

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Б1.В.ДВ.01.01
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Моделирование химико-технологических систем

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки
04.06.01 Химические науки
направленность (профиль)
Кинетика и катализ

Форма обучения: очная

Год набора: 2020

Общая трудоемкость: 3 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	8	Итого
Форма контроля	Зачет	
Вид занятий		
Лекции	4	4
Лабораторные	4	4
Практические		
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация		
Контактная работа	8	8
Самостоятельная работа	100	100
Контроль		
Итого	108	108

Рабочую программу составил(и):

Доцент, доцент, к.п.н., Кравцова М.В.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Преподаватель, ученое звание отсутствует, ученая степень отсутствует, Гущина Т.П.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:

☒

Отсутствует

☐

Рецензент

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана направления подготовки 04.06.01 Химические науки

Срок действия рабочей программы дисциплины до «01» сентября 2024 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании кафедры

«Химическая технология и ресурсосбережение»

(протокол заседания № 2 от «19» сентября 2019 г.).

1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины – формирование у студентов профессиональных знаний по использованию методов моделирования при проектировании технологических процессов и анализе экспериментальных данных, а так же формирование научного и инженерного подхода к вопросам рационального использования энерго - и материальных ресурсов, в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Методика постановки и проведения эксперимента», «Системный подход в диссертационном исследовании».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Научно-исследовательская деятельность», «Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук».

3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК-1 – способность ориентироваться в полном спектре научных проблем профессиональной области	-	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none">- о современном подходе к рассмотрению химико-технологических систем;- методы разработки математических моделей процессов для различных систем;- методы оптимизации процессов химической технологии и биотехнологии;- методы разработки моделей технических и природных систем.- формирование моделей химико-технологических систем и методах решения уравнений математического описания химических процессов. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none">- производить структурный анализ и синтез сложных процессов, протекающих в аппаратах различных типов;- разрабатывать математические модели процессов на основе структурного анализа и синтеза с использованием блочного подхода к описанию сложных процессов;- осуществлять идентификацию

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
		<p>параметров математической модели, моделирование и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.</p> <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыками использования методов организации и проведения научно-исследовательских работ на основе принципов моделирования технических и природных систем.
ПК-2 – способность к разработке учебно-методической документации для реализации учебного процесса в области химии и смежных наук	-	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять теоретические знания по методам сбора, хранения, обработки и передачи информации с использованием современных компьютерных технологий. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - практическими навыками и знаниями использования современных компьютерных технологий в научных исследованиях.

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
Модуль 1. Системные закономерности в химической технологии	Лекция № 1	Химико-технологическая система и этапы её исследования. Классификация и свойства ХТС. Технологические операторы и типы связи между ними. Модели ХТС. Топологические исследования ХТС с помощью схемо-графических моделей. Представление структуры ХТС в виде графов и матриц	8	2	-	-	
Модуль 2. Математическое моделирование химико-технологических систем	Лекция № 2	Виды моделирования, виды моделей. Классификация моделей. Математическое моделирование, математические модели. Формы представления математических моделей. Структурные схемы и методы их преобразования	8	2	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Самостоятельная работа № 1	Понятие о статистическом моделировании. Понятия функции отклика и факторов. Основные допущения регрессионного анализа. Формулировка задачи аппроксимации. Критерий метода наименьших квадратов. Основные положения теории планирования экспериментов: полный факторный эксперимент (ПФЭ) и обработка его результатов	8	25	-	-	
	Лабораторное занятие №1	Моделирование способов очистки в зависимости от полученных экспериментальных данных взвешенных веществ в сточной воде	8	4	-	-	Отчет по лабораторному занятию № 1
	Самостоятельная работа № 2	Составные части математической модели химико-технологического процесса. Химические и фазовые равновесия. Математическое моделирование тепловых процессов	8	25	-	-	
	Самостоятельная работа № 3	Моделирование массообменных процессов химической технологии	8	25	-	-	
	Самостоятельная работа № 4	Моделирование кинетики химических реакций	8	25	-	-	
Итого:				108	-		

5. Образовательные технологии

При реализации учебного курса дисциплины используются технология традиционного обучения, включающая лекции и практические работы, которые предполагают последовательное изложение материала преподавателем. Лекция проводится с элементами дискуссии. Лабораторное занятие предусматривает выполнение заданий, обсуждение результатов деятельности.

6. Методические указания по освоению дисциплины

При освоении темы необходимо:

- изучить учебный материал по дисциплине «Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», используя лекционный материал и материал библиотечного фонда по данной тематике;
- акцентировать внимание на изучении видов систем, законов протекания реакций и моделирования.

Методические рекомендации к выполнению самостоятельной работы:

1. Изучение теоретического материала по изучаемой теме, изложенного в учебно-методическом пособии.

2. Вопросы для самостоятельной работы студентов:

2.1. Примеры моделирования в агрономии.

2.2. Классификация математических моделей.

2.3. Свойства (функции) модели.

2.4. История разработки статистических моделей продуктивности агроэкосистем.

2.5. Виды моделей, используемых в химической технологии.

3. Подготовка к лабораторным занятиям и выполнение соответствующих заданий.

4. Самостоятельное прочтение, просмотр, Интернет-ресурсы, повторение учебного материала.

5. Подготовка сообщений, докладов, выступлений на семинарских и практических, лабораторных занятиях, подбор литературы по дисциплинарным проблемам.

6. Лабораторное занятие с решением прикладных, расчетных и ситуационных задач, обсуждение результатов деятельности.

7. Подготовка отчетов по лабораторным занятиям:

7.1. Предоставление отчета в электронном виде с названием файла, например ЭРТб-1501_ПР1_Иванов И.И. в соответствии с вариантом и требованиями к содержанию отчета.

7.2. При сдаче отчета студент должен ответить на вопросы преподавателя по теме работе в устной форме, используя отчет по работе.

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
8	ПК-1, ПК-2	Отчеты по лабораторному занятию № 1. Вопросы к экзамену 1-54.

7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

7.2.1 Отчет по лабораторному занятию

(наименование оценочного средства)

Типовой пример задания

Лабораторное занятие № 1. Моделирование способов очистки в зависимости от полученных экспериментальных данных взвешенных веществ в сточной воде.

Цель работы: выбрать методы очистки сточных вод в зависимости от концентрации загрязненного вещества, природы его возникновения и объема сбросных вод.

Алгоритм выполнения задания

1. Выполнить определение взвешенных веществ в представленных пробах гравиметрическим методом - основанным на выделении фильтрата.

2. Вычислить результат выполнения работы:

Массовую концентрацию взвешенных веществ в анализируемой пробе воды X , мг/дм³ рассчитывают по формуле 1:

$$X = \frac{(m_{\text{фо}} - m_{\text{ф}}) \cdot 1000}{V} \quad (1)$$

где $m_{\text{фо}}$ – масса бюкса с бумажным фильтром с осадком взвешенных веществ, г;

$m_{\text{ф}}$ – масса бюкса с бумажным фильтром без осадка, г;

V – объем профильтрованной пробы воды, дм³.

3. Предложенные варианты очистки сточных вод, в зависимости от величины загрязненности методами:

- удаление взвешенных веществ, механической природы возникновения через песчаные фильтры;
- коагуляция взвешенных веществ, органической природы возникновения (отмерший ил и микроорганизмы);
- сепарация и центрифугирование взвешенных из сточной воды с последующем обезвоживанием.

4. Подготовить и представить отчет по лабораторной работе, свести данные в табличном виде.

Темы письменных работ

Письменные работы учебным планом не предусмотрены.

Краткое описание и регламент выполнения

Алгоритм выполнения практического задания:

1. Изучить теоретический материал.

2. Выполнить определение взвешенных веществ в представленных пробах гравиметрическим методом - основанным на выделении фильтра.

3. Вычислить результат выполнения работы:

4. Ответить на контрольные вопросы:

- 1) Эмпирические и теоретические модели, их сущность и примеры.
 - 2) Оптимизационные и имитационные модели, их сущность и примеры.
 - 3) Статистические и динамические модели, их сущность и примеры.
 - 4) Детерминистические и стохастические модели, их сущность и примеры.
 - 5) Принципы моделирования.
 - 6) Этапы моделирования: выбор типа и обоснование степени ее сложности, разработка содержания модели.
 - 7) Что такое модель и моделирование?
 - 8) Значение моделирования в научных исследованиях по агрономии.
 - 9) Где применяются описательные (эмпирические) и объяснительные (теоретические) модели?
 - 10) Оптимизационные и имитационные модели, их сущность и примеры.
 - 11) Статистические и динамические модели, их сущность и примеры.
 - 12) Детерминистические и стохастические модели, их сущность и примеры.
 - 13) Какие функции выполняют модели?
 - 14) Принципы моделирования.
 - 15) Этапы моделирования: выбор типа и обоснование степени ее сложности, разработка содержания модели.
 - 16) Роль математического моделирования при проектировании технологий управления продукционным процессом агрофитоценозов.
 - 17) Статистические модели агроэкосистем.
 - 18) Обусловленность использования регрессионных моделей особенностями эмпирических данных.
 - 19) Моделирование по обобщенным агрометеорологическим показателям.
 - 20) Динамические модели.
5. Подготовить отчет по лабораторной работе.
6. Форма отчета по лабораторной работе
- Номер и название лабораторной работы

Цель и задачи

Теоретическая часть работы

Реактивы, оборудование, материалы

Ход работы

Результаты расчетов и наблюдений

Выводы по работе

Критерии оценки:

«зачтено» – отчет по лабораторной работе выполнен в полном объеме в соответствии с требованиями, указанными в учебно-методическом пособии. Студент отвечает на два заданных вопроса по теме лабораторной работы.

«не зачтено» – отчет по лабораторной работе включает менее 50 % от требуемого объема или отсутствует, или при наличии отчета студент не отвечает ни на один вопрос по теме выполненной работы.

7.3.Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 8

№ п/п	Вопросы
1	Роль кибернетики в химической технологии.
2	Математическое моделирование как современный метод анализа и синтеза химико-технологических процессов (ХТП).
3	Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии.
4	Метод физического и математического моделирования.
5	Математическое моделирование. Сущность и цели математического моделирования объектов химической технологии.
6	Два подхода к составлению математических моделей процесс: детерминированный и стохастический, сферы использования.
7	Математическое описание детерминированных ХТП.
8	Моделирование кинетики гомогенных химических реакций.
9	Краткие сведения из химической кинетики, скорость химической реакции, закон действующих масс.
10	Стехиометрический анализ, механизмы реакций. Кинетические модели гомогенных химических реакций.
11	Моделирование кинетики гетерогенных каталитических реакций.
12	Методы построения кинетических моделей гетерогенных химических реакций: метод стационарных концентраций, метод адсорбционной изотермы Лэнгмюра, методы построения кинетических моделей с использованием теории графов.
13	Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах, как основа построения математических моделей ХТП.
14	Модель идеального перемешивания. Модель идеального вытеснения.
15	Модель с неполным продольным смещением – диффузионная однопараметрическая модель. Модель с неполным продольным и поперечным смещением – диффузионная двухпараметрическая модель. Ячеечная модель.
16	Реакторные процессы в химической промышленности. Структурный анализ процессов, протекающих в реакторе.
17	Подход к построению математической модели химического реактора. Формирование модели гомогенного реактора идеального перемешивания.
18	Анализ стационарного и динамического режимов работы.
19	Моделирование реактора идеального вытеснения. Составление моделей реакторов с учетом продольного и радиального переноса массы и тепла.
20	Моделирование неизотермических химических реакторов. Формирование системы уравнений материального и теплового балансов.
21	Пример построения математического описания конкретного химико-технологического процесса, протекающего в реакторе.
22	Модели тепловых процессов.
23	Основные уравнения тепловых процессов.
24	Модели теплообменных аппаратов, модели идеального вытеснения и идеального перемешивания.
25	Статистический анализ ХТП.

26	Роль статистических методов при обработке данных химического эксперимента. Представление объекта в виде «черного ящика».
27	Эксперимент – основа построения статистических моделей. Понятие факторного пространства, функции отклика, поверхности отклика.
28	Общий вид статистических моделей, уравнение регрессии, параметры уравнения.
29	Некоторые элементы теории вероятности и математической статистики.
30	Обработка результатов эксперимента статистическими методами.
31	Понятие случайной величины, вероятности появления события, функции распределения и плотности распределения вероятности.
32	Основные числовые характеристики случайной величины: математическое ожидание, дисперсия и их свойства.
33	Законы распределения случайных величин. Стохастическая связь.
34	Понятие генеральной совокупности, выборки. Выборочные статистические характеристики: среднее арифметическое, выборочная дисперсия, выборочный коэффициент корреляции.
35	Статистические модели на базе пассивного эксперимента.
36	Пассивный эксперимент. Методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке данных химического эксперимента. Виды регрессии.
37	Определение параметров модели по методу наименьших квадратов.
38	Статистический анализ результатов химического эксперимента.
39	Определение однородности дисперсий по критерию Кохрана.
40	Оценка дисперсии воспроизводимости.
41	Критерий Стьюдента при оценке значимости коэффициентов регрессии.
42	Критерий Фишера для проверки адекватности полученного уравнения регрессии реальному эксперименту.
43	Статистические модели на базе активного эксперимента.
44	Планы первого порядка.
45	Полный факторный эксперимент (ПФЭ).
46	Механические процессы обработки твердых веществ и материалов. Оборудование для их проведения и принцип действия.
47	Процессы транспортировки и хранения газообразных, жидких и твердых веществ и материалов.
48	Насосы и компрессоры.
49	Ректификация. Понятие процесса, назначение и устройство ректификационных колонн.
50	Экстракция.
51	Процессы экстракции и растворения в системах твердое тело – жидкость. Равновесие и скорость процессов.
52	Устройство экстракционных аппаратов.
53	Адсорбция. Характеристики адсорбентов и их виды.
54	Равновесие при адсорбции.

7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
8	Зачет	«зачтено»	Ответ на теоретический материал по одному из двух

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
	(устно)		теоретических вопросов полный, ответы на дополнительные вопросы по теоретическому материалу должны быть близкими к теории.
		«не зачтено»	Не отвечает ни на один из теоретических вопросов, не может ответить ни на один дополнительный вопрос.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Заварухин С.Г.	Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов	учебное пособие	2017	ЭБС «Лань»
2	Гартман Т.Н., Клушин Д.В.	Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики	учебное пособие	2020	ЭБС «Лань»
3	Казиев В.М.	Введение в анализ, синтез и моделирование систем	учебное пособие	2016	ЭБС «IPRbooks»
4	Петров А. В.	Моделирование процессов и систем	учебное пособие	2015	ЭБС «Лань»
5	Баранов Д.А.	Процессы и аппараты химической технологии	учебное пособие	2020	ЭБС «Лань»

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Липин А. А.	Системный анализ и методы химической кибернетики	учебное пособие	2015	ЭБС «Лань»
2	Айнштейн В.Г., Захаров М.К., Носов Г.А.	Процессы и аппараты химической технологии. Общий курс	учебник	2019	ЭБС «Лань»
3	Москвичев Ю. А., Григоричев А.К., Павлов	Теоретические основы химической технологии	учебное пособие	2020	ЭБС «Лань»

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно- методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
	О.С.				

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

– **Бутлеровские сообщения.** Научный англо-русскоязычный химический журнал. Публикует статьи по основным разделам химии и смежным дисциплинам. Журнал входит в Перечень ВАК и систему РИНЦ. Для зарегистрированных пользователей сайта доступен полнотекстовый архив с 1999 года: <http://butlerov.com/stat/reports/view.asp?lang=ru>

– **Химия в интересах устойчивого развития.** В журнале публикуются оригинальные научные сообщения и обзоры по химии процессов, представляющих основу принципиально новых технологий, создаваемых в интересах устойчивого развития, или усовершенствования действующих, сохранения природной среды, экономии ресурсов, энергосбережения. Входит в Перечень ВАК и систему РИНЦ. Доступен полнотекстовый архив с 2001 по 2005 год: <http://www.sibran.ru/journals/Hviur/>

– **Oriental Journal Of Chemistry.** Научный рецензируемый журнал открытого доступа. Страна: Индия. Язык: английский. Публикует результаты научных исследований в области общей химии, биохимии, спектроскопии, химии окружающей среды. Доступен полнотекстовый архив с 2008 года: <http://www.orientjchem.org/Archive.php>

– **Теоретические основы химической технологии.** Журнал публикует сообщения о новых технологических процессах в обрабатывающей промышленности с точки зрения фундаментальной науки. Статьи в журнале посвящены основам тепломассообмена, процессам разделения, межфазным явлениям, течению сыпучих материалов, биотехнологии, оптимизации, автоматизации и управлению, экономии энергии, металлов и сырья, защите окружающей среды и смежным темам. Журнал входит в Перечень ВАК и систему РИНЦ. Для зарегистрированных пользователей Научной электронной библиотеки (eLibrary) доступен полнотекстовый архив с 2011 года: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=8244>

– **Chemical and Process Engineering Research.** Журнал на английском языке Международного института по науке, технологиям и образованию (International Institute for Science, Technology and Education) (США, Великобритания, Гонконг). Публикует оригинальные статьи, касающиеся различных аспектов химического машиностроения, в том числе, управление процессами и контрольно-измерительными приборами данного производства. Доступен полнотекстовый архив с 2011 года: <http://www.iiste.org/Journals/index.php/CPER/issue/archive>

– **Journal of Advanced Chemical Engineering.** Научный рецензируемый и реферируемый журнал открытого доступа. Страна: Египет. Язык: английский. Публикует оригинальные исследования, обзорные статьи, короткие сообщения в области химического машиностроения, современных материалов, биохимии. Доступен полнотекстовый архив с 2011 года: <http://www.ashdin.com/journals/published.aspx?jid=jace>

8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	MathCAD версия 14 или 15	Акт п/п от 21.07.09 (Гос. Контракт 487 от 28.05.09), бессрочный
2	Windows	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия, бессрочный
3	Office Standart	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия, бессрочный; Договор № 727 от 20.07.2016г., срок действия, бессрочный

8.5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Лаборатория «Процессы и аппараты защиты окружающей среды». Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации (А-409)	Столы ученические моноблоки, столы, стулья, доска аудиторная (меловая), проектор, ноутбук, экран переносной, установка технологического комплекса, позволяющая снизить распространение аэродисперсной системы в пространстве., установка, позволяющая создать аэродинамическую тягу
2	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации (А-415)	Столы ученические, стулья ученические, доска аудиторная (меловая), ПК, проектор, экран переносной, рабочий стол, письменный угловой стол, преподават. стол.
3	Компьютерный класс. Помещение для самостоятельной работы. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации (Г-401)	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет