



Государственное образовательное учреждение высшего профессионального
образования

ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

«УТВЕРЖДАЮ»

Декан ХТФ

_____ Погребенков В.М.

«___» _____ 2008 г.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭВМ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Рабочая программа направления 240100 «Химическая технология и биотехнология»

Факультет - химико-технологический (ХТФ)

Обеспечивающая кафедра:- химической технологии топлива и химической
кибернетики

Курс - четвертый

Семестр – восьмой

Учебный план набора 2008 года

Распределение учебного времени

Лекции -	24 часов
Лабораторные работы -	32 часа
Всего аудиторных занятий -	56 часов
Самостоятельная (внеаудиторная) работа-	64 часов
Общая трудоемкость-	120 часов
Зачет в восьмом семестре	

Томск 2008



Предисловие

Рабочая программа составлена на основе ОС ТПУ. ОДОБРЕНА на заседании кафедры химическая технология топлива от 30 января 2008 года, протокол N2 .

Разработчик доцент каф. ХТТ

О.Е.Мойзес

Зав. каф. ХТТ

А.В.Кравцов

Рабочая программа СОГЛАСОВАНА с факультетом, выпускающими кафедрами и СООТВЕТСТВУЕТ действующему плану.

Председатель методической комиссии ХТФ

Ушева Н.В.

Аннотация

Применение ЭВМ в химической технологии (ПЭВМ в ХТ)

240100(б) – 240301 (с)

240100(б) – 240403 (с)

240100(б) – 240501 (с)

240100(б) – 240401 (с)

Каф. ХТТ и ХК ХТФ

Доцент, к.т.н. Мойзес Ольга Ефимовна

Тел.(3822) 419622, E-mail: moe@tpu.ru

Цель: формирование у обучающихся знаний и умений в области разработки математических моделей химико-технологических процессов на основе физико-химических и экспериментально-статистических методов исследования, использования компьютерных технологий при исследовании ХТП, применения методов оптимизации .

Содержание: основные принципы построения и исследования математических моделей химико-технологических процессов (ХТП), современные компьютерные технологии обработки экспериментальной информации, методы оптимизации ХТП, информационные технологии при исследовании ХТП.

Курс 4 (8 сем. –зачет)

Всего 98ч., в т.ч. Лк – 24 ч., Лб – 32ч.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Цели преподавания дисциплины

В результате изучения дисциплины «Применение ЭВМ в химической технологии» студенты ХТФ данного направления должны обладать таким составом знаний, умений и практических навыков которые необходимы и достаточны для дальнейшего изучения других общенаучных, общетехнических и специальных дисциплин.

Целью преподавания дисциплины является:

- привить у студентов навыки разработки математических моделей химико-технологических процессов (ХТП);
- закрепить опыт практического использования вычислительной техники ;
- привить у студентов навыки разработки математических моделей на основе экспериментально-статистических методов исследования;
- привить навыки применения компьютерных технологий при обработке данных и исследовании ХТП.
- привить навыки применения алгоритмов численных методов и методов оптимизации при исследовании ХТП;

В результате изучения дисциплины «Применение ЭВМ в химической технологии» студент должен

Иметь представление:

Региональные и вузовские требования (РВт).

О роли математического моделирования при разработке, эксплуатации и исследовании реальных объектов химической технологии, принципах и методах построения математических моделей ХТП, о современных перспективных методах исследования ХТП, о возможности применения современных компьютерных технологий и пакетов прикладных программ при исследовании и анализе химических процессов.

Знать и уметь использовать:

РВт. :

- Методы построения математических моделей, основанных на физико-химических закономерностях химико-технологических процессов.
- Статистические методы обработки экспериментальных данных объектов химической технологии.
- Алгоритмический язык и методы разработки программных продуктов для инженерного оформления технологических процессов.
- Современные компьютерные технологии и типовые программные продукты при исследовании и анализе ХТП.
- Современные офисные системы и графические оболочки.

Иметь опыт:

- решения конкретных задач при моделировании и оптимизации ХТП;
- практических расчетов при исследовании реальных химических процессов и объектов;
- работы на современных компьютерах;
- практического использования современных программных средств, офисных и программных оболочек.

1.2. Задачи изложения и изучения дисциплины

Для достижения целей при совместной и индивидуальной познавательной деятельности студентов в части овладения теоретическими знаниями и практическими умениями используется набор методического материала: лекции, методические разработки

к проведению практических занятий, контрольные задания для проверки знаний студентов, методические указания к лабораторным работам и другие методические разработки кафедры.

Неотъемлемой частью курса является лабораторный практикум, при прохождении которого студентами приобретаются практические навыки работы на вычислительной технике, построения и статистического анализа математических моделей. Для закрепления теоретических знаний, полученных на лекциях, в курсе предусмотрено проведение практических занятий в совместной и индивидуальной (самостоятельной) формах.

2. СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО РАЗДЕЛА ДИСЦИПЛИНЫ (ЛЕКЦИИ-24 часа)

2.1. Введение (1 час)

Предмет и задачи курса. Применение ЭВМ на различных этапах научных исследований при проектировании и управлении химическими производствами, Химико-технологический процесс (ХТП) — как объект исследования. Физический и математический методы моделирования. Математическое моделирование как современный метод анализа и синтеза химико-технологических процессов и явлений.

2.2. Основные понятия и определения метода математического моделирования (1 час).

Физическое и математическое моделирование. Математическое моделирование. Этапы математического моделирования. Эмпирический и структурный подходы к построению математических моделей. Типы математических моделей: статистические и детерминированные.

2.3. Математическое описание детерминированных ХТП (8 часов)

Формирование кинетических моделей гомогенных химических реакций в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений.(1 час)

Методы построения гетерогенных каталитических реакций. Метод стационарных концентраций. Метод адсорбционной изотермы Лэнгмюра. Методы построения кинетических моделей с использованием теории графов. (2 час)

Типовые модели структуры потоков массы и энергии, как основа построения математических моделей химико-технологических процессов. Модель идеального перемешивания. Модель идеального вытеснения. Модель с неполным продольным смешением — диффузионная однопараметрическая модель. Модель с неполным продольным и поперечным смешением – диффузионная двухпараметрическая модель. Ячеечная модель. (1час)

Реакторные процессы в химической промышленности. Структурный анализ процессов, протекающих в реакторе. Подход к построению математической модели химического реактора. Формирование модели гомогенного реактора идеального перемешивания. Анализ стационарного и динамического режимов работы. Моделирование реактора идеального вытеснения. Составление моделей реакторов с учетом продольного и радиального переноса массы и тепла. Моделирование неизотермических химических реакторов. Формирование системы уравнений материального и теплового балансов (3 часа)

Пример построения математического описания конкретного химико-технологического процесса, протекающего в реакторе.

Формирование математического описания процессов теплообмена в различных по конструктивному оформлению теплообменных аппаратах. (1 час)

2.4. Статистический анализ ХТП (10часов)

Роль статистических методов при обработке данных химического эксперимента. Представление объекта в виде "черного ящика". Эксперимент- основа построения статистических моделей. Понятие факторного пространства, функции отклика, поверхности отклика. Общий вид статистических моделей, уравнение регрессии, параметры уравнения..

2.4.1. Некоторые элементы теории вероятности и математической статистики (2 часа)

Обработка результатов эксперимента статистическими методами. Понятие случайной величины, вероятности появления события, функции распределения и плотности распределения вероятности. Основные числовые характеристики случайной величины: математическое ожидание, дисперсия и их свойства. Законы распределения случайных величин. Стохастическая связь. Понятие генеральной совокупности, выборки. Выборочные статистические характеристики: среднее арифметическое, выборочная дисперсия, выборочный коэффициент корреляции.

2.4.2. Статистические модели на базе пассивного эксперимента (3)

Пассивный эксперимент. Методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке данных химического эксперимента. Виды регрессии. Определение параметров модели по методу наименьших квадратов. Статистический анализ результатов химического эксперимента. Определение однородности дисперсий по критерию Кохрана. Оценка дисперсии воспроизводимости. Критерий Стьюдента при оценке значимости коэффициентов регрессии. Критерий Фишера для проверки адекватности полученного уравнения регрессии реальному эксперименту.

2.4.3. Статистические модели на базе активного эксперимента

(Методы планирования экстремальных экспериментов) (4 часа)

2.4.3.1. Планы первого порядка

Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Понятие матрицы планирования, интервала варьирования, основного уровня. Кодирование переменных. Свойства матрицы планирования. Определение коэффициентов регрессии ПФЭ. Порядок составления плана. Статистический анализ уравнения регрессии. Пример разработки статистической модели и регрессионного анализа на основе ПФЭ.

Дробный факторный эксперимент. Дробные реплики. Разрешающая способность дробных реплик.

Экспериментально-статистические методы оптимизации. **Метод Бокса-Уилсона. (1 час)**

2.4.3.2. Планы второго порядка (Статистические модели оптимальной области исследования объекта) (2 часа)

Описание почти стационарной области. Ортогональные планы 2-го порядка. Ротатабельные планы 2-го порядка. Определение параметров и статистический анализ полинома второй степени.

2.4.3.3. Симплексный метод планирования и оптимизации (2 часа)

Алгоритм симплексного метода. Планирование и оптимизация процесса механического обезвоживания торфа симплексным методом.

2.5. Применение ЭВМ при оптимизации химико-технологических процессов (2 часа.)

Постановка задачи оптимизации в ХТ. Критерий оптимальности, целевая функция и ресурсы оптимизации. Общая стратегия решения задачи оптимизации на ЭВМ.

Методы оптимизации, классификация.

Аналитические методы оптимизации. Методы нелинейного программирования. Методы одномерного поиска: метод деления отрезка пополам, метод "золотого сечения", метод сканирования, метод случайного поиска. Методы многомерного поиска.

3.2. Перечень лабораторных работ (32 часа)

3.2.1 Исследование зависимости константы скорости от температуры. (4 часа).

3.2.2. Моделирование кинетики гомогенных химических реакций. (6 часов).

3.2.3. Компьютерный расчет изотермического реактора идеального перемешивания.

Исследование влияния технологических параметров на протекание реакции. (6 часа).

3.2.4. Моделирование теплообменных аппаратов (4 часа)

3.2.5. Методы корреляционного и регрессионного анализов при обработке экспериментальных данных. Обработка экспериментальных данных в EXCEL (8 часов).

3.2.6. Статистический анализ уравнения регрессии в полном факторном эксперименте. (4 часов)

4. ПРОГРАММА САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Самостоятельная (внеаудиторная) работа студентов состоит в проработке лекционного материала, подготовке к практическим занятиям и лабораторным работам и в выполнении индивидуальных домашних заданий. Она составляет 64 часов и включает следующие пункты:

1. Проработка курса лекций (12)
2. Подготовка к лабораторным работам (16)
3. Подготовка к рубежным контролям (18)
4. Выполнение домашнего задания (18)

Проверка проработки лекционного материала по теоретическим разделам осуществляется опросом студентов и поощряется дополнительными баллами в рейтинг студента по дисциплине. Подготовка к лабораторным работам контролируется предварительным опросом, отчетами и «защитой» выполненных работ.

Эффективной формой самостоятельной работы студентов является выполнение **индивидуального домашнего задания (ИДЗ)**. Темы ИДЗ следующие:

ИДЗ1. Методы моделирования кинетики гетерогенных химических реакций.

ИДЗ2. Примеры разработки планов для проведения экспериментов 1-го порядка (ПФЭ,ДФЭ), расчет параметров регрессионного уравнения. Разработка планов 2-го порядка ИДЗ, сданное в срок, оценивается 40—80 баллов.

5. ТЕКУЩИЙ И ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

При изучении дисциплины «Применение ЭВМ в химической технологии» используется рейтинговая система оценка знаний студентов. В течение семестра студент может набрать 1000 баллов.

Максимальная рейтинговая оценка (общий рейтинг ОР) дисциплины составляет 1000 баллов. В нее входят: 1) рейтинг лекций (РЛ); 2) рейтинг лабораторных работ (РЛР); 3) рейтинг рубежного контроля (РРК); 4) рейтинг домашнего задания (РДЗ); 4) рейтинг зачета(РЗ).

Лекционный рейтинг –это оценка за посещение и участие в лекции. Оценка лекции-7 баллов. Посетив все лекционные занятия и участвуя в них, студенты имеют максимальный РЛ 112 баллов.

Рейтинг лабораторных работ (РЛР)- это оценки за лабораторные работы. Максимальная оценка одной работы 50-60 баллов. Выполняя 7 лабораторных работ, студенты имеют максимальный РЛР 320 баллов.

Рейтинг домашнего задания (РДЗ)- это оценка двух индивидуальных домашних заданий. Если задание решено правильно и сдано в срок, то оно оценивается в 30 баллов, следовательно, максимальный РДЗ равен 60 баллов. Задания, сданные с опозданием, оцениваются в 25 баллов.

В семестре студенты выполняют 3 рубежных контроля, максимальный РРК равен 100 баллов.

В конце семестра подсчитывается рейтинг семестра (РС), максимальное значение которого 800 баллов:

$$РС = РЛ + РЛР + РДЗ + РРК = 110 + 290 + 100 + 300 = 800 \text{ б.}$$

Студент допускается к экзамену, если он полностью выполнил учебный план и если его рейтинг (РС) не менее 450 баллов.

Максимальный рейтинг зачета (РЗ) 200 баллов. Форма проведения зачета – по билетам. Оценка зачета суммируется с рейтингом семестра и подсчитывается общий рейтинг: $OP = PC + PЗ$.

Если оценка экзамена менее 100 баллов, то зачет считается несданным.

Рейтинг поощряет активных студентов **дополнительными баллами** за написание рефератов, досрочную сдачу домашнего задания, выполнение заданий повышенной сложности.

Контролирующие материалы

В соответствии с рейтинговой системой при изучении курса «Применение ЭВМ в химической технологии» проводятся самостоятельные и контрольные работы. Рубежные контроли проводятся в часы практических занятий в письменной форме и включают задания по теоретическим разделам дисциплины с использованием практических заданий. Билеты рубежных контрольных работ составлены лектором Мойзес О.Е.

В самостоятельную работу 1 входят задания для написания кинетических уравнений гомогенных химических реакций. В контрольную работу № 2 входят теоретические вопросы по следующим разделам. Принципы построения математических моделей, моделирование кинетики гомогенных и гетерогенных химических реакций и типовые гидродинамические модели. Практические задания содержат вопросы построения математических моделей гетерогенных реакций.

В контрольную работу № 2 входят следующие теоретические вопросы: математическое моделирование химических реакторов, теплообменных процессов, а также практические задания, охватывающие данные темы

В контрольную работу № 3 входят следующие теоретические вопросы: Построение статистических моделей. Методы корреляционного и регрессионного анализа. Методы планирования эксперимента. Планы первого и второго порядков. Дробный факторный эксперимент. Статистический анализ результатов эксперимента и уравнения регрессии по статистическим критериям. Кроме теоретических вопросов вариант содержит практические задания, охватывающие данные темы, при решении которых студент должен показать знание теоретического материала и умение его применять для решения практических задач.

Итоговый контроль изучения дисциплины в восьмом семестре –зачет, проводится в устной форме по билетам.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В каталоге НТБ ТПУ имеется около 10 наименований учебников и учебных пособий, которые могут быть использованы для изучения дисциплины «Применение ЭВМ в химической технологии». Кроме того, на кафедре ХТТ имеется собственное методическое обеспечение дисциплины, которое включает:

- 1) Рабочая программа дисциплины, рейтинг-план и памятка студенту.
- 2) Задания для самостоятельной аудиторной работы.
- 3) Задания для рубежных, зачетных, итоговых контролей.
- 4) Индивидуальные домашние задания.
- 5) Методические указания к выполнению лабораторных работ.

6.1. Перечень используемых информационных продуктов

6.1.1. Ушева Н.В., Мойзес О.Е., Кузьменко Е.А. Моделирующие системы расчета процессов первичной подготовки нефти и газа. -Томск, ПЭВМ-2002г.

6.1.2. Методические указания к выполнению лабораторных работ.

6.1.3. Методические указания для работы в интегрированной среде Турбо-Паскаль

6.1.4. Курс лекций по ПЭВМ в ХТ

6.2. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

6.2.1. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985.- 489 с.

6.2.2. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. М.: Высшая школа, 1991.-400с.

6.2.3. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов.-М.:ИКЦ «Академкнига», 2006.-416 с.

6.2.4. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Кузьменко Е.А., Фёдоров А.Ф. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Лабораторный практикум. Часть 1. Томск., 2006. – 135 с.

6.2.5. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. М.:Высшая шк.,1978.-319с.

Дополнительная

6.2.6. Гордеев Л.С.6 Кафаров В.В., Бояринов А.И. Оптимизация процессов в химической технологии.-

6.2.7. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Компьютерный анализ технологических процессов. Новосибирск.: Наука,1998.-212с.

6.2.8. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Методы анализа химико-технологических процессов./Учебное пособие. Томск.:ТПУ,1994.-210с.

6.2.9. Афифи А., Эйзен С. Статистический анализ. Подход с использованием ЭВМ.– М.:Мир,1982.–486с.

6.2.10. Бесков В.С. Общая химическая технология: Учебное пособие для вузов.- М.: ИКЦ «Академкнига», 2006.-446 с.

6.3. Перечень методических указаний, наглядных пособий и других материалов.

6.3.1. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Фёдоров А.Ф. Лабораторный практикум по методам кибернетики химико-технологических процессов. Томск, 1996.- 84 с.

6.3.2. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Фёдоров А.Ф. Лабораторный практикум по математическому моделированию химико-технологических процессов. Кинетика химических реакций. Томск., 1997.- 84 с.

6.3.3. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Кузьменко Е.А., Федоров А.Ф. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Лабораторный практикум. –Томск, 2002.- 124с.

6.3.4.Мойзес О.Е. методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке экспериментальных данных. Методические указания. -Томск: ПЭВМ,2006.-12с.

6.3.5. Мойзес О.Е., Марасанова И.В. Компьютерный расчет процесса теплообмена. Методические указания.-Томск:ТПУ,2000.-14с.

6.3.6. Ушева Н.В., Мойзес О.Е. Моделирование химических реакторов. Методические указания. - Томск: ротاپринт ТПУ,2000.-22с.

6.3.7.Кравцов А.В., Мойзес О.Е., Кузьменко Е.А. Баженов, Д.А.Коваль П.И., Информатика и вычислительная математика. /Учебное пособие для студентов химических специальностей технических вузов (гриф УМО), Томск:2003.-244 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Примеры контролируемых материалов.

Томский Политехнический Университет

Зачетный билет № 1

по дисциплине
факультет
курс

Применение ЭВМ
ХТ
4

1. Основные понятия метода моделирования. Виды моделей. Эмпирический и структурный подходы.
2. Метод оптимизации Бокса-Уилсона.
3. Задача.

На основании экспериментальных данных получить линейное уравнение регрессии :

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1.$$

N	X	Y
1	10	7
2	20	10
3	30	12
4	40	14
5	50	20

Составил _____

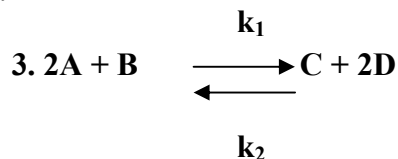
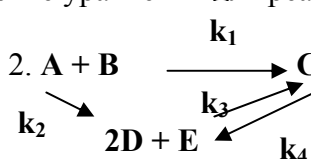
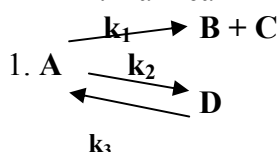
Утверждаю: Зав. кафедрой _____

« _____ » _____ 2008 г.

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА-1

Задание № 6

1. Основные виды математических моделей. Эмпирический подход к построению математических моделей.
2. Написать кинетические уравнения для реакций:



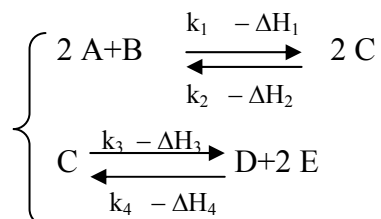
Контрольная работа №1

Вариант 7

1. Математические модели теплообменных аппаратов. Теплообменник типа «смешение – смешение»

2. Задача

В химическом реакторе высотой 20 м и диаметром трубки 0,036 м протекает химическая реакция:



Построить математическую модель процесса..

Контрольная работа 2

1. Понятие «генеральной» совокупности и выборки.
2. Суть корреляционного и регрессионного анализов при обработке экспериментальных данных
3. На процесс влияют следующие факторы:

$$T(x_1) = 120 - 180 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$v(x_2) = 1,2 - 1,4 \text{ м/сек}$$

$$C(x_3) = 40 - 60 \%$$

Записать матрицу планирования эксперимента в натуральных и кодированных переменных.

Контрольная работа – 3

Вариант № 1

1. Суть дробного факторного эксперимента.
2. Пример: Построить матрицу исходного симплекса, если значения факторов:

$$T(x_1) = 100 - 180 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$P(x_2) = 20 - 24 \text{ а}$$

$$C(x_3) = 60 - 80 \%$$

и сделать шаг в направлении оптимума (максимума)

N	x ₁	x ₂	x ₃	y
1				54.3
2				47.2
3				56.4
4				62.7

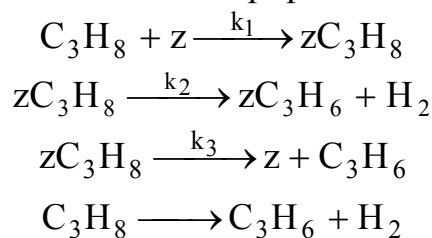
Значения матрицы в кодах:

0,5	0,289	0,204
-0,5	0,289	0,204
0	-0,578	0,204
0	0	-0,612

ДЗ №1

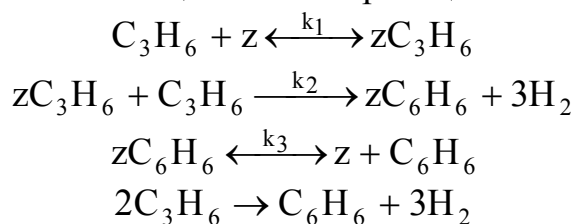
1. Выразить скорость гетерогенной химической реакции методом стационарных концентраций

Реакция дегидрирования.



2. Выразить скорость гетерогенной химической реакции методом Лэнгмюра

Реакция олигомеризации



ДЗ №2

1. На процесс влияют пять факторов:

$$X_1 - T = 100 - 180 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$X_2 - P = 12 - 16 \text{ а}$$

$$X_3 - C_1 = 0,2 - 0,4 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$$

$$X_4 - C_2 = 0,6 - 1,0 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$$

$$X_5 - \tau = 20 - 30 \text{ с.}$$

Построить дробную реплику от ПФЭ 2^{5-2} в натуральных и кодированных единицах.

2. Определить коэффициенты в уравнении регрессии и проверить их на значимость

N	X ₀	X ₁	X ₂	X ₃	Y ₁	Y ₂
1					2.5	2.45
2					4.7	4.73
3					8.2	8.2
4					10.0	10.2
5					12.2	12.4
6					5.8	5.8

7					6.4	6.2
8					8.7	8.76

$$S_{\text{воспр.}}^2 = 0,2072$$

3. На процесс влияет три фактора:

$$C = 20 - 40 \%$$

$$T = 480 - 560 \text{ K}$$

$$v = 0,6 - 1,4 \frac{m^3}{c}$$

Построить матрицу планирования 2-го порядка (ОЦКП) в натуральных единицах.

$$\alpha = 1,215$$

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине "Применение ЭВМ в природоохранной деятельности»

Составитель доцент каф.ХТТ Ольга Ефимовна Мойзес

Рецензент доцент каф,ХТТ, к.х.н. Ушева Н.В.