

УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИПР  
*А.С. Боев*  
«29» 06 2017 г.

**БАЗОВАЯ РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Математическое моделирование химико-технологических процессов**

Направление (специальность) ООП	<b>18.03.01 Химическая технология</b>		
Номер кластера			
Профиль (-и) подготовки (специализация, программа)	<b>Химическая технология подготовки и переработки нефти и газа</b>		
Квалификация	<b>бакалавр</b>		
Базовый учебный план приема (год)	<b>2017г.</b>		
Курс	4	семестр	7
Трудоемкость в кредитах (зачетных единицах)	<b>6</b>		
Виды учебной деятельности	Временной ресурс по очной форме обучения		
Лекции, ч	<b>32</b>		
Практические занятия, ч			
Лабораторные занятия, ч	<b>64</b>		
Контактная (аудиторная) работа (ВСЕГО), ч	<b>96</b>		
Самостоятельная работа, ч	<b>120</b>		
ИТОГО, ч	<b>216</b>		

Вид промежуточной аттестации	<b>экзамен</b>	Обеспечивающее подразделение	<b>Каф. ХТТ и ХК</b>
------------------------------	----------------	------------------------------	----------------------

Заведующий кафедрой Руководитель ООП Преподаватель	<i>Юрьев</i>	Юрьев Е.М.
	<i>Мойзес</i>	Мойзес О.Е.
	<i>Ушева</i>	Ушева Н.В. Мойзес О.Е.

2017 г.

*Замечаний нет*  
*Лид*

УТВЕРЖДАЮ  
 Директор ИПР  
 \_\_\_\_\_ А.С. Боев  
 «\_\_» \_\_\_\_\_ 2017\_\_ г.

**БАЗОВАЯ РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Математическое моделирование химико-технологических процессов**

Направление (специальность) ООП	<b>18.03.01 Химическая технология</b>		
Номер кластера			
Профиль (-и) подготовки (специализация, программа)	<b>Химическая технология подготовки и переработки нефти и газа</b>		
Квалификация	<b>бакалавр</b>		
Базовый учебный план приема (год)	<b>2017г.</b>		
Курс	4	семестр	7
Трудоемкость в кредитах (зачетных единицах)	<b>6</b>		
Виды учебной деятельности	Временной ресурс по очной форме обучения		
Лекции, ч	<b>32</b>		
Практические занятия, ч	<b>64</b>		
Лабораторные занятия, ч	<b>96</b>		
Контактная (аудиторная) работа (ВСЕГО), ч	<b>120</b>		
Самостоятельная работа, ч	<b>216</b>		
ИТОГО, ч	<b>216</b>		
Вид промежуточной аттестации	<b>экзамен</b>	Обеспечивающее подразделение	<b>Каф. ХТТ и ХК</b>
Заведующий кафедрой			Юрьев Е.М.
Руководитель ООП			Мойзес О.Е.
Преподаватель			Ушева Н.В. Мойзес О.Е.

2017\_г.

## **1. Цели освоения дисциплины**

Целями освоения дисциплины (модуля) является формирование у обучающихся определенного состава компетенций (результатов освоения) для подготовки к профессиональной деятельности (в соответствии с п. 3).

## **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина «**Математическое моделирование химико-технологических процессов**» относится к блоку 1 вариативного междисциплинарного профессионального модуля учебного плана ООП **18.03.01 «Химическая технология»**.

### **Пререквизиты:**

1. Физическая химия
2. Процессы и аппараты химической технологии
3. Моделирование химико-технологических процессов

### **Кореквизиты:**

1. Основы проектирования процессов переработки природных энергоносителей
2. Системы управления ХТП

## **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

В соответствии с требованиями ООП освоение дисциплины направлено на формирование у студентов следующих компетенций (результатов освоения ООП), в т.ч. в соответствии с ФГОС ВО и профессиональными стандартами (табл.1):

Таблица 1

## Составляющие результатов освоения ООП

Результаты освоения ООП	Компетенции по ФГОС, СУОС	Составляющие результатов освоения					
		Код	Владение опытом	Код	Умения	Код	Знания
РЗ	ОПК 5, ПК2,16	ВЗ.6(4)	<p>Методами: решения конкретных задач по моделированию химико-технологических процессов; методами анализа и расчета процессов в промышленных аппаратах; методам практического использования современных программных средств, офисных и программных оболочек.</p>	УЗ.6(4)	<p>Строить математические модели, основанные на физико-химических закономерностях химико-технологических процессов, моделировать химические реакторы различных типов; производить выбор аппарата и рассчитывать технологические параметры процесса с учетом задач энерго- и ресурсосбережения.</p>	ЗЗ.6(4)	<p>методы разработки математических моделей типовых процессов химической технологии с учетом динамических свойств; методы построения математических моделей гетерогенных химических реакторов; математические методы разработки и исследования эффективных процессов и аппаратов химической технологии</p>
			<p>практических расчетов при исследовании процессов и аппаратов, химических реакторов; методами определения эффективных технологических режимов работы оборудования.</p>		<p>исследовать кинетику гомогенных и гетерогенных химических реакций; использовать численные методы для решения инженерных задач</p>		<p>методы разработки программных продуктов для инженерного оформления технологических процессов. -модульный принцип разработки математического описания ХТП</p>
			<p>методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов, пакетами прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов</p>		<p>применять методы вычислительной математики и математической статистики для решения конкретных задач расчета, проектирования, моделирования, идентификации и оптимизации процессов химической технологии</p>		<p>экспериментально-статистические методы построения математических моделей химико-технологических процессов; методы планирования эксперимента,</p>

В результате освоения дисциплины студентом должны быть достигнуты следующие результаты (табл. 2):

Таблица 2

*Планируемые результаты обучения по дисциплине*

№ п/п	Результат
РД1	Развить навыки построения математических моделей процессов химической технологии
РД2	Применять численные методы и компьютерные технологии при решении инженерных задач
РД3	Освоить методологию анализа результатов моделирования химико-технологических процессов

#### 4. Структура и содержание дисциплины

##### **Раздел 1. Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии**

Математическое моделирование как современный метод анализа и синтеза химико-технологических процессов (ХТП). Математическое моделирование – перспективное направление совершенствования химико-технологических процессов

Системы и процессы. Сравнение методов физического и математического моделирования, области применения. Математическое моделирование. Сущность и цели математического моделирования объектов химической технологии.

Стехиометрический анализ, механизмы реакций. Экспериментальные методы исследования кинетики химических реакций в проточных реакторах идеального вытеснения и идеального перемешивания. Теоретические методы оценки кинетических параметров. Методы идентификации кинетических параметров с использованием экспериментальных данных.

##### **Названия лабораторных работ:**

1. Моделирование кинетики химических реакций (исследование температурной зависимости, сравнение численных методов Рунге-Кутты и Эйлера).

##### **Раздел 2. Моделирование тепловых и массообменных процессов**

*Модели тепловых процессов.* Основные уравнения тепловых процессов. Исследование процессов аналитическими и численными методами. Исследование стационарного режима работы теплообменного аппарата при постоянной температуре греющего пара. Моделирование процесса нагрева в трубчатой печи. Моделирование процессов сушки.

*Модели массообменных процессов.* Гидродинамические основы процессов массопередачи. Моделирование и расчет диффузионных аппаратов. Расчет процессов разделения в газовых сепараторах на основе методики однократного испарения. Физико-химические основы, принципы расчета и модели процессов ректификации, сушки, экстракции, абсорбции.

**Названия лабораторных работ:**

1. Моделирование процессов сепарации
2. Моделирование процессов ректификации

**Раздел 3. Моделирование гетерогенных каталитических процессов**

Основные понятия химической кинетики в гетерогенном катализе. Теория абсолютных скоростей реакций и ее место в катализе. Элементы теории сложных реакций. Методы построения кинетических моделей гетерогенных химических реакций: метод Лэнгмюра, метод стационарных концентраций, метод графов.

Конструкции химических реакторов с неподвижным слоем катализатора. Квазигомогенные модели каталитических химических процессов, модели идеального вытеснения, модели с учётом явлений переноса по радиусу контактной трубки, двухфазные гетерогенные модели. Моделирование промышленных каталитических процессов (на примере синтеза метанола).

Физико-химические основы процессов, протекающих в аппаратах с кипящим слоем катализатора. Аппаратурное оформление реакторов с кипящим слоем катализатора. Математические модели.

**Названия лабораторных работ:**

3. Моделирование кинетики гетерогенных химических реакций;
4. Моделирование химических реакторов

**Раздел 4. Методы кибернетики. Статистические модели на базе пассивного эксперимента**

Роль кибернетики в химической технологии. Построение математических моделей экспериментально статистическими методами. Некоторые элементы теории вероятности и математической статистики

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 Кохрэна. Оценка дисперсии воспроизводимости. Критерий Стьюдента при оценке значимости коэффициентов регрессии. Критерий Фишера для проверки адекватности полученного уравнения регрессии реальному эксперименту.

**Названия лабораторных работ:**

5. Методы корреляционного и регрессионного анализов при обработке экспериментальных данных. Обработка экспериментальных данных в EXCEL
6. Формирование входной информации в математической модели многокомпонентного процесса

**Раздел 5. Статистические модели на базе активного эксперимента**

Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Понятие матрицы планирования, интервала варьирования, основного уровня. Кодирование переменных. Свойства матрицы планирования. Определение коэффициентов регрессии. ПФЭ. Статистический анализ уравнения регрессии. *Дробный* факторный эксперимент. *Планы второго порядка*. Описание почти стационарной области. Ортогональные планы 2-го порядка. Ротатабельные планы 2-го порядка. Определение параметров и статистический анализ полинома второй степени. Симплексный метод планирования и оптимизации

**Названия лабораторных работ:**

7. Статистический анализ уравнения регрессии в полном факторном эксперименте.

**Раздел 6. Оптимизация химико-технологических процессов**

Постановка задачи оптимизации в ХТ. Критерий оптимальности, целевая функция и ресурсы оптимизации. Общая стратегия решения задачи оптимизации на ЭВМ. Методы оптимизации, классификация. Экспериментально-статистические методы оптимизации. Метод Бокса-Уилсона. Аналитические методы оптимизации.

**Названия лабораторных работ:**

- 9 Одномерная оптимизация. Методы: «Дихотомия, «Золотое сечение», «Сканирование»

**5. Организация самостоятельной работы студентов**

Самостоятельная работа студентов при изучении дисциплины предусмотрена в видах и формах, приведенных в табл. 3.

Таблица 3

*Основные виды и формы самостоятельной работы*

<b>Виды самостоятельной работы</b>	<b>Объем времени, ч</b>
<i>Работа с лекционным материалом, поиск и обзор литературы и электронных источников информации по индивидуально заданной проблеме курса</i>	20
<i>Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку</i>	10
<i>Поиск, анализ, структурирование и презентация информации</i>	10
<i>Подготовка к контрольным работам</i>	12
<i>Выполнение домашних заданий</i>	20
<i>Подготовка к лабораторным работам, практическим занятиям</i>	20
<i>Анализ научных публикаций по заранее определенной преподавателем теме</i>	8
<i>Подготовка к экзамену</i>	20

**6. Оценка качества освоения дисциплины**

Оценка качества освоения дисциплины в ходе текущей и промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в соответствии с «Положением о промежуточной аттестации студентов Томского политехнического университета».

Максимальное количество баллов по дисциплине в семестре – 100 баллов, в т.ч.:

- в рамках текущего контроля – 60 баллов,
- за промежуточную аттестацию (экзамен) – 40 баллов.

Оценка качества освоения дисциплины производится по результатам оценочных мероприятий.

Оценочные мероприятия текущего контроля по разделам и видам учебной деятельности приведены в Приложении «Календарный рейтинг-план изучения дисциплины».

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)**

### **7.1 Методическое обеспечение**

#### **Основная литература:**

1. Ушева Н.В., Мойзес О.Е., Митянина О.Е., Кузьменко Е.А., Математическое моделирование химико-технологических процессов. Учебное пособие.- Томск, 2014. – 136 с.
2. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Кузьменко Е.А., Фёдоров А.Ф. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Учебное пособие. 3-е издание Томск., 2013.- 128 с.
3. Гумеров А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов / А. М. Гумеров. — 2-е изд., перераб.. — Санкт-Петербург: Лань, 2014. — 176 с.

#### **Дополнительная литература:**

1. Бочкарев В.В. Оптимизация химико-технологических процессов: учебное пособие [Электронный ресурс] / В. В. Бочкарев; Национальный исследовательский Томский политехнический университет (ТПУ). — 1 компьютерный файл (pdf; 7.3 МВ). — Томск: Изд-во ТПУ, 2014. — Заглавие с титульного экрана. — Доступ из корпоративной сети ТПУ. — Системные требования: Adobe Reader..
2. Турчак Л.И. Основы численных методов. - М.: Физматлит, 2005.-304с.  
Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов.- М.:ИКЦ «Академкнига», 2006.-416 с.
3. Самойлов, Н. А.. Примеры и задачи по курсу Математическое моделирование химико-технологических процессов . — Москва: Лань, 2013.

## 7.2 Информационное обеспечение

Internet-ресурсы (в т.ч. в среде LMS MOODLE и др. образовательные и библиотечные ресурсы):

1. Электронно-библиотечная система <http://library.ru> , [www.chemnet.ru](http://www.chemnet.ru); <http://www.lib.tpu.ru>
2. Электронно-библиотечная система издательства «Лань», [e.lanbook.com](http://e.lanbook.com).
3. Журнал «Кинетика и катализ». <http://www.maik.ru/cgi-perl/journal.pl?lang=rus&name=kinkat&page=main>
4. Журнал «Катализ в промышленности» [Catalysis in Industry. http://catalysis.kalvis.ru](http://www.catalysis.kalvis.ru).
5. Ушева Н.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Электронная версия курса лекций. ТПУ, 2017. Презентация по дисциплине.

Используемое лицензионное программное обеспечение (в соответствии с **Перечнем лицензионного программного обеспечения ТПУ<sup>1</sup>**):

1. PascalABC.NET
2. Delphi-7
3. Aspen One (Hysys) (Aspen Tech Inc.)
4. PetroSim (KBC Advanced Technology Plc.)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Основное материально-техническое обеспечение дисциплины представлено в табл. 4.

Таблица 4

Материально-техническое обеспечение дисциплины

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, компьютерных классов, учебных лабораторий, объектов для проведения практических занятий с перечнем основного оборудования	Адрес (местоположение), с указанием корпуса и номера аудитории
1.	Компьютерный класс (12 шт.)	634034, г.Томск, ул. Тимакова, 12, учебный корпус 16-б, ауд. 224
2.	Компьютерный класс (10 шт.)	634034, г.Томск, пр. Ленина 43а, учебный корпус 2, Аудитория 135

<sup>1</sup> - <http://portal.tpu.ru:7777/standard/design/samples/Tab5>





