

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по  
УР

\_\_\_\_\_ А.Е. Рудин

«29» июня 2021 года

## Рабочая программа дисциплины

**Б1.О.31**

Моделирование химико-технологических процессов

Учебный план: ФГОС 3++18.03.01\_НВКМ Наноинженерия, композиты и биоматериалы\_ОО №1-1- 93.plx

Кафедра: **18** Инженерной химии и промышленной экологии

Направление подготовки:  
(специальность) 18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки: Наноинженерия, композиты и биоматериалы  
(специализация)

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

### План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся			Сам. работа	Контроль, час.	Трудоём- кость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации	
	Лекции	Практ. занятия	Лаб. занятия					
8	УП	9	9	18	71,75	0,25	3	Зачет
	РПД	9	9	18	71,75	0,25	3	
Итого	УП	9	9	18	71,75	0,25	3	
	РПД	9	9	18	71,75	0,25	3	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, утверждённым приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 07.08.2020 г. № 922

Составитель (и):

кандидат технических наук, Доцент

\_\_\_\_\_

Самарин Виталий Павлович

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой инженерной химии и  
промышленной экологии

\_\_\_\_\_

Бусыгин Николай Юрьевич

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Лысенко Александр  
Александрович

Методический отдел: Макаренко С. В.

## 1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1 Цель дисциплины:** сформировать компетенции обучающегося в области моделирования химико-технологических процессов

### 1.2 Задачи дисциплины:

изучение основных понятий математического моделирования химико-технологических процессов, оптимизации эксперимента в химии и химической технологии;

рассмотрение методов построения моделей и их качественного исследования;

изучение методов оптимизации параметров химико-технологических процессов на основе построенных математических моделей;

закрепление у студентов практических навыков по использованию численных методов оптимизации и компьютерного решения систем уравнений математического описания.

### 1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин

Общая и неорганическая химия

Математика

Информационные технологии

Процессы и аппараты химической технологии

Общая химическая технология

Системы управления и автоматизации химико-технологических процессов

## 2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**ОПК-4: Способен обеспечивать проведение технологического процесса, использовать технические средства для контроля параметров технологического процесса, свойств сырья и готовой продукции, осуществлять изменение параметров технологического процесса при изменении свойств сырья**

**Знать:** методы построения эмпирических (статистических) и физико-химических (теоретических) моделей химико-технологических процессов, методы оптимизации химико-технологических процессов с применением эмпирических и/или физико-химических моделей

**Уметь:** выбирать необходимые методы для получения моделей химико-технологических процессов, применять методы вычислительной математики и математической статистики для моделирования и оптимизации химико-технологических процессов

**Владеть:** пакетами прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов

**ОПК-5: Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные**

**Знать:** методы идентификации математических описаний технологических процессов на основе экспериментальных данных

**Уметь:** применять методы вычислительной математики и математической статистики для обработки результатов эксперимента

**Владеть:** методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов

### 3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа			СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)	Лаб. (часы)			
Раздел 1. Математическое моделирование сложных химико-технологических систем	8						Р,Л
Тема 1. Химико-технологическая система как объект моделирования. Постановка задач синтеза и анализа ХТС		1	1		10	ИЛ	
Тема 2. Интегральные методы расчета параметров химико-технологических систем. Расчет материальных потоков в замкнутой ХТС матричным методом		1	1	2	6	ИЛ	
Тема 3. Декомпозиционные методы расчета параметров химико-технологических систем. Структурный анализ замкнутой ХТС. Итерационный подход к расчету замкнутых ХТС при реализации декомпозиционного метода		1	1	4	8	ИЛ	
Раздел 2. Математические модели элементов химико-технологических систем							
Тема 4. Общие подходы к построению детерминированных математических моделей объектов химической технологии. Типовые математические модели элементов ХТС и их применение		1	1		10	ИЛ	Р,Л
Тема 5. Моделирование гидравлических систем. Моделирование процессов истечения		1	1	2	6	ИЛ	
Тема 6. Моделирование структуры потоков. Определение параметров моделей		1	1	2	8	ИЛ	
Тема 7. Моделирование процессов теплообмена. Моделирование теплообменных аппаратов с учетом структуры потоков		1	1	2	6	ИЛ	
Тема 8. Моделирование процессов химического превращения. Моделирование химических реакторов с учетом выбранной гидродинамической модели структуры потоков		1	1	4	10	ИЛ	
Тема 9. Эмпирические математические модели. Метод наименьших квадратов и его реализация		1	1	2	7,75	ИЛ	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		9	9	18	71,75		
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25					
<b>Всего контактная работа и СР по дисциплине</b>		36,25			71,75		

### 4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

## 5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

### 5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-4	<p>Приводит общее определение математической модели и описание ее параметров, характеризует подходы к постановке задачи расчета по моделям, определяет роль математического моделирования в технологических расчетах и научных исследованиях.</p> <p>Определяет исходные данные, выбор формы уравнения, обосновывает выбор необходимых методов для получения моделей химико-технологических процессов.</p> <p>Выполняет проектные или поверочные расчеты по модели (моделирование гидравлических систем, химической кинетики, теплообменной аппаратуры и др.), анализирует результаты моделирования, проводит вычислительный эксперимент.</p>	<p>Вопросы устного собеседования</p> <p>Практико-ориентированные задания</p> <p>Тестовые задания</p>
ОПК-5	<p>Описывает подходы к решению задачи аппроксимации таблично заданной функции (таблицы наблюдений), формулирует принцип наименьших квадратов, дает определения базовых понятий регрессионного анализа.</p> <p>Преобразует эмпирико-статистические модели для оценки их коэффициентов с использованием программного обеспечения, рационально использует математической статистики для обработки результатов эксперимента.</p> <p>Оценивает коэффициент эмпирических моделей на основе регрессионного анализа, оценивает результаты аппроксимации при обработке результатов активных и пассивных экспериментов.</p>	<p>Вопросы устного собеседования</p> <p>Практико-ориентированные задания</p> <p>Тестовые задания</p>

### 5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	<p>обучающийся показывает всестороннее знание основ экологии, ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях, не допускает существенных ошибок во время устного собеседования. Обучающийся даёт ответы на все поставленные вопросы, содержание ответов позволяет положительно характеризовать сформированность компетенций. Обучающийся правильно и в достаточном объеме выполняет практическое задание</p>	
Не зачтено	<p>обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины, плохо ориентируется в основных понятиях и определениях, некорректно понимает сущность поставленных вопросов, допускает при ответе на вопросы существенные ошибки, содержание ответов позволяет отрицательно характеризовать сформированность компетенций. Обучающийся не может выполнить практическое задание</p>	

## 5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

### 5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
	Семестр 8

1	Понятие химико-технологической системы (ХТС). Элементы ХТС. Технологические операторы, их назначение и условные обозначения.
2	Принципы постановки задач расчета ХТС. Понятия синтеза и анализа ХТС.
3	Разомкнутые и замкнутые ХТС. Типы связей между элементами системы. Особенности расчета разомкнутых и замкнутых ХТС.
4	Сущность интегральных методов расчета ХТС. Применимость, достоинства и недостатки интегральных методов. Расчет материальных потоков ХТС интегральным методом на основе уравнений материального баланса и линейных уравнений связи.
5	Сущность декомпозиционных методов расчета ХТС, их применимость, достоинства и недостатки. Структурный анализ замкнутой ХТС. Реализация итерационных алгоритмов расчета ХТС на основе результатов структурного анализа схемы.
6	Детерминированные математические модели: определение, подходы к построению, основные составляющие моделей.
7	Принципы учета особенностей гидродинамической структуры потоков вещества при построении детерминированных математических моделей. Типовые модели структуры потоков вещества в аппаратах: основные допущения и области применения.
8	Математическое моделирование гидравлических систем. Параметры гидравлических систем. Модель трубопровода. Моделирование процессов истечения жидкостей из емкостей
9	Моделирование теплообменного аппарата на основе модели идеального смешения и ячеечной модели.
10	Моделирование теплообменного аппарата без изменения агрегатного состояния теплоносителей на основе модели идеального вытеснения. Особенности решения системы уравнений для противоточной и противоточной схемы движения теплоносителей.
11	Математическое моделирование химической кинетики.
12	Моделирование химического превращения в реакторах. Модель химического реактора идеального смешения. Модель химического реактора идеального вытеснения.
13	Эмпирико-статистические математические модели в автоматизированных расчетах. Исходные данные для построения моделей. Выбор формы уравнений. Общая постановка задачи построения моделей данного типа.
14	Основные принципы построения эмпирико-статистических моделей: независимые переменные, факторы, функции отклика, объем выборки, выборочные оценки и др.
15	Метод наименьших квадратов и его использование при оценке коэффициентов линейных регрессионных уравнений. Вывод системы уравнений.

### 5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрены.

### 5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Примеры практико-ориентированных заданий приведены в приложении к РПД.

## 5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

### 5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

Обязательное выполнение программы практических занятий, лабораторных работ, успешное прохождение текущего контроля

### 5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная  Письменная  Компьютерное тестирование  Иная

### 5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Необходимо исключить возможность использования текстовых и иных материалов, в т. ч. материалов, размещенных в информационно-телекоммуникационной сети Интернет, во время проведения промежуточной аттестации

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
<b>6.1.1 Основная учебная литература</b>				

Закгейм, А. Ю.	Общая химическая технология. Введение в моделирование химико-технологических процессов	Москва: Логос	2014	<a href="http://www.iprbookshop.ru/66419.html">http://www.iprbookshop.ru/66419.html</a>
Бусыгин Н. Ю., Багров И. В.	Автоматизированные расчеты химико-технологических систем. Интегральные и декомпозиционные методы	СПб.: СПбГУПТД	2015	<a href="http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2493">http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2493</a>
<b>6.1.2 Дополнительная учебная литература</b>				
Бусыгин Н. Ю., Багров И. В.	Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии. Лабораторный практикум	СПб.: СПбГУПТД	2017	<a href="http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2017897">http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2017897</a>
Бусыгин Н. Ю., Самарин В. П.	Моделирование химико-технологических процессов. Контрольная работа	СПб.: СПбГУПТД	2019	<a href="http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2019135">http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2019135</a>
Бусыгин Н. Ю.	Автоматизированные системы химических расчетов: решение задач в среде Mathcad	СПб.: СПбГУПТД	2009	<a href="http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=172">http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=172</a>
Романков П. Г., Фролов В. Ф., Флисюк О. М.	Массообменные процессы химической технологии	Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ	2017	<a href="http://www.iprbookshop.ru/67361.html">http://www.iprbookshop.ru/67361.html</a>
Фролов В. Ф.	Лекции по курсу «Процессы и аппараты химической технологии»	Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ	2017	<a href="http://www.iprbookshop.ru/67349.html">http://www.iprbookshop.ru/67349.html</a>
Романков, П. Г., Фролов, В. Ф., Флисюк, О. М.	Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии (примеры и задачи)	Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ	2020	<a href="http://www.iprbookshop.ru/97815.html">http://www.iprbookshop.ru/97815.html</a>

## 6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/>

## 6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

Microsoft Windows  
MicrosoftOfficeProfessional  
Mathcad Education – University Edition Term  
Интернет-тренажеры в сфере образования

## 6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

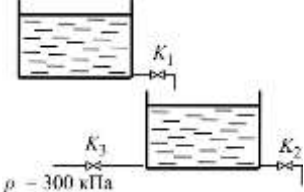
Аудитория	Оснащение
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска

Кафедра инженерной химии и промышленной экологии СПбГУПТД

Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология», профиль «Наноинженерия, композиты и биоматериалы»

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов»

**Примеры практико-ориентированных заданий для промежуточного контроля**

№ п/п	Условия типовых задач (задач, кейсов)																		
1.	Проанализируйте уравнение Аррениуса $k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$ с точки зрения подхода к оценке предэкспоненциального множителя и энергии активации методом линейной регрессии. Определите вид функции отклика и факторов. Предложите программные средства решения задачи.																		
2.	В аппарат поступают 2 входных потока, для которых заданы объемные расходы $V_1$ и $V_2$ (в м <sup>3</sup> /ч), и 2 выходных с объемными расходами $V_3$ и $V_4$ . Плотности всех потоков известны, обозначим их как $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4$ соответственно. Запишите уравнения материального баланса.																		
3.	Для химической реакции, протекающей по схеме $A_1 + A_2 \rightarrow 2 A_3$ запишите кинетические уравнения. Предложите метод и программные средства для решения уравнений.																		
4.	 <p>Постройте математическую модель гидравлической системы. Определите изменение уровня жидкости (бензол – толуол) в емкостях на интервале [0, 60]. В начальный момент времени уровень жидкости в сосудах <math>H_1 = 10, H_2 = 8</math> м. Концентрация бензола-50%. <math>\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta_3 = 1</math>. Диаметр патрубков 0,021 м. Сечение резервуаров <math>S_1 = S_2 = 2</math> м<sup>2</sup>. Температура жидкости – 25 °С.</p>																		
5.	<p>В таблице приведена зависимость давления насыщенного пара диметилацетамида от температуры.</p> <table border="1" data-bbox="272 1261 1517 1328"> <thead> <tr> <th><math>Xt, ^\circ C</math></th> <th>25</th> <th>40</th> <th>70</th> <th>90</th> <th>110</th> <th>130</th> <th>150</th> <th>165</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><math>Yp, \text{кПа}</math></td> <td>0,17</td> <td>1,1</td> <td>3,36</td> <td>5,94</td> <td>9,68</td> <td>15,1</td> <td>34,7</td> <td>50</td> </tr> </tbody> </table> <p>Найдите коэффициенты уравнений и установите, какое из приведенных соотношений наилучшим образом описывает экспериментальные данные?</p> $\ln p = \frac{A}{T} + B; \quad \ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T; \quad \ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T + D_1 T;$ $\ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T + D_1 T + D_2 T^2.$	$Xt, ^\circ C$	25	40	70	90	110	130	150	165	$Yp, \text{кПа}$	0,17	1,1	3,36	5,94	9,68	15,1	34,7	50
$Xt, ^\circ C$	25	40	70	90	110	130	150	165											
$Yp, \text{кПа}$	0,17	1,1	3,36	5,94	9,68	15,1	34,7	50											
6.	<p>Определите оптимальное время проведения химической реакции <math>A_1 \xrightarrow{k_1} A_2 \xrightarrow{k_2} A_3</math> в реакторе идеального вытеснения, приняв в качестве критерия оптимальности выход целевого компонента <math>A_2</math>.</p> <p>Значения констант скоростей реакции: <math>k_1 = 0,4 \text{ мин}^{-1}; k_2 = 0,1 \text{ мин}^{-1}</math>.</p> <p>Начальные концентрации компонентов: <math>c_1^0 = 0,5 \text{ кмоль/м}^3; c_2^0 = 0; c_3^0 = 0</math>.</p>																		