

УТВЕРЖДАЮ  
Первый проректор, проректор по  
УР

\_\_\_\_\_ А.Е. Рудин

## Рабочая программа дисциплины

**Б1.О.31**

Моделирование химико-технологических процессов

Учебный план: 2024-2025 18.03.01 ИПХиЭ НКИБ 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<br>(курс для ЗАО) |     | Контактная работа обучающихся |                   |              | Сам.<br>работа | Контроль,<br>час. | Трудоёмкость,<br>ЗЕТ | Форма<br>промежуточной<br>аттестации |
|---------------------------|-----|-------------------------------|-------------------|--------------|----------------|-------------------|----------------------|--------------------------------------|
|                           |     | Лекции                        | Практ.<br>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 Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 922

Составитель (и):

кандидат технических наук, Доцент

\_\_\_\_\_

Самарин  
Павлович

Виталий

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой инженерной химии и  
промышленной экологии

\_\_\_\_\_

Бусыгин Николай  
Юрьевич

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Асташкина  
Владимировна

Ольга

Методический отдел:

\_\_\_\_\_

## 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<br>(курс для<br>ЗАО) | Контактная работа |               |                | СР<br>(часы) | Инновац.<br>формы<br>занятий | Форма<br>текущего<br>контроля |
|---|------------------------------|-------------------|---------------|----------------|--------------|------------------------------|-------------------------------|
|   |                              | Лек.<br>(часы)    | Пр.<br>(часы) | Лаб.<br>(часы) |              |                              |                               |
| Раздел 1. Математическое моделирование сложных химико-технологических систем  | 8                            |                   |               |                |              |                              | О,Л                           |
| Тема 1. Химико-технологическая система как объект моделирования. Практическое занятие "Постановка задач синтеза и анализа ХТС"  |                              | 1                 | 1             |                | 10           | ИЛ                           |                               |
| Тема 2. Интегральные методы расчета параметров химико-технологических систем. Практическое занятие "Расчет материальных потоков в замкнутой ХТС матричным методом" Лабораторная работа "Реализация матричного метода расчета замкнутых ХТС в среде Mathcad" |                              | 1                 | 1             | 2              | 6            | ИЛ                           |                               |
| Тема 3. Декомпозиционные методы расчета параметров химико-технологических систем. Практическое занятие "Структурный анализ замкнутой ХТС" Лабораторная работа "Реализации декомпозиционного метода расчета замкнутых ХТС в среде Mathcad"                   |                              | 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. Практическое занятие "Типовые математические модели элементов ХТС и их применение"  |                              | 1                 | 1             |                | 10           | ИЛ                           |                               |
| Тема 5. Моделирование гидравлических систем. Практическое занятие " Построение математической модели процесса истечения жидкости" Лабораторная работа "Расчет параметров истечения жидкости"  |                              | 1                 | 1             | 2              | 6            | ИЛ                           |                               |
| Тема 6. Моделирование структуры потоков. Практическое занятие "Определение параметров моделей структуры потока" Лабораторная работа "Определение модели промышленного реактора с использованием ПЭВМ"   |                              | 1                 | 1             | 2              | 8            | ИЛ                           |                               |
| Тема 7. Моделирование процессов теплообмена. Практическое занятие "Моделирование теплообменных аппаратов с учетом структуры потоков" Лабораторная работа "Определение параметров теплообмена с использованием ПЭВМ"   | 1                            | 1                 | 2             | 6              | ИЛ           |                              |                               |

|  |       |   |    |       |    |  |
|--|-------|---|----|-------|----|--|
| Тема 8. Моделирование процессов химического превращения.<br>Практическое занятие "Моделирование химических реакторов с учетом выбранной гидродинамической модели структуры потоков"<br>Лабораторная работа "Определение кинетических характеристик сложной химической реакции в реакторах различного типа" | 1     | 1 | 4  | 10    | ИЛ |  |
| Тема 9. Эмпирические математические модели.<br>Практическое занятие "Метод наименьших квадратов"<br>Лабораторная работа "Реализация метода наименьших квадратов в среде"   | 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          | 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                                     |  |
| Не зачтено | 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 |  |

## 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.<br>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>       |  |  |             |   |
| Бусыгин Н. Ю.,<br>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>     |
| Евдокимов, А. Н.,<br>Курзин, А. В.             | Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели)  | Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна | 2018        | <a href="https://www.iprbookshop.ru/102527.html">https://www.iprbookshop.ru/102527.html</a>   |
| 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>   |
| <b>6.1.2 Дополнительная учебная литература</b> |  |  |             |   |
| Евдокимов А.Н.,<br>Курзин А.В.                 | Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели)  | Санкт-Петербург: ВШТЭ СПбГУПТД   | 2018        | <a href="http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=201912897">http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=201912897</a> |
| Бусыгин Н. Ю.,<br>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>     |
| 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>   |
| Бусыгин Н. Ю.,<br>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>           |

|   |  |                              |      |   |
|---|--|------------------------------|------|---|
| Романков П. Г.,<br>Фролов В. Ф., Флисюк<br>О. М.    | Массообменные процессы<br>химической технологии  | Санкт-Петербург:<br>ХИМИЗДАТ | 2017 | <a href="http://www.iprbookshop.ru/67361.html">http://www.iprbookshop.ru/67361.html</a> |
| Романков, П. Г.,<br>Фролов, В. Ф.,<br>Флисюк, О. М. | Методы расчета процессов<br>и аппаратов химической<br>технологии (примеры и<br>задачи) | Санкт-Петербург:<br>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   |



## Приложение

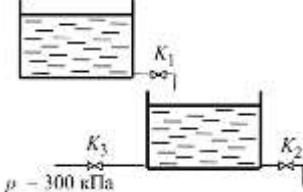
рабочей программы дисциплины Моделирование химико-технологических процессов

*наименование дисциплины*

по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология

наименование ОП (профиля): Наноинженерия, композиты и биоматериалы

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

| № 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" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr> <td style="text-align: left;">Xt, °C</td> <td>25</td> <td>40</td> <td>70</td> <td>90</td> <td>110</td> <td>130</td> <td>150</td> <td>165</td> </tr> <tr> <td style="text-align: left;">Yp, кПа</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> </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, °C | 25   | 40   | 70   | 90   | 110  | 130 | 150 | 165 | Yp, кПа | 0,17 | 1,1 | 3,36 | 5,94 | 9,68 | 15,1 | 34,7 | 50 |
| Xt, °C  | 25  | 40     | 70   | 90   | 110  | 130  | 150  | 165 |     |     |         |      |     |      |      |      |      |      |    |
| Yp, 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</math> мин<sup>-1</sup>; <math>k_2 = 0,1</math> мин<sup>-1</sup>.</p> <p>Начальные концентрации компонентов: <math>c_1^0 = 0,5</math> кмоль/м<sup>3</sup>; <math>c_2^0 = 0</math>; <math>c_3^0 = 0</math>.</p>  |        |      |      |      |      |      |     |     |     |         |      |     |      |      |      |      |      |    |