

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор, проректор
по УР

_____ А.Е. Рудин

Рабочая программа дисциплины

Б1.В.05

Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Учебный план: 2024-2025 18.03.02 ИФСТЗ ПБвРТ ОО №1-1-178.plx

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

Направление подготовки:
(специальность) 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Профиль подготовки:
(специализация) Производственная безопасность в ресурсосберегающих технологиях

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Практ. занятия				
5	УП	16	32	69	27	4	Экзамен
	РПД	16	32	69	27	4	
Итого	УП	16	32	69	27	4	
	РПД	16	32	69	27	4	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, утверждённым приказом Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 923

Составитель (и):

кандидат технических наук, Заведующий кафедрой

Бусыгин Николай Юрьевич

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой инженерной химии и
промышленной экологии

Бусыгин Николай Юрьевич

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Бусыгин Николай Юрьевич

Методический отдел:

С. В. Макаренко

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать компетенции обучающегося в области моделирования энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии в целях исследования, прогнозирования результатов функционирования, оптимизации, в том числе с позиций энерго- и ресурсосбережения.

1.2 Задачи дисциплины:

- ознакомить с основными понятиями математического моделирования процессов и систем энерго- и ресурсосбережения;
- рассмотреть типовые методы построения эмпирических и физико-химических моделей и их качественного исследования;
- сформировать навыки постановки задач оптимизации параметров технологических процессов на основе построенных математических моделей;
- закрепить у студентов практические навыки по использованию численных методов 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:

Математика

Информационные технологии

Численные методы в химико-технологических расчетах

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ПК-1: Способен определять технологические решения, способствующие минимизации и (или) предотвращению негативного воздействия на окружающую среду

Знать: место и роль математического моделирования как метода познания, средства установления взаимосвязи технологических параметров и оптимизации технологических процессов в условиях ограниченных временных и финансовых ресурсов.

Уметь: выбирать существенные факторы, влияющие на технологическую и экономическую эффективность рассматриваемых процессов, выбирать программные средства обработки данных.

Владеть: навыками использования доступных программных продуктов для реализации математических моделей.

ПК-2: Способен оценивать динамику негативного воздействия технологических процессов организации на окружающую среду

Знать: математический аппарат для построения эмпирических статистических моделей для установления качественной и количественной связи между параметрами изучаемых процессов.

Уметь: выбирать средства построения математических моделей статистическими методами.

Владеть: доступными программными продуктами для аппроксимации функций, проведения корреляционного и регрессионного анализа.

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)			
Раздел 1. Эмпирико-статистические математические модели: получение и использование.	5					3
Тема 1. Математическое моделирование как основной метод решения задач оптимизации и проектирования систем инженерной защиты окружающей среды. Современные ЭВМ – техническая основа моделирования. Экономическая и социальная значимость сохранения биосферы и роль методов математического моделирования и оптимизации в инженерном экологическом менеджменте. Общее понятие математической модели. Параметры модели. Классификация математических моделей. Принципы построения математических моделей. Реализация моделей, программные средства реализации моделей.				2		
Тема 2. Общие принципы построения эмпирико-статистических моделей. Моделируемый процесс как «черный ящик». Независимые переменные и функция отклика. Исходные данные для моделирования. Выбор формы модели. Подходы к оценке параметров уравнения модели. Метод наименьших квадратов (МНК) и его реализация. Практическое занятие. Выбор формы эмпирической модели и ее преобразование для использования МНК.		2	2	4		
Тема 3. Программные средства для построения эмпирико-статистических моделей. Использование электронных таблиц MS Excel для получения моделей путем построения линии тренда. Линейная регрессия общего вида в Mathcad. Особенности реализации и использования метода наименьших квадратов в общем виде применительно к линейной регрессии. Практическое занятие. Построение линейных по форме эмпирико-статистических моделей.		2	4	ИЛ		

<p>Тема 4. Нелинейные эмпирико-статистические математические модели. Линеаризация моделей для использования типовых методов и программных средств. Альтернативные методы оценки коэффициентов нелинейных эмпирических моделей. Нелинейная регрессия в Mathcad.</p> <p>Практическое занятие. Оценка коэффициентов уравнения Аррениуса по экспериментальным данным различными методами.</p>		2	2	4	ИЛ	
<p>Раздел 2. Физико-химические математические модели.</p>						
<p>Тема 5. Общие принципы построения физико-химических (детерминированных) математических моделей. Описание гидродинамики, равновесия в системе, кинетики и условий теплообмена как основные составляющие физико-химических моделей. Две постановки задачи расчета процессов и аппаратов по моделям.</p>				2		
<p>Тема 6. Моделирование гидравлических систем как пример построения физико-химических математических моделей. Оценка расхода жидкости через местное сопротивление. Моделирование и расчет короткого разветвленного трубопровода. Моделирование процессов истечения. Практическое занятие. Моделирование процессов перемещения жидкостей. Практическое занятие. Моделирование и расчет истечения жидкостей из системы емкостей.</p>		2	4	4	ИЛ	3
<p>Тема 7. Моделирование кинетики химического взаимодействия как пример построения физико-химических моделей. Материальный баланс простой химической реакции. Закон действующих масс. Построение кинетических уравнений для случаев простой и сложной химических реакций. Практическое занятие. Моделирование кинетики сложной химической реакции</p>		2	2	4	ИЛ	
<p>Раздел 3. Зависимость формы математического описания аппаратов от выбранной гидродинамической модели структуры потоков.</p>						
<p>Тема 8. Типовые модели гидродинамической структуры потоков вещества в аппаратах. Влияние конструктивных особенностей на неравномерность распределения времени пребывания частиц вещества в аппарате. Экспериментальная оценка структуры потоков. С- и F-кривые распределения времени пребывания частиц и их свойства. Практическое занятие. Определение параметров моделей структуры потоков по экспериментальным данным.</p>		2	2	2	ИЛ	3

<p>Тема 9. Моделирование химических реакторов с учетом выбранной гидродинамической модели структуры потоков. Практическое занятие. Математическое описание химических реакторов различного типа и их сравнительная оценка.</p>	2	4	6	ИЛ	
<p>Тема 10. Моделирование теплообменных аппаратов с учетом структуры потоков. Принципы построения математических моделей теплообменников по моделям идеального смешения, вытеснения и ячеечной. Обоснование формы уравнений. Практические занятия. 1) Моделирование теплообменного аппарата на основе ячеечной модели (с различным числом ячеек и взаимным направлением движения потоков). 2) Моделирование теплообменников по модели вытеснения (прямоток, противоток) 3) Комбинированные модели при расчете теплообменников.</p>	2	4	6	ИЛ	
<p>Тема 11. Особенности расчета стационарного процесса теплопередачи с учетом зависимости физико-химических свойств теплоносителей от температуры. Учет агрегатного состояния теплоносителей при выборе уравнений для расчета теплового потока, средней разности температур и коэффициента теплопередачи. Подход к компьютерной оценке коэффициента теплопередачи. Практические занятия: 1) Моделирование теплообмена и расчет коэффициента теплопередачи. 2) Моделирование и расчет теплообменных аппаратов по различным гидродинамическим моделям с учетом зависимости коэффициента теплопередачи от температуры.</p>		2	6	ИЛ	
<p>Тема 12. Подходы к моделированию массообменных процессов и аппаратов. Практическое занятие. Метод аналогий в моделировании тепло- и массопереноса</p>			4		
<p>Раздел 4. Оптимизация технологических процессов на основе их математических моделей</p>					
<p>Тема 13. Общее понятие об оптимизации и численных методах оптимизации. Экономические и технологические параметры целевой функции или критерия оптимальности. Однопараметрическая и многопараметрическая оптимизация. Задачи с ограничениями разного типа. Примеры численных методов оптимизации.</p>			2		3
<p>Тема 14. Примеры использования оптимизационных задач в проектных и технологических расчетах в среде Mathcad и MS Excel. Практическое занятие. Оценка констант скоростей реакции по экспериментальной кинетической кривой.</p>		2	6	ИЛ	

Раздел 5. Математическое моделирование сложных химико-технологических систем.					
Тема 15. Химико-технологическая система как объект моделирования. Понятие ХТС. Статические и динамические режимы функционирования. Элементы ХТС. Технологические операторы. Технологические потоки. Параметричность потоков. Замкнутые и разомкнутые ХТС. Математическая модель ХТС. Постановка задач синтеза и анализа ХТС. Проектный и поверочный расчеты ХТС и ее элементов. Размерность задачи расчета ХТС.			2		
Тема 16. Интегральные методы расчета стационарных режимов ХТС. Сущность интегральных методов и их применимость. Ограничения методов. Расчет материальных потоков в замкнутой ХТС матричным методом. Практическое занятие. Расчет материальных потоков в замкнутой ХТС интегральным (матричным) методом (компьютерное моделирование).	1	2	5	ИЛ	3
Тема 17. Декомпозиционные методы расчета стационарных режимов ХТС. Сущность декомпозиционных методов и их применимость. Формальные методы определения последовательности расчета элементов разомкнутой ХТС. Расчет материальных потоков в разомкнутой ХТС декомпозиционным методом. Структурный анализ замкнутой ХТС и ее расчет итерационным методом. Основные этапы структурного анализа ХТС. Компьютерная реализация алгоритмов. Практические занятия. 1) Расчет материальных потоков в разомкнутой. 2) Структурный анализ замкнутой ХТС. Компьютерный расчет замкнутой ХТС итерационным методом (компьютерное моделирование).	1	4	6	ИЛ	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	16	32	69		
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)		2,5	24,5		
Всего контактная работа и СР по дисциплине		50,5	93,5		

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
ПК-1	Раскрывает принципы построения физико-химических математических моделей, программное обеспечение для реализации моделей.	

	Составляет математическое описание элементов ХТС, опираясь на законы физики, химии, физической химии и других наук, выбирает методы решения систем уравнений модели и программное обеспечение. Выполняет проектные и поверочные расчеты элементов ХТС с использованием выбранных прикладных и специализированных программ, анализирует результаты расчета с позиций влияния моделируемых процессов на окружающую среду, поиска расчетным путем вариантов снижения негативной нагрузки.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированное задание
ПК-2	Объясняет место и роль эмпирических математических моделей в изучении технологических процессов в энерго- и ресурсосбережении, формулирует постановку задачи построения подобных моделей, определяет исходные данные. Выполняет необходимые преобразования исходных уравнений для определения коэффициентов уравнений типовыми методами и доступными программными продуктами. Уверенно выбирает и применяет программные продукты для построения эмпирических уравнений статистическими методами, анализирует и оценивает качество аппроксимации экспериментальных данных, оценивает возможность применения уравнений в практических расчетах при исследовании и проектировании систем энерго- и ресурсосбережения.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированное задание

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	Полный, исчерпывающий ответ, явно демонстрирующий глубокое понимание предмета и широкую эрудицию в оцениваемой области. Критический, оригинальный подход к материалу.	
4 (хорошо)	Ответ полный, основанный на проработке всех обязательных источников информации. Подход к материалу ответственный, но стандартный. Присутствуют небольшие пробелы в знаниях или несущественные ошибки.	
3 (удовлетворительно)	Ответ воспроизводит в основном только лекционные материалы, без самостоятельной работы с рекомендованной литературой. Демонстрирует понимание предмета в целом, без углубления в детали. Присутствуют существенные ошибки или пробелы в знаниях по некоторым темам.	
2 (неудовлетворительно)	Непонимание заданного вопроса. Неспособность сформулировать хотя бы отдельные концепции дисциплины. Попытка списывания, использования неразрешенных технических устройств или пользования подсказкой другого человека (вне зависимости от успешности такой попытки).	

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 5	
1	Общие понятия математического моделирования. Математические модели. Классификация.
2	Основные подходы к построению математических моделей.

3	Эмпирико-статистические математические модели в автоматизированных расчетах. Исходные данные для построения моделей. Выбор формы уравнений. Общая постановка задачи построения моделей данного типа.
4	Основные понятия, применяемые при построении эмпирико-статистических моделей: независимые переменные, факторы, функции отклика, объем выборки, выборочные оценки и др.
5	Метод наименьших квадратов и его использование при оценке коэффициентов линейных регрессионных уравнений. Вывод системы уравнений.
6	Реализация оценки коэффициентов эмпирических уравнений в MS Excel и Mathcad (линейная регрессия общего вида, метод наименьших квадратов).
7	Физико-химические математические модели - общее понятие, основные составляющие.
8	Моделирование процессов перемещения жидкостей. Использование уравнения Бернулли.
9	Моделирование короткого разветвленного трубопровода: подход к расчету и особенности реализации.
10	Математическое моделирование процессов истечения из емкостей: принципы построения уравнений и особенности решения.
11	Моделирование химической кинетики: основные закономерности, лежащие в основе моделей.
12	Моделирование кинетики сложной химической реакции.
13	Необходимость учета особенностей гидродинамической структуры потоков вещества при построении детерминированных математических моделей.
14	Типовые модели структуры потоков вещества в аппаратах: основные допущения и области применения. Диффузионная модель и ее частные (предельные) случаи.
15	Типовые модели структуры потоков вещества в аппаратах: основные допущения и области применения. Ячеечная модель структуры потоков.
16	Экспериментальное определение параметров гидродинамических моделей.
17	Моделирование химического реактора идеального вытеснения.
18	Моделирование химического реактора идеального смешения.
19	Моделирование химического реактора на основе ячейочной модели.
20	Моделирование теплообменного аппарата без изменения агрегатного состояния теплоносителей на основе модели идеального смешения и ячейочной.
21	Моделирование теплообменного аппарата без изменения агрегатного состояния теплоносителей на основе модели идеального вытеснения. Вывод уравнений модели для прямоточной схемы движения теплоносителей.
22	Моделирование теплообменного аппарата без изменения агрегатного состояния теплоносителей на основе модели идеального вытеснения. Особенности решения системы уравнений для противоточной схемы движения теплоносителей.
23	Применение комбинированных моделей структуры потоков (типа смешение - вытеснение) при моделировании теплообменных аппаратов.
24	Особенности учета зависимости свойств потоков в теплообменном аппарате от температуры.
25	Компьютерный расчет коэффициента теплопередачи для различного агрегатного состояния теплоносителей.
26	Базовые понятия оптимизации технологических процессов (постановка задачи, критерий оптимальности и его аргументы, подходы к решению задачи).
27	Химико-технологическая система (ХТС). Элементы ХТС. Технологические операторы, их назначение и условные обозначения. Различные постановки задач расчета ХТС. Понятия синтеза и анализа ХТС
28	Сущность интегральных методов расчета ХТС. Применимость, достоинства и недостатки интегральных методов.
29	Разомкнутые и замкнутые ХТС. Типы связей между элементами системы. Особенности расчета разомкнутых и замкнутых ХТС.
30	Сущность декомпозиционных методов расчета ХТС, их применимость, достоинства и недостатки.
31	Формальные методы определения последовательности расчета элементов разомкнутой ХТС. Возможность компьютерной реализации методов.
32	Структурный анализ замкнутой ХТС – основные этапы и их сущность.
33	Реализация итерационных алгоритмов расчета ХТС на основе результатов структурного анализа замкнутой схемы.

5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрены.

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. В аппарат поступают 2 входных потока, для которых заданы массовые расходы G_1 и G_2 (в кг/ч), и 2 выходных с массовыми расходами G_3 и G_4 . Запишите уравнения материального баланса.

2. В аппарат поступают 2 входных потока, для которых заданы объемные расходы V_1 и V_2 (в м³/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 $A_1 + A_2 = 2 A_3$ запишите уравнение материального баланса, если в ходе реакции объем реакционной смеси не меняется.

Другие примеры практико-ориентированных заданий приведены в приложении к программе дисциплины.

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»

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная Письменная Компьютерное тестирование Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Время на подготовку к устному собеседованию по теоретическому вопросу составляет 20 минут.

Время на выполнение практико-ориентированного задания составляет 60 минут (составление математической модели и ее реализация на компьютере с использованием выбранного обучающимся программного обеспечения).

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Бусыгин Н. Ю.	Моделирование процессов защиты окружающей среды	СПб.: СПбГУПТД	2019	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2019174
Шимова, Ю. С., Демиденко, Н. Ю., Лис, Е. В.	Моделирование химико-технологических процессов	Красноярск: Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева	2021	https://www.iprbooks.hop.ru/116642.html
Воронина, П. В., Лапин, В. Н.	Математическое моделирование в задачах	Новосибирск: Новосибирский государственный университет	2023	https://www.iprbooks.hop.ru/134573.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Бусыгин Н. Ю.	Моделирование процессов защиты окружающей среды. Курсовая работа	СПб.: СПбГУПТД	2016	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=3432
Бусыгин Н. Ю.	Моделирование процессов защиты окружающей среды. Контрольная работа	СПб.: СПбГУПТД	2019	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2019134
Бусыгин Н. Ю.	Методы и средства автоматизированных расчетов в экологии. Решение задач в среде Mathcad	СПб.: СПбГУПТД	2014	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2178

Бусыгин Н. Ю., Багров И. В.	Автоматизированные расчеты химико- технологических систем. Интегральные и декомпозиционные методы	СПб.: СПбГУПТД	2015	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2493
Евдокимов, А. Н., Курзин, А. В.	Моделирование химико- технологических процессов (экспериментально- статистические модели)	Санкт-Петербург: Санкт- Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна	2018	https://www.iprbookshop.ru/102527.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам. Раздел. Информатика и информационные технологии» [Электронный ресурс]. URL: http://window.edu.ru/catalog/?p_rubr=2.2.75.6

Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам. Раздел. Вычислительная математика. Математическое моделирование. Численные методы» [Электронный ресурс]. URL: http://window.edu.ru/catalog/resources?p_rubr=2.2.74.12.57

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

Информационно-образовательная среда СПбГУПТД <https://portal.sutd.ru/> с образовательными ресурсами по дисциплине, в том числе видеоматериалами для практических занятий.

Информационно-образовательная среда заочного обучения СПбГУПТД <http://edu.sutd.ru/moodle/>.

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional

Microsoft Windows

Mathcad Education – University Edition Term

1С-Битрикс: Внутренний портал учебного заведения

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

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