

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»



УТВЕРЖДАЮ:
директор института естествознания
и стандартизации

И.Ю.Мезин
06 сентября 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Направление подготовки
18.03.01 Химическая технология

Направленность (профиль) программы

Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов

Уровень высшего образования – бакалавриат

Программа подготовки – академический бакалавриат

Форма обучения
Очная

Институт	<i>Естествознания и стандартизации</i>
Кафедра	<i>Физической химии и химической технологии</i>
Курс	4
Семестр	8

Магнитогорск 2017 г.

Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 18.03.01 *Химическая технология*, утвержденного приказом МОиН РФ от 11.08.2016 № 1005.


Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры *Физической химии и химической технологии* 25 сентября 2017 г., протокол № 1.

Зав. кафедрой  / А.Н.Смирнов/

Рабочая программа одобрена методической комиссией института Естествознания и стандартизации 25 сентября 2017 г., протокол № 1.

Председатель  / И.Ю. Мезин/






Рабочая программа составлена:

 доцент, д. ф.-м. н.
/ А. Н. Смирнов/

Рецензент:
ведущий специалист НТЦ ГАДП ПАО ММК, к.т.н.

 / Е.Н. Степанов

Лист регистрации изменений и дополнений

№ п/п	Раздел РПД (модуля)	Краткое содержание изменения/ дополнения	Дата, № протокола заседания кафедры	Подпись зав. кафедрой
1	8	Корректировка списка лицензионного обеспечения	№1 от 04.09.2018	
2	8	Корректировка списка литературы	№1 от 04.09.2018	
3	8	Корректировка списка лицензионного обеспечения	№5 от 31.10.2018	
4	3,4,6,7	Корректировка рабочей программы	№1 от 04.09.2019	
5	8	Актуализация учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины	№1 от 31.08.2020	

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

Целями освоения дисциплины (модуля) «Моделирование химико-технологических процессов» являются:

свободное владение основными методами построения, численного решения, реализации (представления) и исследования с помощью ЭВМ математических моделей;

освоение существующих основных математических моделей, используемых при описании химико-технологических процессов;

Следствием из поставленных целей должна стать главная цель:

свободное чтение и понимание отечественных и зарубежных работ, посвященных математическому моделированию в области профессиональной деятельности (коксохимия).

2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы подготовки бакалавра (магистра, специалиста)

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов» входит в базовую часть образовательной программы.

Для изучения дисциплины необходимы знания (умения, владения), сформированные в результате изучения Б1.Б.09 Математика, Б1.Б.11 Информатика, Б1.Б.14 Физическая химия, Б1.Б.19 Химические реакторы.

Знания (умения, владения), полученные при изучении данной дисциплины будут необходимы Б1.В.ДВ.3.1 УИРС, Б3 Государственная итоговая аттестация.

3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) и планируемые результаты обучения

В результате освоения дисциплины (модуля) «Моделирование химико-технологических процессов» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения
ОПК-5 владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией	
Знать	– интерфейс и основные возможности программ общего назначения (электронные таблицы) и специализированных программ для решения задач, связанных с математическим моделированием; – возможности ТП при решении типовых задач;
Уметь	– создать собственную функцию в табличном процессоре; – использовать возможности ТП для реализации алгоритма по блок-схеме; – выполнить в ТП вычисления по итерационным формулам;
Владеть	– практическими навыками работы в табличном процессоре (ТП); – практическими навыками работы в специализированных программах;
ПК-16 способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.	

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения
Знать	<ul style="list-style-type: none"> – понятия «модель», «математическая модель», необходимость наличия математической модели для описания химико-технологического процесса для сферы производства; – физико-химический метод моделирования равновесного состава смеси; – понятие о линейной зависимости/независимости химических реакций; – основные блок-схемы для описания вычислительного алгоритма; – основные численные методы решения уравнения, получаемого в ходе физико-химического моделирования равновесного состава смеси; – основные дифференциальные уравнения формальной кинетики; – основные методы численного решения дифференциальных уравнений; – общую методику построения (выведения) дифференциальных уравнений на основе материального и теплового баланса; – дифференциальные уравнения непрерывности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объема реактора любого типа. – элементы теории подобия (происхождение критериев подобия, критерияльных уравнений, из основных дифференциальных уравнений, описывающих процесс); – уравнение стандартного нормального распределения, его свойства;
Уметь	<ul style="list-style-type: none"> – вывести основные уравнения формальной кинетики; – уметь аналитически решить основные уравнения формальной кинетики; – вывести на основе материального или теплового баланса основные дифференциальные уравнения: непрерывности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объема реактора любого типа;
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> – методом статистического анализа однородности дисперсий; – методом статистического анализа выборки на наличие грубых ошибок; – методом статистического анализа однородности средних; – методом наименьших квадратов (МНК); – методом обработки результатов пассивных экспериментов на основе МНК; – методом ПФЭ; анализ полученной модели на адекватность и работоспособность; – методомДФЭ; – методом построения многоуровневого многофакторного плана, использующего свойства латинских квадратов.

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в академических часах)			Самостоятельная работа (в академических часах)	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код и структурный элемент компетенции
		лекции	лабораторные занятия	практические занятия				
2.1. Тема Понятие о физико-химическом моделировании. Термодинамика химических превращений. Направление химических реакций. Уравнение изотермы химической реакции. Понятие о фугитивности и активности. Способы описания концентрации реагирующих веществ. Изменение энергии Гиббса в ходе реакции. Уравнение изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Гетерогенное химическое равновесие: запись констант равновесия. Определение констант равновесия при различных температурах. Понятие о линейной зависимости химических реакций.	8	5		6/2И	6	АР №2 (Задачи №№ 3–12)	Текущий контроль успеваемости	ПК 16 –зув; ОПК-5 – зув
2.2. Тема Кинетические особенности протекания химических реакций в различных средах. Границы применимости термодинамического подхода к моделированию ХТП. Рассмотрение задач различной сложности. Методика составления систем уравнений, описывающих равновесные концентрации веществ, принимающих участие в химических реакциях. Сведение системы нелинейных уравнений к одному нелинейному уравнению в задачах моделирования протекающих химических реакций.	8	5		6/2И	6	АР №2 (Задача № 13)	Текущий контроль успеваемости	ПК 16 –зув; ОПК-5 – зув
2.3. Тема Дифференциальные уравнения непрерывности потока для неустано-вившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, кон-	8	5		4/2И	6	АР №2 (Задача №14)	Текущий контроль успеваемости	ПК 16 –зув; ОПК-5 – зув.

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в acad. часах)			Самостоятельная работа (в acad. часах)	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код и структурный элемент компетенции
		лекции	лаборат. занятия	практич. занятия				
вективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объёма реактора любого типа. Общие сведения о теории подобия. Основные критерии подобия.								
Итого по разделу		15		16/6И	18		Текущий контроль успеваемости	
3. Раздел Экспериментальный подход								
3.1. Тема Статистические методы анализа экспериментальных данных. Экспериментальные оценки истинного значения измеряемой случайной величины и её дисперсии. Определение грубых ошибок среди результатов повторностей опыта. Средневзвешенные оценки дисперсии. Анализ однородности исходных оценок дисперсии. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения.	8	5		5/ИИ	6	АР №3 (Задачи №№ 15–18)	Текущий контроль успеваемости	ПК 16 –зув; ОПК-5 – зув
3.2. Тема Планирование и обработка результатов однофакторного экспериментов. Формализация экспериментальных данных методом наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента. Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспонен-	8	5		4/ИИ	6	АР №3 (Задачи №№ 19–20)	Текущий контроль успеваемости	ПК 16 –зув; ОПК-5 – зув

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в акад. часах)			Самостоятельная работа (в акад. часах)	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код и структурный элемент компетенции
		лекции	лаборат. занятия	практич. занятия				
<p>циальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов.</p> <p>Двухуровневые планы многофакторных экспериментов. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента.</p> <p>Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ²ⁿ. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ²ⁿ. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.</p> <p>Дробный факторный эксперимент ДФЭ^{2^{n-n'}}. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ²ⁿ ДФЭ^{2^{n-n'}} для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости. Рассмотрение примеров.</p> <p>Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры.</p>								
Итого по разделу		10		9/2И	12	–	Текущий контроль успеваемости	
4. Раздел Комбинированный подход								
4.1. Тема Особенности комбинированных математических моделей. Рассмотрение математических моделей из области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса M ₂₅ и M ₁₀). Задача математического программирования для определения оптимального качества	8	4		4/2И	4,35	АР №4 (Задача №21)	Текущий контроль успеваемости	ПК 16 –зув; ОПК-5 – зув

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	Аудиторная контактная работа (в академических часах)			Самостоятельная работа (в академических часах)	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код и структурный элемент компетенции
		лекции	лабораторные занятия	практические занятия				
кокса и его стоимости.								
Итого по разделу		4		4/2И	4,35	–	Текущий контроль успеваемости	–
Итого за семестр		33		33/12И	38,35	–	Промежуточная аттестация (экзамен)	–
Итого по дисциплине		33		33/12И	38,35	–	–	–

И – в том числе, часы, отведенные на работу в интерактивной форме.

5 Образовательные и информационные технологии

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов» используются различные образовательные технологии:

1. Информационно-развивающие технологии, направленные на овладение большим запасом знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется лекционно-семинарский метод, самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации;

2. Деятельностные практико-ориентированные технологии, направленные на формирование системы профессиональных практических умений при проведении экспериментальных исследований, обеспечивающих возможность качественно выполнять профессиональную деятельность;

3. Развивающие проблемно-ориентированные технологии, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности проблемно мыслить, видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения. Используются следующие виды проблемного обучения: освещение основных проблем изучаемой дисциплины на лекциях, учебные дискуссии, решение задач повышенной сложности. Преподаватель лишь создает проблемную ситуацию, а разрешают её обучаемые в ходе самостоятельной деятельности;

4. Личностно-ориентированные технологии обучения, обеспечивающие в ходе учебного процесса учет различных способностей обучаемых, создание необходимых условий для развития их индивидуальных способностей, развитие активности личности в учебном процессе. Личностно-ориентированные технологии обучения реализуются в результате индивидуального общения преподавателя и студента на консультациях, при выполнении домашних индивидуальных заданий, подготовке индивидуальных отчетов по индивидуальным заданиям, решении задач.

Методическая концепция преподавания дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» предусматривает активную форму усвоения материала, которая обеспечивает максимальную самостоятельность студента в решении технологических задач при выполнении заданий.

Также предусмотрены различные виды лекционных занятий:

- лекция с разбором конкретной задачи, изложенной в устной форме или в виде слайда или видеозаписи, студенты совместно с преподавателем обсуждают и анализируют представленный материал;

- лекция с разбором нерешенных и проблемных вопросов дисциплины – анализ и обсуждение возможных вариантов решения этих вопросов.

Самостоятельная работа стимулирует студентов к самостоятельной проработке тем в процессе написания рефератов, выполнения индивидуальных заданий, в процессе подготовки к коллоквиумам и итоговой аттестации.

Интерактивное обучение включает следующие методы:

- работа в команде
- проблемное обучение
- контекстное обучение
- обучение на основе опыта
- междисциплинарное обучение
- эвристическая беседа
- учебная дискуссия.

Для оценки знаний рекомендуется использовать рейтинговую систему, которая обеспечивает диагностику достижения обучаемым заданного уровня компетентности на каждом этапе текущего, промежуточного и рубежного, итогового контроля. Цель студента – набрать максимальное число баллов. При рейтинговой системе резко возрастает роль

текущего контроля. В конце семестра, студенты, набравшие суммарный рейтинг 50% получают допуск к экзамену.

6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

По дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов» предусмотрена аудиторная и внеаудиторная работа обучающихся.

Аудиторная работа студентов предполагает решение задач на практических занятиях.

Аудиторные работы (АР):

АР №1 «Общие вопросы моделирования»

№1. Составить блок-схему для вычисления суммы квадратов первых N чисел натурального ряда.

№2. Составить блок-схему для решения задачи. Каково время падения тела, если известны высота, ускорение, начальная скорость. Примечание: предусмотреть корректную обработку всех возможных случаев: решение не имеет корней; один, два корня; задача не имеет физического смысла.

АР №2 «Аналитический подход к моделированию ХТП»

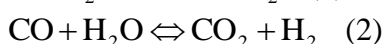
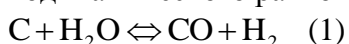
№1. Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве $C=10^{-5}$ моль / л. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.

№2. Рассчитать ионно-молекулярный состав раствора в присутствии растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.

№3. Значение pH раствора регулируется изменением концентрации соды. Рассчитать концентрацию $[\text{CO}_3^{2-}]$ ионов в растворе, с учётом растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.

№4. При каком значении pH достигается практически полное осаждение MnS ($\text{IP}_{\text{MnS}} = 2.5 \cdot 10^{-10}$), содержащегося в растворе в количестве 0,005 моль, при употреблении 50 % избытка осадителя. Расчёт произвести на 1 л исследуемого раствора. Все численные расчёты произвести в табличном процессоре, аналитические записи предоставить в бумажном виде. Из каких соображений находится концентрация марганца $[\text{Mn}^{2+}]$, и между какими химическими формами осуществляется материальный баланс по сере избыточной концентрации осадителя?

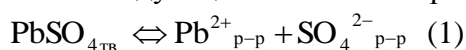
№5. Пример 5. Рассчитать равновесный состав газовой фазы для установившегося термодинамического равновесия получения водяного газа по реакциям:

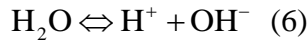
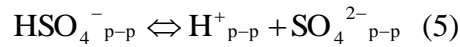
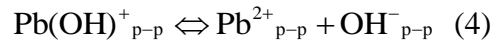
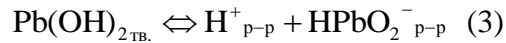
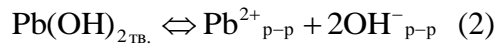


В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно p_{CO} .

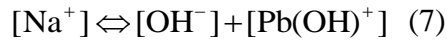
№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход PbSO_4 в $\text{Pb}(\text{OH})_2$. Изменение pH происходит за счёт NaOH.

В системе предполагается протекание следующих химических реакций:

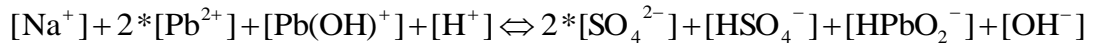




Уравнение материального баланса:



Уравнение электронейтральности:



Примечание: при решении задачи необходимо по имеющимся уравнениям составить систему нелинейных уравнений, из неё вывести уравнение:

$$2 * K_2^2 * K_4 * K_5 * [\text{H}^{+}]^4 + K_2 * K_5 * K_w (2 * K_2 + K_4 * K_w) * [\text{H}^{+}]^3 - \\ - K_4 * K_w^2 (K_1 * K_w^2 + K_2 * K_3 * K_5) * [\text{H}^{+}] - 2 * K_1 * K_4 * K_5 * K_w^4 = 0$$

Из справочных данных необходимо определить константы химических реакций $K_1 - K_6$ соответствующих реакций (1)-(6).

Из практических соображений установить, с какой точностью необходимо вычислять значение рН.

Нелинейное уравнение необходимо решить четырьмя методами: графическим, половинного деления, Ньютона, хорд. Сделать вывод о скорости сходимости каждого из методов при заданной точности получаемого результата, а также пригодности для решения задачи физико-химического моделирования.

Рассмотреть эвристический метод, основанный на специфике решаемой задачи, решения системы нелинейных уравнений.

Все вычисления произвести в табличном процессоре.

№7. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

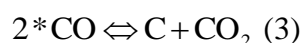
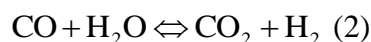
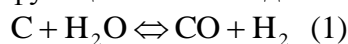
№8. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3) и (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) и (5) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

№9. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (1), (3), (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (1) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

№10. Решить нелинейное уравнение из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.

№11. Решить систему нелинейных уравнений из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.

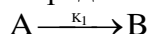
№12. Исходя из понятия линейная зависимость/независимость химических реакций, с помощью встроенных математических функций MathCad для системы реакций





Определить количество линейно-независимых химических реакций. Что это означает с точки зрения математического описания данной системы реакций.

№13. Для необратимой реакции первого порядка:



Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации А. Решить полученное дифференциальное уравнение методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Кутта. Сделать вывод о точности каждого из методов в сравнении друг с другом. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров:

$$C_A^0 = 0,7 \text{ моль/л; } k_1 = 0,001 \text{ 1/с; } h = 0,1 \text{ (шаг интегрирования).}$$

№14. Для последовательной схемы необратимых химических реакций первого порядка: А



Составить систему дифференциальных уравнений и решить её с помощью метода Эйлера, модифицированного Эйлера, Рунге-Кутта 4-ого порядка. Сделать вывод о точности получаемого решения, сравнивая методы между собой. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров:

$$C_A^0 = 0,5 \text{ моль/л; } C_B^0 = C_C^0 = 0 \text{ моль/л; } k_1 = 0,05 \text{ 1/с; } k_2 = 0,07 \text{ 1/с; } h = 0,1 \text{ (шаг интегрирования).}$$

АР №3 «Экспериментальный подход»

№15. С надёжностью $P = 0,95$ обеспечить однородность представленных в таблице данных, исключив грубые ошибки.

к	1	2	3	4	5	6	7	8
$y_k, \%$	54	53	54	30	46	52	55	54
$\Delta y_k, \%$	4,2	3,2	4,2	-19,8	-3,8	2,2	5,2	4,2
$\Delta y_k^2, \%$	18	10	18	392	14	4,8	27	18

Решение данной задачи осуществить на основе двух методов: правила 2σ и критерия максимального отклонения g . Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.

№16. С помощью анализа однородности средних. Дать заключение о возможности преимущества ($P = 0,95$) одного аппарата перед другим по производительности.

$y_k \backslash k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Σ
y_{k1}	188	192	189	193	190	191	190	188	190	-	1711
y_{k2}	193	192	189	194	195	192	194	198	196	195	1933

Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.

№17. Для проверки правильности вольтамперометрической (ВА) методики определения кадмия Cd использовали атомно-абсорбционную (АА) методику, не содержащую систематической погрешности. При анализе одного и того же объекта получены следующие результаты (нг / мл Cd):

$$ВА : 20,5; 22,4; 23,4; 20,8$$

$$АА: 23,5; 20,1; 19,9; 19,2; 19,0; 22,8$$

Содержит ли вольтамперометрическая методика систематическую погрешность?

Расчёты выполнить с использованием табличного процессора без использования специальной надстройки.

№18. Решить задачу №17 используя надстройку табличного процессора.

№19. Используя три различных генерирующих соотношения, составить планы экспериментов ПФЭ⁵⁻². Записать формулы для расчёта коэффициентов линейной модели.

№20. На основе латинских квадратов составить пятиуровневый план пятифакторного эксперимента для исследования процесса инфракрасной сушки гранулированных материалов в вакууме при импульсном энергоподводе. Получить математическую в виде суммы нелинейных функций и найти оптимальные значения режимных параметров процесса: плотности теплового потока на поверхности слоя материала C_I (Вт/см²), толщина слоя продукта C_{II} (мм), диаметра гранул C_{III} (мм), величины разряжения C_{IV} (мм. рт.ст.) и скважности импульса C_V (%), отношение времени работы инфракрасной сушилки к общему времени пребывания в сушильной камере). Выходом процесса y (руб/т) или критерием оптимальности принята величина приведённых доходов с учётом производительности установки и потребляемой мощности.

Уровни	1	2	3	4	5
C_I (Вт/см ²)	0,50	0,75	1,00	1,25	1,50
C_{II} (мм)	5	10	15	20	25
C_{III} (мм)	2	3	4	5	6
C_{IV} (мм. рт.ст.)	0	150	300	450	600
C_V	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
x (безразм.)	-2	-1	0	1	2

и	План	\bar{y} руб/т	и	План	\bar{y} руб/т	и	План	\bar{y} руб/т	и	План	\bar{y} руб/т
1	11111	130	8	41352	270	15	21543	320	22	12345	200
2	23451	140	9	53142	320	16	44444	320	23	24135	170
3	35241	230	10	15432	200	17	51234	390	24	31425	240
4	42531	290	11	33333	400	18	13524	240	25	432151	250
5	54321	260	12	45123	260	19	25314	220			
6	22222	350	13	52413	340	20	32154	220			
7	34512	260	14	14253	180	21	55555	40			

АР №4 «Комбинированный подход»

№ 21. По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 2⁴ рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса M_{25} и M_{10} , сравнить их с предложенными в самой научной статье.

Указание к выполнению задания: на листе ТП в информативном виде создать таблицу планирования эксперимента ПФЭ 2⁴, ввести средние значения показателей качества кокса M_{25} и M_{10} и рассчитать коэффициенты линейной модели.

Содержание практического раздела дисциплины

- 1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд;
- 2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона;
- 3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам.
- 4) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения нелинейных уравнений;
- 5) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Эйлера.
- 6) Алгоритм решения дифференциальных уравнений модифицированным методом Эйлера.
- 7) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Рунге-Куты четвёртого порядка.
- 8) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения диффе-

ренциальных уравнений;

9) *Решение систем дифференциальных уравнений методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Куты.*

10) *Использование пакета прикладных программ MathCad для решения систем дифференциальных уравнений.*

11) *Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса M25 и M10) в пакете MathCad.*

12) *Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования.*

13) *Использование программы MathCad для решения задач математического программирования.*

Перечень вопросов к экзамену

Общие вопросы моделирования:

1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей;

2. Сущность аналитического подхода к математическому моделированию. Моделирование ХТП при аналитическом подходе;

3. Сущность экспериментального подхода к математическому моделированию;

4. Сущность комбинированного подхода к математическому моделированию;

5. Триединство при описании объекта моделирования. Требования к каждой из составной части при описании объекта;

6. Основные этапы моделирования (с поясняющими примерами).

Аналитический подход к созданию математических моделей:

7. Уравнение изотермы химической реакции при различном способе выражения концентрации. Выражение уравнения изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Соотношения для констант равновесия K_N , K_m , K_c в идеальном растворе;

8. Метод Тёмкина-Шварцмана расчёта констант равновесия химической реакции. Понятие о линейной зависимости и независимости уравнений химических реакций. Основные способы определения линейно независимых уравнений химических реакций;

9. Возможности моделирования при термодинамическом подходе к определению равновесных значений участвующих в химических реакциях веществ. Основные достоинства и недостатки при термодинамическом подходе.

10. Основные понятия и определения формальной кинетики: скорость химической реакции, способы её выражения, молекулярность реакции, порядок реакции, частный порядок реакции, постулат химической кинетики (уравнение Гульдберга и Вааге), константа скорости химической реакции (правило Вант-Гоффа, уравнение Аррениуса);

11. Скорость необратимых реакций первого, второго, n-ого порядков. Обратимая реакция первого порядка;

12. Обратимая реакция второго порядка (разобрать только частный случай: отсутствие в начальный момент времени продуктов реакции, начальные концентрации реагирующих веществ равны между собой). Параллельные реакции;

13. Последовательные реакции первого порядка (для трёх химических соединений). Разобрать различные случаи соотношения между собой констант химических реакций;

14. Общее уравнение динамики и скорости химической реакции, протекающей в потоке в режиме идеального вытеснения. Необратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения.

15. Обратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения. Последовательная реакция первого порядка, протекающая в потоке в режиме идеального вытеснения.

16. Кинетика гомогенных реакций, протекающих в режиме идеального перемешивания.

Экспериментальный подход к созданию математических моделей:

17. Статистические методы анализа экспериментальных данных: оценка истинного значения измеряемой величины и её дисперсии; определение грубых ошибок; средневзвешенные оценки дисперсии; анализ однородности исходных оценок дисперсии.

18. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения.

19. Метод наименьших квадратов. Сущность планирования эксперимента в сравнении с непосредственным применением метода наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента. Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов.

20. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭⁿ. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭⁿ. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.

21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ^{n-n'}. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭⁿ ДФЭ^{n-n'} для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости.

22. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры.

23. Применение методов приближённых вычислений при обработке результатов экспериментов. Оценки точности измерений и приближённых вычислений. Оценка точности окончательного результата. Практическое вычисление ошибок.

Численные методы решения задач, возникающих при моделировании:

24. Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам;

25. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона;

26. Решение нелинейного уравнения методом хорд;

27. Решение дифференциального уравнения методом Эйлера. Модифицированный метод Эйлера. Адаптация метода Эйлера на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;

28. Решение дифференциального уравнения методом Рунге-Куты четвёртого порядка. Адаптация метода Рунге-Куты на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;

7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

а) Планируемые результаты обучения и оценочные средства для проведения промежуточной аттестации:

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
<p>ПК-16 способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.</p>		
<p>Знать</p>	<ul style="list-style-type: none"> – понятия «модель», «математическая модель», необходимость наличия математической модели для описания химико-технологического процесса для сферы производства; – физико-химический метод моделирования равновесного состава смеси; – понятие о линейной зависимости/независимости химических реакций; – основные блок-схемы для описания вычислительного алгоритма; – основные численные методы решения уравнения, получаемого в ходе физико-химического моделирования равновесного состава смеси; – основные дифференциальные уравнения формальной кинетики; – основные методы численного решения дифференциальных уравнений; – общую методику построения (выведения) дифференциальных уравнений на основе материального и теплового баланса; – дифференциальные уравнения непре- 	<p style="text-align: center;">Перечень вопросов к экзамену</p> <p>Общие вопросы моделирования:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей; 2. Сущность аналитического подхода к математическому моделированию. Моделирование ХТП при аналитическом подходе; 3. Сущность экспериментального подхода к математическому моделированию; 4. Сущность комбинированного подхода к математическому моделированию; 5. Триединство при описании объекта моделирования. Требования к каждой из составной части при описании объекта; 6. Основные этапы моделирования (с поясняющими примерами). Аналитический подход к созданию математических моделей; 7. Уравнение изотермы химической реакции при различном способе выражения концентрации. Выражение уравнения изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Соотношения для констант равновесия K_N, K_m, K_c в идеальном растворе; 8. Метод Тёмкина-Шварцмана расчёта констант равновесия химической реакции. Понятие о линейной зависимости и независимости уравнений химических реакций. Основные способы определения линейно независимых уравнений химических реакций; 9. Возможности моделирования при термодинамическом подходе к определению равновесных значений участвующих в химических реакциях веществ. Основные до-

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	<p><i>равности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объема реактора любого типа.</i></p> <p><i>– элементы теории подобия (происхождение критериев подобия, критериальных уравнений, из основных дифференциальных уравнений, описывающих процесс); уравнение стандартного нормального распределения, его свойства;</i></p>	<p>стоинства и недостатки при термодинамическом подходе.</p> <p>10. Основные понятия и определения формальной кинетики: скорость химической реакции, способы её выражения, молекулярность реакции, порядок реакции, частный порядок реакции, постулат химической кинетики (уравнение Гульдберга и Вааге), константа скорости химической реакции (правило Вант-Гоффа, уравнение Аррениуса);</p> <p>11. Скорость необратимых реакций первого, второго, n-ого порядков. Обратимая реакция первого порядка;</p> <p>12. Обратимая реакция второго порядка (разобрать только частный случай: отсутствие в начальный момент времени продуктов реакции, начальные концентрации реагирующих веществ равны между собой). Параллельные реакции;</p> <p>13. Последовательные реакции первого порядка (для трёх химических соединений). Разобрать различные случаи соотношения между собой констант химических реакций;</p> <p>14. Общее уравнение динамики и скорости химической реакции, протекающей в потоке в режиме идеального вытеснения. Необратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения.</p> <p>15. Обратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения. Последовательная реакция первого порядка, протекающая в потоке в режиме идеального вытеснения.</p> <p>16. Кинетика гомогенных реакций, протекающих в режиме идеального перемешивания.</p> <p>Экспериментальный подход к созданию математических моделей:</p> <p>17. Статистические методы анализа экспериментальных данных: оценка истинного значения измеряемой величины и её дисперсии; определение грубых ошибок; средневзвешенные оценки дисперсии; анализ однородности исходных оценок дисперсии.</p> <p>18. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения.</p> <p>19. Метод наименьших квадратов. Сущность планирования эксперимента в срав-</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p>нении с непосредственным применением метода наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов.</p> <p>20. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭⁿ. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭⁿ. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.</p> <p>21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ^{n-n'}. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭⁿ ДФЭ^{n-n'} для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости.</p> <p>22. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры.</p> <p>23. Применение методов приближённых вычислений при обработке результатов экспериментов. Оценки точности измерений и приближённых вычислений. Оценка точности окончательного результата. Практическое вычисление ошибок.</p>
Уметь	<ul style="list-style-type: none"> – вывести основные уравнения формальной кинетики; – уметь аналитически решить основные уравнения формальной кинетики; – вывести на основе материального или теплового баланса основные дифференциальные уравнения: непрерывности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; урав- 	<p>Практические задания:</p> <p>№1. Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве $C=10^{-5}$ моль / л. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p> <p>№2. Рассчитать ионно-молекулярный состав раствора в присутствии растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	<p><i>нение материального баланса для элементарного объёма реактора любого типа;</i> – <i>создать собственную функцию в табличном процессоре.</i></p>	<p>№3. Значение pH раствора регулируется изменением концентрации соды. Рассчитать концентрацию $[\text{CO}_3^{2-}]$ ионов в растворе, с учётом растворённой угольной кислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p> <p>№4. При каком значении pH достигается практически полное осаждение MnS ($\text{IP}_{\text{MnS}} = 2.5 \cdot 10^{-10}$), содержащегося в растворе в количестве 0,005 моль, при употреблении 50 % избытка осадителя. Расчёт произвести на 1 л исследуемого раствора. Все численные расчёты произвести в табличном процессоре, аналитические записи предоставить в бумажном виде. Из каких соображений находится концентрация марганца $[\text{Mn}^{2+}]$, и между какими химическими формами осуществляется материальный баланс по сере избыточной концентрации осадителя?</p> <p>№5. Пример 5. Рассчитать равновесный состав газовой фазы для установившегося термодинамического равновесия получения водяного газа по реакциям: $\text{C} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$ (1) $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$ (2)</p> <p>В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно p_{CO}.</p> <p>№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход PbSO_4 в $\text{Pb}(\text{OH})_2$. Изменение pH происходит за счёт NaOH. В системе предполагается протекание следующих химических реакций:</p> $\text{PbSO}_{4\text{тв.}} \rightleftharpoons \text{Pb}^{2+}_{\text{р-р}} + \text{SO}_4^{2-}_{\text{р-р}} \quad (1)$ $\text{Pb}(\text{OH})_{2\text{тв.}} \rightleftharpoons \text{Pb}^{2+}_{\text{р-р}} + 2\text{OH}^-_{\text{р-р}} \quad (2)$ $\text{Pb}(\text{OH})_{2\text{тв.}} \rightleftharpoons \text{H}^+_{\text{р-р}} + \text{HPbO}_2^-_{\text{р-р}} \quad (3)$ $\text{Pb}(\text{OH})^+_{\text{р-р}} \rightleftharpoons \text{Pb}^{2+}_{\text{р-р}} + \text{OH}^-_{\text{р-р}} \quad (4)$

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		$\text{HSO}_4^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-} \quad (5)$ $\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^- \quad (6)$ <p>Уравнение материального баланса: $[\text{Na}^+] \rightleftharpoons [\text{OH}^-] + [\text{Pb}(\text{OH})^+] \quad (7)$</p> <p>Уравнение электронейтральности: $[\text{Na}^+] + 2 * [\text{Pb}^{2+}] + [\text{Pb}(\text{OH})^+] + [\text{H}^+] \rightleftharpoons 2 * [\text{SO}_4^{2-}] + [\text{HSO}_4^-] + [\text{HPbO}_2^-] + [\text{OH}^-]$</p> <p>Примечание: при решении задачи необходимо по имеющимся уравнениям составить систему нелинейных уравнений, из неё вывести уравнение:</p> $2 * K_2^2 * K_4 * K_5 * [\text{H}^+]^4 + K_2 * K_5 * K_w (2 * K_2 + K_4 * K_w) * [\text{H}^+]^3 -$ $- K_4 * K_w^2 (K_1 * K_w^2 + K_2 * K_3 * K_5) * [\text{H}^+] - 2 * K_1 * K_4 * K_5 * K_w^4 = 0$ <p>Из справочных данных необходимо определить константы химических реакций $K_1 - K_6$ соответствующих реакций (1)-(6). Из практических соображений установить, с какой точностью необходимо вычислять значение рН. Нелинейное уравнение необходимо решить четырьмя методами: графическим, половинного деления, Ньютона, хорд. Сделать вывод о скорости сходимости каждого из методов при заданной точности получаемого результата, а также пригодности для решения задачи физико-химического моделирования. Рассмотреть эвристический метод, основанный на специфике решаемой задачи, решения системы нелинейных уравнений. Все вычисления произвести в табличном процессоре. №7. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) на моделируемую систему и итоговое значение рН. №8. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3) и (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом.</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p>Сделать вывод о влиянии уравнения (3) и (5) на моделируемую систему и итоговое значение pH.</p> <p>№9. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (1), (3), (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (1) на моделируемую систему и итоговое значение pH.</p> <p>№10. Решить нелинейное уравнение из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.</p> <p>№11. Решить систему нелинейных уравнений из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.</p> <p>№12. Исходя из понятия линейная зависимость/независимость химических реакций, с помощью встроенных математических функций MathCad для системы реакций</p> $\text{C} + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{CO} + \text{H}_2 \quad (1)$ $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2 \quad (2)$ $2 * \text{CO} \Leftrightarrow \text{C} + \text{CO}_2 \quad (3)$ $\text{C} + 2 * \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{CO}_2 + 2 * \text{H}_2 \quad (4)$ <p>Определить количество линейно-независимых химических реакций. Что это означает с точки зрения математического описания данной системы реакций.</p> <p>№13. Для необратимой реакции первого порядка:</p> $\text{A} \xrightarrow{k_1} \text{B}$ <p>Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации А. Решить полученное дифференциальное уравнение методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Кутта. Сделать вывод о точности каждого из методов в сравнении друг с другом. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров:</p> $C_A^0 = 0,7 \text{ моль/л}; k_1 = 0,001 \text{ 1/с}; h = 0,1 \text{ (шаг интегрирования)}.$

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства																																																												
		<p>№14. Для последовательной схемы необратимых химических реакций первого порядка:</p> $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ <p>Составить систему дифференциальных уравнений и решить её с помощью метода Эйлера, модифицированного Эйлера, Рунге-Кутты 4-ого порядка. Сделать вывод о точности получаемого решения, сравнивая методы между собой. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров: $C_A^0 = 0,5$ моль/л; $C_B^0 = C_C^0 = 0$ моль/л; $k_1 = 0,05$ 1/с; $k_2 = 0,07$ 1/с; $h = 0,1$ (шаг интегрирования).</p>																																																												
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> – <i>практическими навыками работы в табличном процессоре (ТП);</i> – <i>практическими навыками работы в специализированных программах;</i> – <i>методом статистического анализа однородности дисперсий;</i> – <i>методом статистического анализа выборки на наличие грубых ошибок;</i> – <i>методом статистического анализа однородности средних;</i> – <i>методом наименьших квадратов (МНК);</i> – <i>методом обработки результатов пассивных экспериментов на основе МНК;</i> – <i>методом ПФЭ; анализ полученной модели на адекватность и работоспособность;</i> – <i>методом ДФЭ;</i> <i>методом построения многоуровневого многофакторного плана, использующего</i> 	<p>Практические задания из профессиональной области:</p> <p>№15. С надёжностью $P = 0,95$ обеспечить однородность представленных в таблице данных, исключив грубые ошибки.</p> <table border="1" data-bbox="936 794 2163 1094"> <thead> <tr> <th>к</th> <th>1</th> <th>2</th> <th>3</th> <th>4</th> <th>5</th> <th>6</th> <th>7</th> <th>8</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>$y_k, \%$</td> <td>54</td> <td>53</td> <td>54</td> <td>30</td> <td>46</td> <td>52</td> <td>55</td> <td>54</td> </tr> <tr> <td>$\Delta y_k, \%$</td> <td>4,2</td> <td>3,2</td> <td>4,2</td> <td>-19,8</td> <td>-3,8</td> <td>2,2</td> <td>5,2</td> <td>4,2</td> </tr> <tr> <td>$\Delta y_k^2, \%$</td> <td>18</td> <td>10</td> <td>18</td> <td>392</td> <td>14</td> <td>4,8</td> <td>27</td> <td>18</td> </tr> </tbody> </table> <p>Решение данной задачи осуществить на основе двух методов: правила 2σ и критерия максимального отклонения r. Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.</p> <p>№16. С помощью анализа однородности средних. Дать заключение о возможности преимущества ($P = 0,95$) одного аппарата перед другим по производительности.</p> <table border="1" data-bbox="936 1278 2163 1417"> <thead> <tr> <th>$y_k \backslash k$</th> <th>1</th> <th>2</th> <th>3</th> <th>4</th> <th>5</th> <th>6</th> <th>7</th> <th>8</th> <th>9</th> <th>10</th> <th>Σ</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>y_{k1}</td> <td>188</td> <td>192</td> <td>189</td> <td>193</td> <td>190</td> <td>191</td> <td>190</td> <td>188</td> <td>190</td> <td>-</td> <td>1711</td> </tr> </tbody> </table>	к	1	2	3	4	5	6	7	8	$y_k, \%$	54	53	54	30	46	52	55	54	$\Delta y_k, \%$	4,2	3,2	4,2	-19,8	-3,8	2,2	5,2	4,2	$\Delta y_k^2, \%$	18	10	18	392	14	4,8	27	18	$y_k \backslash k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Σ	y_{k1}	188	192	189	193	190	191	190	188	190	-	1711
к	1	2	3	4	5	6	7	8																																																						
$y_k, \%$	54	53	54	30	46	52	55	54																																																						
$\Delta y_k, \%$	4,2	3,2	4,2	-19,8	-3,8	2,2	5,2	4,2																																																						
$\Delta y_k^2, \%$	18	10	18	392	14	4,8	27	18																																																						
$y_k \backslash k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Σ																																																			
y_{k1}	188	192	189	193	190	191	190	188	190	-	1711																																																			

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства											
	<i>свойства латинских квадратов.</i>	y_{k2}	193	192	189	194	195	192	194	198	196	195	1933
		<p>Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.</p> <p>№17. Для проверки правильности вольтамперометрической (ВА) методики определения кадмия Cd использовали атомно-абсорбционную (АА) методику, не содержащую систематической погрешности. При анализе одного и того же объекта получены следующие результаты (нг / мл Cd):</p> <p style="text-align: center;">ВА : 20,5; 22,4; 23,4; 20,8</p> <p style="text-align: center;">АА: 23,5; 20,1; 19,9; 19,2; 19,0; 22,8</p> <p>Содержит ли вольтамперометрическая методика систематическую погрешность?</p> <p>Расчёты выполнить с использованием табличного процессора без использования специальной надстройки.</p> <p>№18. Решить задачу №17 используя надстройку табличного процессора.</p> <p>№19. Используя три различных генерирующих соотношения, составить планы экспериментов ДФЭ2⁵⁻². Записать формулы для расчёта коэффициентов линейной модели.</p> <p>№20. На основе латинских квадратов составить пятиуровневый план пятифакторного эксперимента для исследования процесса инфракрасной сушки гранулированных материалов в вакууме при импульсном энергоподводе. Получить математическую в виде суммы нелинейных функций и найти оптимальные значения режимных параметров процесса: плотности теплового потока на поверхности слоя материала C_I (Вт/см²), толщина слоя продукта C_{II} (мм), диаметра гранул C_{III} (мм), величины разряжения C_{IV} (мм. рт.ст.) и скважности импульса C_V (% , отношение времени работы инфракрасной сушилки к общему времени пребывания в сушильной камере). Выходом процесса y (руб/т) или критерием оптимальности принята величина приведённых доходов с учётом производительности установки и потребляемой мощности.</p>											
		Уровни	1	2	3	4	5						
		C_I (Вт/см ²)	0,50	0,75	1,00	1,25	1,50						
		C_{II} (мм)	5	10	15	20	25						

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства									
		С _{III} (мм)	2	3	4	5	6				
С _{IV} (мм. рт.ст.)	0	150	300	450	600						
С _V	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0						
х(безразм.)	-2	-1	0	1	2						
и	План	\bar{y} руб/т	и	План	\bar{y} руб/т	и	План	\bar{y} руб/т	и	План	\bar{y} руб/т
1	11111	130	8	41352	270	15	21543	320	22	12345	200
2	23451	140	9	53142	320	16	44444	320	23	24135	170
3	35241	230	10	15432	200	17	51234	390	24	31425	240
4	42531	290	11	33333	400	18	13524	240	25	432151	250
5	54321	260	12	45123	260	19	25314	220			
6	22222	350	13	52413	340	20	32154	220			
7	34512	260	14	14253	180	21	55555	40			
<p>Содержание практического раздела дисциплины</p> <p>1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд;</p> <p>2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона;</p> <p>3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам.</p> <p>4) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения нелинейных уравнений;</p> <p>5) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Эйлера.</p> <p>6) Алгоритм решения дифференциальных уравнений модифицированным методом Эйлера.</p> <p>7) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Рунге-Куты четвёртого порядка.</p>											

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p>8) <i>Использование пакета прикладных программ MathCad для решения дифференциальных уравнений;</i></p> <p>9) <i>Решение систем дифференциальных уравнений методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Куты.</i></p> <p>10) <i>Использование пакета прикладных программ MathCad для решения систем дифференциальных уравнений.</i></p> <p>11) <i>Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса M25 и M10) в пакете MathCad.</i></p>
ОПК-5 владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией		
Знать	<ul style="list-style-type: none"> – интерфейс и основные возможности программ общего назначения (электронные таблицы) и специализированных программ для решения задач, связанных с математическим моделированием; – возможности ТП при решении типовых задач; 	<p>Теоретические вопросы:</p> <p>21) Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам;</p> <p>22) Решение нелинейного уравнения методом Ньютона;</p> <p>23) Решение нелинейного уравнения методом хорд;</p> <p>24) Решение дифференциального уравнения методом Эйлера. Модифицированный метод Эйлера. Адаптация метода Эйлера на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;</p> <p>25) Решение дифференциального уравнения методом Рунге-Куты четвертого порядка. Адаптация метода Рунге-Куты на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;</p>
Уметь	<ul style="list-style-type: none"> – создать собственную функцию в табличном процессоре; – использовать возможности ТП для реализации алгоритма по блок-схеме; – выполнить в ТП вычисления по итерационным формулам; 	<p>Практические задания:</p> <p>№ 21. По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 2⁴ рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса M₂₅ и M₁₀, сравнить их с предложенными в самой научной статье.</p> <p>Указание к выполнению задания: на листе ТП в информативном виде создать таблицу планирования эксперимента ПФЭ 2⁴, ввести средние значения показателей качества кокса M₂₅ и M₁₀ и рассчитать коэффициенты линейной модели.</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p style="text-align: center;">Содержание практического раздела дисциплины <i>Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса M25 и M10) в пакете MathCad.</i></p>
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> – практическими навыками работы в табличном процессоре (ТП); – практическими навыками работы в специализированных программах; 	<p style="text-align: center;">Практические задания из профессиональной области <i>Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования.</i> <i>Использование программы MathCad для решения задач математического программирования.</i></p>

б) Порядок проведения промежуточной аттестации, показатели и критерии оценивания:

Промежуточная аттестация по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов» включает теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень усвоения обучающимися знаний, и практические задания, выявляющие степень сформированности умений и владений, проводится в форме экзамена.

Экзамен по данной дисциплине проводится в устной форме по экзаменационным билетам, каждый из которых включает 2 теоретических вопроса и одно практическое задание.

Показатели и критерии оценивания экзамена:

– на оценку «отлично» (5 баллов) – обучающийся демонстрирует высокий уровень освоения компетенций, всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, свободно выполняет практические задания, свободно оперирует знаниями, умениями, применяет их в ситуациях повышенной сложности.

– на оценку «хорошо» (4 балла) – обучающийся демонстрирует средний уровень освоения компетенций: основные знания, умения освоены, но допускаются незначительные ошибки, неточности, затруднения при аналитических операциях, переносе знаний и умений на новые, нестандартные ситуации.

– на оценку «удовлетворительно» (3 балла) – обучающийся демонстрирует пороговый уровень освоения компетенций: в ходе контрольных мероприятий допускаются ошибки, проявляется отсутствие отдельных знаний, умений, навыков, обучающийся испытывает значительные затруднения при оперировании знаниями и умениями при их переносе на новые ситуации.

– на оценку «неудовлетворительно» (2 балла) – обучающийся демонстрирует знания не более 20% теоретического материала, допускает существенные ошибки, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.

– на оценку «неудовлетворительно» (1 балл) – обучающийся не может показать знания на уровне воспроизведения и объяснения информации, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.

8 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) Основная литература:

1. Моделирование химико-технологических процессов : учебник / Г.И. Ефремов. — Москва : ИНФРА-М, 2019. — 255 с. + Доп. материалы [Электронный ресурс; Режим доступа: <https://new.znaniium.com>]. — (Высшее образование: Бакалавриат). — www.dx.doi.org/10.12737/12066. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/989195> (дата обращения: 11.11.2019).

2. Закгейм А. Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А. Ю. Закгейм. - 3-е изд., перераб. и доп. - Москва : Логос, 2012. - 304 с. - (Новая университетская библиотека). - ISBN 978-5-98704-497-1. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/468690> (дата обращения: 11.11.2019).

б) Дополнительная литература:

3. Системный анализ процессов и аппаратов химической технологии : учеб. пособие / Э.Д. Иванчина, Е.С. Чернякова, Н.С. Белинская, Е.Н. Ивашкина ; Томский политехнический университет. - Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2017. - 115 с. - ISBN 978-5-4387-0787-5. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/1043896> (дата обращения: 11.11.2019)

4. Статистические методы обработки экспериментальных данных с использованием пакета MathCad: Учебное пособие/Ф.И.Карманов, В.А.Острейковский - Москва : КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 208 с.: 60x90 1/16 (Обложка) ISBN 978-5-905554-96-4 - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/508241> (дата обращения: 11.11.2019).

5. Статистический анализ данных в MS Excel : учеб. пособие / А.Ю. Козлов, В.С. Мхитарян, В.Ф. Шишов. — Москва : ИНФРА-М, 2019. — 320 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). — www.dx.doi.org/10.12737/2842. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/987337> (дата обращения: 11.11.2019).

6. Головнев, Н.Н. Энергетика и направленность химических процессов. Химическая кинетика и химическое равновесие : учеб. пособие / Н.Н. Головнев. - Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2018. - 148 с. - ISBN 978-5-7638-3783-4. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/1031881> (дата обращения: 11.11.2019).

7. Основы программирования на VBA для Microsoft Excel/БычковМ.И. - Новосибирск : НГТУ, 2010. - 99 с.: ISBN 978-5-7782-1460-6 - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/549331> (дата обращения: 11.11.2019).

7. Деева, В.С. Компьютерное моделирование в нефтегазовом деле : учеб. пособие / В.С. Деева ; Томский политехнический университет. - Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2018. - 86 с. - ISBN 978-5-4387-0806-3. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/1043846> (дата обращения: 11.11.2019)

8. Андреев, С. М. Моделирование объектов и систем управления : учебное пособие / С. М. Андреев ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2017. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsystema.ru/uploader/fileUpload?name=3337.pdf&show=dcatalogues/1/1138496/3337.pdf&view=true> . - Макрообъект. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-9967-1028-7. - Сведения доступны также на CD-ROM.

9. Баженов, Н. М. Методы одномерной и многомерной оптимизации : практикум по дисциплине "Моделирование систем" / Н. М. Баженов, Е. С. Рябчикова ; МГТУ, Кафедра промышленной кибернетики и систем управления. - Магнитогорск : МГТУ, 2011. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsystema.ru/uploader/fileUpload?name=1344.pdf&show=dcatalogues/1/1123747/1344.pdf&view=true>. - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

10. Гаврилова, И. В. Имитационное моделирование : учебное пособие / И. В. Гаврилова ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsystema.ru/uploader/fileUpload?name=2836.pdf&show=dcatalogues/1/1133202/2836.pdf&view=true>. - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

в) Методические указания:

Крылова, С. А. Введение в анализ и синтез химико-технологических систем : учебное пособие / С. А. Крылова ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsystema.ru/uploader/fileUpload?name=25.pdf&show=dcatalogues/1/1131464/25.pdf&view=true> .

г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Федеральный институт промышленной собственности : сайт РОСПАТЕНТА / ФИПС. – Москва : ФИПС, 2009 – . – URL: <http://www1.fips.ru/>
2. Российский индекс научного цитирования (РИНЦ) : национальная библиографическая база данных научного цитирования. – Текст: электронный // eLIBRARY.RU : научная электронная библиотека : сайт. – Москва, 2000 – . – URL: https://elibrary.ru/project_risc.asp.
3. Академия Google (Google Scholar) : поисковая система : сайт. – URL: <https://scholar.google.ru/> .
4. Единое окно доступа к информационным ресурсам : электронная библиотека : сайт / ФГАУ ГНИИ ИТТ "ИНФОРМИКА". – Москва, 2005. – . –URL: <http://window.edu.ru/>.
5. East View Information Services : Электронная база периодических изданий / ООО «ИВИС. – URL: <https://dlib.eastview.com/>.
6. Российская Государственная библиотека. Каталоги : сайт / Российская государственная библиотека. – Москва : РГБ, 2003 – . URL: <https://www.rsl.ru/ru/4readers/catalogues/>.
7. Электронная библиотека МГТУ им. Г. И. Носова. – URL: <http://magtu.ru:8085/mareweb2/Default.asp> .

Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
MSWindows 7	Д-1227 от 08.10.2018 Д-757-17 от 27.06. 2017	11.10.2021 27.07.2018
MS Office 2007	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно
Mathcad Education - University Edition (200 pack)	Д-1662-13 от 22.11.2013	бессрочно
FAR Manager	свободно распространяемое ПО	бессрочно
7Zip	свободно распространяемое	бессрочно

9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Тип и название аудитории	Оснащение аудитории
Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа	Мультимедийные средства хранения, передачи и представления информации.

Тип и название аудитории	Оснащение аудитории
Учебная аудитория для проведения практических занятий.	Персональные компьютеры с пакетом MS Office, выходом в Интернет и с доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.
Учебные аудитории для групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Доска, учебные столы, стулья.
Учебные аудитории для самостоятельной работы обучающихся	Персональные компьютеры с пакетом MS Office, выходом в Интернет и с доступом в электронную информационно-образовательную среду университета
Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования	Стеллажи для хранения оборудования, методическая литература для учебных занятий