



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИММиМ  
А.С. Савинов  
20.03.2020 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

***МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ***

Направление подготовки (специальность)  
18.03.01 Химическая технология

Направленность (профиль/специализация) программы  
Химическая технология тугоплавких неметаллических и силикатных материалов

Уровень высшего образования - бакалавриат  
Программа подготовки - академический бакалавриат

Форма обучения  
заочная

Институт/ факультет	Институт металлургии, машиностроения и материалобработки
Кафедра	Металлургии и химических технологий
Курс	5

Магнитогорск  
2019 год

Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (уровень бакалавриата) (приказ Минобрнауки России от 11.08.2016 г. № 1005)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Metallургии и химических технологий

18.02.2020, протокол № 6

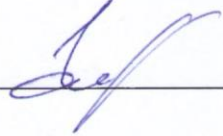
Зав. кафедрой  А.С. Харченко

Рабочая программа одобрена методической комиссией ИММиМ

20.03.2020 г. протокол № 5

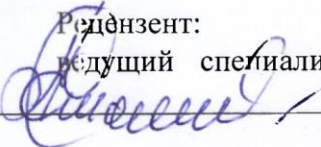
Председатель  А.С. Савинов

Рабочая программа составлена:

профессор кафедры МиХТ, д-р физ.-мат. наук  А.Н. Смирнов

Рецензент:

ведущий специалист НТЦ ГАДП ПАО «ММК» МиХТ, канд. техн. наук

 Е.Н. Степанов

**Лист актуализации рабочей программы**

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2020 - 2021 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от 31.08.2020 г. № 1  
Зав. кафедрой А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2021 - 2022 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2022 - 2023 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2023 - 2024 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

### 1 Цели освоения дисциплины (модуля)

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.

### 2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Моделирование химико-технологических процессов входит в вариативную часть учебного плана образовательной программы.

Для изучения дисциплины необходимы знания (умения, владения), сформированные в результате изучения дисциплин/ практик:

Математика

Информатика

Физическая химия

Химические реакторы

Массообменные процессы химической технологии

Техническая термодинамика и теплотехника

Процессы и аппараты химической технологии

Знания (умения, владения), полученные при изучении данной дисциплины будут необходимы для изучения дисциплин/практик:

Учебно-исследовательская работа студента

Подготовка к защите и защита выпускной квалификационной работы

Планирование и организация эксперимента

### 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 табличного процессора (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 математических пакетах прикладных программ;

<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>	<p>понятия «модель», «математическая модель», необходимость наличия математической модели для описания производственного химико-технологического процесса;  физико-химический метод моделирования равновесного состава раствора;  понятие о линейной зависимости/независимости химических реакций;  основные блок-схемы для описания вычислительного алгоритма;  основные численные методы решения нелинейных уравнений, получаемых в ходе физико-химического моделирования равновесного состава раствора;  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, критериальных уравнений, описывающих процесс переноса тепла, массы);  уравнение стандартного нормального распределения, его свойства;</p>
<p>Уметь</p>	<p>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;</p>
<p>Владеть</p>	<p>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.</p>

#### 4. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц 144 академических часов, в том числе:

- контактная работа – 12,9 академических часов;
- аудиторная – 10 академических часов;
- внеаудиторная – 2,9 академических часов
- самостоятельная работа – 122,4 академических часов;
- подготовка к экзамену – 8,7 академических часа

Форма аттестации - экзамен

Раздел/ тема дисциплины	Курс	Аудиторная контактная работа (в академических часах)			Самостоятельная работа студента	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код компетенции
		Лек.	лаб. зан.	практ. зан.				
1. Раздел "Общие вопросы моделирования"								
1.1. Общее понятие модели. Многообразие форм представления модели. Понятие о математическом моделировании. Основные подходы к построению математических моделей. Аналитический подход к моделированию. Экспериментальный подход к моделированию. Комбинированный подход к моделированию. Основные этапы построения математических моделей. Триединство процесса моделирования: модель,	5	2			20	Выполнение практических работ (Блок №1).	Коллоквиум.	ОПК-5, ПК-16
1.2. Примеры математического моделирования из различных областей знания (физика, военное дело, биология).		1			5	Выполнение практических работ (Блок №1).	Коллоквиум.	ОПК-5, ПК-16
Итого по разделу		3			25			
2. Раздел "Аналитический подход к моделированию химико-технологических процессов"								

<p>2.1 Понятие о физико-химическом моделировании. Основные сведения из курса "Физическая химия". Термодинамика химических превращений. Направление химических реакций. Уравнение изотермы химической реакции. 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. Метод Тёмкина-Шварцмана для расчёта констант равновесия. Расчёт константы равновесия на основе равновесных концентраций реагирующих веществ. Расчёт равновесных концентраций на основе константы равновесия. Методика расчёта равновесных концентраций при одновременном протекании нескольких реакций (методика моделирования равновесного состава раствора). Ограничения термодинамического подхода в случае моделирования (расчёта) равновесного состава реагирующих веществ.</p>	5	1	2/2И	20	Выполнение практических работ (Блок №2).	Коллоквиум по задачам.	ОПК-5, ПК-16
<p>2.2 Кинетические особенности протекания химических реакций. Методика составления систем уравнений, описывающих равновесные концентрации веществ, принимающих участие в химических реакциях.</p>				2/2И	20	Выполнение практических работ (Блок №3).	Коллоквиум по задачам.

2.3 Дифференциальные уравнения непрерывности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объёма реактора любого типа. Общие сведения о теории подобия. Основные критерии подобия. Критериальные				30	Подготовка к семинарскому занятию.	Семинарское занятие.	ОПК-5, ПК-16
Итого по разделу	1		4/4И	70			
3. Раздел "Экспериментальный подход"							
3.1 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	5		2	6	Выполнение практических работ (Блок №4).		ОПК-5, ПК-16



<p>3.2 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 экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов. Двухуровневые планы многофакторных экспериментов. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ2п. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ2п. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности. Дробный факторный эксперимент ДФЭ2п-п'. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ2п ДФЭ2п-п' для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости. Рассмотрение примеров. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для</p>				6	Выполнение практических работ (Блок №4).		ОПК-5, ПК-16
Итого по разделу			2	12			
4. Раздел "Комбинированный метод"							

4.1 Особенности комбинированных математических моделей. Рассмотрение математических моделей из области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10).	5				15,4	Подготовка к семинарскому занятию.	Семинарское занятие.	ОПК-5, ПК-16
Итого по разделу					15,4			
5. Раздел "Экзамен"								
5.1 Экзамен	5					Подготовка к экзамену	Экзамен	ОПК-5, ПК-16
Итого по разделу								
Итого за семестр		4		6/4И	122,4		экзамен	
Итого по дисциплине		4		6/4И	122,4		экзамен	ОПК-5,ПК-16

## 5 Образовательные 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**

Представлено в приложении 1.

## **7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации**

Представлены в приложении 2.

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

### **а) Основная литература:**

1. Ефремов, Г. И. Моделирование химико-технологических процессов : учебник / Г.И. Ефремов. — Москва : ИНФРА-М, 2019. — 255 с. + Доп. материалы [Электронный ресурс; Режим доступа <http://new.znaniium.com>]. — (Высшее образование: Бакалавриат). — [www.dx.doi.org/10.12737/12066](http://www.dx.doi.org/10.12737/12066). - ISBN 978-5-16-103090-5. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/989195>

2. Загкейм, А. Ю. Загкейм А. Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А. Ю. Загкейм. - 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>

### **б) Дополнительная литература:**

1. 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>

2. Карманов, Ф. И. 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. ISBN 978-5-905554-96-4. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/508241>

3. Козлов, А. Ю. 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](http://www.dx.doi.org/10.12737/2842). - ISBN 978-5-16-101024-2. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/987337>

4. 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>

### **в) Методические указания:**

1. Материальные и тепловые расчеты химико-технологических процессов : учебное пособие / С. А. Крылова, З. И. Костина, И. В. Понурко, А. В. Горохов; МГТУ, [каф. ХТНМиФХ]. - Магнитогорск, 2011. - 50 с. : табл. - URL:

<https://magtu.informsystema.ru/uploader/fileUpload?name=36.pdf&show=dcatalogues/1/1079012/36.pdf&view=true>. - Макрообъект. - Текст : электронный. - Имеется печатный аналог.

2. 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> . - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

3. Крылова, С. А. Общая химическая технология : учебное пособие / С. А. Крылова, Р. Н. Абдрахманов, И. В. Понурко ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2017. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://magtu.informsystema.ru/uploader/fileUpload?name=26.pdf&show=dcatalogues/1/1139098/26.pdf&view=true> . - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

#### г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

##### Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
MS Windows 7 Professional(для классов)	Д-1227-18 от 08.10.2018	11.10.2021
MS Windows 7 Professional (для классов)	Д-757-17 от 27.06.2017	27.07.2018
MS Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно
MathCAD v.15 Education University Edition	Д-1662-13 от 22.11.2013	бессрочно
FAR Manager	свободно распространяемое ПО	бессрочно

##### Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Электронная база периодических изданий East View Information Services, ООО	<a href="https://dlib.eastview.com/">https://dlib.eastview.com/</a>
Национальная информационно-аналитическая система – Российский индекс научного цитирования	URL: <a href="https://elibrary.ru/project_risc.asp">https://elibrary.ru/project_risc.asp</a>
Поисковая система Академия Google (Google Scholar)	URL: <a href="https://scholar.google.ru/">https://scholar.google.ru/</a>
Информационная система - Единое окно доступа к информационным ресурсам	URL: <a href="http://window.edu.ru/">http://window.edu.ru/</a>
Электронные ресурсы библиотеки МГТУ им. Г.И. Носова	<a href="http://magtu.ru:8085/marcweb2/Default.asp">http://magtu.ru:8085/marcweb2/Default.asp</a>

## **9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа (Мультимедийные средства хранения, передачи и представления информации)

Учебная аудитория для проведения практических занятий (Персональные компьютеры с пакетом MS Office, вы-ходом 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)

Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования (стеллажи для хранения оборудования, методическая литература для учебных занятий)

**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. Блок № (БЛ):**

**БЛ №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.

**БЛ №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  $[CO_3^{2-}]$  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 ( $IP_{MnS} = 2.5 \cdot 10^{-10}$ ), 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  $[Mn^{2+}]$ , и между какими химическими формами осуществляется материальный баланс по сере избыточной концентрации осадителя?

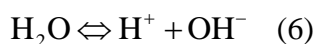
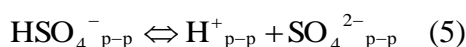
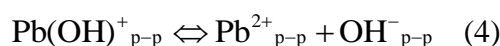
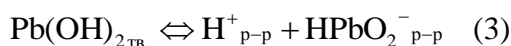
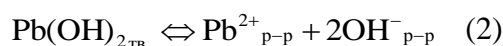
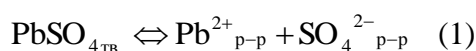
№5. Пример 5. Рассчитать равновесный состав газовой фазы для установившегося тер-модинамического равновесия получения водяного газа по реакциям:



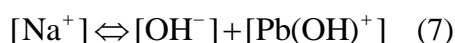
В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно  $p_{\text{CO}}$ .

№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход  $\text{PbSO}_4$  в  $\text{Pb}(\text{OH})_2$ . Изменение pH происходит за счёт  $\text{NaOH}$ .

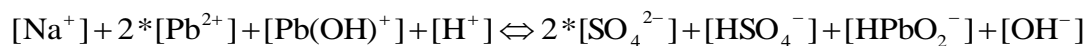
В системе предполагается протекание следующих химических реакций:



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 pH.



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.

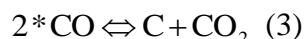
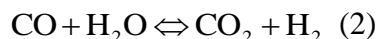
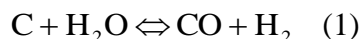
№8. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3) и (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) и (5) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

№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.

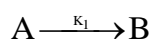
№11. Решить систему нелинейных уравнений из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.

№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.

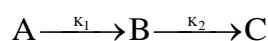
№13. Для необратимой реакции первого порядка:



Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации А. Решить полученное дифференциальное уравнение методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Кутты. 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-Кутты 4-ого порядка. Сделать вывод о точности получаемого решения, сравнивая методы между собой. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров:

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

### БЛ №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  $2\sigma$  и критерия максимального отклонения  $r$ . 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	$\Sigma$
$y_{k1}$	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 ДФЭ2<sup>5-2</sup>. 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/см<sup>2</sup>), 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 <sup>2</sup> )	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			

#### **БЛ №4 «Комбинированный подход»**

№ 21. По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 2<sup>4</sup> рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса M<sub>25</sub> и M<sub>10</sub>, сравнить их с предложенными в самой научной статье.

Указание к выполнению задания: на листе ТП в информативном виде создать таблицу планирования эксперимента ПФЭ 2<sup>4</sup>, ввести средние значения показателей качества кокса M<sub>25</sub> и M<sub>10</sub> 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 по-полам.
- 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 четвертого порядка.
- 8) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения дифференциальных 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 M<sub>25</sub> и M<sub>10</sub>) 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 ПФЭ<sup>n</sup>. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ<sup>n</sup>. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.

21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ<sup>2<sup>n-n'</sup></sup>. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ<sup>n</sup> ДФЭ<sup>2<sup>n-n'</sup></sup> 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><b>ПК-16</b> 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>	<p>– понятия «модель», «математическая модель», необходимость наличия математической модели для описания химико-технологического процесса для сферы производства;</p> <p>– физико-химический метод моделирования равновесного состава смеси;</p> <p>– понятие о линейной зависимости/независимости химических реакций;</p> <p>– основные блок-схемы для описания вычислительного алгоритма;</p> <p>– основные численные методы решения уравнения, получаемого в ходе физико-химического моделирования равновесного состава смеси;</p>	<p style="text-align: center;"><b>Перечень вопросов к экзамену</b></p> <p>Общие вопросы моделирования:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей;</li> <li>2. Сущность аналитического подхода к математическому моделированию. Моделирование ХТП при аналитическом подходе;</li> <li>3. Сущность экспериментального подхода к математическому моделированию;</li> <li>4. Сущность комбинированного подхода к математическому моделированию;</li> <li>5. Триединство при описании объекта моделирования. Требования к каждой из составной части при описании объекта;</li> <li>6. Основные этапы моделирования (с поясняющими примерами).</li> </ol> <p>Аналитический подход к созданию математических моделей:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>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 <math>K_N</math>, <math>K_m</math>, <math>K_c</math> в идеальном растворе;</li> <li>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;</li> <li>9. Возможности моделирования при термодинамическом подходе к определению равновесных значений участвующих в химических реакциях веществ. Основные достоинства и недостатки при термодинамическом подходе.</li> </ol>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	<p>– основные дифференциальные уравнения формальной кинетики;</p> <p>– основные методы численного решения дифференциальных уравнений;</p> <p>– общую методику построения (выведения) дифференциальных уравнений на основе материального и теплового баланса;</p> <p>– дифференциальные уравнения непрерывности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии;</p> <p>уравнение материального баланса для элементарного объёма реактора любого типа.</p> <p>– элементы теории подобия (происхождение критериев подобия, критериальных уравнений, из</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 сравнении с непосредственным применением метода наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента Проверка адекватности</p>



Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	<p><i>основных дифференциальных уравнений, описывающих процесс); уравнение стандартного нормального распределения, его свойства;</i></p>	<p>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 ПФЭ<sup>n</sup>. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ<sup>n</sup>. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.</p> <p>21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ<sup>n-n'</sup>. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ<sup>n</sup> ДФЭ<sup>n-n'</sup> 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	<p>– вывести основные уравнения формальной кинетики;</p> <p>– уметь аналитически решить основные уравнения формальной кинетики;</p> <p>– вывести на основе материального или теплового баланса основные дифференциальные уравнения: непрерывности потока для неустановившегося</p>	<p><b>Практические задания:</b></p> <p>№1. Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве <math>C=10^{-5}</math> 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> <p>№3. Значение pH раствора регулируется изменением концентрации соды. Рассчитать концентрацию <math>[CO_3^{2-}]</math> ионов в растворе, с учётом растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	<p>я движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объёма реактора любого типа; – создать собственную функцию в табличном процессоре.</p>	<p>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 <math>MnS</math> (<math>IP_{MnS} = 2.5 \cdot 10^{-10}</math>), 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 <math>[Mn^{2+}]</math>, 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:</p> $C + H_2O \rightleftharpoons CO + H_2 \quad (1)$ $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 \quad (2)$ <p>В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно <math>p_{CO}</math>.</p> <p>№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход <math>PbSO_4</math> в <math>Pb(OH)_2</math>. Изменение pH происходит за счёт NaOH.</p> <p>В системе предполагается протекание следующих химических реакций:</p> $PbSO_{4_{тв.}} \rightleftharpoons Pb^{2+}_{p-p} + SO_{4^{2-}}_{p-p} \quad (1)$ $Pb(OH)_{2_{тв.}} \rightleftharpoons Pb^{2+}_{p-p} + 2OH^{-}_{p-p} \quad (2)$ $Pb(OH)_{2_{тв.}} \rightleftharpoons H^{+}_{p-p} + HPbO_2^{-}_{p-p} \quad (3)$ $Pb(OH)^{+}_{p-p} \rightleftharpoons Pb^{2+}_{p-p} + OH^{-}_{p-p} \quad (4)$ $HSO_{4^{-}}_{p-p} \rightleftharpoons H^{+}_{p-p} + SO_{4^{2-}}_{p-p} \quad (5)$ $H_2O \rightleftharpoons H^{+} + OH^{-} \quad (6)$ <p>Уравнение материального баланса:</p> $[Na^{+}] \rightleftharpoons [OH^{-}] + [Pb(OH)^{+}] \quad (7)$ <p>Уравнение электронейтральности:</p> $[Na^{+}] + 2 * [Pb^{2+}] + [Pb(OH)^{+}] + [H^{+}] \rightleftharpoons 2 * [SO_{4^{2-}}] + [HSO_{4^{-}}] + [HPbO_2^{-}]$ <p>Примечание: при решении задачи необходимо по имеющимся уравнениям составить систему</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p>нелинейных уравнений, из неё вывести уравнение:</p> $2 * K_2^2 * K_4 * K_5 * [H^+]^4 + K_2 * K_5 * K_w (2 * K_2 + K_4 * K_w) * [H^+]^3 - K_4 * K_w^2 (K_1 * K_w^2 + K_2 * K_3 * K_5) * [H^+] - 2 * K_1 * K_4 * K_5 * K_w^4 = 0$ <p>Из справочных данных необходимо определить константы химических реакций <math>K_1 - K_6</math> соответствующих реакций (1)-(6).</p> <p>Из практических соображений установить, с какой точностью необходимо вычислять значение pH.</p> <p>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.</p> <p>Рассмотреть эвристический метод, основанный на специфике решаемой задачи, решения системы нелинейных уравнений.</p> <p>Все вычисления произвести в табличном процессоре.</p> <p>№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 pH.</p> <p>№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 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</p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства																																				
		<p>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:  <math>C_A^0 = 0,7</math> моль/л; <math>k_1 = 0,001</math> 1/с; <math>h = 0,1</math> (шаг интегрирования).</p> <p>№14. Для последовательной схемы необратимых химических реакций первого порядка: А</p> $\text{A} \xrightarrow{k_1} \text{B} \xrightarrow{k_2} \text{C}$ <p>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:  <math>C_A^0 = 0,5</math> моль/л; <math>C_B^0 = C_C^0 = 0</math> моль/л; <math>k_1 = 0,05</math> 1/с; <math>k_2 = 0,07</math> 1/с; <math>h = 0,1</math> (шаг интегрирования).</p>																																				
Владеть	<ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>практическим и навыками работы в табличном процессоре (ТП);</i></li> <li>– <i>практическим и навыками работы в специализированных программах;</i></li> <li>– <i>методом статистического анализа однородности дисперсий;</i></li> <li>– <i>методом</i></li> </ul>	<p><b>Задания на решение задач из профессиональной области:</b></p> <p>№15. С надёжностью <math>P = 0,95</math> обеспечить однородность представленных в таблице данных, исключив грубые ошибки.</p> <table border="1" data-bbox="651 1697 1481 1998"> <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><math>y_k, \%</math></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><math>\Delta y_k, \%</math></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><math>\Delta y_k^2, \%</math></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 <math>2\sigma</math> и критерия максимального отклонения <math>g</math>. Расчёты выполнить с использованием табличного</p>	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
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																														

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства																																																																								
	<p><i>статистического анализа выборки на наличие грубых ошибок;</i></p> <p>– <i>методом статистического анализа однородности средних;</i></p> <p>– <i>методом наименьших квадратов (МНК);</i></p> <p>– <i>методом обработки результатов пассивных экспериментов на основе МНК;</i></p> <p>– <i>методом ПФЭ; анализ полученной модели на адекватность и работоспособность;</i></p> <p>– <i>методом ДФЭ; методом построения многоуровневого многофакторного плана, использующего свойства латинских квадратов.</i></p>	<p>процессора.</p> <p>№16. С помощью анализа однородности средних. Дать заключение о возможности преимущества (<math>P = 0,95</math>) одного аппарата перед другим по производительности.</p> <table border="1" data-bbox="651 488 1481 817"> <thead> <tr> <th><math>y_k</math></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><math>\Sigma</math></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><math>\backslash k</math></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td><math>y_{k1}</math></td> <td>18</td> <td>19</td> <td>18</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>18</td> <td>19</td> <td>-</td> <td>171</td> </tr> <tr> <td></td> <td>8</td> <td>2</td> <td>9</td> <td>3</td> <td>0</td> <td>1</td> <td>0</td> <td>8</td> <td>0</td> <td></td> <td>1</td> </tr> <tr> <td><math>y_{k2}</math></td> <td>19</td> <td>19</td> <td>18</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>19</td> <td>193</td> </tr> <tr> <td></td> <td>3</td> <td>2</td> <td>9</td> <td>4</td> <td>5</td> <td>2</td> <td>4</td> <td>8</td> <td>6</td> <td>5</td> <td>3</td> </tr> </tbody> </table> <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 ДФЭ<sup>5-2</sup>. 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 <math>C_I</math> (Вт/см<sup>2</sup>), толщина слоя продукта <math>C_{II}</math> (мм), диаметра гранул <math>C_{III}</math> (мм), величины разряжения <math>C_{IV}</math> (мм. рт.ст.) и скважности импульса <math>C_V</math> (%), отношение времени работы инфракрасной сушилки к общему времени пребывания в сушильной камере). Выходом процесса <math>y</math> (руб/т) или критерием оптимальности принята величина приведённых доходов с учётом производительности установки и потребляемой мощности.</p>	$y_k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$\Sigma$	$\backslash k$												$y_{k1}$	18	19	18	19	19	19	19	18	19	-	171		8	2	9	3	0	1	0	8	0		1	$y_{k2}$	19	19	18	19	19	19	19	19	19	19	193		3	2	9	4	5	2	4	8	6	5	3
$y_k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$\Sigma$																																																															
$\backslash k$																																																																										
$y_{k1}$	18	19	18	19	19	19	19	18	19	-	171																																																															
	8	2	9	3	0	1	0	8	0		1																																																															
$y_{k2}$	19	19	18	19	19	19	19	19	19	19	193																																																															
	3	2	9	4	5	2	4	8	6	5	3																																																															

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства											
		Уровни	1	2	3	4	5						
		$C_I$ (Вт/см <sup>2</sup> )	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						
		u	План	$\bar{y}$ уру б/т	u	План	$\bar{y}$ уру б/т	u	План	$\bar{y}$ уру б/т	u	План	$\bar{y}$ уру б/т
		1	111 11	13 0	8	413 52	27 0	1 5	215 43	32 0	2 2	123 45	20 0
		2	234 51	14 0	9	531 42	32 0	1 6	444 44	32 0	2 3	241 35	17 0
		3	352 41	23 0	1 0	154 32	20 0	1 7	512 34	39 0	2 4	314 25	24 0
		4	425 31	29 0	1 1	333 33	40 0	1 8	135 24	24 0	2 5	432 151	25 0
		5	543 21	26 0	1 2	451 23	26 0	1 9	253 14	22 0			
		6	222 22	35 0	1 3	524 13	34 0	2 0	321 54	22 0			
		7	345 12	26 0	1 4	142 53	18 0	2 1	555 55	40			
		<b>Содержание практического раздела дисциплины</b>											
		1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд;											
		2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона;											
		3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка по-полам.											
		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 четвертого порядка.											
		8) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения дифференциальных уравнений;											
		9) Решение систем дифференциальных уравнений методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Куты.											

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<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>
<p>ОПК-5 владением основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией</p>		
Знать	<p>– интерфейс и основные возможности программ общего назначения (электронные таблицы) и специализированных программ для решения задач, связанных с математическим моделированием;</p> <p>– возможности ТП при решении типовых задач;</p>	<p><b>Теоретические вопросы:</b></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	<p>создать собственную функцию в табличном процессоре;</p> <p>использовать возможности ТП для реализации алгоритма по блок-схеме;</p> <p>выполнить в ТП вычисления по итерационным формулам;</p>	<p><b>Практические задания:</b></p> <p>№ 21. По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ <math>2^4</math> рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса <math>M_{25}</math> и <math>M_{10}</math>, 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 <math>2^4</math>, ввести средние значения показателей качества кокса <math>M_{25}</math> и <math>M_{10}</math> и рассчитать коэффициенты линейной модели.</p> <p><i>Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса M25 и M10) в пакете MathCad.</i></p>
Владеть	<p>– практическими навыками работы в табличном процессоре (ТП);</p>	<p><b>Задания на решение задач из профессиональной области:</b></p> <p><i>Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования.</i></p> <p><i>Использование программы MathCad для решения задач</i></p>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
	– практическими навыками работы в специализированных программах;	<i>математического программирования.</i>

**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.