

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« _____ » _____ 202_ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)»

«Моделирование химико-технологических процессов»

Направление подготовки бакалавров 18.03.01 Химическая технология

Направленность (профиль) – Химическая технология синтетических
биологически активных веществ

Типы задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский и
технологический

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 202_

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки бакалавров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
профессор кафедры БХС

В.П. Молчанов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20 __ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» является освоение студентами вопросов моделирования и оптимизации сложных химико-технологических процессов, которые, в свою очередь, формируют профессиональный уровень специалиста по данному направлению подготовки.

Задачами дисциплины являются:

- формирование знаний о принципах, методах и алгоритмах построения статистических моделей на основе результатов пассивного и активного эксперимента; методах оптимизации технологических процессов с использованием информационных технологий;

- формирование способности получать математические модели описания типовых явлений и процессов химической технологии на основании фундаментальных законов их поведения; проводить структурную и параметрическую идентификацию статистических моделей; обрабатывать статистические данные с использованием программного обеспечения; производить анализ модели с целью оптимизации параметров исследуемого процесса;

- формирование навыков владения методами анализа и численными методами, вычислительной техникой при решении прикладных задач в области профессиональной деятельности; работы с современными информационными технологиями и программными продуктами для поддержки проектирования моделей и математического, имитационного, графического, информационного моделирования.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной дисциплине Блока 1 ОП ВО. Для изучения курса требуются знания, полученные студентами при изучении дисциплин: «Информатика», «Математика», «Физическая химия», «Компьютерная графика и проектирование технологических схем», «Общая химическая технология», «Процессы и аппараты химической технологии», «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия».

Знания, полученные в данном курсе необходимы для последующего изучения таких дисциплин учебного процесса, как «Системы управление химико-технологическими процессами», «Проектирование и оборудование предприятий химической промышленности». Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ОПК-4. Способен обеспечивать проведение технологического процесса, использовать технические средства для контроля параметров технологического

процесса, свойств сырья и готовой продукции, осуществлять изменение параметров технологического процесса при изменении свойств сырья.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИОПК-4.1. *Использует знание основных принципов организации химического производства, его иерархической структуры, общих закономерностей организации и реализации химических процессов, основных химических производств при решении задач профессиональной деятельности.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

З1.1. Основные принципы, приемы и средства проектирования и организации химико-технологических процессов и производств.

Уметь:

У1.1. Получать математические модели описания типовых явлений и процессов химической технологии на основании фундаментальных законов их поведения.

ИОПК-4.2. *Демонстрирует умение рассчитывать основные характеристики химического процесса, выбирать рациональную схему производства заданного продукта и оценивать технологическую эффективность производства.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

З2.1. Принципы, методы и алгоритмы структурной и параметрической идентификации статистических и динамических моделей химической технологии.

Уметь:

У2.1. Пользоваться методами системно-структурного анализа, численными методами и средствами вычислительной техники при решении прикладных задач анализа эффективности и оптимизации химико-технологических процессов и производств.

ИОПК-4.5. *Применяет математические методы и современные IT-технологии для моделирования и оптимизации химико-технологических процессов.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

З3.1. Методы моделирования и оптимизации химико-технологических процессов с использованием современных информационных технологий.

Уметь:

У3.1. Пользоваться навыками работы с современными информационными технологиями и программными продуктами для поддержки проектирования моделей и математического, имитационного, графического, информационного моделирования химико-технологических процессов и производств.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий; выполнение лабораторных занятий; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
Общая трудоемкость дисциплины	3	108
Аудиторные занятия (всего)		45
В том числе:		
Лекции		15
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		30
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		63
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к лабораторным занятиям		40
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		23
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		не предусмотрен
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		0

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1	Методы моделирования и области их применения. Основные понятия и определения	9	2	-	2	5
2	Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов	9	2	-	2	5
3	Построение физико-химических моделей химико-технологических процессов	9	2	-	2	5
4	Математические модели	10	2	-	2	6
5	Математическое моделирование структуры потоков	11	1	-	4	6
6	Математическое моделирование теплообменных процессов	11	1	-	4	6
7	Моделирование массообменных процессов	11	1	-	4	6
8	Моделирование химических процессов	11	1	-	4	6
9	Математические модели химических реакторов	9	1	-	2	6

10	Статистические модели	9	1	-	2	6
11	Оптимизация химико-технологических процессов	9	1	-	2	6
Всего на дисциплину		108	15	-	30	63

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБЛАСТИ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ»

Предмет дисциплины. Значение моделирования в научных исследованиях и промышленной практике. Роль теоретических и экспериментальных методов в исследованиях. Основные понятия и определения. Основы классификации методов исследований. Кибернетика. Управление. Система, объект, процесс. Составление и решение дифференциальных уравнений, описывающих процессы химической технологии. Структурные схемы объектов химической технологии. Виды подобия, модели и моделирование. Виды моделей (по способу построения, характеру изменения переменных, характеру режима моделируемого явления). Системный подход к моделированию. Физическое и математическое моделирование. Адекватность моделей. Моделирование на ЭВМ.

МОДУЛЬ 2 «ПОСТРОЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Построение эмпирических моделей ХТП. Основные понятия теории вероятности и математической статистики. Обработка результатов пассивных и активных экспериментов и построение эмпирических моделей. Элементы корреляционного и регрессионного анализа. Этапы построения эмпирических моделей. Определение вида приближенного уравнения регрессии. Компьютерное моделирование химико-технологических процессов с помощью эмпирических моделей.

МОДУЛЬ 3 «ПОСТРОЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Информационные матрицы. Этапы построения теоретических моделей. Математическое описание химико-технологических процессов с помощью физико-химических моделей. Компьютерное моделирование химико-технологических процессов с помощью физико-химических моделей.

МОДУЛЬ 4 «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ»

Общие принципы анализа типовых технологических процессов. Системный анализ процессов химической технологии. Блочный принцип описания объекта исследований. Общие принципы построения модели процесса. Классификация математических моделей. Математические модели химико-технологических процессов (ХТП). Этапы математического моделирования ХТП. Методология построения математических моделей химико-технологических процессов. Схема построения математических моделей процессов химической технологии. Построение систем уравнений

математического описания химико-технологических процессов. Методы проверки адекватности модели и объекта и ее коррекция.

МОДУЛЬ 5 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ»

Методы исследования структуры потоков. Типовые модели структуры потоков. Идентификация математического описания структуры потоков. Математическое описание зоны потока, движение фазы в которой представляется гидродинамической моделью идеального смешения. Математическое описание зоны потока, движение фазы в которой представляется гидродинамической моделью идеального вытеснения. Математическое описание зоны потока, движение фазы в которой представляется однопараметрической диффузионной моделью. Ячеечные гидродинамические модели. Комбинированные модели. Определение условий перемешивания в проточных аппаратах.

МОДУЛЬ 6 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ»

Основные закономерности теплообмена. Математические модели простейших типов теплообменных аппаратов. Математическая модель противоточного теплообменника с сосредоточенными параметрами. Математическая модель противоточного абсорбционного аппарата. Математические модели теплообменных процессов.

МОДУЛЬ 7 «МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ»

Математическое описание равновесия в системе «жидкость-пар», «жидкость-жидкость». Моделирование процесса массопередачи. Моделирование процесса сепарации. Моделирование процесса ректификации. Моделирование процесса абсорбции. Моделирование процесса адсорбции.

МОДУЛЬ 8 «МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Основные понятия химической кинетики. Построение кинетических моделей. Методы определения кинетических характеристик химических реакций. Решение прямой и обратной задачи химической кинетики. Моделирование кинетики гомогенных химических реакций. Особенности гетерогенных химических процессов. Моделирование кинетики гетерогенных химических реакций. Моделирование сложных реакций. Моделирование критических явлений в химической кинетике.

МОДУЛЬ 9 «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ»

Характеристика химических реакторов. Математические модели химических реакторов идеального перемешивания и идеального вытеснения. Сравнение химических реакторов идеального перемешивания и идеального

вытеснения. Математическая модель каскада реакторов идеального перемешивания. Исследование химического процесса, протекающего в гомогенном реакторе идеального смешения. Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения в стационарном режиме.

МОДУЛЬ 10 «СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ»

Основные понятия и определения. Классификация и общий вид уравнений статистических моделей. Статистические модели объектов на основе пассивного эксперимента. Линейная регрессионная модель с одной независимой переменной. Параболическая регрессионная модель. Статистические модели на основе активного эксперимента. Полный факторный эксперимент. Дробный факторный эксперимент. Статистические модели оптимальной области объекта исследования.

МОДУЛЬ 11 «ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

Понятие об оптимизации. Критерий оптимальности. Методы решения оптимальных задач. Математические модели как основа оптимизации технологических процессов. Статистические методы оптимизации. Аналитические методы оптимизации. Оптимизация методом дифференциального исчисления. Поиск оптимума численными методами. Экспериментальный поиск оптимума. Частные задачи оптимизации химических реакторов. Анализ, оптимизация и синтез химико-технологических систем.

5.3. Лабораторные работы

Таблица 3. Лабораторные работы и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели лабораторных работ	Наименование лабораторных работ	Трудо- емкость в часах
Модуль 1 Цель: освоение основных принципов и этапов моделирования химико-технологических процессов	Составление модели проведения химического эксперимента. Построение деревьев синтеза биологически активных веществ с применением синтетического подхода.	2
Модуль 2 Цель: освоение принципов построения эмпирических моделей химико-технологических процессов	Построение уравнения многофакторной регрессии методом наименьших квадратов Построение уравнения нелинейной многофакторной регрессии методом Брандона.	2
Модуль 3 Цель: освоение принципов построения физико-химических моделей химико-технологических процессов	Решение задачи параметрической идентификации математической модели. Изучение методов исследования поведения целевой функции при параметрической идентификации.	2

Модуль 4 Цель: освоение принципов построения математических моделей химико-технологических процессов	Метод математического моделирования и его использование при построении математических моделей элементов ХТС. Блок-схема построения математической модели элемента ХТС	2
Модуль 5 Цель: освоение принципов математического моделирования структуры потоков	Моделирование структуры потоков. Составление модели перемешивания твердых частиц в аппарате КС при использовании дифференциального уравнения с частными производными	4
Модуль 6 Цель: освоение принципов математического моделирования теплообменных процессов	Моделирование теплообменных процессов. Применение метода конечных разностей для решения тепловых химико-технологических задач.	4
Модуль 7 Цель: освоение принципов математического моделирования массообменных процессов	Моделирование парожидкостного равновесия. Моделирование процесса ректификации в простой колонне.	4
Модуль 8 Цель: овладение навыками математического моделирования кинетики химических реакций	Моделирование кинетики гомогенных химических реакций. Моделирование кинетики гетерогенных химических реакций. Моделирование кинетики каталитических реакций. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций.	4
Модуль 9 Цель: овладение навыками моделирования химических реакторов	Составление модели реактора идеального перемешивания при использовании дифференциального уравнения. Исследование химического процесса, протекающего в гомогенном реакторе идеального смешения. Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения в стационарном режиме.	2
Модуль 10 Цель: освоение принципов построения статистических моделей химико-технологических процессов	Проверка статистических гипотез. Изучение формально-логического подхода компьютерного планирования органического синтеза с помощью программы SywBag	2
Модуль 11 Цель: овладение навыками анализа и оптимизации химико-технологических процессов	Решение задачи об оптимизации химико-технологического процесса. Симплексные методы оптимизации ХТС.	2

5.4. Практические занятия

Учебным планом практические занятия не предусмотрены.

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы бакалавров является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к лабораторным занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к зачету.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на лабораторные занятия. В рамках дисциплины выполняются 11 лабораторных работ. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы лабораторных занятий. Оценивание осуществляется по содержанию и качеству выполненного задания путем проведения устного опроса.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Гумеров, А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов по направлениям подготовки "Химическая технология" и "Энерго- и ресурсообеспечивающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / А.М. Гумеров. - 2-е изд. ; перераб. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 25.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1533-5. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211445> . - (ID=106016-0)

2. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия : в составе учебно-методического комплекса / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - Москва : Солон - Пресс, 2005. - 535 с. : ил. - (Библиотека студента) (УМК-У). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-98003-188-X : 274 р. 94 к. - (ID=59885-10)

3. Перевалов, В. П. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов / В. П. Перевалов, Г. И. Колдобский. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 53 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-15858-8. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/509891> (дата обращения: 10.01.2023). - (ID=152980-0)

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учебное пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 403 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-07524-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/516052> (дата обращения: 10.01.2023). - (ID=150445-0)
2. Кафаров, В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учеб. пособие для вузов : в составе учебно-методического комплекса / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. - М. : Высшая школа, 1991. - 399, [1] с. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - 1 р. 80 к. - (ID=85720-24)
3. Луценко, В.А. Математическое моделирование химико-технологических процессов на аналоговых вычислительных машинах : лабораторные практические работы : учеб. пособие для вузов по спец. "Основные процессы хим. пр-в и хим. кибернетика" / В.А. Луценко, Л.Н. Финякин. - 2-е изд. ; доп. и перераб. - М. : Химия, 1984. - 271 с. - (Химическая кибернетика). - Текст : непосредственный. - 95 к. - (ID=115413-6)
4. Закгейм, А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов : учеб. пособие для вузов / А.Ю. Закгейм. - 2-е изд. ; доп. и перераб. - М. : Химия, 1982. - 288 с. - Текст : непосредственный. - 90 к. - (ID=85864-69)
5. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.М. Гумеров [и др.]. - Москва : КолосС, 2008. - 159 с. - (Для высшей школы) (УМК-У). - Библиогр. : с. 159. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9532-0631-0 : 338 р. 52 к. - (ID=57652-12)

7.3. Методические материалы

1. Косивцов, Ю.Ю. Применение ЭВМ в химии, химической технологии и биотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Ю.Ю. Косивцов, А.И. Сидоров, В.В. Алферов; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2005. - 142 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 142. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0313-9 : [б. ц.]. - (ID=59422-107)
2. Учебно-методический комплекс дисциплины "Моделирование химико-технологических процессов" направления подготовки 18.03.01 Химическая технология. Направленность (профиль): Химическая технология синтетических биологически активных веществ : ФГОС 3++ / Каф. Биотехнологии, химии и стандартизации ; сост. В.П. Молчанов. - 2022. - (УМК). - Текст : электронный. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/116124> . - (ID=116124-0)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

Microsoft Office 2007 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭК ТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ": сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.). Диск 1, 2, 3, 4. - М.: Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст: электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/116124>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

Для проведения лабораторных работ имеются лаборатории с персональными компьютерами (наличие локальной вычислительной сети обязательно).

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

Учебным планом экзамен по дисциплине не предусмотрен.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля знаний и умений обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам выполнения дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у студентов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания студенту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания - 20.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность – 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации – «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачёта:

для категории «знать» (бинарный критерий):

ниже базового - 0 балл;

базовый уровень – 1 балла;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 1 балла.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке предоставляется:

база заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении);

методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытания и проставления зачёта.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ.

7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете.

1. Основа стратегии математического моделирования физико-химических систем.

2. Основные элементы описания физико-химической системы: технологический и функциональный операторы. Их характеристика и методы синтеза. Топологический принцип формализации.

3. Исследование механизмов химических реакций. Обоснование выбора стратегии.

4. Особенности процедуры выдвижения гипотез о механизмах реакций. Типы применяемого программного обеспечения, их характеристика и сравнительный анализ.

5. Исследование механизмов реакций. Программы формально-логического направления.

6. Исследование механизмов реакций. Программы эмпирического направления.

7. Структура процесса принятия решений при определении механизма химической реакции. Выбор и использование компьютерных программ для конкретных объектов на разных этапах исследования.

8. Особенности исследования механизмов каталитических реакций. Автоматизация построения кинетических моделей.

9. Математическое моделирование. Этапы выполнения. Виды моделей.

10. Состав и методы составления математического описания объектов.

11. Уравнения. Характеристика различных видов уравнений и их систем.

12. Машинное решение уравнений. Особенности решения дифференциальных уравнений.

13. Выбор и реализация метода решения уравнений математического описания.

14. Аппарат идеального смешения. Математическое описание в установившемся и неустойчивом режиме.

15. Аппарат идеального вытеснения. Математическое описание и метод решения.

16. Математическое моделирование формальной кинетики химических процессов.

17. Анализ методов решения обратной задачи химической кинетики.

18. Блочный принцип построения математических моделей.

19. Анализ микрокинетики. Получение и представление кинетических данных.

20. Интегральный метод анализа кинетических данных.

21. Дифференциальный метод анализа кинетических данных.

22. Изменение температуры и объема как факторы, влияющие на скорость химического процесса.

23. Определение лимитирующей стадии в гетерогенных системах. Влияние диффузионного сопротивления.

24. Гетерогенные каталитические реакции: особенности описания и анализ кинетических гипотез.

25. Типы лабораторных каталитических реакторов. Выбор лабораторного реактора.

26. Исследование макрокинетики. Последовательность анализа.

27. Отклонения от ожидаемого значения экспериментальных наблюдений. Методы уменьшения отклонений. Экспериментальные кривые отклика.

28. Выбор реактора для макрокинетических исследований. Циркуляционная схема организации процесса.

29. Расчет количества катализатора для адиабатического реактора. Оценка стоимости реакторной установки.

30. Управление реакторами воздействием по расходу и соотношению подачи реагентов.

31. Управление реакторами воздействием по расходу теплоносителя и его температуре.

32. Аппараты с промежуточным теплообменом.

33. Аппараты с внутренним теплообменом.

34. Сравнительная характеристика аппаратов с промежуточным и внутренним теплообменом. Аппараты с комбинированной схемой.

35. Типовые схемы теплосъема и анализ устойчивости реакторов.

36. Синтез системы автоматизированного проектирования. Структура системы и анализ ресурсов проектирования.

37. Математическое и информационное обеспечение системы автоматизированного проектирования.

38. Анализ данных с использованием пакета Microsoft Excel.

39. Математическое моделирование как основной метод кибернетики.

40. Понятие о планировании экспериментов.

41. Методы статистической обработки экспериментальных данных.

42. Численные методы приближения функции.

43. Методы численного интегрирования.

44. Методы численного дифференцирования.

45. Методы решения экстремальных задач.

46. Метод молекулярной динамики.

47. Метод Монте-Карло.

48. Понятие о квантово-химических методах расчета.

49. Моделирование кинетических закономерностей химических процессов.

50. Математические модели химических реакторов.

51. Проблема искусственного интеллекта.

52. Понятие об экспертных системах. Применение экспертных систем в химии.

53. Компьютерное планирование органического синтеза.

54. Математическое моделирование химико-технологических процессов.

55. Способы компьютерного кодирования химических структур.

56. Погрешности измерений. Их учет при обработке экспериментальных данных.

57. Кибернетика. Особенности химической кибернетики.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного студенту.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

Приложение

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров – 19.03.01 Химическая технология
Направленность (профиль) – Химическая технология синтетических
биологически активных веществ
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»
Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов»
Семестр 7

ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1

1. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Основа стратегии математического моделирования физико-химических систем.
2. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Блочный принцип построения математических моделей.
3. Задание для проверки уровня «уметь» – 0 или 1 балл:
Используя кинетические данные лабораторного химического эксперимента, построить математические модели работы аппарата идеального смешения в установившемся и неустойчивом режиме.

Критерии итоговой оценки за зачет:
«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;
«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: проф. кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман