

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«Моделирование химико-технологических процессов»

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов» является частью программы бакалавриата «Химическая технология (общий профиль, СУОС)» по направлению «18.03.01 Химическая технология».

### **Цели и задачи дисциплины**

Целью изучения дисциплины является формирование системы знаний, умений и навыков в области разработки и применения математических моделей химико-технологических процессов, производств и отдельных аппаратов с целью оптимизации основного технико-экономического показателя «затраты: результат». Задачи учебной дисциплины: - изучение методов составления полной системы математических уравнений, описывающих предмет моделирования; - формирование умения реализовать математические модели ХТП на ЭВМ; - формирование навыков проведения компьютерных исследований моделируемых объектов..

### **Изучаемые объекты дисциплины**

- балансные, кинетические, вспомогательные уравнения и системы уравнений, описывающие, или моделирующие работу отдельных аппаратов, процессов и производств; - методы численного или аналитического решения уравнений и систем уравнений, описывающих моделируемые объекты, а также математические и физические ограничения, соответствующие данной модели; - методы реализации математических моделей и навыки составления программных моделей на современных ЭВМ; - существующее программное обеспечение для моделирования процессов и производств..

### Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		7	
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	68	68	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)	17	17	
- лабораторные работы (ЛР)	34	34	
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	15	15	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	40	40	
2. Промежуточная аттестация			
Экзамен	36	36	
Дифференцированный зачет			
Зачет			
Курсовой проект (КП)			
Курсовая работа (КР)			
Общая трудоемкость дисциплины	144	144	

### Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
7-й семестр				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Общие вопросы моделирования.	4	12	2	10
<p>Введение.</p> <p>Основные понятия и принципы моделирования.</p> <p>Классификация математических моделей.</p> <p>Примеры применения математических моделей для решения производственных задач.</p> <p>Раздел 1. Виды уравнений и методы их решения при моделировании химико-технологических процессов.</p> <p>Тема 1. Уравнения баланса.</p> <p>Уравнения материального баланса в интегральной и дифференциальной формах.</p> <p>Понятия переходного и стационарного состояния объекта. Некоторые варианты решения уравнений баланса и предельные переходы к стационарному состоянию.</p> <p>Интегральные и дифференциальные уравнения теплового баланса. Размерности величин, участвующих в вычислениях и их согласования</p> <p>Тема 2. Коэффициенты кинетических моделей.</p> <p>Известные математические модели простых и сложных химических реакций. Способы определения кинетических констант (4-5 способов). Метод нахождения обеих констант скорости для реакций последовательного типа, основанный на минимизации квадратичного функционала.</p> <p>Тема 3. Метод сеток для решения дифференциальных уравнений со смешанными производными.</p> <p>Задачи, приводящие к дифференциальным уравнениям со смешанными производными.</p> <p>Метод сеток для решения дифференциальных уравнений. Ограничения метода сеток и способы частичного преодоления недостатков процедуры.</p>				
Статистические модели.	8	4	10	15
<p>Раздел 3. Регрессионные модели и оптимизация на их основе.</p> <p>Тема 7. Метод МНК.</p> <p>Методы аппроксимации экспериментальных данных. Варианты метода МНК, позволяющие проводить процедуры линеаризации зависимостей.</p> <p>Тема 8. Регрессионный анализ.</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>Вариант описания экспериментальных результатов многомерной функцией Тейлора. Ограничение размерности разложения, приводящие к частному виду – уравнению регрессии. Процедура построения матриц эксперимента в общем виде и в варианте с кодированными переменными. Статистические критерии воспроизводимости, адекватности и значимости. Метод дробных реплик. Понятия активного и пассивного эксперимента. Матричный метод решения системы уравнений для нахождения коэффициентов уравнения регрессии. Процедура рандомизации эксперимента. Симплекс-метод поиска экстремума в активном эксперименте. Примеры применения методов регрессионного анализа. Тема 9. Оптимизация химико-технологических процессов.</p> <p>Основные виды функций отклика сложной системы на внешние возмущения и методы поиска экстремумов многомерных функций, систематизированные как градиентные и безградиентные методы. Метод градиентного спуска, метод наискорейшего спуска, симплекс метод поиска экстремума.</p> <p>Заключение.</p> <p>Применение моделирования в химической промышленности для определения оптимальных технологических параметров.</p>				
Детерминированные модели.	5	18	3	15
<p>Раздел 2. Математические модели основных процессов химической технологии.</p> <p>Тема 4. Моделирование теплообменных процессов.</p> <p>Процедура составления системы дифференциальных уравнений для теплообменника смешения. Решение дифференциального уравнения теплообмена и переход его решения в стационарное. Примеры реализации подобного варианта теплообмена в промышленных условиях</p> <p>Тема 5. Моделирование процессов с межфазным переносом.</p> <p>Процедура составления системы дифференциальных уравнений теплообмена</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>через стенку, включая вариант протекания неизотермической химической реакции в одном из объёмов теплообменного аппарата.</p> <p>Варианты погружного аппарата, теплообменника типа «труба в трубе» для случаев сопутствующего тока и противотока.</p> <p>Процедура составления дифференциальных уравнений для межфазных химических реакций, протекающих на границе двух сред.</p> <p>Системы уравнений, описывающие межфазные процессы абсорбции, ректификации и экстракции.</p> <p>Тема 6. Моделирование процесса кристаллизации.</p> <p>Математическое описание кристаллизации из растворов.</p>				
ИТОГО по 7-му семестру	17	34	15	40
ИТОГО по дисциплине	17	34	15	40