

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. Варианты погружного аппарата, теплообменника типа «труба в трубе» для случаев сопутствующего тока и противотока. Процедура составления дифференциальных уравнений для межфазных химических реакций, протекающих на границе двух сред. 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