

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«Моделирование химико-технологических процессов (Модуль Химическая технология полимерных материалов и энергетических конденсированных систем)»

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов (Модуль Химическая технология полимерных материалов и энергетических конденсированных систем)» является частью программы бакалавриата «Химическая технология (общий профиль, СУОС)» по направлению «18.03.01 Химическая технология».

Цели и задачи дисциплины

Цель учебной дисциплины – формирование у студентов знаний, умений и навыков применения методов вычислительной математики, современных информационных технологий и системного подхода для решения сложных прикладных задач в своей предметной области, совершенствование их логического и алгоритмического мышления. Задачи учебной дисциплины:

- изучение основ общей теории моделирования, этапов и особенностей математического Моделирования химико-технологических процессов (ХТП);
- изучение методов построения формальных математических моделей физико-химических процессов и идентификации свойств многокомпонентных химических продуктов по экспериментальным данным на основе пассивного и активного, оптимально спланированного, эксперимента;
- изучение математических моделей и методов моделирования кинетики сложных химических реакций;
- формирование умения ставить задачи математического моделирования в своей предметной области и выбирать численный метод их решения;
- формирование умения строить кинетическую модель химической реакции в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений по заданной стехиометрической модели и решать прямую задачу химической кинетики с использованием прикладных программ;
- формирование умения правильно выбирать тип оптимального плана эксперимента в зависимости от требований, предъявляемых к свойствам формальной математической модели;
- формирование навыков построения формальных моделей физико-химических процессов и моделей свойств многокомпонентных химических продуктов в своей предметной области с использованием прикладных программных систем..

Изучаемые объекты дисциплины

- основы общей теории моделирования;
- метод математического моделирования, его место и роль в системном анализе при исследовании и оптимизации сложных систем и процессов;
- особенности математического моделирования химико-технологических процессов;
- метод наименьших квадратов и регрессионные математические модели на основе пассивного и активного эксперимента;
- методы оптимального планирования эксперимента;
- математические модели и методы моделирования кинетики химических реакций;
- обобщенная математическая модель задачи оптимизации химико-технологического процесса..

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
Методы построения формальных математических моделей на основе экспериментальных данных.	6	10	6	10
<p>Тема 3. Построение регрессионных математических моделей на основе пассивного эксперимента. Понятие пассивного и активного эксперимента. Основные предпосылки построения регрессионных математических моделей и применения регрессионного анализа. Метод наименьших квадратов (МНК). Уравнение регрессии (УР) и система нормальных уравнений (СНУ) относительно стандартизированных переменных, особенности СНУ. Решение СНУ в матричном виде относительно коэффициентов УР. Статистические критерии проверки гипотез: воспроизводимости эксперимента по критерию Кохрена; значимости коэффициентов УР по критерию Стьюдента; адекватности регрессионной модели по критерию Фишера.</p> <p>Тема 4. Построение регрессионных математических моделей на основе оптимального планирования эксперимента. Смысл методов оптимального планирования эксперимента. Сущность полного факторного эксперимента (ПФЭ). Понятие плана эксперимента и его геометрическая интерпретация. Смысл основных критериев оптимальности планов эксперимента. Обработка результатов и оптимальные свойства ПФЭ. Дробный факторный эксперимент. Принципы построения дробных реплик. Метод центрального композиционного планирования (ЦКП). Принцип композиционности планов эксперимента. Центральные композиционные ортогональный (ЦКОП) и ротатабельный (ЦКРП) планы, их структура, особенности и оптимальные свойства соответствующих им регрессионных моделей. Статистический анализ регрессионных моделей второго порядка, получаемых с помощью ЦКОП и ЦКРП.</p> <p>Тема 5. Методы идентификации свойств многокомпонентных химических продуктов. Особенности оптимального планирования эксперимента при изучении свойств</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
многокомпонентных химических продуктов (МХП). Планирование эксперимента на симплекс-решётках. Понятие о приведённых полиномах Шеффе. Симплекс-решётчатые планы Шеффе. Принципы построения матриц планирования для планов Шеффе. Вычисление коэффициентов полинома Шеффе и способы оценки адекватности модели. Планирование эксперимента при идентификации свойств МХП в локальной области.				
Основы общей теории моделирования и особенности математического моделирования химико-технологических процессов.	6	12	4	15
Тема 1. Введение в общую теорию моделирования. Основные направления использования ЭВМ в химии и химической технологии. Технология решения сложных научных и инженерных задач на ЭВМ. Понятие моделирования и модели. Материальные и информационные модели. Классификация материальных моделей и способов моделирования, теоретическая основа физического и аналогового моделирования. Классификация информационных моделей и способов моделирования. Понятие математической модели и метода математического моделирования. Роль математического моделирования и методов идентификации математических моделей в системном анализе при исследовании и оптимизации сложных, в том числе химико-технологических, объектов и процессов. Тема 2. Особенности математического моделирования химико-технологических процессов. Классификация математических моделей в химической технологии. Методы построения математических моделей. Этапы математического моделирования химико-технологических процессов (ХТП) и блочный принцип построения математических моделей ХТП. Смысл и критерии оценки адекватности математических моделей. Состав полного математического описания ХТП.				
Математическое моделирование кинетики химических реакций.	5	12	5	15

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>Тема 6. Математические модели химических реакций. Классификация типов химических реакций, их особенности. Стехиометрические и кинетические математические модели простых, сложных и обратимых химических реакций.</p> <p>Тема 7. Методы математического моделирования кинетики химических реакций. Понятие прямой и обратной задачи химической кинетики. Особенности математического моделирования кинетики химических реакций. Алгоритм решения прямой задачи химической кинетики по стехиометрической модели химической реакции и заданным значениям констант скоростей стадий реакции. Этапы и методы построения кинетической модели сложной химической реакции. Пример построения кинетической модели с использованием метода оптимального планирования эксперимента.</p>				
ИТОГО по 7-му семестру	17	34	15	40
ИТОГО по дисциплине	17	34	15	40