

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ
И.о. директора ИШПР
Н. В. Гусева
«30» 06 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ПРИЕМ 2020 г.
ФОРМА ОБУЧЕНИЯ заочная

Моделирование химико-технологических процессов			
Направление подготовки/специальность	18.03.01 Химическая технология		
Образовательная программа (направленность (профиль))	Химическая технология переработки нефти и газа		
Специализация	Технология нефтегазохимии и полимерных материалов		
Уровень образования	высшее образование - бакалавриат		
Курс	4	семестр	8
Трудоемкость в кредитах (зачетных единицах)	5		
Виды учебной деятельности	Временной ресурс		
Контактная (аудиторная) работа, ч	Лекции		12
	Практические занятия		
	Лабораторные занятия		12
	ВСЕГО		24
Самостоятельная работа, ч			156
ИТОГО, ч			180

Вид промежуточной аттестации	Экзамен	Обеспечивающее подразделение	ОХИ ИШПР
Заведующий кафедрой - руководитель ОХИ на правах кафедры			Е.И. Короткова
Руководитель ООП			Е.А. Кузьменко
Преподаватель			И.М. Долганов

2020 г.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины является формирование у обучающихся определенного ООП (п. 5. Общей характеристики ООП) состава компетенций для подготовки к профессиональной деятельности.

Код компетенции	Наименование компетенции	Составляющие результатов освоения (дескрипторы компетенций)	
		Код	Наименование
ОПК(У)-5	Владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией	ОПК(У)-5.B4	Владеет методами поиска и обмена информацией в компьютерных сетях, пакетами прикладных программ при моделировании химико-технологических процессов
		ОПК(У)-5.Y4	Умеет выполнять обработку результатов моделирования с применением прикладных компьютерных программ
		ОПК(У)-5.34	Знает основные методы получения, хранения и переработки информации при моделировании ХТП
ПК(У)-2	Готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров	ПК(У)-2.B2	Владеет алгоритмами численных методов, навыками программирования и самостоятельного выполнения компьютерных расчетов при моделировании, и оптимизации объектов химической технологии
		ПК(У)-2.Y2	Умеет применять численные методы, использовать языки программирования и прикладные программы для решения профессиональных задач
		ПК(У)-2.32	Знает основные модели структуры потоков, алгоритмы численных методов, методологию анализа результатов моделирования
ДПК(У)-1	Способность планировать и проводить химические эксперименты, проводить обработку результатов эксперимента, оценивать погрешности, применять методы математического моделирования и анализа при исследовании химико-технологических процессов	ДПК(У)-1.B6	Владеет методами построения математических моделей ХТП и интерпретации полученных результатов; методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов
		ДПК(У)-1.Y6	Умеет применять методы математического моделирования при исследовании ХТП, применять методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке экспериментальных данных и методы планирования эксперимента
		ДПК(У)-1.36	Знает методы построения физико-химических и эмпирических моделей ХТП; методы математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Дисциплина относится к базовой части Блока 1 учебного плана образовательной программы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

После успешного освоения дисциплины будут сформированы результаты обучения:

Планируемые результаты обучения по дисциплине		Компетенция
Код	Наименование	
РД1.	Освоить методы построения математических моделей химико-технологических процессов	ДПК(У)-1
РД2.	Самостоятельно выполнять компьютерные расчеты при моделировании ХТП	ОПК(У)-5 ПК(У)-2
РД3.	Освоить методы обработки и анализа данных, полученных при теоретических и экспериментальных исследованиях, методы корреляционного и регрессионного анализа	ОПК(У)-5 ПК(У)-2 ДПК(У)-1
РД4	Освоить методы планирования и оптимизации эксперимента	ДПК(У)-1
РД5	Освоить методологию анализа результатов моделирования химико-технологических процессов	ДПК(У)-1

4. Структура и содержание дисциплины

Основные виды учебной деятельности

Разделы дисциплины	Формируемый результат обучения по дисциплине	Виды учебной деятельности	Объем времени, ч.
Раздел 1. Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии	РД-1	Лекции	2
		Лабораторные занятия	2
		Самостоятельная работа	25
Раздел 2. Кинетические модели химических реакций	РД-1, РД-2 РД5	Лекции	2
		Лабораторные занятия	2
		Самостоятельная работа	25
Раздел 3. Моделирование гомогенных химических реакторов	РД-1, РД-2 РД-3 РД5	Лекции	2
		Лабораторные занятия	2
		Практическое занятие	0
		Самостоятельная работа	25
Раздел 4. Модели тепловых и массообменных процессов	РД-1, РД-2 РД5	Лекции	2
		Лабораторные занятия	2
		Самостоятельная работа	25
Раздел 5. Построение моделей экспериментально-статистическими методами. Статистические модели на основе пассивного эксперимента	РД-1, РД2 РД3, РД5	Лекции	1
		Лабораторные занятия	2
		Практическое занятие	0
		Самостоятельная работа	20
Раздел 6. Статистические модели на основе активного эксперимента (планирование эксперимента)	РД-1, РД2 РД-4, РД5	Лекции	1
		Лабораторные занятия	0
		Практическое занятие	20
		Самостоятельная работа	16
Раздел 7 Методы оптимизации ХТП	РД2 РД4	Лекции	2
		Лабораторные занятия	2
		Самостоятельная работа	16

Содержание разделов дисциплины:

Раздел 1. Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии

Математическое моделирование – современный метод анализа и синтеза химико-технологических процессов. Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии. Метод физического и математического моделирования.

Сущность и цели математического моделирования объектов химической технологии. Два подхода к составлению математических моделей процесса: детерминированный и стохастический.

Темы лекций:

1. Основные определения метода моделирования. Подходы к построению математических моделей.

Лабораторные работы:

1. Исследование зависимости константы скорости от температуры

Раздел 2. Кинетические модели химических реакций

Краткие сведения из химической кинетики, скорость химической реакции, закон действующих масс. Экспериментальные методы исследования кинетики химических реакций. Кинетические модели гомогенных химических реакций. Кинетические модели гетерогенных химических реакций.

Темы лекций:

2. Моделирование кинетики гомогенных химических реакций.

Моделирование кинетики гетерогенных химических реакций

Лабораторные работы:

2. Моделирование кинетики гомогенных химических реакций

Раздел 3. Моделирование гомогенных химических реакторов

Структура потоков - гидродинамическая основа математических моделей. Модель идеального перемешивания, идеального вытеснения, диффузионные модели. Адекватность моделей структуры потоков Структурный анализ процессов, протекающих в реакторе, выделение микро- и макроуровней. Описание протекания химического процесса в реакторе идеального смешения, идеального вытеснения. Уравнения теплового баланса гомогенных химических реакторов. Сравнение различных типов химических реакторов.

Темы лекций:

3. Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах

Математическое моделирование гомогенных изотермических химических реакторов

4. Математическое моделирование гомогенных неізотермических химических реакторов

Лабораторные работы:

3. Моделирование гомогенных химических реакторов

Раздел 4. Модели тепловых и массообменных процессов

Основные уравнения тепловых процессов. Модели теплообменных аппаратов, модели идеального вытеснения и идеального перемешивания. Исследование процессов аналитическими и численными методами. Гидродинамические основы процессов массопередачи. Механизм переноса вещества и законы диффузии, основы кинетики процесса массопередачи.

Темы лекций:

5. Математическое моделирование теплообменных аппаратов и массообменных процессов

Лабораторные работы:

4. Моделирование теплообменных аппаратов в стационарном режиме

Раздел 5. Построение моделей экспериментально-статистическими методами

Особенности построения статистических моделей.

Некоторые элементы теории вероятности и математической статистики.

Законы распределения случайной величины.

Пассивный эксперимент. Методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке данных химического эксперимента. Виды регрессии. Определение параметров модели по методу наименьших квадратов. Статистический анализ уравнения регрессии.

Темы лекций:

6. Экспериментально-статистические методы построения математических моделей.

Некоторые элементы теории математической статистики

7. Пассивный эксперимент. Методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке данных химического эксперимента.

Лабораторные работы:

5. Методы корреляционного и регрессионного анализа при обработке экспериментальных данных;

Раздел 6. Статистические модели на основе активного эксперимента (планирование эксперимента)

Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Понятие матрицы планирования, интервала варьирования, основного уровня. Кодирование переменных. Свойства матрицы планирования. Определение коэффициентов регрессии ПФЭ. Статистический анализ уравнения регрессии. Дробный факторный эксперимент. Симплексный метод планирования и оптимизации. Планы второго порядка.

Темы лекций:

8. Активный эксперимент. Методы планирования эксперимента. Полный и дробный факторный эксперимент.

9. Статистический анализ уравнения регрессии. Симплексный метод планирования и оптимизации

10. Планирование второго порядка

Лабораторные работы:

6. Статистический анализ уравнения регрессии в полном факторном эксперименте.

Раздел 7. Методы оптимизации ХТП

Постановка задачи оптимизации в ХТ. Критерий оптимальности, целевая функция, оптимизирующие параметры. Методы оптимизации, классификация. Метод Бокса-Уилсона.

Темы лекций:

11. Методы оптимизации ХТП. Основные понятия и определения оптимизации.

Метод крутого восхождения по поверхности отклика (Бокса-Уилсона).

12. Аналитические методы. Частные задачи при оптимизации ХТП.

Методы одномерной оптимизации: дихотомии, «золотого сечения», сканирования.

Метод покоординатного «спуска»

Лабораторные работы:

7. Одномерная оптимизация. Поиск экстремума с использованием методов: дихотомии, «золотого сечения», сканирования

5. Организация самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов при изучении дисциплины (модуля) предусмотрена в следующих видах и формах:

- Работа с лекционным материалом, поиск и обзор литературы и электронных источников информации по индивидуально заданной проблеме курса;
- Работа в электронном курсе (изучение теоретического материала, выполнение индивидуальных заданий и контролирующих мероприятий и др.);
- Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку;
- Выполнение домашних заданий, подготовка рефератов и презентаций.

- Подготовка к лабораторным работам;
- Подготовка к оценивающим мероприятиям;
- Подготовка отчетов по лабораторным работам

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. Учебно-методическое обеспечение

Основная литература:

1. Ушева Н.В., Мойзес О.Е., Митянина О.Е., Кузьменко Е.А. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Учебное пособие. -2014.-158 с.
Схема доступа: <http://www.lib.tpu.ru/fulltext2/m/2014/m366.pdf>
2. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Кузьменко Е.А., Фёдоров А.Ф. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Лабораторный практикум. Часть 1. Томск. 2013. – 136 с.
Схема доступа: <http://www.lib.tpu.ru/fulltext2/m/2013/m266.pdf>
3. Гумеров А.Н., Валеев А.Н и др. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Учебное пособие.– Лань, 2014 .– 176 с.
Схема доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=41014
Дополнительная литература
4. Мойзес О.Е., Е. А. Кузьменко. Углубленный курс информатики: учебное пособие [Электронный ресурс]; Национальный исследовательский Томский политехнический университет (ТПУ), — Томск: Изд-во ТПУ, 2014. — 157 с
Схема доступа: <http://www.lib.tpu.ru/fulltext2/m/2014/m365.pdf>
5. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов.-М.:ИКЦ «Академкнига», 2008.-416 с.
Схема доступа: <https://e.lanbook.com/book/126905>
6. Н. И. Кривцова, О. Е. Мойзес. Дополнительные главы математики. Статистический анализ. Учебное пособие.– Национальный исследовательский Томский политехнический университет (ТПУ)- Томск: Изд-во ТПУ, 2015. —86 с.
Схема доступа: <http://www.lib.tpu.ru/fulltext2/m/2016/m006.pdf> (контент)

6.2. Информационное и программное обеспечение

Internet-ресурсы (в т.ч. в среде LMS MOODLE и др. образовательные и библиотечные ресурсы):

1. Электронный курс «Математическое моделирование ХТП»
<https://stud.lms.tpu.ru/course/view.php?id=2302>
1. Электронно-библиотечная система «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
2. Электронно-библиотечная система «Юрайт» - <https://urait.ru/>
3. Научно-электронная библиотека eLIBRARY.RU - <https://elibrary.ru/defaultx.asp>
4. Электронно-библиотечная система «Консультант студента» <http://www.studentlibrary.ru/>
5. Электронно-библиотечная система «ZNANIUM.COM» - <https://new.znanium.com/>

Лицензионное программное обеспечение (в соответствии с **Перечнем лицензионного программного обеспечения ТПУ**): 7-Zip; Adobe Acrobat Reader DC; Adobe Flash Player; AkeelPad; Cisco Webex Meetings; Google Chrome; Microsoft Office 2007 Standard Russian Academic; Mozilla Firefox ESR; ownCloud Desktop Client; Tracker Software PDF-XChange Viewer; WinDjView; Zoom Zoom

7. Особые требования к материально-техническому обеспечению дисциплины

В учебном процессе используется следующее лабораторное оборудование для лабораторных занятий:

№	Наименование специальных помещений	Наименование оборудования
	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации 634034 г. Томская область, Томск, Тимакова улица, д.12, учебный корпус №16 б, аудитория 225	Доска аудиторная настенная - 1 шт.;Комплект учебной мебели на 72 посадочных мест; Компьютер - 2 шт.; Проектор - 1 шт. Экран с приводом;
1	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (учебная лаборатория) 634034 г. Томская область, Томск, Тимакова улица, д.12, учебный корпус №16 б, аудитория 223	Комплект учебной мебели на 20 посадочных мест; Шкаф для одежды - 3 шт.;Тумба стационарная - 12 шт.;Поляка - 12 шт.; Компьютер - 16 шт.; Принтер - 2 шт.; Проектор - 1 шт. Экран с приводом;
2	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (компьютерный класс) 634034 г. Томская область, Томск, Тимакова улица, д.12, учебный корпус №16 б, аудитория 224	Комплект учебной мебели на 13 посадочных мест;Шкаф для одежды - 2 шт.;Шкаф для документов - 3 шт.; Источник питания ТЭС-18 - 1 шт.;Источник питания ТЭС-1800 - 1 шт.; Компьютер - 11 шт.; Принтер - 3 шт.; Проектор - 1 шт.
3.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (компьютерный класс) 634034 г. Томская область, Томск, пр. Ленина, 39, учебный корпус №2, аудитория 133	Комплект учебной мебели на 13 посадочных мест;Тумба стационарная - 1 шт.; Компьютер - 13 шт.; Проектор - 1 шт.

Рабочая программа составлена на основе Общей характеристики образовательной программы по направлению 18.03.01 Химическая технология/Технология нефтегазохимии и полимерных материалов (приема 2020 г., заочная форма обучения).

Разработчик(и):

Должность	ФИО
Доцент ОХИ	Долганов И.М.

Программа одобрена на заседании выпускающего Отделения химической инженерии (протокол от « 19 » 06 2020 г. № 15).

Заведующий кафедрой –

руководитель ОХИ на правах кафедры

подпись

/Е. И. Короткова/