

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Владимирский государственный университет имени  
Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»  
(ВлГУ)



«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор

по образовательной деятельности

А.А.Панфилов

« 05 » 09 2016 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

### Моделирование химико-технологических процессов

Направление подготовки: 18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки: технология и переработка полимеров

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

Семестр	Трудоем- кость зач. ед, час.	Лек- ций, час.	Практич. занятий, час.	Лаборат работ, час.	СРС, час.	Форма промежуточно го контроля (экз./зачет)
5	5/180	36	-	36	72	Экзамен (36)
Итого	5/180	36	-	36	72	Экзамен (36)

Владимир 2016

## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Целью** освоения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» является научить студентов:

- применять основные приемы обработки экспериментальных данных;
- использовать возможности вычислительной техники и новых компьютерных технологий при решении технологических задач;
- составлять математические модели конкретных процессов химической технологии.

### **Задачи освоения дисциплины**

В процессе изучения дисциплины студент должен освоить

- основные понятия и определения: о химико-технологической системе, математической модели и блочном методе моделирования;
- применение ЭВМ и новых компьютерных технологий при выполнении технологических расчетов для конкретных процессов.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов» входит в базовую часть дисциплин программы подготовки бакалавров направления «Химическая технология».

Настоящий курс требует подготовки по дисциплинам:

- математика;
- информатика;
- процессы и аппараты химической технологии;
- общая химическая технология.

Изучение дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» дает возможность свободно использовать современные информационные технологии при изучении других дисциплин, дает навыки работы с компьютером как средством управления информацией.

## 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В процессе освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

**знать:** методы построения эмпирических (статистических) и физико-химических (теоретических) моделей химико-технологических процессов; методы идентификации математических описаний технологических процессов на основе экспериментальных данных (ПК-2);

**уметь:** применять методы вычислительной математики и математической статистики для решения конкретных задач расчета, проектирования, моделирования, идентификации процессов химической технологии. (ПК-2, ПК-16);

**владеть:** методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов, пакетами прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов. (ПК-2, ПК-16).

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств деловой сферы деятельности; использовать сетевые компьютерные

технологии и базы данных в своей предметной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования (ПК-2).

- способность планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-16);

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 часа.

№ п/п	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Объем учебной работы с применением интерактивных методов (в часах / %)	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра), форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабор. занятия	СРС	КР/КП		
1.	Теоретические основы математического моделирования объектов химической технологии	5		2			12		2/100	Рейтинг №1  Рейтинг №2  Рейтинг №3
2.	Теоретические основы создания стохастических математических описаний процессов химической технологии	5		14		8	20		18/82	
3.	Основы создания детерминированных математических описаний процессов химической технологии	5		14		20	25		30/88	
4.	Математическое моделирование реакторных процессов	5		6		8	15		8/57	
										Экзамен
	<b>Итого:</b>	<b>5</b>		<b>36</b>		<b>36</b>	<b>72</b>	<b>КР</b>	<b>58/81</b>	<b>Экзамен</b>

## СОДЕРЖАНИЕ ЛЕКЦИОННОГО КУРСА

### **Тема № 1. Теоретические основы математического моделирования объектов химической технологии**

Блочный метод математического моделирования; основные законы, используемые при создании математических описаний объектов; типовые гидродинамические модели структуры потока вещества в объектах химической технологии

### **Тема № 2. Теоретические основы создания стохастических математических описаний процессов химической технологии**

Общий вид стохастических математических описаний. Пассивный эксперимент, составление плана пассивного эксперимента, обработка результатов пассивного эксперимента методом наименьших квадратов. Активный эксперимент. Составление оптимального плана активного эксперимента средствами Matlab. Расчет коэффициентов регрессии средствами Matlab и оценка адекватности полученного математического описания.

### **Тема № 3 Теоретические основы создания детерминированных математических описаний процессов химической технологии**

Основные законы, используемые при создании детерминированных математических описаний. Виды типовых возмущений и функции отклика на эти возмущения. Идентификация детерминированных математических описаний.

Математические описания теплообменных процессов, процессов разделения и других процессов, происходящих в технологических и природных системах.

### **Тема № 4. Математическое моделирование реакторных процессов**

Основные закономерности, используемые при описании кинетики химических реакций (закон действующих масс, принцип независимости реакций, температурная зависимость константы скорости химической реакции - закон Аррениуса); типы химических реакций: последовательные, параллельные, разветвленные, одно и многостадийные; математическое описание реактора непрерывного действия.

## ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ

Лабораторные работы выполняются в соответствии с учебным планом бригадами из 2-х – 3-х студентов. Каждой бригаде выдается индивидуальное задание. Все лабораторные работы выполняются на ЭВМ в системе *MATLAB*.

Лабораторная работа Обработка данных пассивного и активного экспериментов. Создание статистических математических описаний.

Лабораторная работа Тепловой расчет электрокалорифера на заданную тепловую нагрузку.

Лабораторная работа Тепловой расчет пневмосушилки.

Лабораторная работа Тепловой расчет пускового режима экструдера.

Лабораторная работа Тепловой расчет экструдера в режиме нормальной эксплуатации.

Лабораторная работа Исследование влияния скорости нагрева и толщины изделия на распределение температур при прессовании.

Лабораторная работа Моделирование реакторных процессов.

## КУРСОВЫЕ РАБОТЫ

Темы курсовых работ выдаются индивидуально каждому студенту в соответствии с его специализацией. Все расчеты при выполнении КР проводятся на ЭВМ.

### Рекомендуемые темы курсовых работ:

1. Математическое моделирование теплового режима работы электрокалорифера в среде Matlab средствами Simulink.
2. Тепловой расчет прессы с электрообогревом .
3. Математическое моделирование процесса нагрева экструзируемого материала в зоне пластикации экструдера.
4. Планирование и обработка данных машинного эксперимента при исследовании процесса получения пенокарбидов.
5. Моделирование и тепловой расчет теплообменника с различным током фаз.
6. Моделирование реакторных процессов.

Все расчеты выполняются с помощью Matlab-программ или средствами Simulink системы Matlab.

## 5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При проведении **лабораторных занятий** студентам предлагается:

- применение компьютеров, использование обучающих программ, новых компьютерных технологий для решения поставленных задач;
- междисциплинарное обучение – использование знаний из разных областей, их группировка и концентрация в контексте конкретной решаемой задачи;
- опережающая самостоятельная работа – изучение студентами нового материала до его изложения преподавателем на лекции и других аудиторных занятиях.

При чтении **лекций** применяется презентация материала.

Таким образом, на интерактивные формы изучения данной дисциплины приходится 81% общего количества аудиторных часов.

## 6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

**Текущий контроль** знаний студентов проводится 3 раза за семестр. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины – **экзамен**.

Для текущего контроля студентам предлагается **тест**:

### Рейтинг 1.

**1. Какой метод математического моделирования используется при составлении математического описания?**

- a. блочный метод
- b. динамический анализ
- c. метод наименьших квадратов

**2. Какие математические описания, строятся на основе фундаментальных законов и закономерностей?**

- a. алгебраические

- b. стохастические
  - c. - детерминированные
- 3. Какие математические описания, строятся на основе обработки экспериментальных данных?**
- a. детерминированные
  - b. стохастические
  - c. алгебраические
- 4. Что положено в основу составления математических описаний?**
- a. законы массопередачи и теплопередачи
  - b. закон Фурье
  - c. закон сохранения вещества и закон сохранения энергии в дифференциальной форме
- 5. Какое понятие шире: математическое описание или математическая модель?**
- a. одно и то же
  - b. математическая модель
  - c. математическое описание
- 6. Какой основной закон химической кинетики используются при описании скорости химической реакции?**
- a. закон действия масс
  - b. закон сохранения энергии
  - c. закон сохранения вещества
- 7. Какой принцип химической кинетики используется при описании кинетики сложных реакций?**
- a. принцип равенства реакций
  - b. принцип соответствия реакций
  - c. принцип независимостей реакций
- 8. Что необходимо задавать для решения обыкновенных дифференциальных уравнений?**
- a. начальные и граничные условия
  - b. начальные условия
  - c. граничные условия
- 9. Что необходимо задавать для решения дифференциальных уравнений в частных производных?**
- a. начальные и граничные условия
  - b. начальные условия
  - c. граничные условия
- 10. Какие виды типовых возмущений используются при исследовании объектов моделирования?**
- a. ступенчатое и импульсное
  - b. ступенчатое и синусоидальное
  - c. импульсное и синусоидальное

## Рейтинг 2.

- 1. Что такое пассивный эксперимент?**
- a. входные факторы меняются поочередно
  - b. входные факторы меняются одновременно
- 2. Что такое активный эксперимент?**
- a. входные факторы меняются поочередно
  - b. входные факторы меняются одновременно
- 3. Что такое опыты на воспроизводимость (параллельные опыты)?**
- a. опыты проводятся при различных значениях входных факторов.
  - b. опыты проводятся случайным образом.
  - c. опыты проводятся при одних и тех же значениях входных факторов

**4. Критерий Фишера – это:**

- a. критерий воспроизводимости эксперимента.
- b. критерий адекватности
- c. критерий значимости коэффициентов.

**5. Какие виды типовых возмущений используются при исследовании объектов моделирования?**

- a. ступенчатое и импульсное
- b. ступенчатое и синусоидальное
- c. импульсное и синусоидальное

**6. Метод, используемый при расчете коэффициентов в уравнениях регрессии?**

- a. блочный метод
- b. метод наименьших квадратов
- c. метод Фишера

**7. Какой метод математического моделирования используется при составлении математического описания?**

- a. блочный метод
- b. динамический анализ
- c. метод наименьших квадратов

**8. Что положено в основу составления математических описаний?**

- a. законы массопередачи и теплопередачи
- b. закон Фурье
- c. закон сохранения вещества и закон сохранения энергии в дифференциальной форме

**9. Какое понятие шире: математическое описание или математическая модель?**

- a. одно и то же
- b. математическая модель
- c. математическое описание

**10. Вид статистического математического описания**

- a. уравнение регрессии
- б дифференциальное уравнение
- с дифференциальное уравнение в частных производных

**Рейтинг 3**

**1. Модель идеального смешения – это модель**

- a. с простыми параметрами
- b. с сосредоточенными параметрами
- c. с сосредоточенными параметрами

**2. Модель идеального вытеснения – это модель**

- a. с сосредоточенными параметрами
- b. с простыми параметрами
- c. с распределенными параметрами

**3. Что является параметрами ячеечной модели?**

- a. число ячеек и общее время пребывания
- b. число ячеек и среднее время пребывания в ячейке
- c. объем аппарата и его размеры

**4. F-кривая – это функция отклика на:**

- a. синусоидальное возмущение
- b. импульсное возмущение
- c. ступенчатое возмущение

**5. S-кривая – это функция отклика на:**

- a. ступенчатое возмущение
- b. синусоидальное возмущение
- c. импульсное возмущение

**6. Что необходимо задавать для решения дифференциальных уравнений в частных производных?**

- a. начальные и граничные условия
- b. начальные условия
- c. граничные условия

**7. Какой типовой гидродинамической модели подчиняется структура потока материала в зоне пластикации экструдера?**

- a. ячеечной модели
- b. однопараметрической диффузионной модели
- c. модели идеального вытеснения

**8. Каким уравнением описывается процесс нагрева пресс-композиции при заданных законах изменения температуры матрицы и пуансона?**

- a. уравнением нестационарной теплопроводности
- b. уравнением Фурье
- c. уравнением движения потока тепла

**9. Что необходимо задавать для решения обыкновенных дифференциальных уравнений?**

- a. начальные и граничные условия
- b. начальные условия
- c. граничные условия

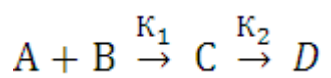
**10. Какой метод математического моделирования используется при составлении математического описания?**

- a. блочный метод
- b. динамический анализ
- c. метод наименьших квадратов

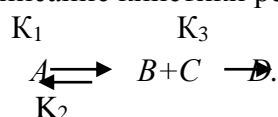
**Вопросы к экзамену:**

1. Что такое математическое описание объекта, математическая модель, математическое моделирование.
2. Детерминированное и стохастическое математическое описание. Их преимущества и недостатки. Теоретическая база при составлении этих математических описаний.
3. Основные законы, используемые при составлении детерминированных математических описаний.
4. Блочный метод математического моделирования. Декомпозиция объекта исследования. Основные процессы химической технологии.
5. Типовая гидродинамическая модель. Модель идеального смешения. Вывод математического описания. Количественные характеристики модели и F,C – кривые.
6. Типовая гидродинамическая модель. Модель идеального вытеснения. F,C – кривые.
7. Типовая гидродинамическая модель. Ячеечная модель. F,C – кривые. При каких условиях ячеечная модель переходит в модель идеального смешения или идеального вытеснения.
8. Записать МО кинетики реакции  $A \xrightarrow{k_1} k_2 B$ , проводимого в реакторе идеального смешения периодического действия.
9. Записать МО кинетики реакции  $A \xrightarrow{k} k_2 B$ , проводимого в реакторе идеального смешения непрерывного действия.
10. Математическое описание реакции  $A \xrightarrow{k} B$  в реакторе непрерывного действия ИВ.
11. Записать математическое описание кинетики реакции вида

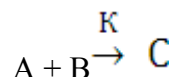




12. Записать математическое описание кинетики реакции вида



13. Составить Simulink программу для решения дифференциального уравнения, описывающего реакцию вида



14. Регрессионный анализ.

15. Критерий Фишера – критерий адекватности.

16. Проведение параллельных опытов. Оценка опытов на воспроизводимость

17. Пассивный эксперимент. Его недостатки.

18. Активный эксперимент. Его преимущества.

19. Кодирование входных переменных.

20. Метод математического приближения – метод наименьших квадратов.

21. Составление оптимального плана активного эксперимента средствами Matlab. Расчет коэффициентов регрессии средствами Matlab.

22. Математическое описание электрокалорифера.

23. Математическое описание прямоточного кожухотрубчатого теплообменника.

24. Математическое описание противоточного кожухотрубчатого теплообменника.

25. Математическое описание кожухотрубчатого теплообменника с перекрестным током фаз.

## САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа студентов проводится в соответствии с тематическим планом курса. Студентам выдаются вопросы по каждой теме. Контроль знаний осуществляется в виде устного опроса на лабораторных занятиях, при промежуточном тестировании и при защите курсовой работы.

*Вопросы для самостоятельной проработки:*

Тема № 1.

1. Математическое описание и математическая модель: какое понятие шире и почему.
2. Технологический процесс и технологическая система. Суть того и другого понятия.
3. Блок-схема математической модели.
4. Классификация типовых гидродинамических моделей.
5. Роль гидродинамической модели в составлении общего математического описания системы.

Тема № 2.

1. Регрессионный анализ. Что это значит?
2. Критерий Стьюдента – критерий значимости коэффициентов в уравнении регрессии.
3. Критерий Фишера – критерий адекватности.
4. Проведение параллельных опытов. Оценка опытов на воспроизводимость.
5. Критерий Кохрена. Алгоритм расчета критерия Кохрена.
6. Ортогональные планы, в чем их особенность?

Тема № 3.

1. Материальный и тепловой балансы в дифференциальной форме. Что из себя представляет каждая составляющая балансов.
2. Суть системного подхода к исследованию технологических систем.
3. Пять основных этапов системного исследования систем.

4. На чем основано составление детерминированных математических описаний.
5. Режимы работы технологических и природных систем, чем отличаются математические описания этих режимов.

#### Тема № 4.

1. Основные постулаты химической кинетики, используемые при описании химических реакций.
2. Температурная зависимость константы скорости химической реакции (закон Аррениуса).
3. Отличие математических описаний реактора периодического и непрерывного действия.
4. Типы реакций с примерами.

## 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### Основная литература

1. **Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов:** учеб. пособие / А.Ю. Закгейм. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Логос., 2012 - 304 с.(электр. ресурс: <http://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4>).
2. **Моделирование химико-технологических процессов:** учебник / Г.И. Ефремов. - М.: НИЦ ИНФРА-М., 2016 - 255 с.(электр. ресурс: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=510221>).
3. **Моделирование технологических и природных систем.** Под ред. Ю.Т.Панова. Учебное пособие – Тамбов : Изд-во Першина Р.В., 2014 ( библ. ВлГУ).

### Дополнительная литература

1. Барабанов Н.Н., Земскова В.Т. **Расчеты химико-технологических процессов в системе MATLAB.** Уч. Пособие. Гос. ун-т. Владимир. 2011. ( библ. ВлГУ).
2. **Математическое моделирование химико-технологических процессов** [Электронный ресурс] / А. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, А. М. Гумеров, В. М. Емельянов.-М.: КолосС., 2008, <http://www.studentlibrary.ru/doc/ISBN9785953206310-SCN0004.html>
3. MATLAB R2006/2007/2008 + Simulink 5/6/7. Основы применения. [Электронный ресурс] / В. П. Дьяконов. - М. : СОЛОН-ПРЕСС.2008 <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913590428.html>

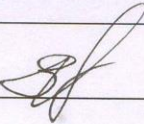
### Программное обеспечение

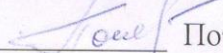
Студенты пользуются разработанными преподавателями программами или составляют сами программы для решения поставленной задачи. Все программы составляются с помощью системы MATLAB. Очень широко используется одно из расширений системы MATLAB SIMULINK, позволяющее строить виртуальные модели процессов.

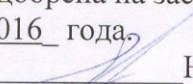
## 8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

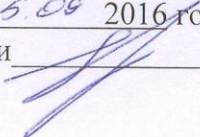
1. Компьютерный класс на 10 ПЭВМ
2. Мультимедийные средства.
3. Слайды-лекции.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению  
18.03.01 Химическая технология

Рабочую программу составил доцент кафедры ХТ  Земскова В.Т.

Рецензент : Генеральный директор ООО «Альфасистемы»  Потапов Д.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ХТ  
протокол № 1 от 5.09.2016 года,  
Заведующий кафедрой  Ю.Т.Панов

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии  
направления 18.03.01 Химическая технология  
протокол № 1 от 5.09 2016 года.  
Председатель комиссии  Ю.Т.Панов

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ  
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Программа переутверждена:

на \_\_\_\_\_ учебный год.      Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от  
\_\_\_\_\_ года.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

на \_\_\_\_\_ учебный год.      Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от  
\_\_\_\_\_ года.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

на \_\_\_\_\_ учебный год.      Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от  
\_\_\_\_\_ года.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_