

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тульский государственный университет»

Институт Политехнический
Кафедра «Электро- и нанотехнологии»

Утверждено на заседании кафедры
«Электро- и нанотехнологии»
«11» января 2023 г., протокол № 6

И.о. заведующего кафедрой

 И.В. Гнидина

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
«Моделирование химико-технологических процессов»**

**основной профессиональной образовательной программы
высшего образования – программы бакалавриата**

по направлению подготовки
18.03.01 Химическая технология

с направленностью (профилем)

Технология органического синтеза

Формы обучения: очная

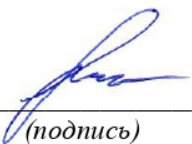
Идентификационный номер образовательной программы: 180301-01-23

Тула 2023 год

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ
рабочей программы дисциплины (модуля)

Разработчик:

Волгин В. М. профессор, д.т.н., профессор
(ФИО, должность, ученая степень, ученое звание)



(подпись)

1 Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

Целью изучения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» является получение студентами теоретических знаний, умений и практических навыков применения методов математического моделирования при анализе и синтезе технологических процессов химической технологии.

Задачами изучения дисциплины являются:

- освоение и приобретение навыков математического моделирования технологических процессов химической технологии;
- применение стандартных пакетов и средств компьютерного моделирования для анализа и синтеза технологических процессов химической технологии.

2 Место дисциплины (модуля) в структуре основной профессиональной образовательной программы

Дисциплина (модуль) относится к обязательной части основной профессиональной образовательной программы.

Дисциплина (модуль) изучается в 6 семестре.

3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы (формируемыми компетенциями) и индикаторами их достижения, установленными в общей характеристике основной профессиональной образовательной программы, приведён ниже.

В результате освоения дисциплины (модуля) обучающийся должен:

Знать:

- 1) основы теории фундаментальных разделов химии; строение и химические свойства простых веществ и химических соединений; механизмы химических реакций, происходящих в химико-технологических процессах, (код компетенции – ОПК-1, код индикатора – ОПК-1.1);
- 2) фундаментальные законы, характеризующие физико-химические процессы химической технологии (код компетенции – ОПК-2, код индикатора – ОПК-2.1);

Уметь:

- 1) систематизировать и анализировать результаты экспериментальных исследований, исследовать механизмы химических реакций; формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных и собственных теоретико-экспериментальных исследований в области химико-технологических процессов (код компетенции – ОПК-1, код индикатора – ОПК-1.2);
- 2) использовать методы математического моделирования физико-химических процессов для решения задач теоретического и прикладного характера; (код компетенции – ОПК-2, код индикатора – ОПК-2.2);

Владеть:

- 1) навыками моделирования различных механизмов химических реакций, протекающих в технологических процессах (код компетенции – ОПК-1, код индикатора – ОПК-1.3);

2) навыками решения задач химической технологии с использованием мультифизического моделирования (код компетенции – ОПК-2, код индикатора – ОПК-2.3).

Полные наименования компетенций и индикаторов их достижения представлены в общей характеристике основной профессиональной образовательной программы.

4 Объем и содержание дисциплины (модуля)

4.1 Объем дисциплины (модуля), объем контактной и самостоятельной работы обучающегося при освоении дисциплины (модуля), формы промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

Номер семестра	Формы промежуточной аттестации	Общий объем в зачетных единицах	Общий объем в академических часах	Объем контактной работы в академических часах						Объем самостоятельной работы в академических часах
				Лекционные занятия	Практические (семинарские) занятия	Лабораторные работы	Клинические практические занятия	Консультации	Промежуточная аттестация	
Очная форма обучения										
6	Э	4	144	32	-	32	-	2	0,25	77,75
Итого	–	4	144	32	-	32	-	2	0,25	77,75

Условные сокращения: Э – экзамен, ЗЧ – зачет, ДЗ – дифференцированный зачет (зачет с оценкой), КП – защита курсового проекта, КР – защита курсовой работы.

4.2 Содержание лекционных занятий

Очная форма обучения

№ п/п	Темы лекционных занятий
6 семестр	
1	Введение. Цель и задачи курса. О моделях и моделировании в науке и технике.
2	Классификация моделей, используемых в технике: материальные модели; абстрактная, теоретическая модель; математическая модель объекта. Инженерно-физические модели в технике. Структурные модели в технике. Геометрические модели в технике. Информационные модели в технике. Уровни и формы представления моделей. Основные свойства моделей: адекватность, точность, практическая ценность и удобство использования.
3	Основные этапы компьютерного моделирования. Типовые задачи компьютерного моделирования: одновариантный анализ (стационарных состояний, переходных процессов, периодических процессов, устойчивости, частотный анализ), многовариантный анализ (статистический, чувствительности), синтез (параметрический, структурный), оптимизация (параметрическая, структурная).
4	Применение методологии системного анализа для решения задач моделирования. Объект моделирования, окружающая среда, входные воздействия и возмущения, состояние системы. Методы построения математических моделей: экспериментальный, теоретический, комбинированный.

№ п/п	Темы лекционных занятий
5	Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов. Формулировка задачи аппроксимации данных для описания экспериментальных зависимостей и получения эмпирических моделей процессов. Виды критериев аппроксимации. Определение вида аппроксимирующей функции. Определение значений параметров эмпирической модели методом наименьших квадратов.
6	Основные положения теории планирования экспериментов: ортогональный центральный композиционный план экспериментов и обработка его результатов. Определение коэффициентов модели, их значимости и оценка адекватности уравнения регрессии.
7	Построение теоретических моделей химико-технологических процессов. Законы сохранения. Фундаментальные законы физико-химических процессов. Описание основных механизмов процессов переноса: диффузия, конвекция, миграция, гомогенные и гетерогенные реакции. Граничные и начальные условия.
8	Построение теоретических моделей химико-технологических процессов. Законы сохранения. Фундаментальные законы физико-химических процессов. Описание основных механизмов процессов переноса: диффузия, конвекция, миграция, гомогенные и гетерогенные реакции. Граничные и начальные условия.
9	Применение комбинированного подхода для построения математических моделей. Основные понятия анализа размерностей, π -теорема. Безразмерные комплексы, определяющие поведение системы. Приведение математической модели к безразмерному виду и определение критериев подобия.
10	Численные методы решения типовых задач моделирования химико-технологических процессов: методы решения систем нелинейных уравнений для реагирующих сред, методы решения краевых задач для систем дифференциальных уравнений для процессов переноса.
11	Математическое моделирование систем с гомогенными и гетерогенными химическими реакциями.
12	Математическое моделирование химико-технологических процессов как системы взаимосвязанных идеальных химических реакторов.
13	Математическое моделирование макрокинетики химических реакторов с учетом конвективно-диффузионного переноса.
14	Мультифизическое моделирование взаимосвязанных процессов тепло- и массопереноса в химических реакторах.
15	Математическое моделирование окислительно-восстановительных проточных батарей.
16	Математическое моделирование систем с гомогенным катализом и автокатализом.
17	Математическое моделирование электромембранных систем.
18	Применение математического моделирования для оптимизации химико-технологических процессов.

4.3 Содержание практических (семинарских) занятий

Очная форма обучения

Занятия указанного типа не предусмотрены основной профессиональной образовательной программой.

4.4 Содержание лабораторных работ

Очная форма обучения

№ п/п	Наименования лабораторных работ
6 семестр	
1	Моделирование кинетики гомогенных химических реакций.
2	Моделирование кинетики гетерогенных химических реакций.
3	Моделирование химико-технологического процесса с использованием модели взаимосвязанных идеальных реакторов.
4	Моделирование гидродинамических процессов в проточном реакторе и определение распределения времени пребывания.
5	Моделирование макрокинетики проточного реактора с гомогенными реакциями в неизотермических условиях.
6	Моделирование макрокинетики проточного реактора с гетерогенными реакциями.
7	Моделирование гомогенного электрокатализа
8	Моделирование процессов переноса в электромембранных системах

4.5 Содержание клинических практических занятий

Занятия указанного типа не предусмотрены основной профессиональной образовательной программой.

4.6 Содержание самостоятельной работы обучающегося

Очная форма обучения

№ п/п	Виды и формы самостоятельной работы
6 семестр	
1	Подготовка к лабораторным работам
2	Подготовка к контрольным работам
3	Подготовка к промежуточной аттестации и ее прохождение

5 Система формирования оценки результатов обучения по дисциплине (модулю) в рамках текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося

Очная форма обучения

Мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося			Максимальное количество баллов
6 семестр			
Текущий контроль успеваемости	Первый рубежный контроль	Оцениваемая учебная деятельность обучающегося:	
		Посещение лекционных занятий	5
		Выполнение лабораторных работ	10
		Контрольная работа № 1	15
		Итого	30
	Второй рубежный контроль	Оцениваемая учебная деятельность обучающегося:	
		Посещение лекционных занятий	5
		Выполнение лабораторных работ	10
		Контрольная работа № 2	15

Мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося			Максимальное количество баллов
		Итого	30
Промежуточная аттестация	Экзамен		40 (100*)

* В случае отказа обучающегося от результатов текущего контроля успеваемости.

Шкала соответствия оценок в стобалльной и академической системах оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Система оценивания результатов обучения	Оценки			
Стобалльная система оценивания	0 – 39	40 – 60	61 – 80	81 – 100
Академическая система оценивания (экзамен, дифференцированный зачет, защита курсового проекта, защита курсовой работы)	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Академическая система оценивания (зачет)	Не зачтено	Зачтено		

6 Описание материально-технической базы (включая оборудование и технические средства обучения), необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю) требуется:

- для проведения лекционных занятий требуется учебная аудитория, оборудованная доской для написания мелом, а также компьютером (или ноутбуком), видеопроектором, настенным экраном;
- для проведения лабораторных работ требуется компьютерный класс.

7 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

7.1 Основная литература

1. Голубева, Н. В. Математическое моделирование систем и процессов : учебное пособие / Н. В. Голубева. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 192 с. — ISBN 978-5-8114-1424-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/76825>. — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Гумеров, А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс] / Гумеров А. М. 2-е изд., перераб. Санкт-Петербург : Лань, 2022. 176 с. ISBN 978-5-8114-1533-5.

3. Евдокимов, А. Н. Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели) : учебное пособие / А. Н. Евдокимов, А. В. Курзин. Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели), 2031-02-04. Санкт-Петербург : Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, 2018. 106 с. ISBN 2227-8397.

4. Заварухин, С. Г. Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов : учебное пособие / С. Г. Заварухин. Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов, 2025-02-05. Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2017. 86 с. ISBN 978-5-7782-3284-6.

5. Теплофизика. Неравновесные процессы тепломассопереноса : учебное пособие / В. И. Байков, Н. В. Павлюкевич, А. К. Федотов, А. И. Шнип. — Минск : Вышэйшая школа, 2018. — 480 с. — ISBN 978-985-06-2941-8. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/90838.html>. — Режим доступа: для авторизир. пользователей

7.2 Дополнительная литература

1. Шимова, Ю. С. Моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие / Ю. С. Шимова, Н. Ю. Демиденко, Е. В. Лис. Моделирование химико-технологических процессов, 2026-11-18. Красноярск : Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, 2021. 94 с. ISBN 978-5-86433-860-5.

2. Ашихмин, В. Н. Введение в математическое моделирование : учебное пособие / В. Н. Ашихмин, М. Б. Гитман, И. Э. Келлер. — Москва : Логос, 2004. — 439 с. — ISBN 5-94010-272-7. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/9063.html>. — Режим доступа: для авторизир. пользователей.

8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. <https://tsutula.bookonlime.ru/> - ЭБС ТулГУ «BookOnLime» учебные издания ТулГУ по всем дисциплинам, доступ авторизованный.

2. <https://e.lanbook.com/> - ЭБС «Лань», доступ авторизованный.

3. <https://www.iprbookshop.ru/> - Цифровой образовательный ресурс IPR SMART, доступ авторизованный

4. <https://cyberleninka.ru/> - Научная электронная библиотека «КиберЛенинка» , доступ свободный

5. <https://www.elibrary.ru/> - Научная электронная библиотека eLibrary.ru, доступ свободный

6. <https://urait.ru/> - Образовательная платформа «Юрайт», доступ авторизованный

9 Перечень информационных технологий, необходимых для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

9.1 Перечень необходимого ежегодно обновляемого лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

1. Программный пакет для анализа COMSOL Multiphysics.

2. Пакет прикладных математических программ Scilab.

3. Adobe Reader .

4. Пакет офисных приложений «МойОфис»

9.2 Перечень необходимых современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1. Справочная правовая система «КонсультантПлюс».