

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «МГТУ»)

Кафедра химии

**Методические указания  
к самостоятельной работе студентов**

по дисциплине **Б1.В.02.ДВ.01.02 Основы оптимизации химических процессов**

для направления подготовки (специальности)

04.04.01 Химия

Профиль Физическая и коллоидная химия

Квалификация выпускника, уровень подготовки магистр

Форма обучения: очная

Составитель – Воронько Н.Г. доцент кафедры химии, к.т.н.

Методические указания к самостоятельной работе рассмотрены и одобрены на заседании кафедры-разработчика

---

Химии

название кафедры

24.06.2019 протокол № 12.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Общие организационно-методические указания.....3
2. Тематический план.....3
3. Список рекомендуемой литературы.....4
4. Содержание и методические указания к изучению тем дисциплины.....5

## 1. ОБЩИЕ ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Методические указания разработаны в соответствии с ФГОС ВО для направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденным приказом № 655 от 13 июля 2017 г. и УП, утвержденным Ученым советом МГТУ (Протокол № 7 от 28.02.2019), а также рабочей программой по дисциплине «Основы оптимизации химических процессов», утвержденной на заседании кафедры химии МГТУ.

Минимум содержания дисциплины «Основы оптимизации химических процессов» для самостоятельной работы составляет 26 часов: «Основные понятия и принципы моделирования и оптимизации моделей. Классификация математических моделей химических процессов. Численные методы. Кинетические модели процессов химической технологии и их оптимизация. Численные методы решения дифференциальных уравнений. Математические модели гидродинамики и их оптимизация. Математические модели теплообменных процессов и их оптимизация. Математические модели процессов кристаллизации и их оптимизация. Математические модели массообменных процессов в системах «жидкость–пар» и их оптимизация. Статистические модели химических процессов и их оптимизация».

В результате освоения программы дисциплины «Основы оптимизации химических процессов» магистр должен:

**знать:**

- основы моделирования химических процессов и оптимизации моделей;
- методы реализации математических моделей на ЭВМ;

**уметь:**

- применять существующее программное обеспечение для решения химико-технологических задач;

**владеть:**

- навыками построения математических моделей химических процессов;
- навыками составления программ, моделирующих химические процессы.

Процесс изучения дисциплины «Основы оптимизации химических процессов» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО для направления подготовки 04.04.01 Химия:

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции
1	<b>ПК-1-н.</b>	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках
2	<b>ПК-3-н.</b>	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках

Целью дисциплины «Основы оптимизации химических процессов» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой магистра и учебным планом направления 04.04.01 Химия, что предполагает освоение обучающимися теоретических знаний и приобретения практических навыков в области планирования эксперимента и обработки результатов.

Задачи дисциплины:

- дать необходимые теоретические знания, практические умения и навыки по основам планирования эксперимента и обработки результатов, позволяющие успешно использовать их в профессиональной деятельности.

## 2. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№ п/п	Наименование тем и содержание самостоятельной работы	Кол-во часов
1.	<b>Введение.</b> <b>Основные понятия и принципы моделирования и оптимизации моделей</b> Основные понятия и принципы моделирования. Физическое и математическое моделирование, достоинства и недостатки различных методов моделирования химических процессов.	1
2.	<b>Классификация математических моделей химических процессов</b> Классификация математических моделей, детерминированные и статистические модели химических процессов. Схема разработки математического описания химических процессов.	2
3.	<b>Численные методы</b> Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений. Численные методы интегрирования.	2
4.	<b>Кинетические модели процессов химической технологии и их оптимизация</b> Кинетические модели процессов химической технологии, схема построения кинетических моделей. Методы расчета констант скоростей в уравнениях кинетики.	3
5.	<b>Численные методы решения дифференциальных уравнений</b> Численные методы решения дифференциальных уравнений, алгоритмы решения систем дифференциальных уравнений на ЭВМ.	3
6.	<b>Математические модели гидродинамики и их оптимизация</b> Математические модели гидродинамики в реакторах различных типов. Математическое описание зон идеального перемешивания, идеального вытеснения. Ячеечная и диффузионная модели гидродинамики.	3
7.	<b>Математические модели теплообменных процессов и их оптимизация</b> Математическое описание теплообменных процессов в аппаратах. Модель теплообмена в теплообменниках смешения, в трубчатых теплообменниках, в аппаратах комбинированного типа.	3
8.	<b>Математические модели процессов кристаллизации и их оптимизация</b> Математические модели процессов кристаллизации. Описание равновесия и кинетики процесса кристаллизации в политермическом режиме. Математическое описание кривых распределения кристаллов по размерам. Модель вакуум-кристаллизации хлорида калия.	3
9.	<b>Математические модели массообменных процессов в системах «жидкость – пар» и их оптимизация</b> Математическое описание процесса абсорбции. Моделирование процесса абсорбции хлористого водорода. Математическое описание процесса ректификации.	3
10.	<b>Статистические модели химических процессов и их оптимизация</b> Статистические модели химических процессов, способы их разработки. Регрессионный анализ, оценка адекватности уравнений регрессии. Принципы математического планирования эксперимента. Методы оптимизации химических процессов.	3

Всего:

26 ч.

## 3. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

**Основная литература:**

1. **Воронько, Н. Г.** Математические методы расчётов химических процессов / Н. Г. Воронько. – Мурманск. : Изд-во МГТУ, 2015. – 171 с.

**Дополнительная литература:**

2. **Воронько, Н. Г.** Сборник расчётно-графических заданий и задач по коллоидной химии / Н. Г. Воронько. – Мурманск : Изд-во МГТУ, 2009. – 142 с.
3. **Краткий справочник физико-химических величин** / под ред. А. А. Равделя, А. М. Пономарёвой. – 10-е изд., испр. и доп. – СПб. : «Иван Фёдоров», 2002. – 240 с.
4. **Расчёты и задачи по коллоидной химии:** учебное пособие для химико-технологических специальностей вузов / под ред. В. И. Барановой. – М. : Высшая школа, 1989. – 288 с.

4. СОДЕРЖАНИЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ  
К ИЗУЧЕНИЮ ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Необходимо обратить внимание на следующие вопросы:

№	Вопрос
1.	Как осуществляется умножение матрица $A$ на матрицу $B$ ? В каком случае такая операция возможна? Приведите примеры.
2.	Какими свойствами обладают операции умножения матриц? Что такое перестановочные матрицы?
3.	Как осуществляется разложение детерминанта квадратной матрицы $n$ -го порядка по элементам $i$ -й строки и $j$ -го столбца? Что такое адьюнкта и дополнительный минор к элементу $a_{ij}$ ? Приведите примеры.
4.	Что такое обратная матрица $A^{-1}$ по отношению к данной матрице $A$ ? Сформулируйте теорему о существовании обратной матрицы.
5.	Для чего применяют матричную запись кинетики сложных реакций? Что такое стехиометрическая матрица и молекулярная матрица реакции? Чему равно их произведение?
6.	Как найти решение СЛАУ, используя правило Крамера?
7.	Как найти решение СЛАУ через обратную матрицу СЛАУ?
8.	В чём сущность метода исключения Гаусса? Что такое расширенная матрица СЛАУ и треугольная матрица? Как можно применить метод Гаусса к вычислению детерминантов?
9.	Сформулируйте теоремы об инвариантности ранга матрицы и о ранге треугольной матрицы. Как их можно применить для определения числа линейно независимых стадий сложной реакции?
10.	Что такое разрывная функция, кусочно-непрерывная функция, разрыв 1-го рода, разрыв 2-го рода, устранимый разрыв? Приведите примеры термодинамических функций с конечным и бесконечным разрывом.
11.	Что такое производная от функции $f(x)$ в точке $x$ , дифференциал $x$ , дифференцирование $f(x)$ ? Объясните физический и геометрический смысл производной функции на примере графической зависимости концентрации продукта от времени протекания химической реакции.
12.	Как рассчитываются производные: суммы функций $(u \pm v)'$ , произведения функций $(uv)'$ и отношения функций $\left(\frac{u}{v}\right)'$ ? Приведите примеры.
13.	Как рассчитываются производные сложных функций $F(x) = f[\varphi(x)]$ и $F(x) = f\{\varphi[\psi(x)]\}$ ? Приведите примеры.

14.	Как осуществляется разложение функции в степенные ряды Маклорена и Тейлора? Объясните геометрический смысл ряда Тейлора на примере седиментационной кривой полидисперсной системы.
15.	Приведите биномиальную формулу Ньютона для разложения в степенной ряд функций $(y + x)^m$ и $(1 + x)^m$ . Что происходит при $m \in \mathbb{N}$ ? Что такое биномиальное распределение?
16.	Как используется разложение функции в степенной ряд при выводе зависимости повышения температуры кипения раствора от молярной доли растворённого вещества?
17.	Что такое стационарная точка функции $f(x)$ ? Сформулируйте правила исследования стационарных точек.
18.	Что такое первообразная функции $f(x)$ ? Сформулируйте теорему об общем виде первообразной.
19.	Что такое неопределённый интеграл, подинтегральная функция, подинтегральное выражение? Объясните физический смысл понятия интеграла на примере процесса изотермического расширения газа.
20.	Как связаны между собой операции интегрирования и дифференцирования? Объясните геометрический смысл интегрирования. Что такое интегральная линия функции $f(x)$ ?
21.	В чём заключается метод интегрирования через вспомогательную переменную? Объясните на примере вывода уравнения Шишковского.
22.	Напишите формулу Ньютона–Лейбница. Сформулируйте и докажите теорему Барроу.
23.	Что такое определённый интеграл? Как найти численное значение определённого интеграла по графику интегрируемой функции? Что такое определённый интеграл? Как найти численное значение определённого интеграла по графику интегрируемой функции?
24.	Что такое дифференциальное уравнение (ДУ), обыкновенные ДУ, порядок ДУ? Напишите уравнения Липпмана как примеры ДУ 1-го и 2-го порядка.
25.	Объясните, как решить задачу Коши на примере дифференциального уравнения Кирхгофа и дифференциальных уравнений простых односторонних реакций 1-го 2-го и $n$ -го порядков.