

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Директор Естественно-технологического
института



подпись

Петрова Л. А.

" 26 "

06

2019 год

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

Дисциплина Б1.В.03.01 Математические методы расчетов химических процессов
код и наименование дисциплины

Направление подготовки / специальность 04.04.01 Химия
код и наименование направления подготовки / специальности

Направленность / специализация Физическая и коллоидная химия
наименование направленности (профиля) / специализации образовательной программы

Квалификация выпускника Магистр
указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО

Кафедра-разработчик Химии
название кафедры-разработчика рабочей программы

Мурманск
2019

Лист согласования

1 Разработчик(и)

Часть 1	<u>доцент</u> должность	<u>Химии</u> кафедра	 подпись	<u>Воронько Н. Г.</u> Ф.И.О
Часть 2	должность	кафедра	подпись	Ф.И.О
Часть 3	должность	кафедра	подпись	Ф.И.О

2. Рассмотрена и одобрена на заседании кафедры-разработчика рабочей программы

<u>Химии</u> наименование кафедры	<u>24.06.2019</u> дата	
протокол № <u>12</u>	 подпись	<u>Деркач С. Р.</u> Ф.И.О. заведующего кафедрой-разработчика

Лист изменений и дополнений, вносимых в РП

к рабочей программе по дисциплине **Б1.В.03.01 Математические методы расчетов химических процессов**, входящей в состав ОПОП по направлению (профилю) подготовки 04.04.01 Химия, направленности Физическая и коллоидная химия, с 2020 года начала подготовки

Таблица 1 Изменения и дополнения

№ п/п	Дополнение или изменение, вносимое в рабочую программу в части	Содержание дополнения или изменения	Основание для внесения дополнения или изменения	Дата внесения дополнения или изменения
1	Титульного листа	Переименование ФГБОУ ВО «МГТУ» в ФGAOУ ВО «МГТУ»	1) Приказ Минобрнауки России № 854 от 31.07.2020 2) Утверждение изменения в компоненты ОПОП Ученым Советом МГТУ (Протокол № 5 от 30.10.2020)	30.10.2020 г.

Аннотация рабочей программы дисциплины

Коды циклов дисциплин, модулей, практик	Название циклов, разделов, дисциплин, модулей, практик	Краткое содержание (Цель, задачи, содержание разделов дисциплины, реализуемые компетенции, формы промежуточного контроля, формы отчетности)
1	2	3
Б1	Дисциплины (модули)	
Б1.В	Вариативная часть	
Б1.В.03.01	Математические методы расчётов химических процессов	<p>Цель дисциплины – подготовка магистров в соответствии с квалификационной характеристикой магистра и учебным планом направления 04.04.01 Химия.</p> <p>Задачи дисциплины – дать необходимые теоретические знания, практические умения и навыки по основам математических методов расчётов химических процессов, позволяющие успешно использовать их в профессиональной деятельности.</p> <p><u>В результате изучения дисциплины обучающийся должен:</u></p> <p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> – основы математического аппарата современной химии, необходимые для решения вопросов, связанных с практической деятельностью; – основы математического моделирования физико-химических процессов; – методы реализации математических моделей физико-химических процессов на ЭВМ; <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> – использовать математические методы в химических исследованиях; – применить существующее программное обеспечение для решения физико-химических задач; <p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> – навыками построения математических моделей простейших физико-химических процессов; – навыками составления программ, моделирующих физико-химические процессы. <p><u>Содержание разделов дисциплины:</u> линейные алгебраические системы, векторы, элементы исследования функции одной переменной, интегралы, дифференцирование функций нескольких переменных, метод наименьших квадратов, обыкновенные дифференциальные уравнения, ряды, элементы теории вероятностей и математической статистики</p> <p>Реализуемые компетенции: УК-1; ПК-1-н</p> <p>Формы отчётности 2 семестр – экзамен</p>

Пояснительная записка

1. Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО по направлению подготовки/ (специальности) 04.04.01 Химия

(код и наименование направления подготовки /специальности)

утвержденного 13 июля 2017 г. № 655 учебного плана
дата, номер приказа Минобрнауки РФ

в составе ОПОП по направлению подготовки/специальности 04.04.01 Химия, направленности (профилю)/специализации Физическая и коллоидная химия, 2019 года начала подготовки.

2. Цели и задачи учебной дисциплины.

Целью дисциплины «Математические методы расчётов 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 математических методов расчётов химических процессов.

Задачи дисциплины:

– дать необходимые теоретические знания, практические умения и навыки по основам математических методов расчётов химических процессов, позволяющие успешно использовать их в профессиональной деятельности.

3. Планируемые результаты обучения в рамках данной дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки/специальности 04.04.01 Химия:

Таблица 2. - Результаты обучения

№ п/п	Код и содержание компетенции	Степень реализации компетенции	Этапы формирования компетенции (Индикаторы сформированности компетенций)
1.	ПК-1-н. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Компетенция реализуется полностью	ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
2.	УК-1. Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	Компетенция реализуется полностью	УК-1.1. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними УК-1.2. Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению УК-1.3. Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников УК-1.4. Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов УК-1.5. Использует логико-методологический инструментарий для критической оценки современных концепций философского и социального характера в своей предметной области

**4. Структура и содержание учебной дисциплины
«Математические методы расчётов химических процессов»**

Таблица 3 – Распределение учебного времени дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часов.

Вид учебной нагрузки	Распределение трудоемкости дисциплины по формам обучения										
	Очная			Очно-заочная				Заочная			
	Семестр		Всего часов	Семестр		Всего часов	Семестр/Курс		Всего часов		
	2										
Лекции	28			28							
Практические работы	28			28							
Лабораторные работы	–			–							
Контактная работа	56			56							
Самостоятельная работа	52			52							
Выполнение курсовой работы (проекта)	–			–							
Подготовка к промежуточной аттестации	36			36							
Всего часов по дисциплине	144			144							

Формы промежуточной аттестации и текущего контроля

Экзамен	+										
Зачет/зачет оценкой	с –/–										
Курсовая работа (проект)	–										
Количество расчетно-графических работ	–										
Количество контрольных работ	2										
Количество рефератов	–										
Количество эссе	–										

Таблица 4–Содержание разделов дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов», виды работы

№ п/п	Содержание разделов (модулей), тем дисциплины	Количество часов, выделяемых на виды учебной подготовки по формам обучения			
		Л	ПР	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6
1.	1. Линейные алгебраические системы Матрицы, действия над матрицами. Детерминант (определитель), его свойства. Системы линейных алгебраических уравнений. Метод Гаусса. Однородные линейные системы. Расчёт смесей сложного состава. Определение состава смеси по данным спектрофотометрических измерений. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Анализ размерностей.	4	4	–	6
2.	2. Векторы Обозначение и виды векторов. Действия над векторами. Законы векторной алгебры. Координатные формулы. Скалярное, векторное и смешанное произведение. Плоскость. Прямая. Момент силы. Координаты центра масс активированного комплекса. Расчёт расстояний в пространственных решётках.	2	2	–	5
3.	3. Элементы исследования функции одной переменной Определение функции. Непрерывность функции. Погрешность вычисления функции одной переменной. Линейная аппроксимация. Правило Лопиталья–Бернулли. Исследование функции. Правила исследования стационарных точек. Построение линии равновесия. Уравнение линии рабочих концентраций в процессе массопередачи. Максимум скорости реакции. Автокаталитические реакции. Уравнение Аррениуса. Приближённое решение конечных уравнений. Химические системы, описываемые нелинейными уравнениями.	4	4	–	6
4.	4. Интегралы Неопределённый интеграл. Теорема об общем виде первообразной. Неопределённые интегралы основных элементарных функций. Определённый интеграл. Несобственные интегралы. Простейшие дифференциальные уравнения. Теплота, расходуемая на нагревание образца. Температура водородного пламени. Закон Бугера–Ламберта–Бера. Скорость ламинарного течения жидкости. Закон Пуазейля. Инверсия сахаров. Определение размера частиц по скорости седиментации. Простая перегонка. Измерение излучения точечного источника радиоактивности. Регулирование кислотности среды в химическом реакторе.	4	4	–	6
5.	5. Дифференцирование функций нескольких переменных Функция двух переменных. Дифференцирование композиции. Частные производные высших порядков. Локальный экстремум функции двух переменных. Функции многих переменных. Дифференцирование композиции. Дифференцирование вектор-функций скалярных аргументов. Скалярное поле. Градиент. Векторное поле. Описание процесса многоступенчатой экстракции. Экстракция уксусной кислоты.	2	2	–	6

6.	6. Метод наименьших квадратов Случай линейной функциональной зависимости. Случай нелинейной функциональной зависимости. Определение Аррениусовых параметров. Определение гидратного числа для карбоновой кислоты.	2	2	–	5
7.	7. Обыкновенные дифференциальные уравнения Дифференциальные уравнения первого порядка. Уравнение в полных дифференциалах. Линейное уравнение. Однородное уравнение относительно искомой функции y и аргумента x . Дифференциальные уравнения второго порядка. Линейные однородные системы дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Радиоактивный распад. Среднее время жизни возбуждённого состояния молекулы. Определение порядка реакции. Средняя скорость реакции. Кинетика коагуляции. Седиментация частиц в жидкости. Линейные осцилляторы. Кинетика химической реакции в условиях диффузии. Необратимые и обратимые реакции первого порядка. Последовательные реакции. Последовательно-параллельные реакции первого порядка.	4	4	–	6
8.	8. Ряды Числовые ряды. Знакоположительные ряды. Знакопеременные ряды. Степенные ряды. Вычисление радиуса сходимости. Ряды Фурье. Интеграл Фурье. Преобразование Фурье. Отмывка полимера. Фильтрация в цилиндрических фильтрах. Перенос тепла через стенку реактора. Фурье-спектроскопия. Выявление скрытых периодичностей.	2	2	–	6
9.	9. Элементы теории вероятностей и математической статистики Некоторые элементы комбинаторики. Основные понятия теории вероятностей. Геометрическая интерпретация вероятности. Распределение частиц по ячейкам. Теоремы умножения и сложения вероятностей. Законы распределения и числовые характеристики случайных величин. Вероятностная модель задачи о примеси. Число частиц заданного размера. Эмпирическая функция распределения. Выборочное среднее. Выборочная дисперсия. Исправленная выборочная дисперсия. Распределения Пирсона и Стьюдента. Доверительный интервал. Доверительная вероятность. Распределение Фишера–Снедекора. Выбраковка результатов химического анализа. Статистическая проверка статистических гипотез. Построение доверительного интервала для регрессионной прямой.	4	4	–	6
	Итого по курсу «Математические методы расчётов химических процессов»:	28	28	–	52

Таблица 5 – Соответствие компетенций, формируемых при изучении дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов», и видов занятий с учетом форм контроля

Перечень компетенций	Виды занятий								Формы контроля
	Л	ЛР	ПР	КР/КП	РГР	к/р	э	СР	
ПК-1-н	+		+			+		+	Отчет по практической работе Выполнение к/р Устное собеседование по темам СР
УК-1	+		+			+		+	

Примечание: Л – лекции, ЛР – лабораторные работы, ПР – практические работы, КР/КП – курсовая работа (проект), РГР – расчётно-графическая работа, к/р – контрольная работа, э – эссе, СР – самостоятельная работа

Таблица 6 – Перечень лабораторных работ

Не предусмотрено

Таблица 7 – Перечень практических работ

№ п/п	Наименование практических работ	Кол-во часов	№ темы по табл. 1
1.	Расчёт смесей сложного состава	2	1
2.	Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров	2	1
3.	Расчёт координат центра масс активированного комплекса	1	2
4.	Расчёт расстояний в пространственных решётках	1	2
5.	Расчёт точки максимума скорости реакции. Уравнение Аррениуса.	2	3
6.	Описание сложных равновесий в химических системах	2	3
7.	Расчёт ламинарного течения жидкости	1	4
8.	Определение размера частиц по скорости седиментации в гравитационном и центробежном полях	2	4
9.	Математическое описание простой перегонки	1	4
10.	Расчёт многоступенчатой экстракции уксусной кислоты	2	5
11.	Определение зависимости константы скорости реакции от абсолютной температуры	2	6
12.	Определение порядка и средней скорости реакции	1	7
13.	Кинетика коагуляции. Определение зависимости концентрации золя от времени	1	7
14.	Построение математической модели конвективной диффузии, сопровождающейся химической реакцией	2	7
15.	Расчёт процесса фильтрования в цилиндрических фильтрах	1	8
16.	Расчёт теплопереноса через стенку реактора	1	8
17.	Вероятностная модель кинетики перемешивания	2	9
18.	Выборка результатов химического анализа	2	9
	Итого	28	

5. Перечень контрольных работ

№ п/п	Наименование и содержание контрольной работы	№ темы по табл. 1
1.	КР 1. Линейная алгебра. Дифференциальное исчисление	1, 3, 5
2.	КР 2. Интегральное исчисление	4, 7, 8

Перечень тем курсовой работы (проекта)

Не предусмотрено

Перечень примерных тем рефератов

Не предусмотрено

Перечень примерных тем курсовой работы /проекта

Не предусмотрено

Перечень расчётно-графических работ (РГР)

Не предусмотрено

6. Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов»:

1. Методические указания к практическим занятиям
2. Методические указания к самостоятельной работе

3. Методические указания к выполнению контрольной работы

7. Фонд оценочных средств

Фонд оценочных средств является компонентом ОП, разрабатывается в форме отдельного документа и включает в себя критерии оценивания сформированности компетенций на различных этапах их формирования и процедуры оценивания.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература

№ п\п	Библиографическое описание* (название литературного источника)	Наличие		
		Электронно-библиотечная система (ЭБС)	Библиотека МГТУ (печатное издание)	Количество экземпляров печатного издания
1.	Воронько, Н. Г. Математические методы расчётов химических процессов / Н. Г. Воронько. – Мурманск. : Изд-во МГТУ, 2015. – 171 с.	–	+	50

Дополнительная литература

№ п\п	Библиографическое описание* (название литературного источника)	Наличие		
		Электронно-библиотечная система (ЭБС)	Библиотека МГТУ (печатное издание)	Количество экземпляров печатного издания
1.	Воронько, Н. Г. Сборник расчётно-графических заданий и задач по коллоидной химии / Н. Г. Воронько. – Мурманск : Изд-во МГТУ, 2009. – 142 с.	–	+	66
2.	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. (29 экз.)	–	+	29
3.	Расчёты и задачи по коллоидной химии: учебное пособие для химико-технологических специальностей вузов / под ред. В. И. Барановой. – М. : Высшая школа, 1989. – 288 с.	–	+	88

9. Перечень ресурсов информационно - телекоммуникационной сети «Интернет»

<http://нэб.рф/>
<http://ito.edu.ru/>
<http://chemexpress.fatal.ru>
<http://www.xumuk.ru>
<http://e.lanbook.com/>
<http://www.chemport.ru>
<http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
<http://www.studentlibrary.ru/>

10. Перечень программного обеспечения, профессиональных баз данных и информационных справочных систем, реквизиты подтверждающего документа

1. Операционная система Microsoft Windows Vista Business Russian Academic OPEN, лицензия № 44335756 от 29.07.2008 (договор №32/379 от 14.07.08 г.)
2. Офисный пакет Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN, лицензия № 47233444 от 30.07.2010 (договор 32/285 от 27.07.2010 г.)
3. Система оптического распознавания текста ABBYY FineReader Corporate 9.0 (сетевая версия), 2009 год (договор ЛЦ-080000510 от 28 апреля 2009 г.)

4. Антивирус Dr.Web Desktop Security Suite (комплексная защита), антивирус Dr.Web Server Security Suite (серверный) (договор №7689 от 23.07.2018, договор №7236 от 03.11.2017, договор №810-000046 от 26.06.2017)

11. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Математические методы расчетов химических процессов»

Таблица 8 – Материально-техническое обеспечение дисциплины

№ п./п.	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
1.	<p>500 Л Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, практических работ, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной аттестации. г. Мурманск, просп. Кирова, д. 1 (корпус «Л»)</p>	<p>Укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления информации аудитории: проекционное оборудование: Мультимедиа-проектор Toshiba TLP-X2500a Ноутбук Asus X553MA 15.6",N3530,4G,500G,DVDRW Настенный проекционный экран Digis Optimal-B, формат 3:4, 120x160 см DSOB-4301 Посадочных мест – 32</p>
2.	<p>406Л Помещение для самостоятельной работы г. Мурманск, просп. Кирова, д. 1 (корпус «Л»)</p>	<p>Аудитория укомплектована специализированной мебелью и компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета</p>
3.	<p>Аудитория 502Л Помещение для хранения и профилактического обслуживания оборудования г. Мурманск, просп. Кирова, д. 1 (корпус «Л»)</p>	<p>Помещение оснащено мебелью для хранения оборудования</p>

**Таблица 9 – Технологическая карта дисциплины
(промежуточная аттестация – «экзамен»); 2 семестр)
Дисциплина: «Математические методы расчётов химических процессов»**

№	Контрольные точки	Зачетное количество баллов		График прохождения (неделя сдачи)
		min	max	
Текущий контроль				
1.	Посещение лекций (14 лекций) Нет посещений – 0 баллов, (5 лекций) 30 % - 20 баллов; (10 лекций) 60% - 25 баллов; (14 лекций) 100 % - 30 баллов	20	30	17-ая неделя
2.	Выполнение практических работ (18 п.р.) Выполнение одной п.р. в срок – 1,7 балла; не в срок – 1,1 балла.	20	30	По расписанию
3.	Выполнение контрольных работ (2 к.р.) 1 к.р. – 20 баллов, 2 к.р. – 40 баллов	20	40	10, 17-ая неделя
ИТОГО за работу в семестре		60	100	17-ая неделя
Промежуточная аттестация				
	Экзамен Оценка «5» - 20 баллов, Оценка «4» - 15 баллов, Оценка «3» - 10 баллов	10	20	Сессия
ИТОГОВЫЕ БАЛЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ		60	100	
<p>Итоговая оценка определяется по итоговым баллам за дисциплину и складывается из баллов, набранных в ходе текущего контроля (итога за работу в семестре) и промежуточной аттестации (экзамен)</p> <p>Шкала баллов для определения итоговой оценки: 91 - 100 баллов - оценка «5», 81-90 баллов - оценка «4», 70- 80 баллов - оценка «3», 69 и менее баллов - оценка «2»</p> <p>Итоговая оценка проставляется в экзаменационную ведомость и зачетку обучающегося.</p>				

Таблица 10 – Ведомость для фиксирования результатов текущего контроля (промежуточная аттестация – экзамен)

ФИО	Количество баллов			Итого (60-100 баллов)
	Посещение лекций (20 – 30 балла)	Выполнение практических работ (20 - 30 баллов)	Выполнение контрольных работ – 2 (20 - 40 баллов)	