

Компонент ОПОП 04.04.01 Химия  
наименование ОПОП

Б1.В.03.01  
шифр дисциплины

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

Дисциплины  
(модуля)

Математические методы расчетов химических процессов

Разработчик :

Воронько Н.Г.

ФИО

доцент кафедры химии

должность

доктор хим. наук, доцент

ученая степень,

звание

Утверждено на заседании кафедры

химии

наименование кафедры

протокол № 6 от 16.02.2024

Заведующий кафедрой химии



подпись

Дякина Т.А.

ФИО

Мурманск  
2024

### Пояснительная записка

Объем дисциплины 4 з.е.

1. **Результаты обучения по дисциплине**, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций, установленными образовательной программой

Компетенции	Индикаторы достижения компетенций	Результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p><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</p>	<p><b>ПК-1-н-1.</b> Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий <b>ПК-1-н-2.</b> Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</p>	<p><b>Знать:</b> основы математического аппарата современной химии, необходимые для решения вопросов, связанных с практической деятельностью; основы математического моделирования физико-химических процессов. <b>Уметь:</b> использовать математические методы в химических исследованиях. <b>Владеть:</b> навыками построения математических моделей простейших физико-химических процессов.</p>
<p><b>УК-1.</b> Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий</p>	<p><b>УК-1.1.</b> Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними <b>УК-1.2.</b> Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению <b>УК-1.3.</b> Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников <b>УК-1.4.</b> Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов <b>УК-1.5.</b> Использует логико-методологический инструментарий для критической оценки современных концепций философского и социального характера в своей предметной области</p>	<p><b>Знать:</b> методы реализации математических моделей физико-химических процессов на ЭВМ. <b>Уметь:</b> применить существующее программное обеспечение для решения физико-химических задач. <b>Владеть:</b> навыками составления программ, моделирующих физико-химические процессы.</p>

## 2. Содержание дисциплины

### **Тема 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.

### **Тема 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.

### **Тема 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.

### **Тема 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.

### **Тема 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.

### **Тема 6. Метод наименьших квадратов**

Случай линейной функциональной зависимости. Случай нелинейной функциональной зависимости. Определение Аррениусовых параметров. Определение гидратного числа для карбоновой кислоты.

### **Тема 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.

### **Тема 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.

### **Тема 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.

### **3. Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины**

- мультимедийные презентационные материалы по дисциплине «Математические методы расчетов химических процессов» представлены в электронном курсе в ЭИОС МАУ;

- методические указания к выполнению лабораторных работ, контрольной работы представлены в электронном курсе в ЭИОС МАУ;

- методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины представлены на официальном сайте МАУ в разделе «Информация по образовательным программам, в том числе адаптированным».

### **4. Фонд оценочных средств по дисциплине**

Фонд оценочных средств (ФОС) является отдельным компонентом образовательной программы, разработан в форме отдельного документа, представлен на официальном сайте МАУ в разделе «Информация по образовательным программам, в том числе адаптированным». ФОС включает в себя:

- перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения дисциплины;

- задания текущего контроля;

- задания промежуточной аттестации;

- задания внутренней оценки качества образования.

**5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы** (печатные издания, электронные учебные издания и (или) ресурсы электронно-библиотечных систем)

#### **Основная литература**

- 1. Воронько, Н. Г.** Математические методы расчётов химических процессов / Н. Г. Воронько. – Мурманск. : Изд-во МГТУ, 2015. – 171 с. (Библиотека МГТУ – 50 экз.)
- 2. Дёрффель, К.** Статистика в аналитической химии / К. Дёрффель. – М. : Мир, 1994. – 268 с. (Библиотека МГТУ – 2 экз.)

### Дополнительная литература

3. **Воронько, Н. Г.** Сборник расчётно-графических заданий и задач по коллоидной химии / Н. Г. Воронько. – Мурманск : Изд-во МГТУ, 2009. – 142 с. (Библиотека МГТУ – 66 экз.)
4. **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. (Библиотека МГТУ – 29 экз.)
5. **Расчёты и задачи по коллоидной химии:** учебное пособие для химико-технологических специальностей вузов / под ред. В. И. Барановой. – М. : Высшая школа, 1989. – 288 с. (Библиотека МГТУ – 88 экз.)

### 6. Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- 1) Государственная система правовой информации - официальный интернет-портал правовой информации- URL: <http://pravo.gov.ru>
- 2) Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» - URL: <http://window.edu.ru>
- 3) Справочно-правовая система. Консультант Плюс - URL: <http://www.consultant.ru/>
- 4) Электронно-библиотечная система «Издательства «ЛАНЬ» <http://e.lanbook>
- 5) Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» <http://bibli>
- 6) Электронно-библиотечная система «Консультант студента» <http://www.studentlibrary.ru/>

Материалы, находящиеся в свободном доступе на следующих сайтах:

- <http://chemexpress.fatal.ru>
- <http://www.xumuk.ru>
- <http://wikipedia.ru>
- <http://www.chemport.ru>
- <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>

### 7. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

- 1) *Офисный пакет Microsoft Office 2007*
- 2) *Система оптического распознавания текста ABBYY FineReader*
- 3) . Офисный пакет Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN, лицензия № 47233444 от 30.07.2010 (договор 32/285 от 27.07.2010 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)

### 8. Обеспечение освоения дисциплины лиц с инвалидностью и ОВЗ

Обучающиеся из числа инвалидов и лиц с ОВЗ обеспечиваются печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

**9. Материально-техническое обеспечение дисциплины** представлено в приложении к ОПОП «Материально-технические условия реализации образовательной программы» и включает:

- учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных программой магистратуры, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения;

- помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа к электронной информационно-образовательной среде МАУ.

## 10. Распределение трудоемкости по видам учебной деятельности

Таблица 1 - Распределение трудоемкости

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

### Перечень практических работ

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

### Перечень контрольных работ

№ п/п	Темы контрольных работ
<b>Очная форма</b>	
1.	<b>КР 1.</b> Линейная алгебра. Дифференциальное исчисление
2.	<b>КР 2.</b> Интегральное исчисление