

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

АПАТИТСКИЙ ФИЛИАЛ

**Методические указания к выполнению практических работ**

По дисциплине: Б.1.В.03.ДВ.04.02 Моделирование химических процессов  
указывается цикл (раздел) ОП, к которому относится дисциплина, название дисциплины

для направления подготовки (специальности) 04.03.01 Химия  
код и наименование направления подготовки (специальности)

Неорганическая химия и химия координационных соединений  
наименование профиля /специализаций/образовательной программы

Квалификация выпускника, уровень подготовки бакалавр  
(указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО)

Кафедра - разработчик: химии и строительного материаловедения  
название кафедры - разработчика рабочей программы

Разработчик(и) А.В. Соловьев, доцент, к.т.н.  
ФИО, должность, ученая степень, (звание)

**Апатиты  
2019**

## Пояснительная записка

**1. Методические указания** составлены на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки РФ от 17 июля 2017 года, № 671, учебного плана в составе ОП по направлению подготовки 04.03.01 Химия, профилю «Неорганическая химия и химия координационных соединений».

**2. Цели и задачи** учебной дисциплины (модуля). «Моделирование химических процессов»

**Целью дисциплины** (модуля) «Моделирование химических процессов» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой бакалавра и рабочим учебным планом направления 04.03.01 Химия, что предполагает освоение обучающимися теоретических знаний в области химической технологии, раскрытие взаимосвязи между химией, технологией и аппаратурным оформлением технологического процесса, формирование навыков создания аппаратурно-технологических схем.

**Задачи дисциплины** (модуля):

- изучение проблем и закономерностей перехода от лабораторных процессов и моделей к промышленным процессам и аппаратам;
- формирование практических навыков решения конкретных технических задач и умения проектировать типовые технологические схемы химико-технологических процессов.

**3. Планируемые результаты** обучения по дисциплине «Моделирование химических процессов»

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия:

**ПК-2-т** - Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции

**ПК-3-т** - Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания

Результаты формирования компетенций и планируемые результаты обучения представлены в таблице 1.

**Таблица 1 – Планируемые результаты обучения**

№ п/п	Код компетенции	Компоненты компетенции, степень их реализации	Результаты обучения
1.	ПК-2-т - Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется	<b>Знать:</b> 1. Операционное исчисление. 2. Российскую систему патентной информации. 3. Зарубежные базы данных и поисковые системы. <b>Уметь:</b>

	продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции	полностью	<p>1. Создавать 2D, 3D и полярные графики.</p> <p>2. Пользоваться греческим алфавитом как в уравнениях, так и в тексте.</p> <p><b>Владеть:</b> Инженерными приложениями и инструментами моделирования такими, как Pro/ENGINEER, Excel.</p> <p><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b>  <b>ПК-2-г-1.</b> Выполняет стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства  <b>ПК-2-г-2.</b> Составляет протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме</p>
3.	<b>ПК-3-г -</b> Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью	<p><b>Знать:</b> - Mathcad и Autocad,</p> <p><b>Уметь:</b> - работать с КОМПАС-3D и <u>AutoCAD</u></p> <p><b>Владеть:</b> - навыками научно-конструкторские работы.</p> <p><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b>  <b>ПК-3-г-1.</b> Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)  <b>ПК-3-г-2.</b> Составляет обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме</p>

Таблица 3 – Перечень практических работ

№ ПЗ	Наименование тем, их содержание	Кол-во часов	№ темы по табл.4 РП
1	2	3	4
1.	Принципы моделирования химических процессов.	2	1.1-1.2
2.	Построение эмпирических моделей	4	2.1-2.2

3.	Основные положения теории планирования экспериментов	2	2.3-2.5
4.	Математическое моделирование статических и динамических режимов работы гидравлических систем.	4	3.1-3.2
5.	Построение регрессионных моделей зависимостей давлений насыщенных паров индивидуальных веществ от температуры.	6	3.3-3.4
6.	Построение математических моделей стационарных режимов работы гомогенных жидкофазных реакторов.	8	3.5-3.11
7.	Построение математических моделей нестационарных процессов с распределенными параметрами в трубчатых реакторах	4	3.12
8.	Построение математических моделей процесса многокомпонентной массопередачи в ректификационных колоннах тарельчатого и насадочного типов	4	3.13
9.	Оптимизация процессов в жидкофазных реакторах с мешалкой	3	3.14
	<b><u>Всего часов:</u></b>		<b>37</b>

## Рекомендации к выполнению практических работ

### *Практическое задание №1.*

*Тема: «Принципы моделирования химических процессов».*

Основные принципы моделирования химических процессов. Физическое и математическое моделирование. Детерминированные и вероятностные математические модели. Цифровое и аналоговое моделирование. Применение методологии системного анализа для решения задач моделирования. Применение принципа «черного ящика» при математическом моделировании.

Иерархическая структура химических производств и их математических моделей. Основные приемы моделирования: эмпирический, структурный и комбинированный. Построение статических и динамических моделей. Решение прямых задач. Проектный и поверочный ( оценочный ) расчет процессов. Решение обратных задач. Параметрическая и структурная идентификация математических моделей. Установление адекватности математических моделей. Стратегия проведения расчетных исследований и компьютерного моделирования реальных процессов. Оптимизация химико-технологических процессов.

### *Практическое задание №2 .*

*Тема: «Построение эмпирических моделей».*

Формулировка задачи аппроксимации для описания экспериментальных зависимостей и получения эмпирических моделей процессов. Виды критериев аппроксимации. Критерий метода наименьших квадратов. Решение задачи аппроксимации для нелинейной и линейной по параметрам моделей. Матричная формулировка задачи аппроксимации. Аналитический и алгоритмический подходы для решения задачи аппроксимации для линейных и линеаризованных моделей методом наименьших квадратов. Оценка точности описания с использованием остаточной дисперсии, а также ошибок

и погрешностей в каждой экспериментальной точке измерения.

Нормальный закон распределения для векторных случайных величин и определение их числовых характеристик. Дисперсионный анализ. Определение выборочных коэффициентов корреляции и коэффициента множественной корреляции.

Линейный регрессионный анализ для построения эмпирических моделей на основе данных пассивного эксперимента. Понятия функции отклика и факторов. Основные допущения регрессионного анализа. Критерии проверки однородности дисперсий. Выбор вида уравнений регрессии, определение коэффициентов регрессии и их значимости с использованием критерия Стьюдента. Процедура исключения незначимых коэффициентов регрессии. Определение адекватности регрессионных моделей с помощью критерия Фишера. Критерий воспроизводимости и условия его применимости.

### *Практическое задание №3 .*

*Тема: «Основные положения теории планирования экспериментов».*

Основные положения теории планирования экспериментов: полный факторный эксперимент (ПФЭ) и обработка его результатов. Оптимальные свойства матрицы планирования и свойство ортогональности. Определение коэффициентов моделей, их значимости и адекватности уравнения регрессии. Свойство ротатабельности полного факторного эксперимента.

Активный эксперимент в почти стационарной области в окрестности экстремума функции отклика. Ортогональный центральный композиционный план эксперимента ( ОЦКП ) и обработка его результатов. Обеспечение ортогональности матрицы планирования и определение величины звездного плеча. Определение коэффициентов модели, их значимости и адекватности уравнения регрессии. Расчетное вычисление координат точки оптимума (экстремума).

#### *Практическое задание №4 .*

*Тема: «Математическое моделирование статических и динамических режимов работы гидравлических систем».*

Математическое моделирование статических и динамических режимов работы гидравлических систем.

Этапы математического моделирования: формулировка гипотез, построение математического описания, разработка моделирующего алгоритма, проверка адекватности моделей и идентификация их параметров, расчетные исследования (вычислительный эксперимент).

Разработка математического описания процессов. Блочный принцип построения структурных математических моделей. Обобщенное описание движения потоков фаз в аппаратах с помощью гидродинамических моделей, учитывающих сосредоточенные и распределенные источники вещества и энергии. Локальные интенсивности источников вещества и энергии в потоках, соответствующие различным физико-химическим процессам. Основные типы уравнений математического описания химико-технологических процессов - конечные, обыкновенные дифференциальные и дифференциальные уравнения в частных производных.

#### *Практическое задание №5.*

*Тема: «Построение регрессионных моделей зависимостей давлений насыщенных паров индивидуальных веществ от температуры».*

Математическое моделирование простых гидравлических систем. Составление уравнений математического описания процесса в стационарном и нестационарном состоянии. Построение информационных матриц математических моделей для выбора общего алгоритма решения - моделирующего алгоритма. Организация циклических вычислительных процедур и определение корректирующих уравнений. Схематическое изображение моделирующих алгоритмов в виде блок-схем расчетов. Вычислительные, логические и алгоритмические блоки при составлении

блок-схем расчетов.

Математическое моделирование теплообменников с мешалкой и змеевиковых теплообменников в стационарном состоянии. Выбор и графическое представление алгоритмов решения. Применение стандартных методов вычислительной математики для решения задачи.

Математическое моделирование прямоточных и противоточных трубчатых теплообменников. Решение задачи Коши и краевой задачи. Графическое представление алгоритмов решения.

#### *Практическое задание №6 .*

*Тема: «Построение математических моделей стационарных режимов работы гомогенных жидкофазных реакторов».*

Математическое моделирование стационарных процессов в реакторах с мешалкой с помощью систем конечных уравнений. Описание микрокинетических закономерностей протекания сложных химических реакций в жидкой фазе для многокомпонентных систем. Декомпозиционные алгоритмы решения систем конечных уравнений. Применение метода Ньютона - Рафсона для получения решения. Проблема сходимости процесса решения.

#### *Практическое задание № 7.*

*Тема: «Построение математических моделей нестационарных процессов с распределенными параметрами в трубчатых реакторах».*

Математическое моделирование нестационарных процессов в реакторах с мешалкой с помощью систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение задачи Коши - задачи с начальными условиями. Выбор и графическое представление алгоритма решения.

Явные методы численного (приближенного) решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений различных порядков - Эйлера, Эйлера-Коши и

Рунге-Кутта. Оценка точности методов - ошибок усечения. Переходные ошибки и ошибки округления при численном интегрировании дифференциальных уравнений. Способы обеспечения сходимости решения задачи.

Неявные методы численного (приближенного) решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений - Эйлера и Крэнка-Никольсона (метода трапеций). Применение итерационных алгоритмов решения нелинейных конечных уравнений на каждом шаге интегрирования. Разложение правых частей дифференциальных уравнений в ряды Тейлора для их решения неявным методом Эйлера. Понятие жесткости систем дифференциальных уравнений, критерии жесткости и выбор неявных методов для их решения.

Математическое моделирование трубчатого реактора в стационарном состоянии с прямоточным движением теплоносителя и сложной кинетической схемой реакции. Решение задачи Коши. Графическое представление алгоритма решения.

Математическое моделирование трубчатого реактора в стационарном состоянии с противоточным движением теплоносителя и сложной кинетической схемой реакции. Решение краевой задачи. Графическое представление алгоритма решения.

Математическое моделирование нестационарных процессов с распределенными параметрами в трубчатых реакторах с помощью дифференциальных уравнений в частных производных. Формулировка начальных и граничных условий. Дифференциальные уравнения в частных производных - эллиптического, параболического и гиперболического типов. Алгоритмы решения уравнений параболического типа. Математическая модель химического превращения в изотермических условиях для нестационарного процесса в трубчатых аппаратах с учетом продольного перемешивания.

### Практическое задание №8.

*Тема: « Построение математических моделей процесса многокомпонентной массопередачи в ректификационных колоннах тарельчатого и насадочного типов».*

Математическое моделирование процесса многокомпонентной массопередачи в ректификационных колоннах тарельчатого и насадочного типа. Моделирование фазового равновесия и процесса массопередачи на тарелках. Декомпозиционный алгоритм поперечного расчета колонны ректификации.

### Практическое задание №9.

*Тема: «Оптимизация процессов в жидкофазных реакторах с мешалкой».*

Оптимизация химико-технологических процессов. Задачи оптимального проектирования и управления. Выбор критериев оптимальности (целевых функций) и оптимизирующих переменных (ресурсов оптимизации). Ограничения I и II рода. Использование методов оптимизации для решения различных задач: оптимизации процессов с использованием их структурных моделей (численные методы оптимизации процессов) и эмпирических моделей (экспериментально-статистические методы оптимизации).

### Список рекомендуемой литературы

№ п/п	Название учебников, учебных пособий и других источников	Авторы (под ред.)	Издательство	Год издания
1	2	3	4	5
<b>Основная:</b>				
1.	Общая химическая технология. Введение в моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785987044971.html?SSr=010134171b106b0b2512518">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785987044971.html?SSr=010134171b106b0b2512518</a>	Закгейм А.Ю.	М.: Логос	2017

2.	Математическое моделирование химико-технологических процессов <a href="https://e.lanbook.com/book/41014">https://e.lanbook.com/book/41014</a>	Гумеров Ас.М.,	Издательство "Лань"	2014
<b>Дополнительная:</b>				
1.	Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN592210120.html?SSr=010134171b106b0b2512518">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN592210120.html?SSr=010134171b106b0b2512518</a>	Самарский А.А.	М. : ФИЗМАТЛИ Т	2005
2.	Процессы и аппараты химической технологии. Общий курс. Книга 1: учебник <a href="https://e.lanbook.com/book/111193">https://e.lanbook.com/book/111193</a>	Айнштейн В.Г., Захаров М.К., Носов Г.А., Захаренко В.В., Зиновкина Т.В., Таран А.Л., Костанян А.Е.	Издательство "Лань"	2019
3.	Процессы и аппараты химической технологии. Общий курс. Книга 2: учебник <a href="https://e.lanbook.com/book/111194">https://e.lanbook.com/book/111194</a>	Айнштейн В.Г., Захаров М.К., Носов Г.А., Захаренко В.В., Зиновкина Т.В., Таран А.Л., Костанян А.Е.	Издательство "Лань"	2019
4.	Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии (примеры и задачи) : Учеб. пособие для вузов <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785938081826.html?SSr=010134171b106b0b2512518">http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785938081826.html?SSr=010134171b106b0b2512518</a>	Романков П.Г.	СПб. : ХИМИЗДАТ	2010