

Компонент ОПОП 04.04.01 Химия  
наименование ОПОП

**Б1.В.02.ДВ.01.02**  
шифр дисциплины

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

Дисциплины  
(модуля)

Основы оптимизации 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 3 з.е.

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

Компетенции	Индикаторы достижения компетенций	Результаты обучения по дисциплине (модулю)
<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	<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	<b>Знать:</b> основы моделирования химических процессов и оптимизации моделей; методы реализации математических моделей на ЭВМ. <b>Уметь:</b> применять существующее программное обеспечение для решения химико-технологических задач. <b>Владеть:</b> навыками построения математических моделей химических процессов.
<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	<b>ПК-3-н.1.</b> Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными  <b>ПК-3-н.2.</b> Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	<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.

## 2. Содержание дисциплины

### Тема 1. Введение.

#### Основные понятия и принципы моделирования и оптимизации моделей

Основные понятия и принципы моделирования. Физическое и математическое моделирование, достоинства и недостатки различных методов моделирования химических процессов.

### Тема 2. Классификация математических моделей химических процессов

Классификация математических моделей, детерминированные и статистические модели химических процессов. Схема разработки математического описания химических процессов.

### **Тема 3. Численные методы**

Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений. Численные методы интегрирования.

### **Тема 4. Кинетические модели процессов химической технологии и их оптимизация**

Кинетические модели процессов химической технологии, схема построения кинетических моделей. Методы расчета констант скоростей в уравнениях кинетики.

### **Тема 5. Численные методы решения дифференциальных уравнений**

Численные методы решения дифференциальных уравнений, алгоритмы решения систем дифференциальных уравнений на ЭВМ.

### **Тема 6. Математические модели гидродинамики и их оптимизация**

Математические модели гидродинамики в реакторах различных типов. Математическое описание зон идеального перемешивания, идеального вытеснения. Ячеечная и диффузионная модели гидродинамики.

### **Тема 7. Математические модели теплообменных процессов и их оптимизация**

Математическое описание теплообменных процессов в аппаратах. Модель теплообмена в теплообменниках смешения, в трубчатых теплообменниках, в аппаратах комбинированного типа.

### **Тема 8. Математические модели процессов кристаллизации и их оптимизация**

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.

### **Тема 9. Математические модели массообменных процессов в системах «жидкость – пар» и их оптимизация**

Математическое описание процесса абсорбции. Моделирование процесса абсорбции хлористого водорода. Математическое описание процесса ректификации.

### **Тема 10. Статистические модели химических процессов и их оптимизация**

Статистические модели химических процессов, способы их разработки. Регрессионный анализ, оценка адекватности уравнений регрессии. Принципы математического планирования эксперимента. Методы оптимизации химических процессов.

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

- мультимедийные презентационные материалы по дисциплине «Основы оптимизации химических процессов» представлены в электронном курсе в ЭИОС МАУ;
- методические указания к выполнению контрольных работ 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 МАУ – 50 экз.)
2. **Дёрффель, К.** Статистика в аналитической химии / К. Дёрффель. – М. : Мир, 1994. – 268 с. (Библиотека МАУ – 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 МАУ – 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 МАУ – 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 МАУ – 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	10			10								
Практические работы	36			36								
Лабораторные работы	–			–								
Контактная работа	46			46								
Самостоятельная работа	26			26								
Выполнение курсовой работы (проекта)	–			–								
Подготовка к промежуточной аттестации	36			36								
Всего часов по дисциплине	108			108								

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	–											

### 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