|  |  |
| --- | --- |
| Наименованиедисциплины | **Моделирование химико-технологических процессов** |
| **Курс** | 4 | **Семестр** | 7 | **Трудоемкость** | 4 ЗЕ, 144 ч (68 ч ауд. зан.) |
| **Виды занятий** | ЛК, ПЗ | **Формы аттестации** | Зачет с оценкой |
| **Интерактивные формы обучения** | Интерактивные лекции, исследовательский практикум, конференции, метод проектов, дискуссии и др. |
| **Цели освоения дисциплины** |
| овладение основами математического моделирования химико-технологических процессов; умение разрабатывать математические модели с использованием алгебраических и дифференциальных уравнений, рассчитывать основные параметры процесса в статическом и динамическом режимах; дать основы оптимизации химико-технологических процессов. |
| **Место дисциплины в структуре ООП** |
| Дисциплина входит в цикл специализации при завершении подготовки бакалавра по специальности 18.03.01, базируется на результатах изучения дисциплин базовой части профессионального цикла: «Процессы и аппараты химической технологии», «Общая химическая технология», а так же дисциплины вариативной: «Химическая технология неорганических веществ». |
| **Основное содержание**  |
| Модуль 1 «ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ» Цель математического моделирования, классификация химико-технологических процессов и математических моделей. Виды моделирования: физическое и математическое моделирование. Принципы математического моделирования процессов химической технологии. Этапы моделирования. Состав математического описания. Алгебраические уравнения, трансцендентные уравнения, обыкновенные дифференциальные уравнения, дифференциальные уравнения в частных производных. Статистический анализ модели и проверка ее на адекватность. Использование модели.Модуль 2 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ» Основные понятия химической кинетики. Классификация реакций. Скорость химической реакции. Кинетические уравнения. Механизм химической реакции. Формулирование гипотез о возможных механизмах реакции. Простые и сложные реакции: последовательная реакция, параллельная реакция, смешанная реакция. Стехиометрические уравнения. Стехиометрическая матрица. Методы упрощения математической модели кинетики. Линейные инварианты. Ключевые вещества. Этапы идентификации математической модели кинетики химических реакций: Прямая и обратная задачи кинетики. Экспериментальное исследование кинетики химических реакций: Интегральный метод анализа опытных данных, Дифференциальный метод анализа опытных данных. Разработка математической модели кинетики химических реакций. Формулирование критерия адекватности. Отыскание кинетических констант (параметрическая идентификация модели)Модуль 3 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ» Классификация химических реакторов. Организация материальных потоков. Организация тепловых потоков. Математические модели процесса в реакторе. Математические модели реакторов идеального смешения. Математические модели химических реакторов идеального вытеснения. Каскад реакторов идеального смешения. Сравнение химических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения и каскада РИСМодуль 4 «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ» Блочный принцип построения моделей массопередачи. Общая характеристика математического описания: Уравнение баланса массы, Уравнение равновесия, Уравнение кинетики. Начальные и граничные условия. Моделирование массообменного процесса на примере моделирования процесса адсорбции: Уравнение материального баланса, Уравнение кинетики сорбции, Уравнение равновесия сорбции, Уравнение теплового баланса, Уравнение передачи тепла |
| **Формируемые компетенции** |
| **ПК-8** способен составлять математические модели типовых профессиональных задач, находить способы их решения и интерпретировать профессиональный (физический) смысл полученного математического результата,**ПК-9** готов применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ деловой сферы деятельности; использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей предметной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования**,****ПК-27** готов использовать информационные технологии при разработке проектов. |
| **Образовательные результаты** |
| **Знать:** методы моделирования и оптимизации химико-технологических систем с применением вычислительной техники; методы оптимизации химико-технологических процессов с применением эмпирических и/или физико-химических моделей.**Уметь:** составлять математические модели с использованием алгебраических и дифференциальных уравнений для основных химико-технологических процессов, протекающих в стационарном и динамическом режимах; применять методы вычислительной математики и математической статистики для решения конкретных задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов.**Владеть:** методами кинетического анализа и моделирования химических реакторов; методами определения оптимальных и рациональных технологических режимов химико-технологических процессов. |
| **Взаимосвязь дисциплины с профессиональной деятельностью выпускника** |
| Освоение дисциплины обеспечивает решение выпускником задач будущей профессиональной деятельности (научно-исследовательской, производственно-технологической), связанной с математическим моделированием и оптимизацией химико-технологических систем. |
| **Ответственная кафедра** |
| Кафедра технологии неорганических веществ |
| **Составители** | **Подписи** |
| д.т.н., доцент Прокофьев В.Ю. |  |
| Заведующий кафедрой, д.т.н., профессор Ильин А.П. |  |
| **Дата** |  |