

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Б1.О.04

(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки
18.04.01 Химическая технология

направленность (профиль)

Химия и технология продуктов основного органического и нефтехимического синтеза

Форма обучения: очная

Год набора: 2026

Общая трудоемкость: 5 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	1	Итого
Форма контроля	Экзамен	
Вид занятий		
Лекции	32	32
Лабораторные	16	16
Практические	16	16
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР	-	-
Промежуточная аттестация	0.35	0.35
Контактная работа	64.35	64.35
Самостоятельная работа	80	80
Контроль	35,65	35,65
Итого	180	180

Рабочую программу составил(и):

Доцент, к.х.н., Болотин А.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:

☒

Отсутствует

☐

Рецензент

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана направления подготовки 18.04.01 Химическая технология

Срок действия рабочей программы дисциплины до «31» августа 2028 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании кафедры

«Химическая технология и ресурсосбережение»

(протокол заседания № 1 от «29» августа 2025 г.).

1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины – формирование у студентов профессиональных знаний по использованию методов моделирования при проектировании технологических процессов и анализе экспериментальных данных, а также формирование научного и инженерного подхода к вопросам рационального использования энерго- и материальных ресурсов, в химической технологии и нефтехимии.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Системный подход к научно-исследовательской работе».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Дополнительные главы процессов и аппаратов», «Производственная практика (научно-исследовательская работа)», «Учебная практика (научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы))», «Производственная практика (преддипломная практика)».

3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ОПК-3. Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку.	ОПК-3.1. Разрабатывает научно-обоснованные нормы выработки при производстве продукции, расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии на основании материального и энергетического балансов химико - технологического процесса.	Знать: <ul style="list-style-type: none">• принципы составления материального и энергетического балансов химико-технологического процесса;• методы математического моделирования, оптимизации и проектирования процессов химической технологии и биотехнологии;• основные модели структуры потоков, теплообменных и массообменных процессов, методы идентификации параметров модели и методы установления.
		Уметь: <ul style="list-style-type: none">• выбирать факторы оптимизации химико-технологического процесса;• разрабатывать математические модели процессов на основе структурного анализа и синтеза с использованием

		<p>блочного подхода к описанию сложных процессов; производить проверку адекватности математических моделей;</p> <ul style="list-style-type: none"> • осуществлять идентификацию параметров математической модели, моделирование и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> • методиками нахождения оптимальных параметров химико-технологического процесса.
<p>ОПК-4. Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты</p>	<p>ОПК-4.1. Составляет рациональную схему получения, выделения и очистки продуктов производства</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> • методы изучения систем и системный подход, общий состав химико-технологических систем и уравнений их иерархии. <p>Уметь:</p> <p>выявлять лимитирующие стадии химико-технологического процесса.</p> <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> • навыками расчета оптимальных режимов отдельных технологических стадий химико-технологического процесса.

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
Модуль 1. «Математическое моделирование как современный метод анализа и синтеза химико-технологических процессов (ХТП)».	Лек1	Общие понятия моделирования, виды моделей, их классификация.	1	2	-	-	
	Лек2	Математическое моделирование явлений пространственно-временной самоорганизации. Понятие о синергетике. Явления самоорганизации в физико-химических системах. Современная классификация математических моделей явлений самоорганизации (1. Точечные модели, 2. Распределённые модели, 3. Микроскопические стохастические (или имитационные) модели).	1	4	-	-	
	Лаб1	Компьютерное моделирование кинетики гидролиза полисахаридов	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе №1
	Пр1	Дифференциальные уравнения в химии, химической технологии, биологии и биотехнологии.	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 1

Модуль 2. «Математический аппарат синергетики в задачах химии и химической технологии»	Лек3	Математические модели ХТП, описываемые одним дифференциальным уравнением первого порядка. Основы качественной теории динамических систем (общие принципы). Понятие решения одного автономного дифференциального уравнения. Стационарное состояние (состояние равновесия). Устойчивость состояния равновесия. Методы оценки устойчивости. Аналитический метод исследования устойчивости стационарного состояния (метод Ляпунова). Линеаризация системы в окрестности стационарного состояния.	1	6	-	-	
	Пр2	Математические модели автокаталитических реакций. Осциллирующие автокаталитические реакции.	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 2
	Лек4	Математические модели ХТП, описываемые системой двух автономных дифференциальных уравнений. Фазовая плоскость. Фазовый портрет. Устойчивость стационарного состояния. Исследование устойчивости стационарных состояний нелинейных систем второго	1	4	-	-	

		порядка. Свойства и классификация особых точек. Примеры исследования устойчивости стационарных состояний моделей ХТП.					
	Лаб2	Компьютерное моделирование роста численности популяций (математические модели Мальтуса, Ферхюльста, Лотка-Вольтерра).	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе №2
Модуль 3 «Математическое моделирование химических реакторов: химические колебания, анализ устойчивости и регулирование химико-технологических процессов».	Лек5	Краткие сведения по химической кинетике. Составление уравнений, описывающих поведение химических реакторов. Типы химических реакторов. Материальный баланс реактора. Тепловой баланс реактора. Преобразование уравнений к безразмерным переменным.	1	6	-	-	
	Пр3	Принципы составления и приведения к безразмерному виду математических моделей реакторов идеального смешения.	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 3
	Лек6	Построение и анализ базовых математических моделей автоколебательных процессов в физико-химических системах. Значение математического моделирования периодических процессов для развития современной химии и химической технологии.	1	4	-	-	

	Лаб3	Математическое моделирование периодических процессов в физико-химических системах на примере базовой математической модели «Брюсселятор».	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе №3
	Лек7	Применение методов теории устойчивости при исследовании химических реакторов. Современные задачи математического моделирования нелинейной динамики каталитических реакций и процессов.	1	6	-	-	
	Пр.4	Стационарные состояние химических реакторов и их устойчивость «в малом».	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 4
	Лаб4	Компьютерное моделирование промышленных процессов непрерывного культивирования микроорганизмов.	1	2	-	-	Отчет по лабораторной работе №4
	Пр5	Исследование устойчивости химических реакторов «в большом».	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 5
	Пр6	Исследование устойчивости химических реакторов вторым методом Ляпунова.	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 6
	Лаб5	Математическое моделирование работы реактора со структурой потока «идеальное смешение» и «идеальное вытеснение».	1	2	-	-	Отчет по лабораторной работе № 5
	Пр7	Построение и анализ базовых математических моделей теплового режима гетерогенных экзотермических реакций.	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 7

	Пр8	Дифференциальные уравнения в моделировании сообществ микроорганизмов.	1	2	-	-	Отчет по практическому занятию № 8
	Ср	Изучение теоретического материала. Подготовка отчетов по практическим занятиям.	1	80	-	-	
	Контроль	Подготовка к экзамену	1	35,65	-	-	
	ПА	Экзамен	1	0,35	-	-	Экзамен
Итого:				180			

5. Образовательные технологии

При реализации учебного курса дисциплины используются следующие технологии: технология традиционного обучения, включающая лекции и практические работы, которые предполагают последовательное изложение материала преподавателем. Лекция с элементами дискуссии, с использованием технологий развития критического мышления. Практическое занятие с решением задач, обсуждение результатов деятельности, проводится обсуждение результатов деятельности; технология проектного обучения: применяются лекции-консультации с использованием метода защиты проекта.

6. Методические указания по освоению дисциплины

При освоении темы необходимо:

- изучить учебный материал по дисциплине, используя лекционный материал и материал библиотечного фонда по данной тематике;
- акцентировать внимание на изучении видов систем, законов протекания реакций и моделирования.

Методические рекомендации к выполнению самостоятельной работы:

1. Изучение теоретического материала по изучаемой теме, изложенного в учебно-методическом пособии.

2. Вопросы для самостоятельной работы студентов

- ~ основные принципы моделирования в химической технологии;
- ~ этапы математического моделирования;
- ~ модели химико-технологических процессов;
- ~ основные типы уравнений математического описания ХТС;
- ~ методы оптимизации химико-технологических процессов.

3. Подготовка к аудиторным занятиям (практическим работам и промежуточной аттестации).

4. Самостоятельное прочтение, просмотр, Интернет-ресурсы, повторение учебного материала.

5. Подготовка проектов и практических занятий, подбор литературы по дисциплинарным проблемам.

6. Практические занятия включают в себя решение прикладных, расчетных и ситуационных задач, обсуждение результатов деятельности.

7. Подготовка отчетов по практическим занятиям:

7.1. Предоставление отчета в электронном виде с названием файла, например, ХТм-2002_ПР1_Иванов И.И. в соответствии с вариантом и требованиями к содержанию отчета.

7.2. При сдаче отчета студент должен ответить на вопросы преподавателя по теме практической работе в устной форме, используя отчет по практической работе.

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	ОПК-3.1, ОПК-4.1	Отчеты по практическим занятиям № 1-8, лабораторным работам № 1-5 в электронном виде. Вопросы к зачету № 1-68.

7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

7.2.1 Отчет по практическому занятию

(наименование оценочного средства)

Типовой пример задания:

Практическое занятие № 1. Дифференциальные уравнения в химии, химической технологии и биологии.

Автоколебания могут возникнуть в случае экзотермической реакции при определенном соотношении между тепловыделением и теплооттоком. Здесь главной причиной возникновения колебаний является нелинейная зависимость скорости реакции от температуры, описываемая законом Аррениуса. В приближении *реактора идеального смешения* модели термокинетики представляют собой многопараметрические системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), в которых одна из фазовых переменных – температура.

Впервые термокинетические модели были рассмотрены в рамках *теории горения* академиками Н.Н. Семеновым, Я.Б. Зельдовичем и профессором Д.А. Франк-Каменецким. Базовой моделью здесь служит модель Зельдовича-Семенова, для которой систему безразмерных параметров предложил Д.А. Франк-Каменецкий. В теории химических реакторов принята аналогичная модель *реактора идеального смешения (РИС)* с другой системой безразмерных параметров.

Цели работы:

1. Рассмотреть простейшую модель экзотермической реакции первого порядка, происходящей в *реакторе идеального смешения*, которая при определенных условиях может демонстрировать как *множественность стационарных состояний*, так и *автоколебания*. Система уравнений модели для изменения концентрации x и температуры T внутри реактора имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= g(x_0 - x) - k \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] x; \\ \frac{dT}{dt} &= g(T_0 - T) + b \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] x + a_1 (T_s - T); \\ g &= q/V; \quad b = -\frac{DH}{c_p}; \quad a = \frac{hS}{c_p}, \end{aligned} \quad (1)$$

где x^0 и T^0 – концентрация и температура на входе в реактор; q – скорость потока; V, S – объем и площадь стенок реактора; T_s – температура стенок; r, c_p – плотность и теплоемкость реакционной смеси; h – коэффициент теплоотдачи; $-DH$ – тепловой эффект реакции.

2. Провести параметрический анализ преобразованной соответствующим образом системы уравнений математической модели химического реактора (1) и найти области

множественности стационарных состояний и автоколебаний;

3. Построить параметрический портрет математической модели на плоскости (g, a) , четко указав: **I** – область единственного стационарного состояния; **II** – область автоколебаний; **III, IV** – области множественности стационарных состояний.

Приведенная в качестве примера практическая работа выполняется методом творческих заданий.

Задание:

1. Изучить учебный материал по дисциплине «**Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов**», используя лекционный материал и материал библиотечного фонда по указанной тематике;

2. Выбрать базовый набор параметров математической модели;

3. Зафиксировать параметр g и сделать вертикальный разрез на параметрическом портрете модели таким образом, чтобы прямая разреза пересекала область автоколебаний **II**. Представить зависимость стационарных состояний от параметра a на рисунке;

4. Учесть, что колебания начинаются и заканчиваются в точках сверхкритической бифуркации Андронова-Хопфа h_1 и h_2 ;

5. Показать типичную форму колебаний концентрации вещества x и T внутри реактора для одного набора параметров;

6. На основании результатов параметрического анализа описать механизм термокинетических колебаний;

7. Своевременно подготовить и защитить отчёт по практическому занятию.

Критерии оценки:

- Оценка «**зачтено**» ставится студенту, если отчет по практическому занятию включает более 50% от требуемого объема и выполнен в соответствии с требованиями, указанными в учебно-методическом пособии;
- Оценка «**не зачтено**» ставится студенту, если отчет практическому занятию включает менее 50% от требуемого объема.

7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 1

№ п/п	Вопросы к экзамену
1.	Понятие моделирования, модели.
2.	Виды моделирования, виды моделей. Классификация моделей.
3.	Математическое моделирование, математические модели. Формы представления математических моделей.
4.	Метод физического моделирования, области применения. Особенности физического моделирования исследования явлений.
5.	Сущность явления изоморфизма уравнений. Привести примеры.
6.	Кинетические модели гомогенных химических реакций. Методы численной реализации
7.	Построение кинетических моделей. Моделирование простых и сложных объектов. Методы решения дифференциальных уравнений модели.
8.	Два подхода к составлению математических моделей процесса: детерминированный и стохастический, их возможность и сфера использования. Алгоритмизация математических моделей.
9.	Общие сведения о математических моделях и компьютерном моделировании.
10.	Методология компьютерного моделирования.
11.	Роль отечественных учёных в развитии методологии математического моделирования.
12.	Математические и кинетические модели биотехнологических процессов. Общая характеристика.
13.	Примеры явлений и процессов, которые можно моделировать.
14.	Математическое моделирование процессов биотрансформации и биокатализа.
15.	Основные этапы математического моделирования.
16.	Основы качественной теории нелинейных динамических систем. Фазовое пространство. Фазовые траектории. Нахождение особых точек методом теории возмущений. Типы особых точек: устойчивый узел и неустойчивый узел; седло; центр; устойчивый и неустойчивый фокусы. Анализ устойчивости. Особые траектории. Предельные циклы. Бифуркации.
17.	Математическое описание технологических процессов на основе уравнений материального и теплового баланса для стационарных и нестационарных условий.
18.	Математическое моделирование процессов периодического культивирования микроорганизмов.
19.	Математическое моделирование процессов непрерывного культивирования микроорганизмов.
20.	Примеры автоколебательных процессов в живых системах.
21.	Предельные циклы и условия их существования. Изображение автоколебательной системы на фазовой плоскости.
22.	Рождение предельного цикла. Бифуркация Андронова – Хопфа. «Мягкое» и «жесткое» возбуждение автоколебаний. Модельные системы?
23.	Устойчивость состояния равновесия. Привести строгое математическое определение устойчивости состояния равновесия для уравнения $\frac{dx}{dt}=f(x)$ по Ляпунову.
24.	Анализ базовой математической модели колебательных процессов Р. Лефевра и И.Р. Пригожина «брюсселятор»; система дифференциальных уравнений; линейный анализ устойчивости «точечной» и «распределенной» систем; научное и методологическое

№ п/п	Вопросы к экзамену
	значение математической модели.
25.	Примеры систем, которые рассматривает макрокинетика (тепловой взрыв, цепное воспламенение, колебательные химические и биологические процессы («брюсселятор»)).
26.	Кинетические закономерности реакций в неизотермических условиях при заданном режиме тепловыделения и теплоотвода.
27.	Рассказать о потоке идеального смешения.
28.	Охарактеризовать поток идеального вытеснения.
29.	Описание стационарного и нестационарного процессов в реакторе идеального смешения, в реакторе идеального вытеснения.
30.	Для каких аппаратов может быть применена ячеечная модель?
31.	Назвать тепловые режимы работы аппаратов.
32.	Теория теплового взрыва и горения (модели Н.Н. Семенова и Д.А. Франк-Каменецкого).
33.	Значение концентрационных колебаний при математическом моделировании различных нелинейных явлений. Привести примеры из химии биологии, экологии, медицины, биотехнологии.
34.	Базовая математическая модель термокинетических колебаний в замкнутой системе Д.А. Франк – Каменецкого и И.Е. Сальникова (линейный анализ устойчивости, связь с теорией теплового взрыва, оценка критической температуры взрыва при протекании технологического процесса).
35.	Анализ базовой математической модели Лотка-Вольтера; система дифференциальных уравнений; линейный анализ устойчивости «точечной» системы; качественные зависимости переменных во времени; научное и методологическое значение математической модели.
36.	Анализ устойчивости режимов хемостата; система уравнений для модели хемостата в безразмерных переменных и параметрах; анализ устойчивости хемостата; колебательные режимы концентрации биомассы и субстрата в хемостате.
37.	Культивирование микроорганизмов в режиме хемостата; методы экспериментального определения параметров роста по стационарным состояниям в условиях неосложненного роста.
38.	Культивирование микроорганизмов в режиме хемостата; методы экспериментального определения параметров роста по стационарным состояниям в условиях ингибирования продуктами метаболизма.
39.	Какие допущения принимаются при моделировании химических реакторов?
40.	Какие элементарные модели используются при математическом описании химических реакторов?
41.	Какие виды систем дифференциальных уравнений могут быть решены с помощью ЭВМ?
42.	Кинетика ферментативных реакций в открытых системах. Проточные реакторы идеального перемешивания.
43.	Основные понятия ферментативной кинетики: понятие о биокатализаторах – ферментах; активный центр фермента; субстрат; фермент – субстратный комплекс; активированный комплекс; специфичность действия ферментов.
44.	Характеристика ингибиторов и активаторов ферментативных реакций.
45.	Качественное исследование устойчивости биологических систем: анализ устойчивости режимов проточного биореактора (хемостат).
46.	Зависимость скорости ферментативных реакций от концентрации субстрата. Модель Михаэлиса-Ментен. Графические методы определения параметров уравнения Михаэлиса-Ментен.

№ п/п	Вопросы к экзамену
47.	Кинетика ингибирования ферментативных реакций. Классификация ингибиторов. Механизмы действия ингибиторов.
48.	Простейшие кинетические математические модели химических и биологических процессов, как системы двух дифференциальных уравнений первого порядка (динамические системы).
49.	Качественное исследование математических моделей биологических процессов. Критические явления. Связь с нелинейной неравновесной термодинамикой.
50.	Изобразите качественный вид бифуркационной диаграммы различных возможных режимов для математической модели «брюселятор» на плоскости контрольных параметров A, B в отсутствии диффузии.
51.	Технология параметрического анализа базовых математических моделей термокинетики.
52.	Описание тепловых режимов для стационарного и нестационарного процессов в реакторе идеального смешения, в реакторе идеального вытеснения.
53.	Термокинетические колебания в проточных химических системах. Устойчивость и колебания в химическом реакторе идеального смешения (РИС) (линейный анализ устойчивости, связь с теорией теплового взрыва, оценка критической температуры взрыва при протекании ХТП).
54.	Технология параметрического анализа базовых математических моделей термокинетики. Основные результаты для простейших моделей: теплового взрыва Зельдовича-Семенова; Вольтера и Сальникова по математическому моделированию динамики полимеризации; теоретических основ химической технологии Ариса-Амундсона; горения смеси двух углеводородов в проточном РИС; самовозгорания пыли бурого угля; нитрования амила и т.п.
55.	Математическая модель реактора идеального смешения для простой кинетики, в которой не участвуют промежуточные продукты, может быть записана в виде двух ОДУ. В уравнениях: C – концентрация вещества от которой зависит кинетика процесса; k – константа скорости реакции, которая полагается зависящей только от температуры; $F(C)$ – функция, выражающая зависимость скорости реакции от концентрации исходного вещества; b – обратная величина времени пребывания смеси в реакторе; коэффициент h описывает как теплопередачу, так и унос тепла выходящим потоком. При некотором выборе способа введения безразмерных переменных и параметров система может быть приведена к модели Б.В. Вольтера и И.Е. Сальникова, являющейся базовой при моделировании динамики процессов полимеризации. Возможны ли в химико – технологическом процессе, моделируемом системой ДУ, возникновения «теплового взрыва», равно как и других типов динамических неустойчивостей? Если ответ положительный, получите соответствующие критерии их возникновения. Указание: Ключ к решению данной практической задачи теории устойчивости режимов работы химических реакторов может дать наличие полной аналогии первого из уравнений математической модели с уравнением диффузионной кинетики, равно как и понятие о глубине превращения?.
56.	Математическая модель экзотермического процесса, протекающего в реакторе идеального смешения для реакции первого порядка $A \rightarrow P$, где A – реагирующее вещество, P – продукт реакции, в безразмерном виде может быть записана в виде двух ОДУ. Какую систему двух дифференциальных уравнений типа называют моделью Я.Б. Зельдовича и Н.Н. Семенова. Какой вариант введения безразмерных переменных используется в модели Зельдовича – Семенова? Запишите исходную размерную математическую модель РИС и поясните физический смысл входящих в дифференциальные уравнения модели теплофизических, кинетических и геометрических параметров. Расскажите о методическом значении базовой математической модели Зельдовича - Семенова и возможности ее практического применения при количественной оценке области технологически безопасных режимов.

№ п/п	Вопросы к экзамену
	Какой вид примет базовая математическая модель в случае: а) реакции окисления $A+O_2 \rightarrow P$, когда кислород является одним из исходных компонентов; б) реакции $A \rightarrow P$ с произвольной кинетикой? Составьте программу в пакете Mathcad для численного решения модели Зельдовича - Семенова. Приведите графические зависимости кинетических кривых, изобразите фазовый портрет ОДУ при разных значениях управляющих параметров модели. Указание. При компьютерном моделировании необходимо использовать значения параметров, полученных из параметрического анализа математической модели Зельдовича - Семенова.
57.	Математическая модель Ариса-Амундсона является одной из базовых математических моделей теоретических основ химической технологии. В литературе модели такого типа называются CSTR (continuous stirred-tank reactor – непрерывный реактор идеального смешения). Для одной химической реакции первого порядка $A \rightarrow P$ эта математическая модель в безразмерных переменных может быть записана в виде двух ОДУ. Какой способ введения безразмерных переменных и параметров был использован Арисом и Амундсоном? Как изменится форма записи дифференциальных уравнений базовой математической модели Ариса – Амундсона в случае: а) реакции окисления $A+O_2 \rightarrow P$; б) реакции n – го порядка $nA \rightarrow P$; в) реакции с произвольной кинетикой? Какие этапы математического моделирования являются необходимыми (обязательными) при оценке риска возникновения аварийных ситуаций при осуществлении нелинейных экзотермических химико – технологических процессов? Каким образом при математическом моделировании конкретного реактора могут быть оценены условия существования критических режимов («опасные» и «безопасные» границы критических явлений)? Перечислите основные факторы, которые существенно повышают риск возникновения аварий и требуют детального исследования критических условий для химических реакций уже на кинетическом уровне. Исследуйте возможные сценарии возникновения аварийной ситуации с помощью базовой математической модели упомянутого типа. Составьте программу в пакете Mathcad для численного решения модели. Приведите графические зависимости кинетических кривых, изобразите фазовый портрет ОДУ при разных значениях управляющих параметров модели. Указание. При компьютерном моделировании необходимо использовать значения параметров, полученных из параметрического анализа математической модели Ариса-Амундсона).
58.	Безопасная эксплуатация теплоэнергетических объектов является основой бесперебойного функционирования системы энергообеспечения городов и населенных пунктов. Тем не менее, как показывает опыт, на ТЭЦ, ГРЭС, котельных происходят пожары и взрывы, которые характерны для всех стадий обращения с углем. При этом самовозгорание является одной из основных причин пожаров на складах топлива и трактах углеподачи (в 50-60%), по этой причине происходит каждый шестой (!) пожар на ТЭС или котельной. От каких параметров, по Вашему мнению, будет зависеть способность углей к самовозгоранию? Постройте математическую модель, позволяющую качественно объяснить основные особенности процесса самовозгорания угольной пыли и выявить физико-химические и теплофизические параметры, определяющие условия самовозгорания. В качестве базовой математической модели используйте уравнения, описывающие материальный баланс в реакторе идеального вытеснения (РИВ). Необходимо рассмотреть три варианта схемы реакции: 1) горение при избытке кислорода; 2) с учетом изменения кислорода; 3) трехстадийную схему с термоактивацией угля. Как могут быть практически использованы детальные расчеты макрокинетики этих процессов при проектировании современных энергетических установок? Указание: Необходимо построить и исследовать модели, качественно описывающие самовозгорания угольной пыли в цилиндрическом реакторе при различных теплофизических и физико-химических предположениях. Прежде всего, это

№ п/п	Вопросы к экзамену
	режим идеального вытеснения в трубе, для которого нужно рассмотреть одномерные стационарные профили распределения концентрации и температуры по длине реактора.
59.	Основные понятия кинетики: механизм химической реакции, скорость химической реакции, константа скорости реакции, кинетическое уравнение химического процесса, константа равновесия, порядок реакции.
60.	Основные принципы химической кинетики: зависимость скорости реакции от концентрации реагентов; принцип сохранения общей концентрации вещества в реакциях; метод стационарных концентраций (метод Боденштейна); принцип независимости протекания реакций.
61.	Составить и решить кинетические уравнения для необратимой реакции первого порядка.
62.	Составить и решить кинетические уравнения для необратимой реакции второго порядка.
63.	Составить и решить кинетические уравнения для обратимой реакции первого порядка.
64.	Составить и решить кинетические уравнения для двух последовательных реакций первого порядка.
65.	Составить и решить кинетические уравнения для двух параллельных реакций первого порядка.
66.	Математические модели автокаталитических реакций.
67.	Автоколебательные химические реакции.
68.	Математические модели цепных реакций.

7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
1	Экзамен (устно)	«отлично»	Знает: <ul style="list-style-type: none"> Весь учебный материал по изучаемой дисциплине и аргументированно использует его в нестандартных ситуациях, проявляя при этом неординарные творческие способности в учебной деятельности; Основные принципы, теории, законы, правила, используемые для изучения объектов дисциплины; признаки, параметры, характеристики, свойства объектов, изучаемые в дисциплине; Модели, схемы, структуры, описывающие объекты дисциплины; Методы, способы, приемы

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
			<p>решения основных задач;</p> <ul style="list-style-type: none"> Оценки, пределы, ошибки, ограничения применяемых методов, моделей, теорий. <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> Применять полученные знания в нестандартных условиях, делать аргументированные выводы, оценивать с практической точки зрения отдельные новые факты, явления процессы, решать творческие задачи, воспринимать иную позицию (точку зрения), как альтернативную, при обучении пользоваться дополнительными источниками информации; давать полные, логичные и обоснованные ответы на основные и дополнительные вопросы по изучаемой дисциплине. <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> Глубокими и крепкими знаниями, научной терминологией; умением дополнять, адаптировать и развивать методы, алгоритмы, приемы, методики для решения конкретных задач; Умением анализировать и использовать нормативно – правовые документы, учебную, научную и другие виды литературы, результаты наблюдений и деятельности.
		«хорошо»	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> Основополагающие теории и факты, логично освещает причинно – следственные связи между ними. <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> Работать самостоятельно, подготовить реферат и защитить его положения,

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
			<p>давать полные логичные ответы и не допускать грубых ошибок (при ответе допускаются не принципиальные неточности), систематизировать программный материал с помощью преподавателя.</p> <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Умением свободного использования изученного материала в стандартных условиях; умением анализировать, делать выводы по техническим и экономическим расчетам, правильно использовать технологию, составлять простые таблицы, схемы.
		«удовлетворительно»	<p>Знает и понимает суть дисциплины, основных положений учебного материала;</p> <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Поверхностно анализировать события, ситуации, делать определенные выводы, самостоятельно воспроизводить большую часть материала. <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Умением давать правильные ответы (допускаются некоторые неточности и не принципиальные ошибки); • Умением работать только с учебной литературой, указанной преподавателем
		«неудовлетворительно»	<p>Не отвечает ни на один из теоретических вопросов, не может ответить ни на один дополнительный вопрос.</p>

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1.	Гумеров А. М.	Математическое моделирование химико-технологических процессов	учебное пособие	2022	ЭБС «Лань»
2.	Гартман Т.Н., Клушин Д.В.	Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики	учебное пособие	2020	ЭБС «Лань»
3.	Казиев В.М.	Введение в анализ, синтез и моделирование Систем	учебное пособие	2019	ЭБС «IPRbooks»
4.	Баранов Д.А.	Процессы и аппараты химической Технологии	учебное пособие	2020	ЭБС «Лань»
5.	Айнштейн В.Г., Захаров М.К., Носов Г.А.	Процессы и аппараты химической технологии. Общий курс	учебник	2019	ЭБС «Лань»

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1.	Липин А. А.	Системный анализ и методы химической кибернетики	учебное пособие	2017	ЭБС «Лань»
2.	Москвичев Ю. А., Григоричев А.К., Павлов О.С.	Теоретические основы химической технологии	учебное пособие	2020	ЭБС «Лань»
3.	Заварухин С.Г.	Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов	учебное пособие	2017	ЭБС «Лань»

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

➤ **Химическая промышленность сегодня.** Журнал «Химическая промышленность сегодня» публикует оригинальные статьи химико-технологического профиля, содержащие новые результаты завершенных исследований в области химической технологии и биотехнологии, промышленного внедрения и эксплуатации химических производств. Журнал также публикует обзоры наиболее интересных и актуальных научных достижений и практических разработок по публикациям отечественной и иностранной печати, информацию о проведении научных конференций, симпозиумов и научно-практических совещаний в области химической технологии и химической промышленности.

➤ **Теоретические основы химической технологии.** Журнал публикует сообщения о новых технологических процессах в обрабатывающей промышленности с точки зрения фундаментальной науки. Статьи в журнале посвящены основам тепломассообмена, процессам разделения, межфазным явлениям, течению сыпучих материалов, биотехнологии, оптимизации, автоматизации и управлению, экономии энергии, металлов и сырья, защите окружающей среды и смежным темам. Журнал входит в Перечень ВАК и систему РИНЦ. Для зарегистрированных пользователей Научной электронной библиотеки (eLibrary) доступен полнотекстовый архив с 2011 года: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=8244>

➤ **Математическое моделирование.** Журнал "Математическое моделирование" основан в 1989 году. Журнал выходит ежемесячно в печатном и электронном виде. Журнал публикует обзоры, оригинальные статьи и краткие сообщения, посвященные математическому моделированию с применением ЭВМ и численным методам решения сложных и актуальных проблем науки и современной технологии. Помещаются также работы, имеющие высокий предметный и математический уровень, показывающие возможности вычислительного эксперимента в данной области и освещающие следующие вопросы: постановки научно-технических задач, построение математических моделей для них, математические методы их исследований и вычислительные алгоритмы их решения, пакеты прикладных программ для решения актуальных задач, иллюстрированные расчеты, апробация моделей путем сравнения с экспериментальными или теоретическими данными. Публикуются также рефераты препринтов и депонированных рукописей, письма в редакцию, научная информация (планы и итоги конференций, школ и т.п.). Возможна публикация объявлений и рекламных материалов.

➤ **"Компьютерные исследования и моделирование".** Рецензируемый российский журнал "Компьютерные исследования и моделирование" публикует результаты оригинальных исследований и работы обзорного характера в области компьютерных исследований и математического моделирования в физике, технике, биологии, экологии, экономике, психологии и других областях знания. Журнал редактируется и издается Институтом компьютерных исследований в сотрудничестве с кафедрой биофизики биологического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

➤ **Бутлеровские сообщения.** Научный англо-русскоязычный химический журнал. Публикует статьи по основным разделам химии и смежным дисциплинам. Журнал входит в Перечень ВАК и систему РИНЦ. Для зарегистрированных пользователей сайта доступен полнотекстовый архив с 1999 года: <http://butlerov.com/stat/reports/view.asp?lang=ru>

➤ **Химия в интересах устойчивого развития.** В журнале публикуются оригинальные научные сообщения и обзоры по химии процессов, представляющих основу принципиально новых технологий, создаваемых в интересах устойчивого развития, или усовершенствования действующих, сохранения природной среды, экономии ресурсов, энергосбережения. Входит в Перечень ВАК и систему РИНЦ.

Доступен полнотекстовый архив с 2001 по 2005 год: <http://www.sibran.ru/journals/Hviur/>

➤ **Oriental Journal Of Chemistry.** Научный рецензируемый журнал открытого доступа. Страна: Индия. Язык: английский. Публикует результаты научных исследований в области общей химии, биохимии, спектроскопии, химии окружающей среды. Доступен полнотекстовый архив с 2008 года: <http://www.orientchem.org/Archive.php>

➤ **Chemical and Process Engineering Research.** Журнал на английском языке Международного института по науке, технологиям и образованию (International Institute for Science, Technology and Education) (США, Великобритания, Гонконг). Публикует оригинальные статьи, касающиеся различных аспектов химического машиностроения, в том числе, управление процессами и контрольно-измерительными приборами данного производства.

Доступен полнотекстовый архив с 2011 года: <http://www.iiste.org/Journals/index.php/CPER/issue/archive>

➤ **Journal of Advanced Chemical Engineering.** Научный рецензируемый и реферируемый журнал открытого доступа. Страна: Египет. Язык: английский. Публикует оригинальные исследования, обзорные статьи, короткие сообщения в области химического машиностроения, современных материалов, биохимии. Доступен полнотекстовый архив с 2011 года: <http://www.ashdin.com/journals/published.aspx?jid=jace>

8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	MathCAD версия 14 или 15	Акт п/п от 21.07.09 (Гос. Контракт 487 от 28.05.09), бессрочный
2	Windows	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия, бессрочный
3	Office Standart	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия, бессрочный; Договор № 727 от 20.07.2016г., срок действия, Бессрочный.

8.5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1.	Лаборатория "Процессы и аппараты защиты окружающей среды". Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. (А-409)	Столы ученические моноблоки, Столы, стулья, доска аудиторная (меловая), проектор, ноутбук, экран переносной, установка технологического комплекса, позволяющая снизить распространение аэродисперсной системы в пространстве, установка, позволяющая создать аэродинамическую тягу
2.	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. (УЛК-203).	Переносной проектор, экран, стол преподавательский, столы ученические, стулья ученические, доска аудиторная (маркерная), ПК с выходом в сеть Интернет.
3.	Помещение для самостоятельной работы обучающихся (Г-401).	Столы, стулья, компьютеры