**Рабочая программа дисциплины (модуля) «Моделирование химико-технологических процессов», включая оценочные материалы**

## 1. Требования к результатам обучения по дисциплине (модулю)

### 1.1. Перечень компетенций, формируемых дисциплиной (модулем) в процессе освоения образовательной программы

| Группа компетенций | Категория компетенций | Коды и содержание компетенций |
|---|---|---|
| Универсальные | - | - |
| Общепрофессиональные | - | ОПК-1. Способен использовать математические, естественнонаучные и инженерные знания для решения задач своей профессиональной деятельности |
| | - | ОПК-4. Способен использовать методы математического моделирования отдельных стадий и всего технологического процесса, осуществлять теоретический анализ и экспериментальную проверку адекватности модели |
| | - | ОПК-5. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности |
| Профессиональные | - | - |

### 1.2. Компетенции и индикаторы их достижения, формируемых дисциплиной (модулем) в процессе освоения образовательной программы

| Код компетенции | Код индикатора компетенции | Содержание индикатора компетенции |
|---|---|---|
| ОПК-1 | ОПК-1.1 | Применяет при решении задач профессиональной деятельности математический аппарат, методы математического анализа и моделирования |
| ОПК-1 | ОПК-1.3 | Решает задачи профессиональной деятельности, применяя инженерные знания и основы технического регулирования |
| ОПК-4 | ОПК-4.1 | Использует математические методы и методы статистики для обработки и анализа данных при решении задач профессиональной деятельности, применяет методы математического моделирования процессов и объектов на базе стандартных пакетов прикладных программ |
| ОПК-4 | ОПК-4.2 | Осуществляет анализ, построение и экспериментальную проверку математических моделей технологического процесса и его стадий |
| ОПК-5 | ОПК-5.1 | Применяет средства современных информационных технологий для поиска, хранения, обработки, анализа и представления информации |

### 1.3. Результаты обучения по дисциплине (модулю)

**Цель изучения дисциплины (модуля)** – приобретение базовых знаний по основным разделам курса, а также умений и практических навыков в области моделирования химико-технологических процессов, используемых при решении научных и практических задач.

В результате изучения дисциплины (модуля) обучающийся должен

**знать:**

- методы построения эмпирических (статистических) и физико-химических (теоретических) моделей химико-технологических процессов;
- методы идентификации математических описаний технологических процессов на основе экспериментальных данных;
- методы оптимизации химико-технологических процессов с применением эмпирических и/или физико-химических моделей;

**уметь:**

- применять известные методы вычислительной математики и математической статистики для решения конкретных задач расчета, моделирования, идентификации

и оптимизации при исследовании, проектировании и управлении процессами химической технологии

- использовать в своей практической деятельности для достижения этих целей известные пакеты прикладных программ;

**владеть:**

- методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов
- методами вычислительной математики для разработки и реализации на компьютерах алгоритмов моделирования, идентификации и оптимизации химико-технологических процессов.

## 2. Объем, структура и содержание дисциплины (модуля)

### 2.1. Объем дисциплины (модуля)

| *Виды учебной работы* | *Формы обучения* |
|---|---|
| | *Очная* |
| **Общая трудоемкость**: зачетные единицы/часы | 4/144 |
| **Контактная работа:** | 72 |
| Занятия лекционного типа | 36 |
| Занятия семинарского типа | 36 |
| **Консультации** | 0 |
| **Промежуточная аттестация:** зачет с оценкой | 0 |
| **Самостоятельная работа** (СР) | 72 |

### 2.2. Темы (разделы) дисциплины (модуля) с указанием отведенного на них количества часов по формам образовательной деятельности

***Очная форма обучения***

| № п/п | Наименование тем (разделов) | Виды учебной работы (в часах) | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | Контактная работа | | | | | | СР |
| | | Занятия лекционного типа | | Занятия семинарского типа | | | | |
| | | Л | Иные | ПЗ | С | ЛР | Иные | |
| 1. | Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов | 12 | 0 | 6 | 0 | 6 | 0 | 24 |
| 2. | Построение физико-химических химико-технологических процессов | 12 | 0 | 6 | 0 | 6 | 0 | 24 |
| 3. | Основы оптимизации химико-технологических процессов | 12 | 0 | 6 | 0 | 6 | 0 | 24 |

***Примечания:***

Л – лекции, ПЗ – практические занятия, С – семинары, ЛР – лабораторные работы, СР – самостоятельная работа.

### 2.3. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) и видам работ

**Содержание лекционного курса**

| № п/п | Наименование тем (разделов) | Содержание лекционного курса |
|---|---|---|
| 1. | Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов | 1.1. Формулировка задачи аппроксимации данных 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.<br>1.2. Нормальный закон распределения для векторных случайных величины и определение их числовых характеристик. Математическое ожидание и дисперсия для векторных случайных величин. Дисперсионный и корреляционный анализ. Понятия дисперсии воспроизводимости и адекватности, а также - остаточной дисперсии. Определение выборочных коэффициентов корреляции и коэффициента множественной корреляции. Статистический подход к определению ошибок и погрешностей в экспериментальных точках измерений.<br>1.3. Регрессионный и корреляционный анализ для построения эмпирических моделей на основе данных пассивного эксперимента. Понятия функции отклика и факторов. Основные допущения регрессионного и корреляционного анализа. Критерии проверки однородности дисперсий. Выбор вида уравнений регрессии, а также определение коэффициентов регрессии и их значимости с использованием критерия Стьюдента. Процедура исключения незначимых коэффициентов регрессии. Определение адекватности регрессионных моделей с помощью критерия Фишера.<br>1.4. Основные положения теории планирования экспериментов (I): полный факторный эксперимент (ПФЭ) и обработка его результатов. Оптимальные свойства матрицы планирования и свойство ортогональности. Определение коэффициентов моделей, их значимости и проверка адекватности уравнения регрессии. Свойство ротатабельности полного факторного эксперимента.<br>1.5. Основные положения теории планирования экспериментов (II): ортогональный центральный композиционный план (ОЦКП) экспериментов и обработка его результатов. Обеспечение ортогональности матрицы планирования и определение величины звездного плеча. Определение коэффициентов модели, их значимости и оценка адекватности уравнения регрессии. Расчетное вычисление координат точки оптимума (экстремума).<br>1.6. Оптимизация экспериментальных исследований с применением метода Бокса-Вильсона. Основные подходы к оптимизации экспериментальных исследований. Экспериментально-статистический метод. Стратегия движения к оптимуму целевой функции (функции отклика) градиентным методом. Критерии достижения «почти стационарной области» и методы уточнения положения оптимальной точки в факторном пространстве. |
| 2. | Построение физико-химических химико-технологических процессов | 2.1 Этапы математического моделирования. Формулировка гипотез, построение математического описания, разработка моделирующего алгоритма, проверка адекватности модели и идентификация их параметров, расчетные исследования (вычислительный эксперимент).<br>2.2 Составление систем уравнений математического описания процессов и разработка (выбор) алгоритмов их решения. 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 (теплоты). Локальные интенсивности источников вещества и теплоты в потоках, соответствующие различным физико-химических процессам. Основные типы уравнений математического описания химико-технологических процессов – конечные, обыкновенные дифференциальные и дифференциальные уравнения в частных производных. |

| | | |
|---|---|---|
| | | 2.3 Математическое моделирование стационарных и динамических режимов гидравлических процессов в трубопроводных системах, глобальные и декомпозиционные методы решения систем нелинейных уравнений, а также явные и неявные методы численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Составление уравнений математического описания процесса. Построение информационных матриц математических моделей для выбора общего алгоритма решения – моделирующего алгоритма. Реализация алгоритмов решения нелинейных и обыкновенных дифференциальных уравнений. Описание стационарных режимов ХТП с применением систем линейных и нелинейных уравнений. Итерационные алгоритмы решения. Применение методов простых итераций и Ньютона-Рафсона для получения решения. Проблема сходимости процесса решения. Декомпозиционный метод решения сложных систем конечных уравнений. Построение информационной матрицы для выбора оптимального алгоритма решения задачи. Понятие жесткости систем дифференциальных уравнений и критерии жесткости. Явные (быстрые) и неявные (медленные) методы решения. Методы первого (метод Эйлера), второго (модифицированные методы Эйлера) и четвертого порядка (метод Рунге-Кутта). Оценка точности методов – ошибок усечения. Переходные ошибки и ошибки округления при численном интегрировании дифференциальных уравнений. Способы обеспечения сходимости решения задачи. Применение неявных методов для решения жестких систем дифференциальных уравнений. Определения шага интегрирования итерационным методом. Методов Крэнка-Никольсона (метод трапеций).<br>2.4 Математическое моделирование стационарных режимов процессов теплопередачи в пластинчатых и змеевиковых теплообменниках. Математическое описание процессов с применением моделей идеального смешения и вытеснения. Выбор и графическое представление алгоритмов решения. Применение стандартных методов вычислительной математики для решения задач.<br>2.5 Математическое моделирование стационарных режимов процессов теплопередачи в прямоточных и противоточных трубчатых теплообменников, решение задачи Коши и краевой задачи при интегрировании систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Математическое описание процессов с применением моделей идеального вытеснения. Решение задачи Коши и краевой задачи. Представление алгоритмов вычислений в виде информационной матрицы системы уравнений математического описания и блок-схем расчетов. Математическое описание ХТП с применением систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Описание объектов с распределенными в пространстве параметрами. Формулировка начальных и краевых условий задач решения. Численный алгоритм 1-го порядка для решения задачи Коши. Метод «пристрелки» для решения краевой задачи.<br>2.6 Математическое моделирование стационарных режимов процессов в реакторах с мешалкой. Описание микрокинетических закономерностей протекания произвольных сложных химических реакций в жидкой фазе для многокомпонентных систем. Определение ключевых компонентов сложных химических реакций с применением методов линейной алгебры - рангов матриц стехиометрических коэффициентов реакции. Математическое описание реакторного процесса с рубашкой для произвольной схемы протекания химической реакции. Выбор алгоритмов решения задачи с применением информационной матрицы системы |

| | | |
|---|---|---|
| | | уравнений математического описания и представления алгоритма решения с помощью блок-схемы расчета процесса.<br>2.7 Математическое моделирование нестационарных режимов процессов в реакторах с мешалкой. Математическая постановка задачи для реакции с произвольной стехиометрической схемой. Формулировка задачи Коши – задачи с начальными условиями. Разностное представление системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Построение информационной матрицы для выбора алгоритма решения. Графическое представление алгоритма решения в виде блок-схемы расчета.<br>2.8 Математическое моделирование стационарных режимов в трубчатых реакторах с прямоточным и противоточным движением теплоносителей. Математическая постановка задачи для реакции с конкретной стехиометрической схемой. Формулировка задачи Коши – задачи с начальными условиями и краевой задачи – задачи с краевыми условиями. Разностное представление систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Построение информационных матриц для выбора алгоритмов решения. Графическое представление алгоритмов решения в виде блок-схемы расчета.<br>2.9 Математическое моделирование нестационарных режимов процессов в трубчатых реакторах и численные алгоритмы дискретизации для решения систем дифференциальных уравнений с частными производными. Математическая постановка задачи для реакции с конкретной стехиометрической схемой. 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 и с применением однопараметрической диффузионной модели для описания гидродинамической обстановки в реакционном потоке. Алгоритмы решения в виде систем нелинейных уравнений, а также обыкновенных дифференциальных уравнений первого и второго порядков.<br>2.10 Математическое моделирование стационарных режимов процессов непрерывной многокомпонентной ректификации и абсорбции. Математическое описание процесса многокомпонентной ректификации в тарельчатой колонне. Моделирование фазового равновесия и процесса массопередачи на тарелках в многокомпонентных системах. Учет тепловых балансов на тарелках при моделировании процесса в ректификационной колонне. Декомпозиционный алгоритм расчета процесса ректификации в колонном аппарате. Математическое описание процесса многокомпонентной абсорбции в насадочной колонне. Моделирование процесса многокомпонентной массопередачи в секциях насадочной колонны. Алгоритм решения краевой задачи для моделирования процесса абсорбции в насадочной колонне. |
| 3. | Основы оптимизации химико-технологических процессов | 3.1 Решение задач оптимизации с термодинамическими, технологическими, экономическими, технико-экономическими и экологическими критериями оптимальности. Оптимальные ресурсосберегающие ХТП. Выбор критериев оптимальности (целевых функций). Формулировка многокритериальной задачи оптимизации. Особенности решения оптимизационных задач ХТП при наличии нескольких критериев оптимальности, овражном характере целевой функции и наличии ограничений 1-го и 2-го рода.<br>3.2 Алгоритмы одномерной и многомерной оптимизации. Методы сканирования, локализации экстремума, золотого сечения и чисел Фибоначи в случае одномерной оптимизации. |

| | | |
|---|---|---|
| | | Методы многомерной оптимизации нулевого, первого и второго порядков. Симплексные, случайные и градиентные методы многомерной оптимизации. Метод штрафных функций. |

**Содержание занятий семинарского типа**

| № п/п | Наименование тем (разделов) | Тип | Содержание занятий семинарского типа |
|---|---|---|---|
| 1. | Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов | ПЗ | Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов |
| | | ЛР | Обработка результатов пассивного эксперимента;<br>Обработка результатов активного эксперимента; |
| 2. | Построение физико-химических химико-технологических процессов | ПЗ | Построение физико-химических химико-технологических процессов |
| | | ЛР | Моделирование простой гидравлической системы в стационарном режиме;<br>Моделирование простой гидравлической системы в динамическом режиме; |
| 3. | Основы оптимизации химико-технологических процессов | ПЗ | Основы оптимизации химико-технологических процессов |
| | | ЛР | Моделирование химических реакторов. |

**Содержание самостоятельной работы**

| № п/п | Наименование тем (разделов) | Содержание самостоятельной работы |
|---|---|---|
| 1. | Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов | Повторение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям и лабораторным работам |
| 2. | Построение физико-химических химико-технологических процессов | Повторение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям и лабораторным работам |
| 3. | Основы оптимизации химико-технологических процессов | Повторение лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям и лабораторным работам |

## 3. Оценочные материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

По дисциплине (модулю) предусмотрены следующие виды контроля качества освоения:

- текущий контроль успеваемости;
- промежуточная аттестация обучающихся по дисциплине (модулю).

### 3.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации по дисциплине (модулю)

| № п/п | Контролируемые темы (разделы) | Наименование оценочного средства |
|---|---|---|
| 1. | Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов | Контрольная работа |
| 2. | Построение физико-химических химико-технологических процессов | Контрольная работа |
| 3. | Основы оптимизации химико-технологических процессов | Контрольная работа |

### 3.1.1 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности в процессе текущего контроля успеваемости

**Контрольный работа**

**Контрольная работа по теме 1**

1. Чем отличаются эмпирические модели от физико-химических моделей?
2. Чем отличается активный эксперимент от пассивного? Почему методология активного эксперимента может применяться для решения задач оптимизации технологических процессов?
3. Какими уравнениями описываются результаты активного эксперимента?
4. Какими уравнениями описываются результаты пассивного эксперимента?

5. Опишите методологию регрессионного анализа для построения эмпирических математических моделей химических процессов.
6. Как выбирается вид эмпирических моделей – линейных и нелинейных?
7. Дайте определение понятиям ковариации и коэффициента корреляции. Что они характеризуют? Как оценить коэффициент корреляции для простейшей линейной модели?
8. Применение методов наименьших квадратов для оценки параметров функций распределений случайных величин.
9. Как определяются коэффициенты регрессии для линейных по параметрам моделей?
10. Как определяются коэффициенты регрессии для нелинейных по параметрам моделей?
11. Опишите процедуру выбора критерия аппроксимации опытных данных и решение задачи определения коэффициентов регрессии для линейных по параметрам моделей методом наименьших квадратов для общего случая.
12. Дайте характеристику следующим матрицам, используемым при параметрической идентификации линейных и линеаризованных эмпирических моделей:

a. матрице, зависящей от независимых переменных (факторов) и вида аппроксимирующих функций;
b. информационной матрице;
c. корреляционной матрице

13. Как определить значимость коэффициентов регрессии с использованием *t*-критерия Стьюдента? Опишите процедуру отсеивания незначимых коэффициентов в пассивном эксперименте.
14. Перечислите основные допущения регрессионного анализа экспериментальных данных.
15. Этапы регрессионного анализа.
16. Как строится матрица дисперсий-ковариаций и рассчитываются её элементы в пассивном эксперименте?
17. Остаточная дисперсия, дисперсия адекватности и дисперсия воспроизводимости. Что они характеризуют?
18. Как установить адекватность уравнения регрессии с помощью критерия Фишера?
19. Как установить адекватность уравнения регрессии при отсутствии параллельных опытов?
20. Основные отличия активного и пассивного эксперимента. Как проводится полный факторный эксперимент (ПФЭ) и обрабатываются его результаты?
21. Как осуществляется ортогональное центральное композиционное планирование (ОЦКП) экспериментов и проводится обработка его результатов?
22. Опишите процедуру экспериментально-статистического метода оптимизации Бокса-Вильсона.

**Контрольная работа по теме 2**

1. Какие основные допущения принимаются при компьютерном моделировании простой гидравлической системы?
2. Как описывается движение потока жидкости через клапан?
3. Математическая модель простой гидравлической системы (стационарный и динамический режимы). Математическое описание процесса, информационная матрица системы уравнений математического описания, блок-схема алгоритма расчета.
4. Математическое описание гомогенной многостадийной многокомпонентной химической реакции. Закон действующих масс. Матрица стехиометрических коэффициентов. Выражения для скоростей реакций по всем компонентам. Определение ключевых компонентов сложной химической реакции с применением понятия ранга матрицы стехиометрических коэффициентов. Определение скорости выделения или поглощений тепла в сложной химической реакции.
5. Математическая модель стационарного режима в реакторе с мешалкой и рубашкой с произвольной схемой реакции. Изотермический, адиабатический и политропический режимы. Математическое описание процесса, информационная матрица системы

уравнений математического описания, блок-схема алгоритма расчета.
6. Математическая модель нестационарного режима в реакторе с мешалкой и рубашкой с произвольной схемой реакции. Математическое описание процесса, информационная матрица системы уравнений математического описания, блок-схема алгоритма расчета. Периодический, полупериодический, изотермический, адиабатический и политропический режимы.
7. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса в трубчатом реакторе с известным механизмом её протекания и с прямоточным движением теплоносителя в режиме идеального вытеснения.
8. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса в трубчатом реакторе с известной кинетической схемой и с противоточным движением теплоносителя в режиме идеального вытеснения.
9. Математическое описание стационарного процесса многокомпонентной массопередачи на произвольной терелке ректификационной колонны. Матрицы коэффициентов массопередачи с перекрёстными эффектами и вектор движущих сил процесса разделения. Эффективность процесса ректификации по каждому компоненту и зависимость от различных режимных, конструкционных и физико-химических параметров разделяемой смеси.
10. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса многокомпонентной ректификации в тарельчатой колонне.
11. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса многокомпонентной ректификации в насадочной колонне.
12. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса многокомпонентной абсорбции в насадочной колонне.

**Контрольная работа по теме 3**

1. Постановка задач оптимизации при проектировании и управлении химическими производствами. Необходимые условия решения задач оптимизации с ограничениями первого рода. Принципы решения многокритериальных задач оптимизации. Проблема глобального экстремума. Постановка задачи нелинейного программирования с ограничениями перового рода и второго рода.
2. Постановка задач нелинейного программирования. Ограничения 1-го и 2-го рода. Метод штрафных функций. Проблема многокритериальности целевой функции. Алгоритмы решения задачи с многоэкстремальными целевыми функциями. Алгоритмы решение задачи с овражными целевыми функциями, имеющими прямолинейный и криволинейный характер.
3. Определение оптимального времени пребывания в непрерывном реакторе с мешалкой.
4. Определение оптимального времени пребывания в периодическом реакторе с мешалкой с применением критерия выхода целевого продукта.
5. Определение оптимальной температуры в реакторе с мешалкой с применением критерия выхода целевого продукта.
6. Анализ экономических критериев оптимальности. Вывод соотношений, связывающих себестоимость, прибыль и норму прибыли в общем случае.
7. Для реакции первого порядка, протекающей в изотермическом реакторе с мешалкой, минимизировать себестоимость целевого продукта, исчисляемую с учетом затрат на сырье, амортизацию реактора и амортизационной стоимости дополнительного оборудования.
8. Для обратимой реакции первого порядка, протекающей в изотермическом реакторе с мешалкой, минимизировать стоимость потерь сырья и катализатора.
9. Для параллельной реакции первого порядка, протекающей в изотермическом реакторе с мешалкой, минимизировать себестоимость одного из продуктов, исчисляемую с учетом затрат на сырье и амортизацию реактора.

**3.1.2. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности в ходе текущего контроля успеваемости**

**Контрольная работа**

Оценивается не только глубина знаний поставленных вопросов, но и умение изложить письменно.

*Критерии оценивания:* последовательность, полнота, логичность изложения, анализ различных точек зрения, самостоятельное обобщение материала. Изложение материала без фактических ошибок.

Оценка *«отлично»* ставится в случае, когда соблюдены все критерии.

Оценка *«хорошо»* ставится, если обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, знает практическую базу, но допускает несущественные погрешности.

Оценка *«удовлетворительно»* ставится, если обучающийся освоил только основной материал, но не знает отдельных деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушает последовательность в изложении материала, затрудняется с ответами, показывает отсутствие должной связи между анализом, аргументацией и выводами.

Оценка *«неудовлетворительно»* ставится, если обучающийся не отвечает на поставленные вопросы.

**3.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации**

**3.2.1. Критерии оценки результатов обучения по дисциплине (модулю)**

| Шкала оценивания | Результаты обучения | Показатели оценивания результатов обучения |
|---|---|---|
| ОТЛИЧНО | Знает: | - обучающийся глубоко и всесторонне усвоил материал, уверенно, логично, последовательно и грамотно его излагает, опираясь на знания основной и дополнительной литературы,<br>- на основе системных научных знаний делает квалифицированные выводы и обобщения, свободно оперирует категориями и понятиями. |
| | Умеет: | - обучающийся умеет самостоятельно и правильно решать учебно-профессиональные задачи или задания, уверенно, логично, последовательно и аргументировано излагать свое решение, используя научные понятия, ссылаясь на нормативную базу. |
| | Владеет: | - обучающийся владеет рациональными методами (с использованием рациональных методик) решения сложных профессиональных задач, представленных деловыми играми, кейсами и т.д.;<br>При решении продемонстрировал навыки<br>- выделения главного,<br>- связкой теоретических положений с требованиями руководящих документов,<br>- изложения мыслей в логической последовательности,<br>- самостоятельного анализа факты, событий, явлений, процессов в их взаимосвязи и диалектическом развитии. |
| ХОРОШО | Знает: | - обучающийся твердо усвоил материал, достаточно грамотно его излагает, опираясь на знания основной и дополнительной литературы,<br>- затрудняется в формулировании квалифицированных выводов и обобщений, оперирует категориями и понятиями, но не всегда правильно их верифицирует. |
| | Умеет: | - обучающийся умеет самостоятельно и в основном правильно решать учебно-профессиональные задачи или задания, уверенно, логично, последовательно и аргументировано излагать свое решение, не в полной мере используя научные понятия и ссылки на нормативную базу. |
| | Владеет: | - обучающийся в целом владеет рациональными методами решения сложных профессиональных задач, представленных деловыми играми, кейсами и т.д.;<br>При решении смог продемонстрировать достаточность, но не глубинность навыков,<br>- выделения главного,<br>- изложения мыслей в логической последовательности,<br>- связки теоретических положений с требованиями руководящих документов, |

| | | |
|---|---|---|
| | | - самостоятельного анализа факты, событий, явлений, процессов в их взаимосвязи и диалектическом развитии. |
| УДОВЛЕТВО-РИТЕЛЬНО | Знает: | - обучающийся ориентируется в материале, однако затрудняется в его изложении;<br>- показывает недостаточность знаний основной и дополнительной литературы;<br>- слабо аргументирует научные положения;<br>- практически не способен сформулировать выводы и обобщения;<br>- частично владеет системой понятий. |
| | Умеет: | - обучающийся в основном умеет решить учебно-профессиональную задачу или задание, но допускает ошибки, слабо аргументирует свое решение, недостаточно использует научные понятия и руководящие документы. |
| | Владеет: | - обучающийся владеет некоторыми рациональными методами решения сложных профессиональных задач, представленных деловыми играми, кейсами и т.д.;<br>При решении продемонстрировал недостаточность навыков<br>- выделения главного,<br>- изложения мыслей в логической последовательности,<br>- связки теоретических положений с требованиями руководящих документов,<br>- самостоятельного анализа факты, событий, явлений, процессов в их взаимосвязи и диалектическом развитии. |
| НЕУДОВЛЕТВО-РИТЕЛЬНО | Знает: | - обучающийся не усвоил значительной части материала;<br>- не может аргументировать научные положения;<br>- не формулирует квалифицированных выводов и обобщений;<br>- не владеет системой понятий. |
| | Умеет: | обучающийся не показал умение решать учебно-профессиональную задачу или задание. |
| | Владеет: | не выполнены требования, предъявляемые к навыкам, оцениваемым «удовлетворительно». |

**3.2.2. Контрольные задания и/или иные материалы для проведения промежуточной аттестации**

**Список вопросов для устных ответов (варианты теста)**

1. Понятия модель и моделирование. Физическое и математическое моделирование.
2. Что надо понимать под компьютерной моделью реального процесса и компьютерным моделированием?
3. Этапы построения компьютерной модели ХТП.
4. Почему при построении алгоритмов решения задач рекомендуется использовать метод математической декомпозиции?
5. Анализ параметрической чувствительности и расчётные исследования. С какой целью проводятся и как строятся его статические и динамические характеристики?
6. С какой целью и как проводится анализ системы уравнений математического описания?
7. Как определяется число степеней свободы системы уравнений математического описания?
8. Как выбираются переменные (определяемые переменные) относительно которых будет решаться система уравнений математического описания?
9. Чем отличаются эмпирические модели от физико-химических моделей?
10. Чем отличается активный эксперимент от пассивного? Почему методология активного эксперимента может применяться для решения задач оптимизации технологических процессов?
11. Какими уравнениями описываются результаты активного эксперимента?
12. Какими уравнениями описываются результаты пассивного эксперимента?
13. Опишите методологию регрессионного анализа для построения эмпирических математических моделей химических процессов.
14. Как выбирается вид эмпирических моделей – линейных и нелинейных?

15. Дайте определение понятиям ковариации и коэффициента корреляции. Что они характеризуют? Как оценить коэффициент корреляции для простейшей линейной модели?
16. Применение методов наименьших квадратов для оценки параметров функций распределений случайных величин.
17. Как определяются коэффициенты регрессии для линейных по параметрам моделей?
18. Как определяются коэффициенты регрессии для нелинейных по параметрам моделей?
19. Опишите процедуру выбора критерия аппроксимации опытных данных и решение задачи определения коэффициентов регрессии для линейных по параметрам моделей методом наименьших квадратов для общего случая.
20. Дайте характеристику следующим матрицам, используемым при параметрической идентификации линейных и линеаризованных эмпирических моделей:
    a. матрице, зависящей от независимых переменных (факторов) и вида аппроксимирующих функций;
    b. информационной матрице;
    c. корреляционной матрице
21. Как определить значимость коэффициентов регрессии с использованием *t*-критерия Стьюдента? Опишите процедуру отсеивания незначимых коэффициентов в пассивном эксперименте.
22. Перечислите основные допущения регрессионного анализа экспериментальных данных.
23. Этапы регрессионного анализа.
24. Как строится матрица дисперсий-ковариаций и рассчитываются её элементы в пассивном эксперименте?
25. Остаточная дисперсия, дисперсия адекватности и дисперсия воспроизводимости. Что они характеризуют?
26. Как установить адекватность уравнения регрессии с помощью критерия Фишера?
27. Как установить адекватность уравнения регрессии при отсутствии параллельных опытов?
28. Основные отличия активного и пассивного эксперимента. Как проводится полный факторный эксперимент (ПФЭ) и обрабатываются его результаты?
29. Как осуществляется ортогональное центральное композиционное планирование (ОЦКП) экспериментов и проводится обработка его результатов?
30. Опишите процедуру экспериментально-статистического метода оптимизации Бокса-Вильсона.
31. Какие основные допущения принимаются при компьютерном моделировании простой гидравлической системы?
32. Как описывается движение потока жидкости через клапан?
33. Математическая модель простой гидравлической системы (стационарный и динамический режимы). Математическое описание процесса, информационная матрица системы уравнений математического описания, блок-схема алгоритма расчета.
34. Математическое описание гомогенной многостадийной многокомпонентной химической реакции. Закон действующих масс. Матрица стехиометрических коэффициентов. Выражения для скоростей реакций по всем компонентам. Определение ключевых компонентов сложной химической реакции с применением понятия ранга матрицы стехиометрических коэффициентов. Определение скорости выделения или поглощений тепла в сложной химической реакции.
35. Математическая модель стационарного режима в реакторе с мешалкой и рубашкой с произвольной схемой реакции. Изотермический, адиабатический и политропический режимы. Математическое описание процесса, информационная

матрица системы уравнений математического описания, блок-схема алгоритма расчета.

36. Математическая модель нестационарного режима в реакторе с мешалкой и рубашкой с произвольной схемой реакции. Математическое описание процесса, информационная матрица системы уравнений математического описания, блок-схема алгоритма расчета. Периодический, полупериодический, изотермический, адиабатический и политропический режимы.
37. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса в трубчатом реакторе с известным механизмом её протекания и с прямоточным движением теплоносителя в режиме идеального вытеснения.
38. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса в трубчатом реакторе с известной кинетической схемой и с противоточным движением теплоносителя в режиме идеального вытеснения.
39. Математическое описание стационарного процесса многокомпо-нентной массопередачи на произвольной терелке ректификационной колонны. Матрицы коэффициентов массопередачи с перекрёстными эффектами и вектор движущих сил процесса разделения. Эффективность процесса ректификации по каждому компоненту и зависимость от различных режимных, конструкционных и физико-химических параметров разделяемой смеси.
40. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса многокомпонентной ректификации в тарельчатой колонне.
41. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса многокомпонентной ректификации в насадочной колонне.
42. Математическое описание и алгоритм расчёта стационарного процесса многокомпонентной абсорбции в насадочной колонне.
43. Постановка задач оптимизации при проектировании и управлении химическими производствами. Необходимые условия решения задач оптимизации с ограничениями первого рода. Принципы решения многокритериальных задач оптимизации. Проблема глобального экстремума. Постановка задачи нелинейного программирования с ограничениями перового рода и второго рода.
44. Постановка задач нелинейного программирования. Ограничения 1-го и 2-го рода. Метод штрафных функций. Проблема многокритериальности целевой функции. Алгоритмы решения задачи с многоэкстремальными целевыми функциями. Алгоритмы решение задачи с овражными целевыми функциями, имеющими прямолинейный и криволинейный характер.
45. Определение оптимального времени пребывания в непрерывном реакторе с мешалкой.
46. Определение оптимального времени пребывания в периодическом реакторе с мешалкой с применением критерия выхода целевого продукта.
47. Определение оптимальной температуры в реакторе с мешалкой с применением критерия выхода целевого продукта.
48. Анализ экономических критерев оптимальности. Вывод соотношений связывающих себестоимость, прибыль и норму прибыли в общем случае.
49. Для реакции первого порядка, протекающей в изотермическом реакторе с мешалкой, минимизировать себестоимость целевого продукта, исчисляемую с учетом затрат на сырье, амортизацию реактора и амортизационной стоимости дополнительного оборудования.
50. Для обратимой реакции первого порядка, протекающей в изотермическом реакторе с мешалкой, минимизировать стоимость потерь сырья и катализатора.
51. Для параллельной реакции первого порядка, протекающей в изотермическом реакторе с мешалкой, минимизировать себестоимость одного из продуктов, исчисляемую с учетом затрат на сырье и амортизацию реактора.

**Тексты проблемно-аналитических и (или) практических учебно-профессиональных задач**

### 3.2.3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков в ходе промежуточной аттестации

**Процедура оценивания знаний (тест)**

| | |
|---|---|
| Предлагаемое количество заданий | 20 |
| Последовательность выборки | Определена по разделам |
| Критерии оценки | - правильный ответ на вопрос |
| «5» если | правильно выполнено 90-100% тестовых заданий |
| «4» если | правильно выполнено 70-89% тестовых заданий |
| «3» если | правильно выполнено 50-69% тестовых заданий |

**Процедура оценивания знаний (устный ответ)**

| | |
|---|---|
| Предел длительности | 10 минут |
| Предлагаемое количество заданий | 2 вопроса |
| Последовательность выборки вопросов из каждого раздела | Случайная |
| Критерии оценки | - требуемый объем и структура<br>- изложение материала без фактических ошибок<br>- логика изложения<br>- использование соответствующей терминологии<br>- стиль речи и культура речи<br>- подбор примеров их научной литературы и практики |
| «5» если | требования к ответу выполнены в полном объеме |
| «4» если | в целом выполнены требования к ответу, однако есть небольшие неточности в изложении некоторых вопросов |
| «3» если | требования выполнены частично – не выдержан объем, есть фактические ошибки, нарушена логика изложения, недостаточно используется соответствующая терминологии |

**Процедура оценивания умений и навыков (решение проблемно-аналитических и практических учебно-профессиональных задач)**

| | |
|---|---|
| Предлагаемое количество заданий | 1 |
| Последовательность выборки | Случайная |
| Критерии оценки: | - выделение и понимание проблемы<br>- умение обобщать, сопоставлять различные точки зрения<br>- полнота использования источников<br>- наличие авторской позиции<br>- соответствие ответа поставленному вопросу<br>- использование социального опыта, материалов СМИ, статистических данных<br>- логичность изложения<br>- умение сделать квалифицированные выводы и обобщения с точки зрения решения профессиональных задач<br>- умение привести пример<br>- опора на теоретические положения<br>- владение соответствующей терминологией |
| «5» если | требования к ответу выполнены в полном объеме |
| «4» если | в целом выполнены требования к ответу, однако есть небольшие неточности в изложении некоторых вопросов. Затрудняется в формулировании квалифицированных выводов и обобщений |
| «3» если | требования выполнены частично – пытается обосновать свою точку зрения, однако слабо аргументирует научные положения, практически не способен самостоятельно сформулировать выводы и обобщения, не видит связь с профессиональной деятельностью |

## 4. Учебно-методическое и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

### 4.1. Электронные учебные издания

1. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учебное пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 403 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-07524-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/516052.
2. Перевалов, В. П. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов / В. П. Перевалов, Г. И. Колдобский. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 53 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-15858-8. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/509891.
3. Химико-технологические процессы : учебник и практикум для вузов / Ю. А. Комиссаров, М. Б. Глебов, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 340 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-09169-4. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: https://urait.ru/bcode/515192.

**4.2. Электронные образовательные ресурсы**

1. Электронная библиотечная система «ЭБС ЮРАЙТ» Biblio-online.ru (ЭБС «Юрайт») [Электронный ресурс]. – URL: https://urait.ru/.
2. Электронно-библиотечная система ZNANIUM [Электронный ресурс]. – URL: https://znanium.com/.
3. Электронная библиотечная система «Консультант студента» [Электронный ресурс]. – URL: https://www.studentlibrary.ru/.
4. e-Library.ru: Научная электронная библиотека [Электронный ресурс]. – URL: http://elibrary.ru/.
5. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка» [Электронный ресурс]. – URL: http://cyberleninka.ru/.
6. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. – URL: http://window.edu.ru/.
7. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов [Электронный ресурс]. – URL: http://fcior.edu.ru/.

**4.3. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

Обучающимся обеспечен доступ (удаленный доступ) к ниже следующим современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам:

1. Словари и энциклопедии на Академике [Электронный ресурс]. – URL: http://dic.academic.ru.
2. Система информационно-правового обеспечения «Гарант» [Электронный ресурс]. – URL: http://ivo.garant.ru/.

**4.4. Комплект лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства**

1. Лицензионное программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных приложений Microsoft Office.
2. Свободно распространяемое программное обеспечение: свободные пакеты офисных приложений Apache Open Office, LibreOffice.
3. Программное обеспечение отечественного производства: справочно-правовая система «Гарант» (Электронный периодический справочник «Система ГАРАНТ»), образовательная платформа ЮРАЙТ (Электронная библиотечная система «ЭБС ЮРАЙТ» Biblio-online.ru (ЭБС «Юрайт»)), электронно-библиотечная система ZNANIUM, электронная библиотечная система «Консультант студента».

**4.5. Оборудование и технические средства обучения**

Для реализации дисциплины (модуля) используются учебные аудитории для проведения учебных занятий, которые оснащены оборудованием и техническими

средствами обучения, и помещения для самостоятельной работы обучающихся, которые оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду РХТУ им. Д.И. Менделеева. Допускается замена оборудования его виртуальными аналогами.

| **Наименование учебных аудиторий для проведения учебных занятий и помещений для самостоятельной работы*** | **Оснащенность учебных аудиторий для проведения учебных занятий и помещений для самостоятельной работы оборудованием и техническими средствами обучения** |
|---|---|
| Учебные аудитории для проведения учебных занятий | Учебная аудитория укомплектована специализированной мебелью, отвечающей всем установленным нормам и требованиям, оборудованием и техническими средствами обучения (мобильное мультимедийное оборудование). |
| Помещение для самостоятельной работы | Помещение оснащено компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду РХТУ им. Д.И. Менделеева и к ЭБС. |

* Номер конкретной аудитории указан в приказе об аудиторном фонде, расписании учебных занятий и расписании промежуточной аттестации.