

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор передовой инженерной
школы радиолокации,
радионавигации и программной
инженерии**

М.А. Кудров

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине:	Основы математического моделирования в химической технологии
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Авиационные технологии
	Физтех-школа авиационных и цифровых технологий
	кафедра фундаментальных основ газового дела
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

1 (осенний) - Дифференцированный зачет

2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 90 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 180, всего зач. ед.: 4

Программу составил: В.С. Ермолаев, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры фундаментальных основ газового дела 28.02.2025

Аннотация

Дисциплина «Основы математического моделирования в химической технологии» представляет собой комплексный курс, который включает в себя изучение теоретических и физико-химических основ математического моделирования кинетических процессов химической технологии. Курс предназначен для магистрантов, которые заинтересованы в получении глубоких знаний в области физ-мат моделирования физико-химических процессов.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- формирование у магистрантов глубоких знаний и практических навыков в области основ математического моделирования в химической технологии. Кроме того, курс направлен на развитие у магистрантов способности к самостоятельному созданию физ-мат моделей сложного оборудования химической технологии.

Задачи дисциплины

- изучение теоретических основ математического моделирования в химической технологии;
- изучение физико-химических основ кинетики;
- овладение навыками самостоятельного создания физ-мат моделей сложного оборудования химической технологии.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях
ПК-3 Способен профессионально работать с	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)

исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- знать основы математического моделирования в химической технологии.

уметь:

- уметь самостоятельно создавать физ-мат модели сложного оборудования химической технологии.

владеть:

- владеть теоретическими знаниями в области кинетики, гидравлики, гидрогазодинамики, стохастики и неравновесных процессов горения;
- иметь практические навыки решения задач, связанных с физико-химическими процессами;
- уметь анализировать и самостоятельно моделировать процессы физико-химической технологии. "

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Основные понятия химической технологии	3	3		12
2	Основы химреакций	3	3		12
3	Кинетика горения	3	3		12
4	Моделирование процессов тепло-массообмена	3	3		12
5	Применение методов математической физики в кинетических процессах	3	3		12
6	Физико-химическая гидродинамика в химической технологии	3	3		6
7	Физико-химические процессы в реакторах	3	3		6
8	Моделирование физико-химических процессов	3	3		6
9	Многокомпонентные системы в технологическом оборудовании	3	3		6
10	Транспорт массы в химическом оборудовании.	3	3		6
Итого часов		30	30		90
Подготовка к экзамену		30 час.			

Общая трудоёмкость	180 час., 4 зач.ед.
--------------------	---------------------

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Основные понятия химической технологии

Основные законы газо- и гидродинамики, кинетики, стохастики

2. Основы химреакций

Создание химических пакетов реакций

3. Кинетика горения

Учет кинетических процессов при физ-мат моделировании окислительно-восстановительных реакций

4. Моделирование процессов тепло-массообмена

Моделирование движения жидкости в сложном технологическом оборудовании. Моделирование движения газа в сложном технологическом оборудовании.

5. Применение методов математической физики в кинетических процессах

Метод конечных элементов. Метод конечных разностей. Закон сохранения массы. Закон сохранения энергии.

Семестр: 2 (Весенний)

6. Физико-химическая гидродинамика в химической технологии

Основные понятия физико-химической гидродинамики. Физико-химические свойства химического сырья. Процессы массопереноса в технологическом оборудовании.

7. Физико-химические процессы в реакторах

Конверсионно-равновесные процессы. Загрязнение катализаторов. Поверхностная активность.

8. Моделирование физико-химических процессов

Моделирование физико-химических процессов с учетом загрязнения катализаторов.

9. Многокомпонентные системы в технологическом оборудовании

Многокомпонентные системы газов и жидкостей. Взаимодействие компонентов в технологическом оборудовании.

10. Транспорт массы в химическом оборудовании.

Массоперенос в технологическом оборудовании.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиапроектором и экраном.

Компьютерный класс с установленным программным обеспечением Pipesim, HYSYS и ANSYS CFX.

Мультимедийный проектор и экран для проведения лекционных занятий.

Лабораторное оборудование для проведения практических занятий по технологиям переработки газа и компрессии газа.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Нефтегазовое дело. Полный курс [Текст] : 150-летию мировой нефтедобычи посвящается / В. В. Тетельмин, В. А. Язев - Долгопрудный: Интеллект, 2009

Дополнительная литература

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. <http://www.machinelearning.ru> – профессиональный информационно-аналитический ресурс, посвященный машинному обучению, распознаванию образов и интеллектуальному анализу данных.
2. <http://shad.yandex.ru> – сайт школы анализа данных Яндекса.
3. http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=%D0%9C%D0%B0%D1%88%D0%B8%D0%BD%D0%BE%D0%B5_%D0%BE%D0%B1%D1%83%D1%87%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5_%28%D0%BA%D1%83%D1%80%D1%81_%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%86%D0%B8%D0%B9%2C_%D0%9A.%D0%92.%D0%92%D0%BE%D1%80%D0%BE%D0%BD%D1%86%D0%BE%D0%B2%29

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

На занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций.

В процессе самостоятельной работы обучающихся предполагается использование таких программных средств, как WEKA, IPython Notebook и др.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента. В программе курса приведено минимально необходимое время для работы студента над темой. Самостоятельная работа включает в себя:

- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе);
- подготовку к практическим занятиям, выполнение домашних теоретических и практических заданий;
- подготовку к дифференцированному зачету и экзамену.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Авиационные технологии Физтех-школа авиационных и цифровых технологий кафедра фундаментальных основ газового дела
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

- 1 (осенний) - Дифференцированный зачет
- 2 (весенний) - Экзамен

Разработчик: В.С. Ермолаев, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
	ПК-2.2 Способен проводить апробацию результатов научно-исследовательской работы посредством публикации научных статей и участия в конференциях
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Основы математического моделирования в химической технологии» обучающийся должен:

знать:

- знать основы математического моделирования в химической технологии.

уметь:

- уметь самостоятельно создавать физ-мат модели сложного оборудования химической технологии.

владеть:

- владеть теоретическими знаниями в области кинетики, гидравлики, гидрогазодинамики, стохастики и неравновесных процессов горения;
- иметь практические навыки решения задач, связанных с физико-химическими процессами;
- уметь анализировать и самостоятельно моделировать процессы физико-химической технологии. "

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

1. Какие этапы включает технологическое моделирование химического оборудования.
2. Какие технологии используются в химической промышленности.
3. Какие реальные осложнения необходимо учитывать при технологическом моделировании химических процессов.
4. Какие существуют типы математических моделей в химической технологии (например, статические, динамические, дискретные, непрерывные).
5. Каковы преимущества и недостатки различных типов моделей.
6. Какие методы используются для построения математических моделей.
7. Что такое уравнения состояния, и как они применяются в химической технологии.
8. Основные понятия физико-химической гидродинамики.
9. Физико-химические свойства химического сырья.
10. Процессы массопереноса в технологическом оборудовании.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов для сдачи дифференцированного зачета:

1. Какие этапы включает технологическое моделирование химического оборудования.
2. Какие технологии используются в химической промышленности.
3. Какие реальные осложнения необходимо учитывать при технологическом моделировании химических процессов.
4. Какие существуют типы математических моделей в химической технологии (например, статические, динамические, дискретные, непрерывные).
5. Какие этапы включает химическая технология.
6. Какие технологии используются при реформинге нефти и газа.
7. Какие экономические и юридические аспекты важны для нефтегазовой отрасли.
8. Что такое нефтегазовая промышленность и как она влияет на мировую экономику.
9. Какие технологии используются при переработке нефти и газа.
10. Какие последствия может иметь нефтегазовая промышленность для окружающей среды и здоровья людей.

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена:

1. Химический состав сырья.
2. Технологии переработки химических веществ.
3. Технологии реформинга.
5. Основы моделирования кинетических процессов.
6. Основы моделирования процессов глубокой переработки нефти и газа.
7. Примеры численных методов (например, метод Эйлера, метод Рунге-Кутты).
8. Какова роль симуляции в процессах химической технологии.
9. Технологии повышения эффективности сбора газового конденсата.
10. Как модели используются для прогнозирования поведения химических процессов.
11. Как выявлять и анализировать ошибки в математических моделях.

1. Химический состав сырья.
2. Какие программы используются для моделирования процессов химической технологии.

Билет 2

1. Процессы глубокой переработки газа и газового конденсата.
2. Какие экономические и юридические аспекты важны для нефтегазовой отрасли.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Во время проведения дифференцированного зачета и экзамена обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, а также справочной литературой, вычислительной техникой, конспектами лекций. Дифференцированный зачет и экзамен может проводиться по итогам текущей успеваемости и сдачи заданий или путем организации специального опроса, проводимого в устной форме.