



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

***ВВЕДЕНИЕ В НАПРАВЛЕНИЕ***

Направление подготовки (специальность)  
18.03.01 Химическая технология

Направленность (профиль/специализация) программы  
Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов

Уровень высшего образования - бакалавриат

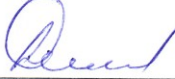
Форма обучения  
заочная

Институт/ факультет	Институт металлургии, машиностроения и материалобработки
Кафедра	Металлургии и химических технологий
Курс	1

Магнитогорск  
2024 год


Программа практики/НИР составлена на основе ФГОС ВО - бакалавриат по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (приказ Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 922)

Программа практики/НИР рассмотрена и одобрена на заседании кафедры  
Металлургии и химических технологий  
09.01.2024 протокол №4

Зав. кафедрой  А.С. Харченко

Программа практики/НИР одобрена методической комиссией ИММиМ  
20.02.2024 г. Протокол № 4

Председатель  А.С. Савинов

Программа составлена:  
профессор кафедры МиХТ, д-р физ.-мат. наук  А.Н.  
Смирнов

Рецензент:  
доцент кафедры Химии, канд. техн. наук  Л.Г. Коляда

## Лист актуализации рабочей программы

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2025 - 2026 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2026 - 2027 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2027 - 2028 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2028 - 2029 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

---

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2029 - 2030 учебном году на заседании кафедры Металлургии и химических технологий

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ А.С. Харченко

### 1 Цели освоения дисциплины (модуля)

формирование начальных знаний и основных понятий в области химической технологии для раскрытия ее социальной, экономической и экологической значимости для России.

### 2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Введение в направление входит в обязательную часть учебного плана образовательной программы.

Для изучения дисциплины необходимы знания (умения, владения), сформированные в результате изучения дисциплин/ практик:

- Химия. Курс средней школы;
- Физика. Курс средней школы;
- Математика. Курс средней школы.

Знания (умения, владения), полученные при изучении данной дисциплины будут необходимы для изучения дисциплин/практик:

Общая химическая технология

Физическая химия

Органическая химия

Процессы и аппараты химической технологии

Массообменные процессы химической технологии

Химические реакторы

Теоретические основы химической технологии топлива и углеродных материалов

### 3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) и планируемые результаты обучения

В результате освоения дисциплины (модуля) «Введение в направление» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции
ОПК-1	Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов
ОПК-1.1	Использует законы химии при изучении и анализе технологических процессов и процессов в окружающем мире
ОПК-1.2	Решает технологические задачи с использованием знаний о строении веществ, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, веществ и материалов
ОПК-1.3	Применяет знания о закономерностях химических процессов при решении технологических задач

#### 4. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц 72 акад. часов, в том числе:

- контактная работа – 4,4 акад. часов;
- аудиторная – 4 акад. часов;
- внеаудиторная – 0,4 акад. часов;
- самостоятельная работа – 63,7 акад. часов;
- в форме практической подготовки – 0 акад. час;

– подготовка к зачёту – 3,9 акад. час

Форма аттестации - зачет

Раздел/ тема дисциплины	Курс	Аудиторная контактная работа (в акад. часах)			Самостоятельная работа студента	Вид самостоятельной работы	Форма текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Код компетенции
		Лек.	лаб. зан.	практ. зан.				
1. Введение								
1.1 Химическая промышленность, хими-ческая технология. Общие сведения.	1	1			4	Самостоятельное изучение учебной литературы	Собеседование, тестирование	ОПК-1.1
1.2 Химические лаборатории. Химическая посуда и оборудование					4	Самостоятельное изучение учебной литературы	Собеседование, тестирование	ОПК-1.1
Итого по разделу		1			8			
2. Основные естественнонаучные законы, на которых базируется химическая техно-логия. Расчеты								
2.1 Расчеты на основе законов газового состояния, составов смесей, стехиометрические расчеты	1	0,5		1	10	Самостоятельное изучение учебной и научной литературы. Подготовка к собеседованию, тестированию, Выполнение домашней контрольной работы	Собеседование, тестирование Домашняя контрольная рабо-та	ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-1.3
2.2 Физические величины, применяемые в техно-химических расчетах. Правила вы-числения					6	Самостоятельное изучение учебной и научной литературы. Подготовка к собеседованию, Выполнение домашней контрольной работы	Собеседование, Домашняя контрольная рабо-та	ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-1.3

Итого по разделу		0,5		1	16			
3. Основные виды природного топлива. Способы его переработки. Характеристики топлива.								
3.1 Твердые горючие ископаемые. Жидкое топливо. Газообразное топливо	1	0,5			12	Самостоятельное изучение учебной литературы. Подготовка к собеседованию, тестированию, Выполнение домашней контрольной работы	Собеседование, тестирование Домашняя контрольная работа	ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-1.3
3.2 Расчеты, связанные с расходом сырья и его характеристиками				1	13,7	Самостоятельное изучение учебной литературы. Подготовка к собеседованию, Выполнение домашней контрольной работы	Собеседование, Домашняя контрольная работа	ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-1.3
Итого по разделу		0,5		1	25,7			
4. Основные химические производства. Общая характеристика								
4.1 . Производство основных продуктов неорганического, органического синтеза строительных и огнеупорных материалов.	1				14	Самостоятельное изучение учебной и научной литературы. Подготовка к собеседованию, тестированию, Выполнение домашней контрольной работы	Собеседование, тестирование Домашняя контрольная работа	ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-1.3
Итого по разделу					14			
Итого за семестр		2		2	63,7		зачёт	
Итого по дисциплине		2		2	63,7		зачет	

## **5 Образовательные технологии**

Проектирование обучения строится на основе следующих принципов:

- Обучение на основе интеграции с наукой и производством.
- Профессионально-творческая направленность обучения.
- Ориентированность обучения на личность.
- Ориентированность обучения на развитие опыта самообразовательной деятельности будущего специалиста.

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине «Химические реакторы» используются различные образовательные технологии:

1. Традиционные образовательные технологии: информационная лекция и практические занятия.

2. Информационно-коммуникационные образовательные технологии: лекция-визуализация. Практическое занятие в форме презентации – представление результатов с использованием специализированных программных сред.

3. Информационно-развивающие технологии, направленные на формирование системы знаний, запоминание и свободное оперирование ими. При самостоятельном изучении литературы применение современных информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации.

4. Деятельностные практико-ориентированные технологии, направленные на формирование системы профессиональных практических умений при разборе конкретных ситуаций, основанных на практических примерах, обеспечивающих возможность качественно выполнять профессиональную деятельность.

5. Развивающие проблемно-ориентированные технологии, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения.

6. Интерактивные технологии: коллективное обсуждение какого-либо спорного вопроса, проблемы, выявление мнений в группе. Изложение проблем и их совместное решение.

7. Личностно-ориентированные технологии обучения, обеспечивающие в ходе учебного процесса учет различных способностей обучаемых, создание необходимых условий для развития их индивидуальных способностей, развитие активности личности в учебном процессе. Личностно-ориентированные технологии обучения реализуются в результате индивидуального общения преподавателя и студента.

## **6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся**

Представлено в приложении 1.

## **7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации**

Представлены в приложении 2.

## **8 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)**

### **а) Основная литература:**

1. Химия нефти и газа : учеб. пособие / В.Д. Рябов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : ИД «ФОРУМ» : ИНФРА-М, 2019. — 335 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). - Текст : электронный. - URL: <https://new.znanium.com/catalog/product/940691>

2. Линник, Ю. Н. Технологические основы добычи и переработки топливно-энергетических ресурсов : учебник / Ю. Н. Линник, В. Ю. Линник, В. Б.

Воронцов ; под общ. ред. Ю.Н. Линника. — Москва : ИНФРА-М, 2020. — 457 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-015474-9. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1035676>  
. – Режим доступа: по подписке.

#### **б) Дополнительная литература:**

1. Летовальцев, А. О. Химическая технология: металлургия, коррозия металлов и способы защиты от нее, сырьевое и энергетическое обеспечение химических производств, химическое материаловедение: учебное пособие / А. О. Летовальцев, Е. А. Решетникова ; Южный федеральный университет. — Ростов-на Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2019. - 102 с. - ISBN 978-5-9275-3174-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1088139>  
. – Режим доступа: по подписке.

2. Афанасьев, В. Я. Уголь России: состояние и перспективы : монография / В.Я. Афанасьев, Ю.Н. Линник, В.Ю. Линник. — Москва : ИНФРА-М, 2023. — 271 с. — (Научная мысль). — DOI 10.12737/2760. - ISBN 978-5-16-009436-6. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1912392>  
. – Режим доступа: по подписке.

3. Топливо, смазочные материалы и технические жидкости : учеб. пособие / В.В. Остриков [и др.] ; под общ. ред. В. В. Острикова. - Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2019. - 244 с. - ISBN 978-5-9729-0321-4. - Режим доступа: <https://new.znanium.com/catalog/product/1048739>

4. Смирнов, А. Н. Производство химических продуктов : учебное пособие. Ч. 1 / А. Н. Смирнов, С. А. Крылова, В. И. Сысоев; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2018. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - URL: <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/2227>  
- Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

5. Производство химических продуктов. Ч. 2. Производство серной кислоты : практикум / А. Н. Смирнов [и др.] ; Магнитогорский гос. технический ун-т им. Г. И. Носова. - Магнитогорск : МГТУ им. Г. И. Носова, 2019. - 1 CD-ROM. - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/2514>

#### **в) Методические указания:**

1. 1 Крылова, С. А. Введение в направление "Химическая технология" : практикум / С. А. Крылова, И. В. Понурко ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2019. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL : <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/2460>  
- Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

2. Крылова, С. А. Общая химическая технология : учебное пособие / С. А. Крылова, Р. Н. Абдрахманов, И. В. Понурко ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2017. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/1389>  
. - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

#### **г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:**



### Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
MS Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно
7Zip	свободно распространяемое	бессрочно
FAR Manager	свободно распространяемое	бессрочно
Chemcraft Windows	Д-933-14 от 17.07.2014	бессрочно
Браузер Yandex	свободно распространяемое	бессрочно

### Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Электронная база периодических изданий East View Information Services, ООО «ИВИС»	<a href="https://dlib.eastview.com/">https://dlib.eastview.com/</a>
Национальная информационно-аналитическая система – Российский индекс научного цитирования (РИНЦ)	URL: <a href="https://elibrary.ru/project_risc.asp">https://elibrary.ru/project_risc.asp</a>
Поисковая система Академия Google (Google Scholar)	URL: <a href="https://scholar.google.ru/">https://scholar.google.ru/</a>
Электронные ресурсы библиотеки МГТУ им. Г.И. Носова	<a href="https://host.megaprolib.net/MP0109/Web">https://host.megaprolib.net/MP0109/Web</a>

### 9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа

Мультимедийные средства хранения, передачи и представления информации.

Учебная аудитория для проведения практических занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации Доска, учебные столы, стулья

Учебная аудитория для проведения практических занятий:

Химическая лаборатория.

Химическая посуда, реактивы, весы лабораторные равноплечие ВЛР-200, Весы электронные лабораторные ВК-300, Низкотемпературная лабораторная электропечь SNOL10/10, электропечь сопротивления камерная лабораторная СНОЛ 10/10, магнитные мешалки, эл. Плитки.

Учебные аудитории для самостоятельной работы обучающихся Персональные компьютеры с пакетом MS Office, выходом в Интернет и с доступом в электронную информационно-образовательную среду университета

Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования Стеллажи для хранения оборудования

Методическая литература для учебных занятий

Химическая посуда

Инструменты для ремонта и профилактического обслуживания учебного оборудования

## 6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

По дисциплине «Планирование эксперимента и моделирование химико-технологических процессов» предусмотрена аудиторная и внеаудиторная работа обучающихся.

Аудиторная работа студентов предполагает решение задач на практических занятиях.

Аудиторные работы. Блок № (БЛ):

БЛ №1 «Общие вопросы моделирования»

№1. Составить блок-схему для вычисления суммы квадратов первых  $N$  чисел натурального ряда.

№2. Составить блок-схему для решения задачи. Каково время падения тела, если известны высота, ускорение, начальная скорость. Примечание: предусмотреть корректную обработку всех возможных случаев: решение не имеет корней; один, два корня; задача не имеет физического смысла.

БЛ №2 «Аналитический подход к моделированию ХТП»

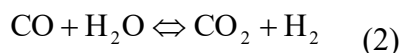
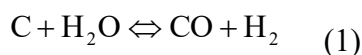
№1. Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве  $C=10^{-5}$  моль / л. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.

№2. Рассчитать ионно-молекулярный состав раствора в присутствии растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.

№3. Значение pH раствора регулируется изменением концентрации соды. Рассчитать концентрацию  $[CO_3^{2-}]$  ионов в растворе, с учётом растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.

№4. При каком значении pH достигается практически полное осаждение MnS ( $IP_{MnS} = 2.5 \cdot 10^{-10}$ ), содержащегося в растворе в количестве 0,005 моль, при употреблении 50 % избытка осадителя. Расчёт произвести на 1 л исследуемого раствора. Все численные расчёты произвести в табличном процессоре, аналитические записи предоставить в бумажном виде. Из каких соображений находится концентрация марганца  $[Mn^{2+}]$ , и между какими химическими формами осуществляется материальный баланс по сере избыточной концентрации осадителя?

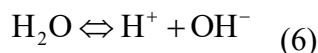
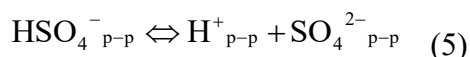
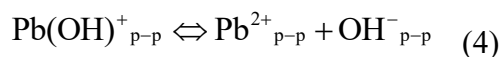
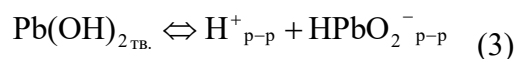
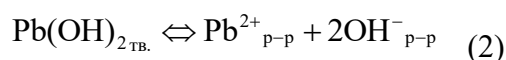
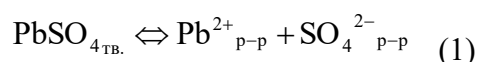
№5. Пример 5. Рассчитать равновесный состав газовой фазы для установившегося тер-модинамического равновесия получения водяного газа по реакциям:



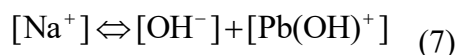
В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно рСО.

№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении рН происходит переход PbSO<sub>4</sub> в Pb(OH)<sub>2</sub>. Изменение рН происходит за счёт NaOH.

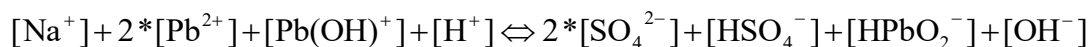
В системе предполагается протекание следующих химических реакций:



Уравнение материального баланса:



Уравнение электронейтральности:



Примечание: при решении задачи необходимо по имеющимся уравнениям составить систему нелинейных уравнений, из неё вывести уравнение:

$$2 * K_2^2 * K_4 * K_5 * [\text{H}^{+}]^4 + K_2 * K_5 * K_w (2 * K_2 + K_4 * K_w) * [\text{H}^{+}]^3 - K_4 * K_w^2 (K_1 * K_w^2 + K_2 * K_3 * K_5) * [\text{H}^{+}] - 2 * K_1 * K_4 * K_5 * K_w^4 = 0$$

Из справочных данных необходимо определить константы химических реакций K1 – K6 соответствующих реакций (1)-(6).

Из практических соображений установить, с какой точностью необходимо вычислять значение рН.

Нелинейное уравнение необходимо решить четырьмя методами: графическим, половинного деления, Ньютона, хорд. Сделать вывод о быстроте сходимости каждого из

методов при заданной точности получаемого результата, а также пригодности для решения задачи физико-химического моделирования.

Рассмотреть эвристический метод, основанный на специфике решаемой задачи, решения системы нелинейных уравнений.

Все вычисления произвести в табличном процессоре.

№7. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

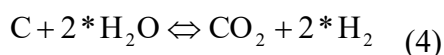
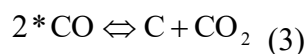
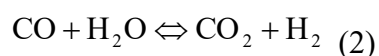
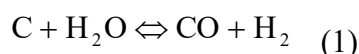
№8. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3) и (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) и (5) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

№9. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (1), (3), (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (1) на моделируемую систему и итоговое значение рН.

№10. Решить нелинейное уравнение из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.

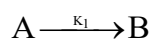
№11. Решить систему нелинейных уравнений из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.

№12. Исходя из понятия линейная зависимость/независимость химических реакций, с помощью встроенных математических функций MathCad для системы реакций



Определить количество линейно-независимых химических реакций. Что это означает с точки зрения математического описания данной системы реакций.

№13. Для необратимой реакции первого порядка:



Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации А. Решить полученное дифференциальное уравнение методом Эйлера, модифицированным методом

Эйлера, Рунге-Кутта. Сделать вывод о точности каждого из методов в сравнении друг с другом. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров:

$$C_0A = 0,7 \text{ моль/л; } k_1 = 0,001 \text{ 1/с; } h = 0,1 \text{ (шаг интегрирования).}$$

№14. Для последовательной схемы необратимых химических реакций первого порядка: А



Составить систему дифференциальных уравнений и решить её с помощью метода Эйлера, модифицированного Эйлера, Рунге-Кутта 4-ого порядка. Сделать вывод о точности получаемого решения, сравнивая методы между собой. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров:

$$C_0A = 0,5 \text{ моль/л; } C_0B = C_0C = 0 \text{ моль/л; } k_1 = 0,05 \text{ 1/с; } k_2 = 0,07 \text{ 1/с; } h = 0,1 \text{ (шаг интегрирования).}$$

БЛ №3 «Экспериментальный подход»

№15. С надёжностью  $P = 0,95$  обеспечить однородность представленных в таблице данных, исключив грубые ошибки.

к	1	2	3	4	5	6	7	8
$y_k, \%$	54	53	54	30	46	52	55	54
$\Delta y_k, \%$	4,2	3,2	4,2	-19,8	-3,8	2,2	5,2	4,2
$\Delta y_k^2, \%$	18	10	18	392	14	4,8	27	18

Решение данной задачи осуществить на основе двух методов: правила  $2\sigma$  и критерия максимального отклонения  $r$ . Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.

№16. С помощью анализа однородности средних. Дать заключение о возможности преимущества ( $P = 0,95$ ) одного аппарата перед другим по производительности.

$y_k \setminus k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$\Sigma$
$y_{k1}$	188	192	189	193	190	191	190	188	190	-	1711
$y_{k2}$	193	192	189	194	195	192	194	198	196	195	1933

Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.

№17. Для проверки правильности вольтамперометрической (ВА) методики определения кадмия Cd использовали атомно-абсорбционную (АА) методику, не содержащую систематической погрешности. При анализе одного и того же объекта получены следующие результаты (нг / мл Cd):

ВА : 20,5; 22,4; 23,4; 20,8

АА: 23,5; 20,1; 19,9; 19,2; 19,0; 22,8

Содержит ли вольтамперометрическая методика систематическую погрешность?

Расчёты выполнить с использованием табличного процессора без использования специальной надстройки.

№18. Решить задачу №17 используя надстройку табличного процессора.

№19. Используя три различных генерирующих соотношения, составить планы экспериментов ДФЭ25-2. Записать формулы для расчёта коэффициентов линейной модели.

№20. На основе латинских квадратов составить пятиуровневый план пятифакторного эксперимента для исследования процесса инфракрасной сушки гранулированных материалов в вакууме при импульсном энергоподводе. Получить математическую в виде суммы нелинейных функций и найти оптимальные значения режимных параметров процесса: плотности теплового потока на поверхности слоя материала CI (Вт/см<sup>2</sup>), толщина слоя продукта CII (мм), диаметра гранул CIII (мм), величины разряжения CIV (мм. рт.ст.) и скважности импульса CV (% , отношение времени работы инфракрасной сушилки к общему времени пребывания в сушильной камере). Выходом процесса y (руб/т) или критерием оптимальности принята величина приведённых доходов с учётом производительности установки и потребляемой мощности.

Уровни	1	2	3	4	5
CI (Вт/см <sup>2</sup> )	0,50	0,75	1,00	1,25	1,50
CII (мм)	5	10	15	20	25
CIII (мм)	2	3	4	5	6
CIV (мм. рт.ст.)	0	150	300	450	600
CV	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
x(безразм.)	-2	-1	0	1	2

u	План	$\bar{y}$	u	План	$\bar{y}$	u	План	$\bar{y}$	u	План	$\bar{y}$
		руб/т			руб/т			руб/т			руб/т

1	11111	130	8	41352	270	15	21543	320	22	12345	200
2	23451	140	9	53142	320	16	44444	320	23	24135	170
3	35241	230	10	15432	200	17	51234	390	24	31425	240
4	42531	290	11	33333	400	18	13524	240	25	432151	250
5	54321	260	12	45123	260	19	25314	220			
6	22222	350	13	52413	340	20	32154	220			
7	34512	260	14	14253	180	21	55555	40			

БЛ №4 «Комбинированный подход»

№ 21. По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 24 рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса М25 и М10, сравнить их с предложенными в самой научной статье.

Указание к выполнению задания: на листе ТП в информативном виде создать таблицу планирования эксперимента ПФЭ 24, ввести средние значения показателей качества кокса М25 и М10 и рассчитать коэффициенты линейной модели.

#### Содержание практического раздела дисциплины

- 1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд;
- 2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона;
- 3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка по-полам.
- 4) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения нелинейных уравнений;
- 5) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Эйлера.
- 6) Алгоритм решения дифференциальных уравнений модифицированным методом Эйлера.
- 7) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Рунге-Куты четвёртого порядка.
- 8) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения дифференциальных уравнений;
- 9) Решение систем дифференциальных уравнений методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Куты.
- 10) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения систем дифференциальных уравнений.
- 11) Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10) в пакете MathCad.
- 12) Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования.
- 13) Использование программы MathCad для решения задач математического программирования.

## Перечень вопросов к экзамену

Общие вопросы моделирования:

1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей;

2. Сущность аналитического подхода к математическому моделированию. Моделирование ХТП при аналитическом подходе;

3. Сущность экспериментального подхода к математическому моделированию;

4. Сущность комбинированного подхода к математическому моделированию;

5. Триединство при описании объекта моделирования. Требования к каждой из составной части при описании объекта;

6. Основные этапы моделирования (с поясняющими примерами).

Аналитический подход к созданию математических моделей:

7. Уравнение изотермы химической реакции при различном способе выражения концентрации. Выражение уравнения изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Соотношения для констант равновесия  $K_N$ ,  $K_m$ ,  $K_c$  в идеальном растворе;

8. Метод Тёмкина-Шварцмана расчёта констант равновесия химической реакции. Понятие о линейной зависимости и независимости уравнений химических реакций. Основные способы определения линейно независимых уравнений химических реакций;

9. Возможности моделирования при термодинамическом подходе к определению равновесных значений участвующих в химических реакциях веществ. Основные достоинства и недостатки при термодинамическом подходе.

10. Основные понятия и определения формальной кинетики: скорость химической реакции, способы её выражения, молекулярность реакции, порядок реакции, частный порядок реакции, постулат химической кинетики (уравнение Гульдберга и Вааге), константа скорости химической реакции (правило Вант-Гоффа, уравнение Аррениуса);

11. Скорость необратимых реакций первого, второго, n-ого порядков. Обратимая реакция первого порядка;

12. Обратимая реакция второго порядка (разобрать только частный случай: отсутствие в начальный момент времени продуктов реакции, начальные концентрации реагирующих веществ равны между собой). Параллельные реакции;

13. Последовательные реакции первого порядка (для трёх химических соединений). Разобрать различные случаи соотношения между собой констант химических реакций;

14. Общее уравнение динамики и скорости химической реакции, протекающей в потоке в режиме идеального вытеснения. Необратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения.

15. Обратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения. Последовательная реакция первого порядка, протекающая в потоке в режиме идеального вытеснения.

16. Кинетика гомогенных реакций, протекающих в режиме идеального перемешивания.

Экспериментальный подход к созданию математических моделей:

17. Статистические методы анализа экспериментальных данных: оценка истинного значения измеряемой величины и её дисперсии; определение грубых ошибок; средневзвешенные оценки дисперсии; анализ однородности исходных оценок дисперсии.



18. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения.

19. Метод наименьших квадратов. Сущность планирования эксперимента в сравнении с непосредственным применением метода наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов.

20. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ $2^n$ . Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ $2^n$ . Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.

21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ $2^{n-p}$ . Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ $2^n$  ДФЭ $2^{n-p}$  для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости.

22. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры.

23. Применение методов приближённых вычислений при обработке результатов экспериментов. Оценки точности измерений и приближённых вычислений. Оценка точности окончательного результата. Практическое вычисление ошибок.

Численные методы решения задач, возникающих при моделировании:

24. Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам;

25. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона;

26. Решение нелинейного уравнения методом хорд;

27. Решение дифференциального уравнения методом Эйлера. Модифицированный метод Эйлера. Адаптация метода Эйлера на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;

28. Решение дифференциального уравнения методом Рунге-Куты четвёртого порядка. Адаптация метода Рунге-Куты на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;

**7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации****а) Планируемые результаты обучения и оценочные средства для проведения промежуточной аттестации:**

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции	Оценочные средства
		ОПК-2: Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-2.1:	Использует математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей;</li><li>2. Основные понятия и определения формальной кинетики: скорость химической реакции, способы её выражения, молекулярность реакции, порядок реакции, частный порядок реакции, постулат химической кинетики (уравнение Гульдберга и Вааге), константа скорости химической реакции (правило Вант-Гоффа, уравнение Аррениуса);</li><li>3. Метод наименьших квадратов. Планирования эксперимента в сравнении с непосредственным применением метода наименьших квадратов.</li></ol>
----------	---	---

ОПК-2.2:	Выбирает математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности	<p>Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве <math>C=10^{-5}</math> моль / л. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p> <p>Решение дифференциального уравнения методом Эйлера. Модифицированный метод Эйлера. Адаптация метода Эйлера на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;</p>
ОПК-5: Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные		

ОПК 5.1:	Выбирает и применяет методы и средства измерения для определения свойств материалов и готовой продукции	<p>Решение дифференциального уравнения методом Рунге-Куты четвёртого порядка. Адаптация метода Рунге-Куты на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП</p> <p>Для необратимой реакции первого порядка:</p> $A \xrightarrow{k_1} B$ <p>Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации А. Решить полученное дифференциальное уравнение методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Кутта. Сделать вывод о точности каждого из методов в сравнении друг с другом.:</p> $C_A^0 = 0,7 \text{ моль/л}; k_1 = 0,001 \text{ 1/с}; h = 0,1 \text{ (шаг интегрирования)}.$
----------	---	---

ОПК 5.2:	Проводит экспериментальные исследования и использует основные приёмы обработки и представления полученных данных	<p>По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 2<sup>4</sup> рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса М<sub>25</sub> и М<sub>10</sub>, сравнить их с предложенными в самой научной статье.</p> <p>При каком значении рН достигается практически полное осаждение MnS (<math>IP_{MnS} = 2.5 \cdot 10^{-10}</math>), содержащегося в растворе в количестве 0,005 моль, при употреблении 50 % избытка осадителя. Расчёт произвести на 1 л исследуемого раствора. Все численные расчёты произвести в табличном процессоре, аналитические записи предоставить в бумажном виде.</p> <p>Из каких соображений находится концентрация марганца [Mn<sup>2+</sup>], и между какими химическими формами осуществляется материальный баланс по сере избыточной концентрации осадителя?</p>
----------	--	---

**б) Порядок проведения промежуточной аттестации, показатели и критерии оценивания:**

Промежуточная аттестация по дисциплине включает теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень усвоения обучающимися знаний, и практические задания, выявляющие степень сформированности умений и владений, проводится в форме *экзамена*.

Экзамен по данной дисциплине проводится в устной форме по экзаменационным билетам, каждый из которых включает 2 теоретических вопроса и одно практическое задание.

**Показатели и критерии оценивания экзамена:**

– на оценку **«отлично»** (5 баллов) – обучающийся демонстрирует высокий уровень сформированности компетенций, всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, свободно выполняет практические задания, свободно оперирует знаниями, умениями, применяет их в ситуациях повышенной сложности.

– на оценку **«хорошо»** (4 балла) – обучающийся демонстрирует средний уровень сформированности компетенций: основные знания, умения освоены, но допускаются незначительные ошибки, неточности, затруднения при аналитических операциях, переносе знаний и умений на новые, нестандартные ситуации.

– на оценку **«удовлетворительно»** (3 балла) – обучающийся демонстрирует пороговый уровень сформированности компетенций: в ходе контрольных мероприятий допускаются ошибки, проявляется отсутствие отдельных знаний, умений, навыков, обучающийся испытывает значительные затруднения при оперировании знаниями и умениями при их переносе на новые ситуации.

– на оценку **«неудовлетворительно»** (2 балла) – обучающийся демонстрирует знания не более 20% теоретического материала, допускает существенные ошибки, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.

– на оценку **«неудовлетворительно»** (1 балл) – обучающийся не может показать знания на уровне воспроизведения и объяснения информации, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.