



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)

***ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА И МОДЕЛИРОВАНИЕ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ***

Направление подготовки (специальность)
18.03.01 Химическая технология

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

Уровень высшего образования - бакалавриат

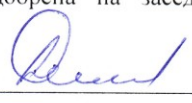
Форма обучения
очная

Институт/ факультет	Институт металлургии, машиностроения и материалообработки
Кафедра	Металлургии и химических технологий
Курс	4
Семестр	8

Магнитогорск
2024 год

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

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры
Металлургии и химических технологий
09.01.2024 протокол №4

Зав. кафедрой  А.С. Харченко

Рабочая программа 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

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

свободное владение основными методами построения, численного решения, реализации (представления) и исследования с помощью ЭВМ математических моделей;
освоение существующих основных математических моделей, используемых при описании химико-технологических процессов.

2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Планирование эксперимента и моделирование химико-технологических процессов входит в обязательную часть учебного плана образовательной программы.

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

Математика

Физическая химия

Химические реакторы

Массообменные процессы химической технологии

Техническая термодинамика и теплотехника

Процессы и аппараты химической технологии

Коллоидная химия

Общая и неорганическая химия

Общая химическая технология

Коксование углей

Подготовка углей для коксования

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

Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы

Учебно-исследовательская работа студента

Производственная - преддипломная практика

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

В результате освоения дисциплины (модуля) «Планирование эксперимента и моделирование химико-технологических процессов» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции
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
ОПК-2.2	Выбирает математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности
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
ОПК-5.2	Проводит экспериментальные исследования и использует основные приёмы обработки и представления полученных данных

4. Структура, объём и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц 144 акад. часов, в том числе:

- контактная работа – 80,95 акад. часов;
- аудиторная – 77 акад. часов;
- внеаудиторная – 3,95 акад. часов;
- самостоятельная работа – 45,35 акад. часов;
- в форме практической подготовки – 4 акад. час;
- подготовка к экзамену – 17,7 акад. час

Форма аттестации - экзамен

Раздел/ тема дисциплины	Семестр	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. Раздел "Общие вопросы моделирования"								
1.1 Общее понятие модели. Многообразие форм представления модели. Понятие о математическом моделировании. Основные подходы к построению математических моделей. Аналитический подход к моделированию. Экспериментальный подход к моделированию. Комбинированный подход к моделированию. Основные этапы построения математических моделей. Триединство процесса моделирования: модель,	8	3		4	10	Выполнение практических работ (Блок №1).	Коллоквиум.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2
1.2 Примеры математического моделирования из различных областей знания (физика, биология).		1			3	Выполнение практических работ (Блок №1).	Коллоквиум.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2
Итого по разделу		4		4	13			
2. Раздел "Аналитический подход к моделированию химико-технологических процессов"								

2.1 Понятие о физико-химическом моделировании. Основные сведения из курса "Физическая химия". Термодинамика химических превращений. Направление химических реакций. Уравнение изотермы химической реакции. Способы описания концентрации реагирующих веществ. Изменение энергии Гиббса в ходе реакции. Уравнение изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Гетерогенное химическое равновесие: запись констант равновесия. Определение констант равновесия при различных температурах. Понятие о линейной зависимости химических реакций. Метод Тёмкина-Шварцмана для расчёта констант равновесия. Расчёт константы равновесия на основе равновесных концентраций реагирующих веществ. Расчёт равновесных концентраций на основе константы равновесия. Методика расчёта равновесных концентраций при одновременном протекании нескольких реакций (методика моделирования равновесного состава раствора). Ограничения термодинамического подхода в случае моделирования (расчёта) равновесного состава реагирующих веществ.	8	4		12	5	Выполнение практических работ (Блок №2).	Коллоквиум по задачам.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2
2.2 Кинетические особенности протекания химических реакций. Методика составления систем уравнений, описывающих равновесные концентрации веществ, принимающих участие в химических реакциях.		5		8	4	Выполнение практических работ (Блок №3).	Коллоквиум по задачам.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2

2.3 Дифференциальные уравнения непрерывности потока для неустановившегося движения несжимаемой жидкости, теплопроводности, конвективной теплопроводности, диффузии, конвективной диффузии; уравнение материального баланса для элементарного объёма реактора любого типа. Общие сведения о теории подобия. Основные критерии подобия. Критериальные		5			4,35	Подготовка к семинарскому занятию.	Семинарское занятие.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2
Итого по разделу		14		20	13,35			
3. Раздел "Экспериментальный подход"								
3.1 Статистические методы анализа экспериментальных данных. Экспериментальные оценки истинного значения измеряемой случайной величины и её дисперсии. Определение грубых ошибок среди результатов повторностей опыта. Средневзвешенные оценки дисперсии. Анализ однородности исходных оценок дисперсии. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения.	8	5		8	3	Выполнение практических работ (Блок №4).		ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2

3.2 Планирование и обработка результатов однофакторного экспериментов. Формализация экспериментальных данных методом 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. Двухуровневые планы многофакторных экспериментов. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ2п. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ2п. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности. Дробный факторный эксперимент ДФЭ2п-п'. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ2п ДФЭ2п-п' для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости. Рассмотрение примеров. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для							
	6		2	8	Выполнение практических работ (Блок №4).		ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2
Итого по разделу	11		10	11			
4. Раздел "Комбинированный метод"							

4.1 Особенности комбинированных математических моделей. Рассмотрение математических моделей из области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10).	8	4		10	8	Подготовка к семинарскому занятию.	Семинарское занятие.	ОПК-2.1, ОПК-2.2, ОПК-5.1, ОПК-5.2
Итого по разделу		4		10	8			
5. Раздел "Экзамен"								
5.1 Экзамен	8					Подготовка к экзамену	Экзамен	ОПК-2.1, ОПК-5.1
Итого по разделу								
Итого за семестр		33		44	45,35		экзамен	
Итого по дисциплине		33		44	45,35		экзамен	

5 Образовательные технологии

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов» используются различные образовательные технологии:

1. Информационно-развивающие технологии, направленные на овладение большим запасом знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется лекционно-семинарский метод, самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации;

2. Деятельностные практико-ориентированные технологии, направленные на формирование системы профессиональных практических умений при проведении экспериментальных исследований, обеспечивающих возможность качественно выполнять профессиональную деятельность;

3. Развивающие проблемно-ориентированные технологии, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности проблемно мыслить, видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения. Используются следующие виды проблемного обучения: освещение основных проблем изучаемой дисциплины на лекциях, учебные дискуссии, решение задач повышенной сложности. Преподаватель лишь создает проблемную ситуацию, а разрешают её обучаемые в ходе самостоятельной деятельности;

4. 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 на консультациях, при выполнении домашних индивидуальных заданий, подготовке индивидуальных отчетов по индивидуальным заданиям, решении задач.

Методическая концепция преподавания дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» предусматривает активную форму усвоения материала, которая обеспечивает максимальную самостоятельность студента в решении технологических задач при выполнении заданий.

Также предусмотрены различные виды лекционных занятий:

- лекция с разбором конкретной задачи, изложенной в устной форме или в виде слайда или видеозаписи, студенты совместно с преподавателем обсуждают и анализируют представленный материал;

- лекция с разбором нерешенных и проблемных вопросов дисциплины – анализ и обсуждение возможных вариантов решения этих вопросов.

Самостоятельная работа стимулирует студентов к самостоятельной проработке тем в процессе написания рефератов, выполнения индивидуальных заданий, в процессе подготовки к коллоквиумам и итоговой аттестации.

Интерактивное обучение включает следующие методы:

- работа в команде
- проблемное обучение
- контекстное обучение
- обучение на основе опыта
- междисциплинарное обучение
- эвристическая беседа
- учебная дискуссия.

Для оценки знаний рекомендуется использовать рейтинговую систему, которая обеспечивает диагностику достижения обучаемым заданного уровня компетентности на каждом этапе текущего, промежуточного и рубежного, итогового контроля. Цель

студента – набрать максимальное число баллов. При рейтинговой системе резко возрастает роль текущего контроля. В конце семестра, студенты, набравшие суммарный рейтинг 50% получают допуск к экзамену.

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. Ефремов, Г. И. Моделирование химико-технологических процессов : учебник / Г.И. Ефремов. — Москва : ИНФРА-М, 2019. — 255 с. + Доп. материалы [Электронный ресурс; Режим доступа <http://new.znaniium.com>]. — (Высшее образование: Бакалавриат). — www.dx.doi.org/10.12737/12066. - ISBN 978-5-16-103090-5. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/989195>

2. Загкейм, А. Ю. Загкейм А. Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А. Ю. Загкейм. - 3-е изд., перераб. и доп. - Москва : Логос, 2012. - 304 с. - (Новая университетская библиотека). - ISBN 978-5-98704-497-1. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/468690>

б) Дополнительная литература:

1. Карманов, Ф. И. Статистические методы обработки экспериментальных данных с использованием пакета MathCad: Учебное пособие/Ф.И.Карманов, В.А.Острейковский - Москва : КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 208 с. ISBN 978-5-905554-96-4. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/508241>
2. Козлов, А. Ю. Статистический анализ данных в MS Excel : учеб. пособие / А.Ю. Козлов, В.С. Мхитарян, В.Ф. Шишов. — Москва : ИНФРА-М, 2019. — 320 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). — www.dx.doi.org/10.12737/2842. - ISBN 978-5-16-101024-2. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/987337>
3. Головнев, Н.Н. Энергетика и направленность химических процессов. Химическая кинетика и химическое равновесие : учеб. пособие / Н.Н. Головнев. - Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2018. - 148 с. - ISBN 978-5-7638-3783-4. - Текст : электронный. - URL: <https://new.znaniium.com/catalog/product/1031881>
4. Максименко И. И., Нагорный Ю. С., Глущенко И. М., Иванченко В. А. Влияние технологических факторов коксования на показатели прочности кокса // Кокс и химия. 1978. № 8. С. 12–14.
5. Михно В. П., Скляр М. Г., Лурье М. В. и др. Исследование зависимости физико-механических свойств и выхода кокса от режима коксования // Кокс и химия. 1975. № 2. С. 8–12.
6. Станкевич А. С. О прогнозе коксующести углей на основе их петрографических особенностей // Кокс и химия. 1964. № 8. С. 5–7.
7. Станкевич А. С. Физико-химические методы снижения влажности коксовой шихты // Кокс и химия. 1967. № 4. С. 1–7.

в) Методические указания:

1. Логунова, О. С. Экспертные оценки и системы в металлургии черных металлов : учебное пособие / О. С. Логунова, Е. А. Ильина, И. И. Мацко. - Магнитогорск : МГТУ, 2013. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - URL: <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/64> - Макрообъект. - Текст : электронный. - Сведения доступны также на CD-ROM.

2. Логунова, О. С. Эконометрика : пакет заданий по дисциплине для всех специальностей заочной формы обучения / О. С. Логунова, Е. А. Ильина, В. В. Королева ; МГТУ, Каф. вычислительной техники и прикладной математики. - Магнитогорск : МГТУ, 2010. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/582>

3. Крылова, С. А. Введение в анализ и синтез химико-технологических систем : учебное пособие / С. А. Крылова ; МГТУ. - Магнитогорск : МГТУ, 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с титул. экрана. - URL: <https://host.megaprolib.net/MP0109/Download/MObject/1379>

Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
7Zip	свободно распространяемое ПО	бессрочно
Linux Calculate	свободно распространяемое ПО	бессрочно

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Электронная база периодических изданий East View Information Services, ООО «ИВИС»	https://dlib.eastview.com/
Национальная информационно-аналитическая система – Российский индекс научного цитирования (РИНЦ)	URL: https://elibrary.ru/project_risc.asp
Поисковая система Академия Google (Google Scholar)	URL: https://scholar.google.ru/

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 (Персональные компьютеры с пакетом MS Office, вы-ходом в Интернет и с доступом в электронную информационно-образовательную среду университета)

Учебные аудитории для групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (Доска, учебные столы, стулья)

Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования (стеллажи для хранения оборудования, методическая литература для учебных занятий)

6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Вопросы по разделу «Общие вопросы моделирования»

№1. Эксперимент как предмет исследования. Основные понятия и определения. Фактор, уровень фактора, отклик.

№2. Принципы подобия, критерии подобия. Элементарные математические модели. Применение аналогий при построении моделей. Вариационные принципы при построении математических моделей.

Вопросы по разделу «Аналитический подход к моделированию ХТП»

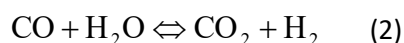
№1. Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве $C=10^{-5}$ моль / л. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу 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 ($PP_{MnS} = 2.5 \cdot 10^{-10}$), 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?

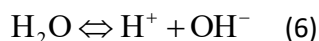
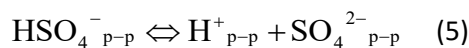
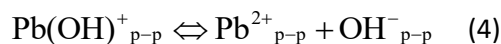
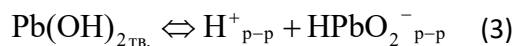
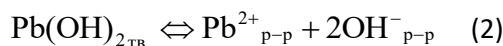
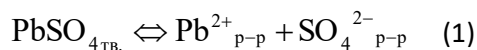
№5. Пример 5. Рассчитать равновесный состав газовой фазы для установившегося термодинамического равновесия получения водяного газа по реакциям:



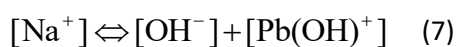
В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно p_{CO} .

№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход $PbSO_4$ в $Pb(OH)_2$. Изменение pH происходит за счёт NaOH.

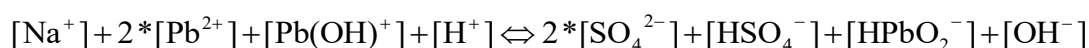
В системе предполагается протекание следующих химических реакций:



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 $K_1 - K_6$ соответствующих реакций (1)-(6).

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

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 pH.

№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 pH.

$y_k \backslash k$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Σ
--------------------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----------

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 ДФЭ⁵⁻². Записать формулы для расчёта коэффициентов линейной модели.

Вопросы по разделу «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.

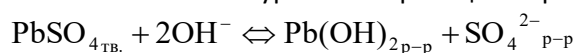
Указание к выполнению задания: на листе ТП в информативном виде создать таблицу планирования эксперимента ПФЭ 2⁴, ввести средние значения показателей качества кокса М₂₅ и М₁₀ и рассчитать коэффициенты линейной модели.

Содержание практического раздела дисциплины

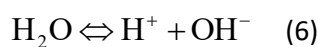
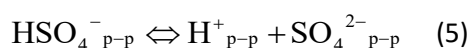
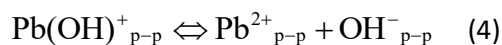
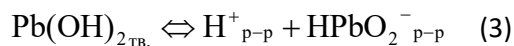
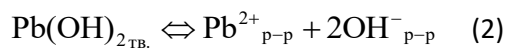
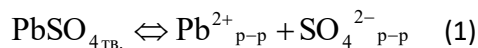
- 1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд;
- 2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона;
- 3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка по-полам.
- 4) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Эйлера.
- 5) Алгоритм решения дифференциальных уравнений модифицированным методом Эйлера.
- 6) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Рунге-Куты четвёртого порядка.
- 7) Решение систем дифференциальных уравнений методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Куты.
- 8) Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования.

Примеры расчетных заданий:

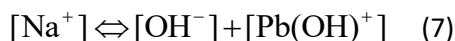
1. Основное уравнение реакции перехода PbSO_4 в Pb(OH)_2 :



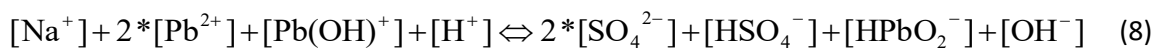
Реакции установившегося равновесия:



Уравнение материального баланса:



Уравнение электронейтральности:



Уравнения (1) – (8) составляют систему уравнений. Сведём систему уравнений (1) – (8) к многочлену, перед этим выразим концентрации всех рассматриваемых в системе ионов через концентрацию $[\text{H}^+]$:

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_w}{[\text{H}^+]} \quad (9)$$

$$[\text{Pb}^{2+}] = \frac{K_2}{[\text{OH}^-]^2} = \frac{K_2 * [\text{H}^+]^2}{K_w^2} \quad (10)$$

$$[\text{SO}_4^{2-}] = \frac{K_1}{[\text{Pb}^{2+}]} = \frac{K_1 * K_w^2}{K_2 * [\text{H}^+]^2} \quad (11)$$

$$[\text{HPbO}_2^-] = \frac{K_3}{[\text{H}^+]} \quad (12)$$

$$[\text{Pb(OH)}^+] = \frac{[\text{Pb}^{2+}] * [\text{OH}^-]}{K_4} = \frac{K_2 * [\text{H}^+]^2}{K_w^2} * \frac{K_w}{[\text{H}^+]} * \frac{1}{K_4} = \frac{K_2 * [\text{H}^+]}{K_4 * K_w} \quad (13)$$

$$[\text{HSO}_4^-] = \frac{[\text{H}^+] * [\text{SO}_4^{2-}]}{K_5} = \frac{[\text{H}^+]}{K_5} * \frac{K_1 * K_w^2}{K_2 * [\text{H}^+]^2} = \frac{K_1 * K_w^2}{K_2 * K_5 * [\text{H}^+]} \quad (14)$$

$$[\text{Na}^+] = \frac{K_w}{[\text{H}^+]} + \frac{K_2 * [\text{H}^+]}{K_4 * K_w} = \frac{K_4 * K_w^2 + K_2 * [\text{H}^+]^2}{K_4 * K_w * [\text{H}^+]} \quad (15)$$

2. Построить графики функций $y = f(x_1)$, $y = f(x_2)$. Найти линейные приближения и коэффициент корреляции для данных зависимостей, используя встроенные возможности MS Excel. Сделать вывод о «тесноте связи» между независимыми переменными x_1 , x_2 и зависимой y .

№ варианта	Зависимая (y) и независимые переменные (x_1 , x_2)	Числовые значения переменных									
25	y	79,31	57,43	60,66	92,55	90,12	71,3	70,5	91,52	68,31	58,56
	x1	4,22	2,9	1,68	3,34	4,21	2,89	4,15	3,41	3,37	4,41
	x2	6,43	6,1	2,55	7,33	6,72	4,86	5,64	3,87	3,27	4,02

Решение

Построим графики функций $y = f(x_1)$ и $y = f(x_2)$ и найдем их линейное приближение.

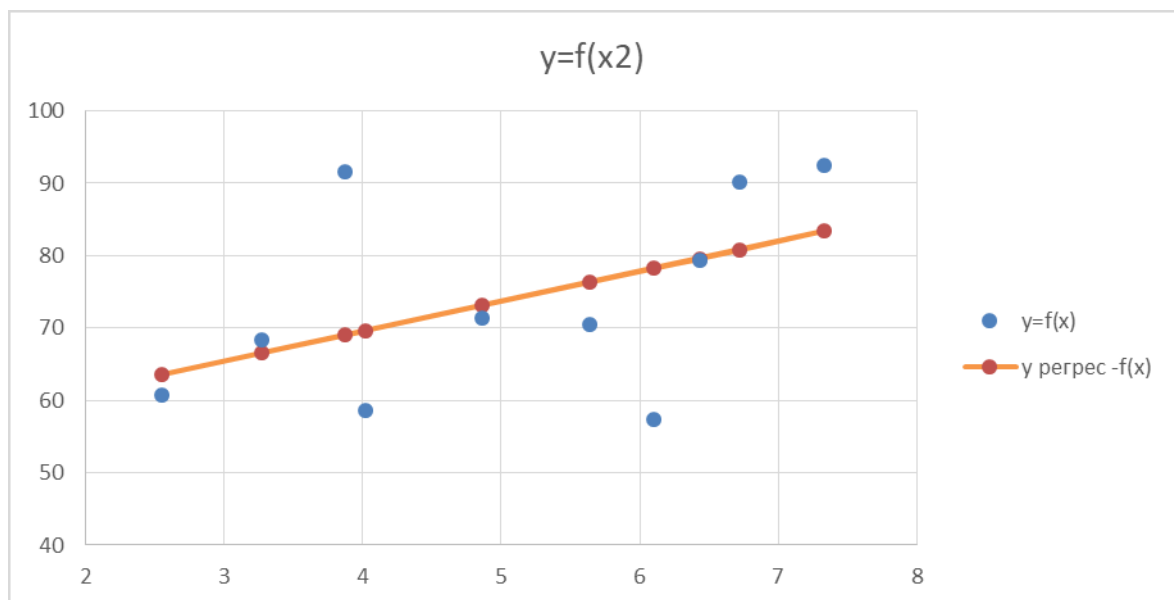
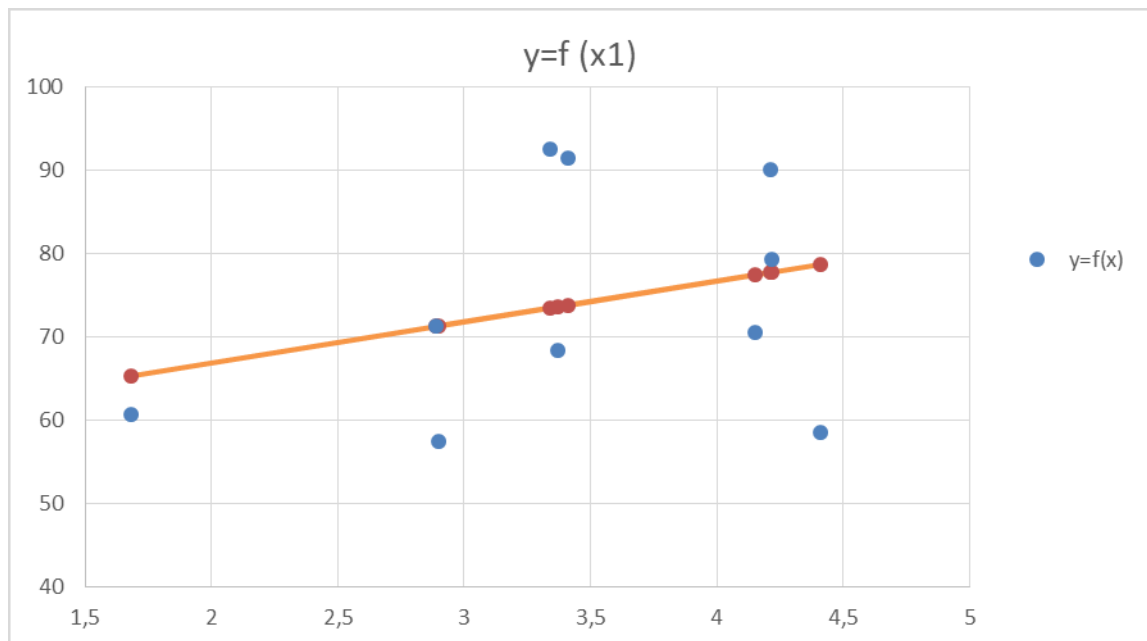


Рисунок 2 - Графики функций $y = f(x_1)$ и $y = f(x_2)$.

При помощи статической формулы посчитаем коэффициент корреляции для каждого графика.

Для зависимости $y = f(x_1)$ $K_{\text{кор.}}$ составил 0,30011,

для $y = f(x_2)$ составил 0,487

Охарактеризовать силу корреляционной связи можно, прибегнув к шкале Челдока (табл.6), в которой определенному числовому значению соответствует качественная характеристика.

Таблица 6

Шкала Челдока

Коэффициент корреляции $ r $	0,1-0,3	0,3-0,5	0,5-0,7	0,7-0,9	0,9-0,99	1,0
Характеристика связи	Слабая	Умеренная	Заметная	Тесная	Очень тесная	Функциональная

Соотнеся вышеприведенные результаты вычисления коэффициентов корреляции, приходим к выводу, что «теснота связи» в функции $y = f(x_1)$ между независимой переменной x_1 и зависимой y очень слабая ($K_{\text{кор.}} = 0,30011$), а в функции $y = f(x_2)$ – умеренная корреляция между независимой переменной x_2 и зависимой y ($K_{\text{кор.}} = 0,487$).

3. Идентифицировать количество корней и вычислить их с точностью до 10^{-3} , используя:

- 1) графический метод;
- 2) метод половинного деления;
- 3) метод Ньютона;
- 4) метод хорд.

Сделать вывод о быстроте сходимости данных алгоритмов относительно друг друга (на основе количества итераций в каждом методе).

1) Графический метод

Построим график, используя данные уравнения

$4x^2 - 5 = 4$	
x	y
-5	91
-4	55
-3	27
-2	7
-1	-5
0	-9
1	-5
2	7
3	27
4	55
5	91

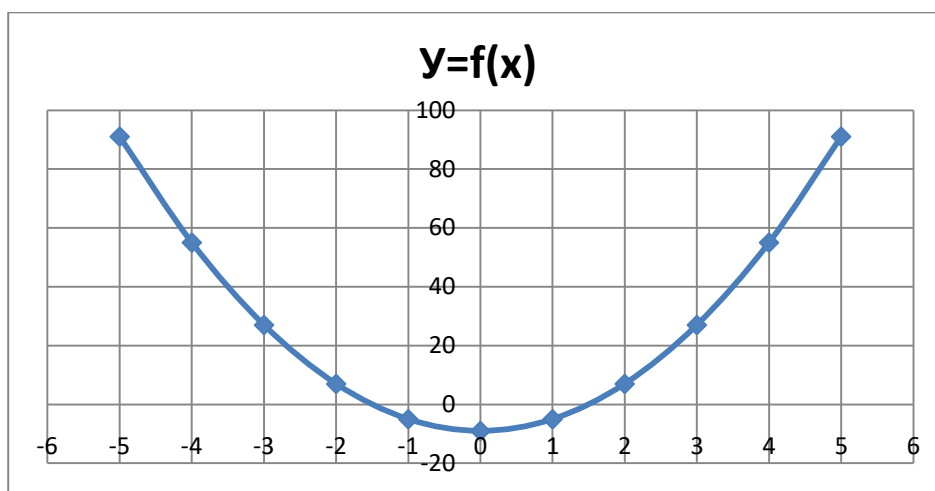


Рис. 1. Зависимость $f(x) = 4x^2 - 5$ на отрезке $[-5;5]$.

Считая, что корнями уравнения является количество пересечений графика с осью $O-X$, вычисляем, что их количество на отрезке $[-5;5]$ равно 2. Приближенные значения корней сводим в таблице №1.

Таблица 1

Результаты графического метода исследования

Корни уравнения	Значение функции
1,5	0
-1,5	0

2) Метод половинного деления

Используя для расчетов MS Excel, получаем данные, которые сведем в таблице №2.

Таблица №2

Результаты половинного метода исследования

Итерация	a	b	$c=(a+b)/2$	f(a)	f(c)	$f(a)*f(c)$	Точность
1	-2	0	-1	7	-5	-35	2
2	-2	-1	-1,5	7	0	0	1
3	-2	-1,5	-1,75	7	3,25	22,75	0,5
4	-1,75	-1,5	-1,625	3,25	1,5625	5,078125	0,25
5	-1,625	-1,5	-1,5625	1,5625	0,765625	1,196289	0,125
6	-1,5625	-1,5	-1,53125	0,765625	0,378906	0,2901	0,0625
7	-1,53125	-1,5	-1,51563	0,378906	0,188477	0,071415	0,03125
8	-1,51563	-1,5	-1,50781	0,188477	0,093994	0,017716	0,015625
9	-1,50781	-1,5	-1,50391	0,093994	0,046936	0,004412	0,007813
10	-1,50391	-1,5	-1,50195	0,046936	0,023453	0,001101	0,003906
11	-1,50195	-1,5	-1,50098	0,023453	0,011723	0,000275	0,001953
12	-1,50098	-1,5	-1,50049	0,011723	0,00586	6,87E-05	0,000977

Искомые корни x^* и значение $f(x^*)$	
x^*	$f(x^*)$
-1,50049	0,00586
Решение найдено за 12 итераций (n_i)	

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^п. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ^п. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.

21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ^{п-п'}. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ^п ДФЭ^{п-п'} 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	

ПК-2.1:	Использует математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности	1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей; 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); 3. Метод наименьших квадратов. Планирования эксперимента в сравнении с непосредственным применением метода наименьших квадратов.
---------	---	---

ОПК-2.2:	Выбирает математические, физические, физико-химические, химические методы для решения задач профессиональной деятельности	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. Решение дифференциального уравнения методом Эйлера. Модифицированный метод Эйлера. Адаптация метода Эйлера на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;
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	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 Для необратимой реакции первого порядка: $A \xrightarrow{k_1} B$ 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.: $C_A^0 = 0,7$ моль/л; $k_1 = 0,001$ 1/с; $h = 0,1$ (шаг интегрирования).
----------	---	---

ОПК 5.2:	Проводит экспериментальные исследования и использует основные приёмы обработки и представления полученных данных	По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 2^4 рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса M_{25} и M_{10}, сравнить их с предложенными в самой научной статье. 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?
----------	--	---

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.