

Минобрнауки России
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

_____ Василенко В.Н.
(подпись) (Ф.И.О.)

"_25_" __05__2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
ДИСЦИПЛИНЫ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГО - И РЕСУРСОБЕРЕГАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ В
ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ, НЕФТЕХИМИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ**

Направление подготовки

18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии,
нефтехимии и биотехнологии

Направленность (профиль)

экологическая безопасность производственных процессов
Квалификация выпускника

бакалавр

Воронеж

Разработчик _____ Клепиков О. В. _____
(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой Промышленной экологии, оборудования химических и нефтехимических производств

_____ Пугачева И.Н. _____
(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины «Моделирование энерго - и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» является формирование у обучающегося теоретических знаний и практических навыков, необходимых для моделирования энерго- и ресурсосберегающих процессов и процессов управления качеством окружающей среды при осуществлении профессиональной деятельности.

Задачи дисциплины:

- планирование и проведение экспериментальных исследований по энерго- и ресурсосбережению, обеспечению экологической безопасности при реализации технологического процесса и анализ их результатов;
- математическое моделирование технологических процессов с использованием стандартных пакетов автоматизированного расчета и проектирования.

Объектами профессиональной деятельности являются

- процессы и аппараты химической технологии, нефтехимии и биотехнологии;
- промышленные установки, включая системы автоматизированного управления;
- системы автоматизированного проектирования; автоматизированные системы научных исследований;
- сооружения очистки сточных вод и газовых выбросов, переработки отходов, утилизации теплоэнергетических потоков и вторичных материалов;
- методы и средства оценки состояния окружающей среды и защиты ее от антропогенного воздействия;
- системы искусственного интеллекта в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии;
- действующие многоассортиментные производства химической и смежных отраслей промышленности.

2. Перечень планируемых результатов обучения, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения дисциплины в соответствии с предусмотренными компетенциями обучающийся должен:

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции (результат освоения)	В результате изучения учебной дисциплины обучающийся должен:		
			знать	уметь	владеть
1	ОПК-2	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	законы естественнонаучных и математических дисциплин, умеет решать основные задачи применительно к реальным процессам, использовать естественнонаучные законы для решения профессиональных проблем	пользоваться приемами и методами анализа естественнонаучных и математических законов для грамотного использования в энерго- и ресурсосберегающих процессах химической технологии, нефтехимии и биотехнологии; владеет методами выбора рационального способа минимизации антропо-	приемами современных технологий для формирования и ресурсосберегающих промышленных процессов; решать творческие задачи на основе исследовательских технологий с элементами моделирования процессов.

				генного воздействия на окружающую среду	
2	ПК-3	способностью использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчета технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред	методы анализа необходимой информации, технических данных, показателей и результатов работы	проводить анализ необходимой информации, технических данных, показателей и результатов работы	навыками применения стандартных программных средств в области анализа информации, обобщения и систематизации технических данных
3	ПК-16	способностью моделировать энерго- и ресурсосберегающие процессы в промышленности	основные понятия и определения математического моделирования, цели и задачи моделирования	осуществлять структурный синтез модели, ее анализ; планировать эксперимент	способностью принимать участие в моделировании процессов с использованием стандартных пакетов

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Дисциплина «Моделирование энерго - и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» относится к обязательным дисциплинам вариативной части цикла Б1, Модуль "Профессиональный" учебного плана подготовки студентов по направлению 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии».

Дисциплина «Моделирование энерго - и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» базируется на знаниях, умениях и компетенциях, сформированных при изучении дисциплин Неорганическая химия, Органическая химия, Экология, Процессы и аппараты «Математика», «Информатика».

Дисциплина «Моделирование энерго - и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» является предшествующей для освоения преддипломной практики, выполнения выпускной квалификационной работы.

4. Объем дисциплины и виды учебных занятий

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы.

Виды учебной работы	Всего часов акад	Семестр 7
		акад
Общая трудоемкость дисциплины	108	108
Контактная работа в т.ч. аудиторные занятия:	47,95	47,95
Лекции	15	15
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>		
Лабораторные занятия (ПЗ)	30	30
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>		
Консультации текущие	0,75	0,75
Консультация перед экзаменом	2,0	2,0

Виды аттестации (экзамен)	0,2	0,2
Самостоятельная работа:	26,25	26,25
Изучение материала по конспекту лекций, учебнику (собеседование, тестирование, решение кейс-заданий)	14,25	14,25
РПР :	12	12
Разработка математической модели	3	3
Выполнение расчетов для РПР	4	4
Оформление текстовой документации	3	3
Оформление текстовой документации в виде графиков	2	2
Контроль	33,8	33,8

5 Содержание дисциплины

5.1 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование разделов дисциплины	Содержание раздела (указывается в дидактических единицах)	Трудоемкость раздела, часы
1.	Основные понятия и определения математического моделирования	Понятие модели и моделирования. Цели и задачи предмета математического моделирования. Классификация моделей. Оптимальное моделирование. Системное моделирование. Понятия системы и системного подхода. Свойства системы. Категории системного моделирования: структура, функция, состояние и т.п. Системный характер технологического объекта.	13
2.	Моделирование типовых технологических процессов	Модель идеального смешения. Модель идеального вытеснения. Диффузионная модель: однопараметрическая и двухпараметрическая. Ячеечная модель с прямыми и обратными потоками. Комбинированные модели: застойные зоны, байпасирование, параллельное и последовательное соединение зон идеального перемешивания и идеального вытеснения. Технологическая линия. Каскад химических реакторов.	35,25
3.	Статистическое моделирование и анализ данных.	Теоретические аспекты и алгоритм предварительной обработки данных. Построение гистограммы. Критерий Пирсона. Основные положения структурного синтеза статистической модели и параметрического анализа модели. Критерий Фишера. Критерий Стьюдента. Планирование эксперимента и обработка экспериментальных данных	23

5.2 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции, час	ЛЗ, час	СРО, час
1.	Основные понятия и определения математического моделирования	5	4	4
2.	Моделирование типовых технологических процессов	5	14	16,25
3.	Статистическое моделирование и анализ данных.	5	12	6

5.2.1 Лекции

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика лекционных занятий	Трудоемкость, час
1.	Основные понятия и определения математического моделирования	Понятие модели и моделирования. Цели и задачи предмета математического моделирования. Основные химические законы, применяемые в моделировании. Классификация моделей. Оптимальное моделирование. Системное моделирование. Понятия системы и системного подхода. Свойства системы. Категории системного моделирования: структура, функция, состояние и т.п. Системный характер технологического объекта. Основные методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования. Современные информационные технологии, прикладные программы и базы данных для расчета технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред	5
2.	Моделирование типовых технологических процессов	Модель идеального смешения. Модель идеального вытеснения. Диффузионная модель: однопараметрическая и двухпараметрическая. Ячеечная модель с прямыми и обратными потоками. Комбинированные модели: застойные зоны, байпасирование, параллельное и последовательное соединение зон идеального перемешивания и идеального вытеснения. Технологическая линия. Каскад химических реакторов. Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в промышленности	5
3.	Статистическое моделирование и анализ данных.	Теоретические аспекты и алгоритм предварительной обработки данных. Построение гистограммы. Критерий Пирсона. Основные положения структурного синтеза статистической модели и параметрического анализа модели. Критерий Фишера. Критерий Стьюдента. Планирование эксперимента и обработка экспериментальных данных	5

5.2.2 Лабораторный практикум

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Наименование практических работ	Трудоемкость, час
1.	Основные понятия и определения математического моделирования	Пример задачи моделирования.	4
2.	Моделирование типовых технологических процессов	Модель идеального смешения.	2
		Модель идеального вытеснения	2
		Комбинированные задачи	4
		Численные методы решения нелинейных уравнений	2

		Моделирование стационарных режимов	2
		Задача планирования при ограничениях на ресурсы	2
3.	Статистическое моделирование и анализ данных	Предварительная обработка данных. Критерий Пирсона.	4
		Дисперсионный анализ. Критерии Стьюдента и Фишера.	2
		Параметрический синтез и статистический анализ.	4
		Планирование эксперимента и обработка данных	2

5.2.3 Практические занятия - не предусмотрены

5.2.4 Самостоятельная работа обучающихся (СРО)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вид СРО	СРО, час
1.	Основные понятия и определения математического моделирования	Изучение материала по конспекту лекций, учебнику	4
2.	Моделирование типовых технологических процессов	Изучение материала по конспекту лекций, учебнику	4,25
		РПР №1	12
3.	Статистическое моделирование и анализ данных.	Изучение материала по конспекту лекций, учебнику	6

6 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

6.1 Основная литература

1. Самойлов Н.А. Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов".-СПб.: Лань,2013
<https://e.lanbook.com/reader/book/37356/#4>

2. Гумеров А.М., Математическое моделирование химико-технологических процессов: Учебное пособие. – 2-е изд. переработ. _ СПб.: Лань,2014. – 176 с.
<https://e.lanbook.com/reader/book/41014/#2> с.

3. Клинов, А.В. Лабораторный практикум по математическому моделированию химико-технологических процессов : учебное пособие / А.В. Клинов, А.В. Малыгин ; - Казань : КГТУ, 2011. - 99 с. : ил., табл. - Библиогр.: с. 97. ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=258853>

4. Клинов, А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова ;. - Казань : Казанский государственный технологический университет, 2009. - 144 с. : ил., табл., схем. - Библ. в кн. - ISBN 978-5-7882-0774-2 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=270540>.

6.2 Дополнительная литература

1. Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие / А.Ю. Закгейм. - 3-е изд., перераб. и доп. - Москва : Логос, 2012. - 304 с. - (Новая университетская библиотека). - ISBN 978-98704-471-1 ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84988> .

2. Зиятдинов, Н.Н. Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad : учебно-методическое пособие / Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Д.А. Рыжов ; сост. Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Д.А. Рыжов ; Федеральное агентство по образованию и др. - Казань : Издательство КНИТУ, 2008. - 161 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн. ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259070>.

3. Коробова Л.А. и др. Математическое моделирование. Практикум : учебное пособие. - Воронеж, 2017
<http://biblos.vsu.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/4350>

6.3 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся.

Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии [Электронный ресурс] : метод. указания для СРС по дисциплине “Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии” / Воронеж. гос. ун-т инж. технол.; сост. С. Н. Черняева, Л. А. Коробова, Ю. А. Сафонова – Воронеж : ВГУИТ, 2014. - 35 с. – [ЭИ]
<http://biblos.vsu.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/2230>

6.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Наименование ресурса сети «Интернет»	Электронный адрес ресурса
«Российское образование» - федеральный портал	http://www.edu.ru/index.php
Научная электронная библиотека	http://www.elibrary.ru/defaulttx.asp?
Федеральная университетская компьютерная сеть России	http://www.runnet.ru/
Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»	http://www.window.edu.ru/
Электронная библиотека ВГУИТ	http://biblos.vsu.ru/megapro/web
Сайт Министерства науки и высшего образования РФ	http://minobrnauki.gov.ru
Портал открытого on-line образования	http://npoed.ru
Информационно-коммуникационные технологии в образовании. Система федеральных образовательных порталов	http://www.ict.edu.ru/
Электронная образовательная среда ФГБОУ ВО «ВГУИТ»	http://education.vsu.ru

6.5 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплин (модулей) в ФГБОУ ВО ВГУИТ [Электронный ресурс] : методические указания для обучающихся на всех уровнях высшего образования / М. М. Данылиев, Р. Н. Плотникова; ВГУИТ, Учебно-методическое управление. - Воронеж : ВГУИТ, 2015. – Режим доступа : <http://biblos.vsu.ru/MegaPro/Web/SearchResult/MarcFormat/100813>. - Загл. с экрана.

6.6 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем **Используемые виды информационных технологий:**

- «электронная»: персональный компьютер и информационно-поисковые (справочно-правовые) системы;

- «компьютерная» технология: персональный компьютер с программными продуктами разного назначения «компьютерная» технология: персональный компьютер с программными продуктами разного назначения (ОС Windows; MSOffice);

- «сетевая»: локальная сеть университета и глобальная сеть Internet.

Программы	Лицензии, реквизиты подтверждающего документа
Онлайн-редактор химических формул	https://allchemistry.info/services/onlayn-redaktor-himicheskikh-formul
Microsoft WindowsXP	Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com
Microsoft Windows 8.1 (64 - bit)	Microsoft Open License Microsoft Windows Professional 8 Russian Upgrade Academic OPEN 1 License No Level#61280574 от 06.12.2012 г. http://eopen.microsoft.com
Microsoft Office 2007	Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com
Microsoft Office 2010	Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level #47881748 от 24.12.2010 г. http://eopen.microsoft.com
AdobeReaderXI	(бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volumedistribution.htm
КОМПАС 3D LT v 12	(бесплатное ПО) http://zoomexe.net/ofis/project/2767-kompas-3d.html

7 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Необходимый для реализации образовательной программы перечень материально-технического обеспечения включает:

- лекционные аудитории (оборудованные видеопроjectionным оборудованием для презентаций; средствами звуковоспроизведения; экраном; имеющие выход в Интернет);

- помещения для проведения лабораторных и практических занятий (оборудованные учебной мебелью);

- библиотеку (имеющую рабочие места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и Интернет);

- компьютерные классы.

Обеспеченность процесса обучения техническими средствами полностью соответствует требованиям ФГОС по направлению подготовки. Материально-техническая база приведена в лицензионных формах и расположена во внутренней сети по адресу <http://education.vsu.ru>.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа

Учебная аудитория № 6-31 для проведения лекционных, практических, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	- комплект мебели для учебного процесса на 44 места Проектор Aser XD 1150 – 1 шт, Экран для проектора – 1 шт, Компьютер Intel Core 2Duo E7300 Монитор 18 LG	Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Adobe Reader XI (бесплатное ПО)
--	---	--

		https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html
Учебная аудитория № 6-33 для проведения лекционных, практических, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Комплект мебели для учебного процессана 24 места Проектор Aser XD 1150 – 1 шт, Экран для проектора – 1 шт, Компьютер Intel Core 2Duo E7300; Монитор 18 LG	Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Adobe Reader XI (бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html
Учебная аудитория № 6-35 для проведения занятий лекционного типа, практических, лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Комплект мебели для учебного процесса на 32 места Компьютеры Corei5–2300 (10 шт), с доступом к сети интернет, Коммутатор Switch. Проектор Aser XD 1150 – 1 шт,	Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Adobe Reader XI (бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html
Учебная аудитория № 6-24 для проведения занятий лекционного типа, практических, лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Комплект мебели для учебного процесса на 48 мест . Компьютер Intel Core 2Duo E7300 - 11 штук; Монитор 18 LG – 11 штук.; Проектор Aser XD 1150. Компьютер Celeron-433. Плоттер HP DesignJet Рабочая станция Intel Celeron 335.	Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Adobe Reader XI (бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html

Для проведения лабораторных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в распоряжении кафедры имеется:

Учебная аудитория № 6-35 для проведения занятий лекционного типа, практических, лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной	Комплект мебели для учебного процесса на 32 места Компьютеры Corei5–2300 (10 шт), с доступом к сети интернет, Коммутатор Switch. Проектор Aser XD 1150 – 1 шт,	Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Adobe Reader XI (бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html
---	--	---

аттестации		
------------	--	--

Аудитория для самостоятельной работы студентов

Учебная аудитория № 6-30 для самостоятельной работы студентов	Комплект мебели для учебного процесса на 2 места Компьютер Р-4-3,0 – 2 шт. Принтер HP LaserJet P 2015 – 1 шт.	<p>Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com</p> <p>Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com</p> <p>Adobe Reader XI (бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html</p> <p>КОМПАС 3D LT v 12, (бесплат.ПО) http://zoomexe.net/ofis/project/2767-kompas-3d.html</p>
---	---	--

Дополнительно, самостоятельная работа обучающихся, может осуществляться при использовании:

Читальные залы библиотеки.	Компьютеры со свободным доступом в сеть Интернет и Электронными библиотечными и информационно справочными системами.	<p>Microsoft Office Professional Plus 2010 Microsoft Open License Microsoft Office Professional Plus 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level #48516271 от 17.05.2011 г. http://eopen.microsoft.com</p> <p>Microsoft Office 2007 Standart, Microsoft Open License Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com</p> <p>Microsoft Windows XP, Microsoft Open License Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com.</p> <p>Adobe Reader XI, (бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/odfreader/volume-distribution.html</p>
----------------------------	--	--

8 Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

8.1 Оценочные материалы (ОМ) для дисциплины включают в себя:

- перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы;
- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;
- типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

8.2 Для каждого результата обучения по дисциплине (модулю) определяются показатели и критерии оценивания сформированности компетенций на различных этапах их формирования, шкалы и процедуры оценивания.

ОМ представляются отдельным комплектом и входят в состав рабочей программы дисциплины.

Оценочные материалы формируются в соответствии с П ВГУИТ «Положение об оценочных материалах».

Документ составлен в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии».

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

по дисциплине/практике

**Моделирование энерго - и ресурсосберегающих процессов в химической
технологии, нефтехимии и биотехнологии**

1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции (результат освоения)	В результате изучения учебной дисциплины обучающийся должен:		
			знать	уметь	владеть
1	ОПК-2	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	законы естественнонаучных и математических дисциплин, умеет решать основные задачи применительно к реальным процессам, использовать естественнонаучные законы для решения профессиональных проблем	пользоваться приемами и методами анализа естественнонаучных и математических законов для грамотного использования в энерго-ресурсосберегающих процессах химической технологии, нефтехимии и биотехнологии; владеет методами выбора рационального способа минимизации антропогенного воздействия на окружающую среду	приемами современных технологий для формирования энерго- и ресурсосберегающих промышленных процессов; решать творческие задачи на основе исследовательских технологий с элементами моделирования процессов.
2	ПК-3	способностью использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчета технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред	методы анализа необходимой информации, технических данных, показателей и результатов работы	проводить анализ необходимой информации, технических данных, показателей и результатов работы	навыками применения стандартных программных средств в области анализа информации, обобщения и систематизации технических данных
3	ПК-16	способностью моделировать энерго- и ресурсосберегающие процессы в промышленности	основные понятия и определения математического моделирования, цели и задачи моделирования	осуществлять структурный синтез модели, ее анализ; планировать эксперимент	способностью принимать участие в моделировании процессов с использованием стандартных пакетов

2. Паспорт оценочных материалов по дисциплине

№ п/п	Контролируемые модули/разделы/темы дисциплины	Индекс контролируемой компетенции (или ее части)	Оценочные средства		Технология оценки (способ контроля)
			наименование	№№ заданий	
1	Основные понятия и определения математического моделирования	ОПК-2	Тестовое задание	1 - 15	Компьютерное или бланочное тестирование
			Кейс-задания	46 - 50	Контроль преподавателем
			Собеседование (экзамен)	61 - 74	Контроль преподавателем

2	Моделирование типовых технологических процессов	ПК-16	Тестовое задание	16 - 30	Компьютерное или бланочное тестирование
			Кейс-задания	51 - 55	Контроль преподавателем
			Собеседование (экзамен)	75 - 85	Контроль преподавателем
3	Статистическое моделирование и анализ данных	ПК-3	Тестовое задание	30 - 45	Компьютерное или бланочное тестирование
			Кейс-задания	56 - 60	Контроль преподавателем
			Собеседование (экзамен)	86 - 95	Контроль преподавателем

3. Оценочные материалы для промежуточной аттестации

Аттестация обучающегося по дисциплине проводится в форме тестирования или письменного ответа и предусматривает возможность последующего собеседования (зачета/ экзамена).

3.1 Тесты (тестовые задания)

3.1.1 ОПК-2 способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования

№ задания	Тестовое задание
1.	<p>Универсальность - это</p> <ul style="list-style-type: none"> a) <u>Полнота отображения свойств объекта</u> b) Соответствие параметров объектов вычисленных по модели их истинному значению c) Способность модели правильно отображать свойства объекта d) Показатель суммарных затрат на получение и использование моделей e) Определение неизвестных параметров из других источников f) Логическое следствие из некоторых фундаментальных законов природы
2.	<p>Точность - это</p> <ul style="list-style-type: none"> a) <u>Соответствие параметров объектов вычисленных по модели их истинному значению</u> b) <u>Полнота отображения свойств объекта</u> c) Способность модели правильно отображать свойства объекта d) Показатель суммарных затрат на получение и использование моделей e) Определение неизвестных параметров из других источников f) Логическое следствие из некоторых фундаментальных законов природы
3.	<p>Адекватность - это</p> <ul style="list-style-type: none"> a) <u>Способность модели правильно отображать свойства объекта</u> b) Соответствие параметров объектов вычисленных по модели их истинному значению c) Полнота отображения свойств объекта d) Показатель суммарных затрат на получение и использование моделей e) Определение неизвестных параметров из других источников f) Логическое следствие из некоторых фундаментальных законов природы
4.	<p>Экономичность - это</p> <ul style="list-style-type: none"> a) <u>Показатель суммарных затрат на получение и использование моделей</u> b) Соответствие параметров объектов вычисленных по модели их истинному значению c) Способность модели правильно отображать свойства объекта d) Полнота отображения свойств объекта e) Определение неизвестных параметров из других источников f) Логическое следствие из некоторых фундаментальных законов природы

5.	<p>Система – это</p> <p>a) <u>Совокупность объектов, связанных между собой и с окружающей средой, причем внутренние связи сильнее внешних</u></p> <p>b) Совокупность математических соотношений и закономерностей, описывающих взаимосвязь между количественными и качественными характеристиками объекта</p> <p>c) Упрощенная копия объекта, сохраняющая его важнейшие свойства, необходимые для решения поставленной задачи</p> <p>d) Совокупность устойчивых связей объекта обеспечивающих его целостность и сохраняющих основные свойства объекта, при различных внешних и внутренних изменениях</p>								
6.	<p>Структура – это</p> <p>a) <u>Совокупность устойчивых связей объекта обеспечивающих его целостность и сохраняющих основные свойства объекта, при различных внешних и внутренних изменениях</u></p> <p>b) Совокупность математических соотношений и закономерностей, описывающих взаимосвязь между количественными и качественными характеристиками объекта</p> <p>c) Упрощенная копия объекта, сохраняющая его важнейшие свойства, необходимые для решения поставленной задачи</p> <p>d) Совокупность объектов, связанных между собой и с окружающей средой, причем внутренние связи сильнее внешних</p>								
7.	<p>Установить правильную последовательность этапов математического моделирования</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) постановка задачи 2) изучение теоретических основ процесса 3) составление уравнений 4) выбор алгоритма и решение модели 5) анализ полученной информации 6) анализ соответствию экспериментальных данных <p>Ответ: 1,2,3,4,5,6</p>								
8.	<p>Метод составления математического описания для уравнения и исследования объектов в узком диапазоне изменения входных и выходных переменных это</p> <ol style="list-style-type: none"> a) <u>экспериментальный</u> b) комбинированный c) аналитический 								
9.	<p>Общим требованием для всех математических моделей является</p> <ol style="list-style-type: none"> a) реализуемая возможность составления дифференциальных уравнений b) <u>число уравнений, включаемых в описание, должно быть равно числу находимых переменных</u> c) обязательное наличие физической модели процесса в уменьшенной форме 								
10.	<p>Установить соответствие между основными видами математических моделей и их свойствами</p> <table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%; border: none;">1. модели с сосредоточенными параметрами</td> <td style="width: 50%; border: none;">1. используются для нестационарных процессов</td> </tr> <tr> <td style="border: none;">2. модели с распределенными параметрами</td> <td style="border: none;">2. изменяются как во времени, так и в пространстве</td> </tr> <tr> <td style="border: none;">3. статические модели</td> <td style="border: none;">3. используются в стационарных условиях</td> </tr> <tr> <td style="border: none;">4. динамические модели</td> <td style="border: none;">4. отражают изменения объекта во времени</td> </tr> </table> <p>Ответ 1-1, 2-2, 3-3, 4-4</p>	1. модели с сосредоточенными параметрами	1. используются для нестационарных процессов	2. модели с распределенными параметрами	2. изменяются как во времени, так и в пространстве	3. статические модели	3. используются в стационарных условиях	4. динамические модели	4. отражают изменения объекта во времени
1. модели с сосредоточенными параметрами	1. используются для нестационарных процессов								
2. модели с распределенными параметрами	2. изменяются как во времени, так и в пространстве								
3. статические модели	3. используются в стационарных условиях								
4. динамические модели	4. отражают изменения объекта во времени								
11.	<p>Метод аналитического составления моделей описания с одновременным проведением экспериментальных исследований это</p> <ol style="list-style-type: none"> a) <u>комбинированный</u> b) аналитический c) экспериментальный 								
12.	<p>Обыкновенные дифференциальные уравнения обычно используют</p> <ol style="list-style-type: none"> a) <u>для математического описания нестационарных режимов работы объектов с сосредоточенными параметрами</u> b) для математического описания стационарных режимов работы объектов с сосредоточенными параметрами 								

21.	<p>При построении математической модели кинетики сложной химической реакции обратимость реакции по стадии учитывается</p> <p>a) вектором скоростей по стадиям b) вектором скоростей по компонентам c) матрицей стехиометрических коэффициентов</p>		
22.	<p>Выбрать уравнение, устанавливающее связь между степенью завершенности химической реакции и концентрацией компонентов</p> <p>a) $C = C_0 + X \cdot \rho$ b) $X \cdot V^s = \omega$ c) $U_{HK} = X_{HK} \cdot X^{-1}_K$</p>		
23.	<p>В уравнении $C = C_0 + X \cdot \rho$ ρ это</p> <p>a) вектор степени завершенности реакции b) вектор начальных концентраций компонентов реакции c) время химического равновесия</p>		
24.	<p>Для двухстадийной последовательной реакции первого порядка $A \rightarrow P \rightarrow D$ концентрация вещества P будет</p> <p>a) в начальный момент времени будет расти, а затем падает b) уменьшается c) увеличивается</p>		
25.	<p>Для какого типа реактора используется следующая математическая модель для реакции $A \rightarrow P \rightarrow D$</p> $\frac{1}{t}(C_{Ao} - C_A) + k_1 C_A = 0$ $\frac{1}{t}(-C_P) + k_1 C_A - k_2 C_P = 0$ $\frac{1}{t}(-C_D) + k_1 C_A = 0$ <p>a) стационарный реактор идеального смешения b) реактор идеального смешения в изотермическом режиме c) реактор идеального вытеснения в изотермическом режиме</p>		
26.	<p>Число компонентов вектора скоростей по компонентам определяется</p> <p>a) количеством веществ b) количеством стадий c) числом компонент вектора скоростей по стадиям</p>		
27.	<p>Каждая компонента вектора по стадиям определяется</p> <p>a) как скорость по стадии, т.е. произведение соответствующей константы скорости реакции на концентрацию веществ b) количеством веществ c) числом строк матрицы стехиометрических коэффициентов</p>		
28.	<p>Число дифференциальных уравнений математической модели кинетики сложной химической реакции определяется</p> <p>a) числом ключевых веществ b) количеством стадий c) количеством веществ</p>		
29.	<p>В уравнении $C_{HK} = C_{HK}^0 + U_{HK}(C_K - C_K^0)$ U_{HK} это</p> <p>a) матрица преобразования b) вектор концентрации веществ в начальный момент времени c) вектор концентрации неключевых веществ</p>		
30.	<p>Установить соответствие в формуле $X \cdot V^s = \omega$ между обозначением характеристик и их наименованием</p> <table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%; vertical-align: top;"> <p>1. X 2. V^s 3. ω</p> </td> <td style="width: 50%; vertical-align: top;"> <p>1. матрица стехиометрических коэффициентов 2. вектор скоростей по стадиям 3. вектор скоростей по компонентам</p> </td> </tr> </table> <p>Ответ: 1-1, 2-2, 3-3</p>	<p>1. X 2. V^s 3. ω</p>	<p>1. матрица стехиометрических коэффициентов 2. вектор скоростей по стадиям 3. вектор скоростей по компонентам</p>
<p>1. X 2. V^s 3. ω</p>	<p>1. матрица стехиометрических коэффициентов 2. вектор скоростей по стадиям 3. вектор скоростей по компонентам</p>		

3.1.3 ПК-3 способностью использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчета технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред

№ задания	Тестовое задание
31	Как называется отклонение результата измерения от истинного значения измеряемой величины? а) <u>погрешность измерения;</u> б) неточность измерения в) искажение измерения
32	Абсолютная погрешность имеет размерность а) в процентах б) в долях в) <u>в единицах измеряемой физической величины</u>
33	Что такое измерение? а) сравнение измеряемой величины с исходной величиной; б) <u>процесс получения опытным путем числового соотношения между измеряемой величиной и значением, принятым за единицу;</u> в) сравнение эталона и средства измерения
34	Что является наиболее близким к истинному значению измеряемой величины при многократных измерениях одной и той же величины а) среднее геометрическое; б) <u>среднее арифметическое;</u> в) среднее квадратичное отклонение
35	Программа, которая позволяет по данным об источниках выброса примесей и условиях местности рассчитать разовые приземные концентрации примесей при неблагоприятных условиях это а) <u>УПРЗА «Эколог»</u> б) «2-ТП-воздух» в) «2-ТП-отходы»
36	Какие из перечисленных программ обеспечивают формирование отчета об охране атмосферного воздуха и инвентаризации и накопления отходов производства а) <u>Программы «2-ТП-воздух», «2-ТП-отходы» серии «Эколог»</u> б) Унифицированная программа расчета загрязнения атмосферы и почвы в) Программа прогноза последствий аварий
37	Какая из перечисленных программ позволяет осуществить оперативный прогноз последствий аварийных выбросов а) <u>ППА</u> б) УПРЗА «Эколог» в) «2-ТП-воздух»
38	Возможность установления связи между типами данных и выделения пространственных взаимоотношений между объектами на карте представляет а) <u>ГИС</u> б) ОБУВ в) ПДВ
39	«Методику расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий» реализует компьютерная программа а) УПРЗА «Эколог» б) «2-ТП-воздух» в) ППА г) <u>«Интеграл»</u>
40	Каждая из изолиний карты полей концентраций вредных веществ соответствует а) <u>определенной доле ПДК загрязняющего воздуха вещества</u> б) определенной высоте рельефа местности в) определенному объему выбросов загрязняющих веществ
41	Компьютерная программа ППА серии «Эколог» предназначена а) <u>для прогноза последствий аварий, связанных с попаданием в окружающую среду ядовитых веществ</u> б) для подбора приборов и автоматизированных средств контроля для дистанционного мониторинга

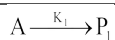
	с) для прогноза потребления атмосферного воздуха для технологических нужд
42	Представление данных на компьютерной карте получило название а) географической информационной системы б) глобальной информационной системы с) информационного обеспечения
43	Информационное обеспечение мониторинга окружающей среды включает в себя (выберите несколько правильных ответов) а) сбор информации б) хранение информации с) алгоритм обработки информации д) анализ информации
44	Результатом расчета по программе УПРЗА «Эколог» являются (выберите несколько правильных ответов): а) значения приземных концентраций б) карты-схемы, на которых значения концентраций загрязняющих веществ изображены в виде изолиний в долях ПДК с) высота и диаметр устья источника в) объем и температура выходящей газовой смеси
45	Тесноту линейной связи между двумя параметрами количественно характеризует коэффициент парной (_____) (впишите слово) Ответ: корреляции

3.2 Кейс-задания

3.2.1 ОПК-2 способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования

Номер задания	Формулировка задачи
46	<p>Задание: напишите вектор скоростей по стадиям для химической реакции</p> $A \xrightarrow{k_1} P_1$ $P_1 \xrightarrow{k_2} P_2$ $P_2 \xrightarrow{k_3} D + E$ <p>Решение:</p> <p>Число компонентов вектора скоростей по стадиям $V^{(S)}$ равно числу стадий. Каждая компонента определяется как произведение константы скорости химической реакции на концентрацию исходных веществ в степени стехиометрического коэффициента.</p> <p>Имеем</p> $V^{(S)} = \begin{bmatrix} V_1^{(S)} \\ V_2^{(S)} \\ V_3^{(S)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \\ k_2 \cdot C_{P_1} \\ k_3 \cdot C_{P_2} \end{bmatrix}$
47	<p>Задание: напишите вектор скоростей по стадиям для химической реакции</p> $A + B \xrightarrow{k_1} P_1$ $P_1 \xrightarrow{k_2} D + E$

	<p>Решение:</p> <p>Число компонентов вектора скоростей по стадиям $V^{(S)}$ равно числу стадий. Каждая компонента определяется как произведение константы скорости химической реакции на концентрацию исходных веществ в степени стехиометрического коэффициента.</p> <p>Имеем</p> $V^{(S)} = \begin{bmatrix} V_1^{(S)} \\ V_2^{(S)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ k_2 \cdot C_{P_1} \end{bmatrix}$
48	<p>Задание: составьте матрицу стехиометрических коэффициентов для химической реакции</p> $A + B \xrightarrow{k_1} P_1$ $P_1 \xrightarrow{k_2} D + E$ <p>Решение:</p> <p>Число строк матрицы стехиометрических коэффициентов X определяется числом веществ, участвующих в реакции, число столбцов – числом стадий. Стехиометрический коэффициент берется со знаком «-», если вещество на стадии расходуется, со знаком «+» - если образуется.</p> <p>Имеем</p> $X = \begin{matrix} A & \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ B & \\ P_1 & \\ D & \\ E & \end{matrix}$
49	<p>Задание: составьте матрицу стехиометрических коэффициентов для химической реакции</p> $A + 2B \xrightarrow{k_1} P_1$ $P_1 \xrightarrow{k_2} 2D + K$ <p>Решение:</p> <p>Число строк матрицы стехиометрических коэффициентов X определяется числом веществ, участвующих в реакции, число столбцов – числом стадий. Стехиометрический коэффициент берется со знаком «-», если вещество на стадии расходуется, со знаком «+» - если образуется.</p> <p>Имеем</p> $X = \begin{matrix} A & \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -2 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ B & \\ P_1 & \\ D & \\ E & \end{matrix}$
50	<p>Задание: определите константу скорости химической реакции по экспериментальным данным</p>



Время	C_A
0	1
1	0,78
2	0,61
3	0,47
4	0,37
5	0,29
6	0,23

Решение

Закон изменения концентрации вещества А во времени описывается уравнением

$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-k_1 \cdot t}$$

имеем

$$\ln C_A = \ln C_{A0} - k_1 \cdot t$$

Это уравнение можно переписать:

$$y = a_0 + a \cdot x$$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i - n \cdot \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i}{[\sum_{i=1}^n x_i]^2 - n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2}$$

$$a_0 = \frac{1}{n} \cdot (\sum_{i=1}^n y_i - a \cdot \sum_{i=1}^n x_i)$$

$$a = -k_1 \quad a_0 = \ln C_{A0}$$

Применительно к исследуемой химической реакции и экспериментальным данным, имеем

Время	C_{A0}	$\ln C_{A0}$	x	y	$x \cdot y$	x^2
0	1	0	0	0	0	0
1	0,78	-0,24846	1	-0,2484	-0,24846	1
2	0,61	-0,4943	2	-0,4943	-0,98859	4
3	0,47	-0,75502	3	-0,75502	-2,26507	9
4	0,37	-0,99425	4	-0,99425	-3,97701	16
5	0,29	-1,23787	5	-1,23787	-6,18937	25
6	0,23	-1,46968	6	-1,46968	-8,81806	36

$$\sum x_i = 21$$

$$\sum y_i = -5,19958$$

$$\sum x_i \cdot y_i = -22,4866$$

$$\sum x_i^2 = 91$$

$$[\sum x_i]^2 = 441$$

$$a = -0,25$$

	$a_0 =$	-0,00169
	$a = -k_1$, таким образом $k_1 = 0,25$	

3.2.2 ПК-16 способностью моделировать энерго- и ресурсосберегающие процессы в промышленности

№ задания	Формулировка задачи
51	<p>Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции, протекающей в изотермических условиях, с использованием понятия о ключевых веществах</p> $A \xrightarrow{K_1} P_1$ $P_1 \xrightarrow{K_2} P_2$ $P_2 \xrightarrow{K_3} D$ <p>Решение</p> <p>Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):</p> $\begin{cases} \frac{dC_k}{dt} = X_k \cdot V(s), \\ C_{нк} = C_{нко} + U_{нк} \cdot (C_k - C_{ко}); \end{cases} \quad (1)$ <p>где C_k – вектор концентрации ключевых веществ; $C_{нк}$ – вектор концентрации неключевых веществ; $C_{ко}, C_{нко}$ – значения соответствующих векторов при начальных условиях; X_k – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ; $V(s)$ – вектор скоростей по стадиям. $U_{нк} = X_{нк} \cdot X_k^{-1}$, (2)</p> <p>где $X_{нк}$ – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ. Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе – структуру алгебраических. Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X:</p> $X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ D \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_k \\ \\ \\ X_{нк} \end{matrix}$ <p>Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми. В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P_1, P_2, т.к. $\det(X_k) \neq 0$ и следовательно, X_k – матрица невырожденная и имеет обратную $X_k^{(-1)}$; Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):</p> $\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$

Выполнив перемножение и используя равенство векторов, получаем систему дифференциальных уравнений математической модели:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_2}. \end{cases} \quad (4)$$

Конкретизируем второе уравнение системы (1). Для этого находим матрицы $X_{\text{к}}^{(-1)}$ и $U_{\text{нк}}$.

Обратная матрица имеет вид:

$$X_{\text{к}}^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

Далее находим матрицу $U_{\text{нк}}$:

$$U_{\text{нк}} = X_{\text{нк}} \times X_{\text{нк}}^{(-1)} = [0 \quad 0 \quad 1] \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = [-1 \quad -1 \quad -1]$$

Реализуем второе уравнение системы (1) при начальных условиях: $t=0$, $C_A = C_{A0}$, $C_{P_1} = C_{P_2} = C_D = 0$.

$$[C_D] = [0] + [-1 \quad -1 \quad -1] \cdot \begin{bmatrix} C_A - C_{A0} \\ C_{P_1} - 0 \\ C_{P_2} - 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

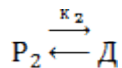
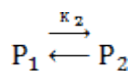
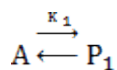
$$C_D = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}.$$

Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

Система (4) и уравнение (5) составляют математическую модель кинетики исследуемой химической реакции:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_2}, \\ C_D = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{cases}$$

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции, протекающей в изотермических условиях, с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

В основе построения математической модели лежит уравнение:

$$X \cdot V^{(s)} = w, \quad (1)$$

где X – матрица стехиометрических коэффициентов;

$V^{(s)}$ – вектор скоростей по стадиям;

w – вектор скоростей по компонентам.

Матрица стехиометрических коэффициентов:

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ D \end{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Если стадия обратимая, то при формировании вектора $V^{(s)}$ – берется разность скоростей прямой и обратной реакции.

Таким образом, вектор скоростей по стадиям исследуемой химической реакции будет иметь вид:

$$V^{(s)} = \begin{bmatrix} V_1^{(s)} \\ V_2^{(s)} \\ V_3^{(s)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A - k_{-1} \cdot C_{P_1} \\ k_2 \cdot C_{P_1} - k_{-2} \cdot C_{P_2} \\ k_3 \cdot C_{P_2} - k_{-3} \cdot C_D \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Вектор скоростей по компонентам:

$$w = \begin{bmatrix} w_A \\ w_{P_1} \\ w_{P_2} \\ w_D \end{bmatrix} = \frac{dC}{dt} = \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \\ C_D \end{bmatrix}. \quad (3)$$

где C – вектор концентраций компонентов реакции.

$$C = [C_A \quad C_{P_1} \quad C_{P_2} \quad C_D]^T.$$

Определяем ранг матрицы X по методу Гаусса [2].

Ранг матрицы $r(X) = 3$. Ключевые и неключевые вещества выбираем в соответствии с рангом матрицы. В данном случае ключевыми веществами являются вещества А, P_1 и P_2 , неключевым веществом – вещество Д.

Построим матрицы ключевых и неключевых веществ:

$$X_K = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}; \quad X_{HK} = [0 \quad 0 \quad 1].$$

Определим структуру дифференциальных уравнений:

$$\frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V(s), \quad (4)$$

$$\frac{dC_K}{dt} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 C_A - K_{-1} C_{P_1} \\ K_2 C_{P_1} - K_{-2} C_{P_2} \\ K_3 C_{P_2} - K_{-3} C_D \end{bmatrix}$$

$$\frac{dC_K}{dt} = \begin{bmatrix} -K_1 & C_A + K_{-1} & C_{P_1} \\ K_1 & C_A - K_{-1} & C_{P_1} - K_2 & C_{P_1} + K_{-2} & C_{P_2} \\ K_2 & C_{P_1} - K_{-2} & C_{P_2} - K_3 & C_{P_2} + K_{-3} & C_D \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A + K_{-1} \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - (K_{-1} + K_2) \cdot C_{P_1} + K_{-2} \cdot C_{P_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - (K_{-2} + K_3) \cdot C_{P_2} + K_{-3} \cdot C_D. \end{cases} \quad (5)$$

Определим структуру алгебраических уравнений:

$$C_{HK} = C_{HKO} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{KO}), \quad (6)$$

$$U_{HK} = X_{HK} \cdot X_K^{(-1)}. \quad (7)$$

Определим обратную $X_K^{(-1)}$ матрицу по одному из известных методов [2, 6].

$$X_{\kappa}^{(-1)} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix},$$

$$U_{\text{ннк}} = [0 \ 0 \ 1] \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = [-1 \ -1 \ -1]$$

Начальные условия: $t = 0, C_{P_1} = C_{P_2} = C_D = 0$.

$$[C_D] = [0] + [-1 \ -1 \ -1] \cdot \begin{bmatrix} C_A - C_{A0} \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix},$$

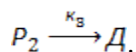
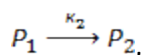
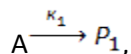
$$C_D = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}.$$

Таким образом, математическая модель кинетики исследуемой химической реакции имеет вид :

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -\kappa_1 \cdot C_A + \kappa_{-1} \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = \kappa_1 \cdot C_A - (\kappa_{-1} + \kappa_2) \cdot C_{P_1} + \kappa_{-2} \cdot C_{P_2} \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = \kappa_2 \cdot C_{P_1} - (\kappa_{-2} + \kappa_3) \cdot C_{P_2} + \kappa_{-3} \cdot C_D, \\ C_D = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{cases}, \quad (8)$$

53

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с протекающей в изотермических условиях, использованием понятия о степени завершенности реакции



Решение

Общий вид математической модели кинетики химической реакции протекающей в изотермических условиях, с использованием понятия о степени завершенности реакции имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{dt} = V^{(s)} \\ C = C_0 + X \cdot \rho \end{cases} \quad (1)$$

Конкретизируем первое уравнение системы (1) для исследуемой химической реакции.

$$\frac{d\rho}{dt} = V^{(S)} = \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \\ K_2 \cdot C_{P_1} \\ K_3 \cdot C_{P_2} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

Определим концентрации веществ, используя второе уравнение системы (1):

$$\begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{A0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix}$$

Имеем:

$$\begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{A0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\rho_1 & - & \rho_2 \\ \rho_1 & - & \rho_3 \\ \rho_2 & - & \rho_3 \\ \rho_3 & & \end{bmatrix}$$

Выполнив сложение векторов в правой части и используя равенство векторов (два вектора равны, если равны их соответствующие компоненты), имеем:

$$\begin{cases} C_A = C_{A0} - \rho_1 \\ C_{P_1} = \rho_1 - \rho_2 \\ C_{P_2} = \rho_2 - \rho_3 \\ C_D = \rho_3 \end{cases} \quad (3)$$

Подставим уравнения, полученные для концентраций веществ (3) в уравнение (2), конкретизировав вектор ρ :

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1) \\ K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2) \\ K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3) \end{bmatrix}$$

Имеем:

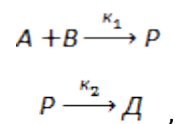
$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1), \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2), \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3). \end{cases} \quad (4)$$

Системы (4) и (3) составляют математическую модель исследуемой реакции:

$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1), \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2), \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3), \\ C_A = C_{A0} - \rho_1, \\ C_{P_1} = \rho_1 - \rho_2, \\ C_{P_2} = \rho_2 - \rho_3, \\ C_D = \rho_3. \end{cases} \quad (5)$$

54

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции протекающей в изотермических условиях в РИС



где K_1 и K_2 – константы скоростей по первой и второй стадиям химической реакции.

Решение:

В изохорно-изотермических условиях основное уравнение процесса (1):

$$\frac{C - C_0}{\tau} = X \cdot f(C), \quad (1)$$

где τ – среднее время пребывания частиц в аппарате;

X – стехиометрическая матрица;

$f(C)$ – кинетическая вектор-функция;

$C = [C_A^0, C_B^0, C_P^0, C_D^0]^T$ – вектор концентраций веществ А, В, Р, Д на входе в реактор.

Для исследуемой химической реакции матрица стехиометрических коэффициентов и кинетическая вектор-функция в формуле (1) имеют следующий вид:

$$X = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$f(C) = \begin{bmatrix} f_1(C) \\ f_2(C) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix},$$

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_D - C_D^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \kappa_2 \cdot C_P \end{bmatrix} \quad (2)$$

Для дальнейших расчетов принимают $C_P^0 = C_D^0 = 0$.

Модель (2) можно упростить, используя понятие о ключевых веществах.

Исходя из структуры матрицы X в качестве ключевых веществ можно выбрать, например A и P (первую и третью строку), так как определитель, составленный из соответствующих им строк матрицы X отличен от нуля:

$$\begin{vmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} = (-1) \cdot (-1) - 1 \cdot 0 \neq 0$$

Тогда:

$$C = \begin{bmatrix} C_K \\ C_{HK} \end{bmatrix},$$

где $C_K = [C_A \ C_P]^T$ – вектор концентраций ключевых веществ;

$C_{HK} = [C_B \ C_D]^T$ – вектор концентраций неключевых веществ.

$$X = \begin{bmatrix} X_K \\ X_{HK} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где X_K – матрица ключевых веществ;

X_{HK} – матрица неключевых веществ.

Векторы C_{HK} и C_K связаны соотношением:

$$C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}), \quad (4)$$

где U_{HK} – матрица преобразования, определяемая по формуле (5):

$$U_{HK} = X_{HK} \cdot X_K^{-1} \quad (5)$$

C_{K0}, C_{HK0} – векторы концентраций ключевых и не ключевых веществ на входе в реактор;

X_K^{-1} – матрица обратная X_K , т.е. $X_{HK} \cdot X_K^{-1} = 1$.

В соответствии с выбором ключевых веществ имеем:

$$X_K = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad X_{HK} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

В рассматриваемом случае

$$X_{\kappa}^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}$$

Вычисляем $U_{\text{нк}}$ по формуле (6):

$$U_{\text{нк}} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

После выполненных преобразований формулы (2) и (4) принимают вид:

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \kappa_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$\begin{bmatrix} C_B \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_B^0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P - 0 \end{bmatrix}.$$

После перемножения:

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B - \kappa_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (8)$$

$$\begin{bmatrix} C_B \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_B^0 - C_A^0 + C_A \\ C_A^0 - C_A - C_P \end{bmatrix}$$

По условию равенства векторов:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} (C_A - C_A^0) = -\kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{1}{\tau} C_D = \kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B - \kappa_2 \cdot C_P \\ C_B = C_B^0 - C_A^0 + C_A \\ C_D = C_A^0 - C_A - C_P \end{cases}, \quad (9)$$

Система (9) – математическая модель кинетики химической реакции протекающей в изотермических условиях в РИС

55

Задание: привести математическую модель кинетики сложной химической реакции к виду в безразмерных переменных

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_2}, \\ C_D = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{cases}$$

Для исследования математической модели на ЭВМ полезно привести систему к виду в

безразмерных переменных, введя следующие замены:

$$C_A = \alpha \cdot X_A, \quad C_{P_1} = \alpha \cdot X_{P_1},$$

$$C_{P_2} = \alpha \cdot X_{P_2}, \quad C_D = \alpha \cdot X_D, \quad t = \sigma \cdot \tau$$

где $X_A, X_{P_1}, X_{P_2}, X_D$ – безразмерные величины;

τ – безразмерное время;

α и σ – коэффициенты, позволяющие преобразовать безразмерные величины к размерным.

$$\begin{cases} \frac{\alpha}{\sigma} \cdot \frac{dX_A}{dt} = -K_1 \cdot \alpha \cdot X_A, \\ \frac{\alpha}{\sigma} \cdot \frac{dX_{P_1}}{dt} = \alpha \cdot K_1 \cdot X_A - K_2 \cdot \alpha \cdot X_{P_1}, \\ \frac{\alpha}{\sigma} \cdot \frac{dX_{P_2}}{dt} = \alpha \cdot K_2 \cdot X_{P_1} - \alpha \cdot K_3 \cdot X_{P_2}, \\ \alpha \cdot X_D = C_{A0} - \alpha \cdot X_A - \alpha \cdot X_{P_1} - \alpha \cdot X_{P_2}. \end{cases}$$

Умножаем первые три уравнения на $\frac{\alpha}{\sigma}$, четвертое уравнение делим на α .

Для определения α и σ принимаем:

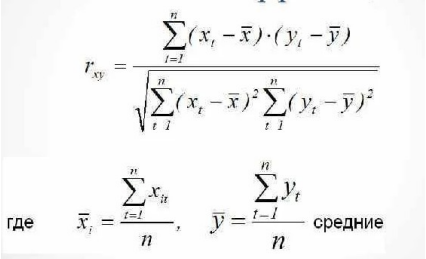
$$\frac{C_{A0}}{\alpha} = 1; K_1 = 1.$$

Введя $\lambda_1 = \frac{K_2}{K_1}$ и $\lambda_2 = \frac{K_3}{K_1}$ получаем

$$\begin{cases} \frac{dX_A}{dt} = -X_A, \\ \frac{dX_{P_1}}{dt} = X_A - \lambda_2 \cdot X_{P_1}, \\ \frac{dX_{P_2}}{dt} = \lambda_1 \cdot X_{P_1} - \lambda_2 \cdot X_{P_2}, \\ X_D = 1 - X_A - X_{P_1} - X_{P_2}. \end{cases}$$

Таким образом последняя система уравнений представлена в безразмерных переменных

3.2.4 ПК-3 способностью использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчета технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред

№ задания	Формулировка задачи																														
56	<p>Задание: рассчитайте средние арифметические значения рядов данных x и y, и коэффициент парной корреляции между x и y (n=9)</p> <table border="1" data-bbox="373 517 1581 640"> <thead> <tr> <th></th> <th>1</th> <th>2</th> <th>3</th> <th>4</th> <th>5</th> <th>6</th> <th>7</th> <th>8</th> <th>9</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>x</td> <td>0,12</td> <td>0,22</td> <td>0,33</td> <td>0,41</td> <td>0,51</td> <td>0,61</td> <td>0,75</td> <td>0,83</td> <td>0,95</td> </tr> <tr> <td>y</td> <td>2,2</td> <td>3,1</td> <td>4,5</td> <td>5,6</td> <td>6,7</td> <td>7,9</td> <td>8,8</td> <td>9,9</td> <td>10</td> </tr> </tbody> </table> <p>Какую встроенную функцию для расчета средних значений и коэффициента парной корреляции Вы будете использовать в электронных таблицах Microsoft Excel</p> <p>Решение Коэффициент парной корреляции рассчитывается по формуле</p> <div style="text-align: center;">  <p>где $\bar{x}_i = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$ средние</p> </div> <p>Рассчитаем средние значения x и y, затем коэффициент парной корреляции: среднее значение x = 0,53 среднее значение y = 6,52 коэффициент парной корреляции $r_{xy} = 0,99$</p> <p>Для расчета средних значений и коэффициента парной корреляции в электронных таблицах Microsoft Excel используются встроенные функции =СРЗНАЧ() и =КОРРЕЛ()</p>		1	2	3	4	5	6	7	8	9	x	0,12	0,22	0,33	0,41	0,51	0,61	0,75	0,83	0,95	y	2,2	3,1	4,5	5,6	6,7	7,9	8,8	9,9	10
	1	2	3	4	5	6	7	8	9																						
x	0,12	0,22	0,33	0,41	0,51	0,61	0,75	0,83	0,95																						
y	2,2	3,1	4,5	5,6	6,7	7,9	8,8	9,9	10																						
57	<p>Задание: рассчитайте средние арифметические значения рядов данных x и y, и коэффициент парной корреляции между x и y (n=9)</p> <table border="1" data-bbox="373 1554 1567 1677"> <thead> <tr> <th></th> <th>1</th> <th>2</th> <th>3</th> <th>4</th> <th>5</th> <th>6</th> <th>7</th> <th>8</th> <th>9</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>x</td> <td>5</td> <td>7</td> <td>8</td> <td>9</td> <td>12</td> <td>14</td> <td>15</td> <td>17</td> <td>18</td> </tr> <tr> <td>y</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>5</td> <td>6</td> <td>7</td> <td>9</td> <td>15</td> <td>20</td> </tr> </tbody> </table> <p>Какую встроенную функцию для расчета средних значений и коэффициента парной корреляции Вы будете использовать в электронных таблицах Microsoft Excel</p> <p>Решение Коэффициент парной корреляции рассчитывается по формуле</p>		1	2	3	4	5	6	7	8	9	x	5	7	8	9	12	14	15	17	18	y	2	3	4	5	6	7	9	15	20
	1	2	3	4	5	6	7	8	9																						
x	5	7	8	9	12	14	15	17	18																						
y	2	3	4	5	6	7	9	15	20																						

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

где $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$ средние

Рассчитаем средние значения x и y, затем коэффициент парной корреляции:
 среднее значение x = 11,67
 среднее значение y = 7,89
 коэффициент парной корреляции $r_{xy} = 0,90$

Для расчета средних значений и коэффициента парной корреляции в электронных таблицах Microsoft Excel используются встроенные функции =СРЗНАЧ() и =КОРРЕЛ()

58 **Задание:** оцените статистическую значимость коэффициента парной корреляции (r_{xy}) между x и y (n=10) (справочно: табличный критерий Стьюдента $t_{\text{табл.}} = 2,31$), если $r_{xy} = 0,55$

Решение
 Для вывода о наличии или отсутствии статистически достоверной корреляционной связи между исследуемыми переменными проводим проверку его статистической значимости. Для этого используем критерий Стьюдента (t), рассчитываемый по формуле:

$$t = \frac{r\sqrt{N-2}}{\sqrt{1-r^2}}$$

Имеем

$$t = \frac{0,55\sqrt{10-2}}{\sqrt{1-0,55^2}} = 2,23$$

поскольку $t=2,23 < t_{\text{табл.}} = 2,31$ можно утверждать, что коэффициент парной корреляции статистически незначим.

59 **Задание:** оцените статистическую значимость коэффициента парной корреляции (r_{xy}) между x и y (n=10) (справочно: табличный критерий Стьюдента $t_{\text{табл.}} = 2,31$), если $r_{xy} = 0,87$

Решение
 Для вывода о наличии или отсутствии статистически достоверной корреляционной связи между исследуемыми переменными проводим проверку его статистической значимости. Для этого используем критерий Стьюдента (t), рассчитываемый по формуле:

$$t = \frac{r\sqrt{N-2}}{\sqrt{1-r^2}}$$

Имеем

$$t = \frac{0,87\sqrt{10-2}}{\sqrt{1-0,87^2}} = 10,12$$

поскольку $t=10,12 > t_{\text{табл.}} = 2,31$ можно утверждать, что коэффициент парной корреляции статистически значим.

60 **Задание:** рассчитайте коэффициенты линейного регрессионного уравнения $y=a_0+ax$, если имеются следующие данные (n=9)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x	2	3	4	5	6	7	9	15	20
y	5	7	8	9	11	12	14	17	23

Решение

коэффициенты линейного регрессионного уравнения $y=a_0+ax$

	$a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i - n \cdot \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i}{[\sum_{i=1}^n x_i]^2 - n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2}$ $a_0 = \frac{1}{n} \cdot (\sum_{i=1}^n y_i - a \cdot \sum_{i=1}^n x_i)$ <p>a=4,5 a₀=0,92</p>
--	--

2.5 Вопросы к собеседованию (экзамену)

ОПК-2 способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования

№	Текст вопроса
61	Понятие модели и моделирования
62	Цели и задачи предмета математического моделирования.
63	Классификация моделей
64	Системное моделирование. Понятия системы и системного подхода.
65	Свойства системы. Категории системного моделирования: структура, функция, состояние, уровень.
66	Системный характер технологического объекта.
67	Этапы математического моделирования.
68	Требования, предъявляемые к математическим моделям.
69	Основные виды математических моделей
70	Классификация систем уравнений математического описания
71	Исследование химико-технологических и экологических систем методом математического моделирования с целью оптимизации параметров процесса, уменьшения образования побочных продуктов и отходов производства
72	Адекватность математической модели.
73	Составление уравнений математического описания.
74	Типовые математические структуры, используемые при математическом моделировании технологических систем в защите окружающей среды от загрязнения.

3.5.1 ПК-16 способность моделировать энерго- и ресурсосберегающие процессы в промышленности

№	Текст вопроса
75	Матрица стехиометрических коэффициентов. Скорость по компонентам. Скорость по стадиям.
76	Полная система кинетических уравнений сложной химической реакции (общий подход)
77	Построение математической модели кинетики двухстадийной необратимой химической реакции и ее анализ
78	Учет обратимости химической реакции при математическом моделировании
79	Построение математической модели кинетики двухстадийной обратимой химической реакции и ее анализ
80	Метод ключевых веществ для упрощения математической модели кинетики химической реакции (на примере двухстадийной необратимой химической реакции А – Р - Д)
81	Метод ключевых веществ для упрощения математической модели кинетики химической реакции (на примере двухстадийной обратимой химической реакции А = Р = Д)

82	Аналитическое решение кинетической модели последовательной реакции первого порядка и ее анализ
83	Сущность обратной кинетической задачи. Обратная кинетическая задача для последовательной реакции первого порядка
84	Понятие о степени завершенности химических реакций. Вектор степени завершенности реакции. Связь между концентрациями веществ и степенью завершенности реакции
85	Построение математической модели кинетики сложной химической реакции с использованием понятия о степени завершенности реакции

3.5.2 ПК-3 способностью использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчета технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред

№	Текст вопроса
86	Математические модели химических реакций в реакторах различных типов. Математическая модель кинетики реакции в реакторе идеального смешения (РИС)
87	Математические модели химических реакций в реакторах различных типов. Математическая модель кинетики реакции в реакторе идеального вытеснения (РИВ)
88	Метод Ньютона для решения нелинейных алгебраических уравнений
89	Метод Рунге-Кутты для решения систем дифференциальных уравнений
90	Основы корреляционного анализа
91	Регрессия. Регрессионный анализ. Построение математической модели в форме регрессионного уравнения
92	Целевая функция. Локальный и глобальный экстремумы
93	Прямые методы поиска безусловного минимума
94	Непрямые методы поиска безусловного минимума
95	Понятие оптимизации в химико-технологических системах

4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Процедуры оценивания в ходе изучения дисциплины знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций, регламентируются положениями:

- П ВГУИТ 2.4.03- Положение о курсовых экзаменах и зачетах;
- П ВГУИТ 4.1.02-Положение о рейтинговой оценке текущей успеваемости.

Для оценки знаний, умений, навыков обучающихся по дисциплине применяется рейтинговая система. Итоговая оценка по дисциплине определяется на основании определения среднеарифметического значения баллов по каждому заданию.

Зачет по дисциплине выставляется в зачетную ведомость по результатам работы в семестре после выполнения всех видов учебной работы, предусмотренных рабочей программой дисциплины (с отметкой «зачтено») и получении по результатам тестирования по всем разделам дисциплины не менее 60 %.

Экзамен по дисциплине выставляется в ведомость по результатам работы в семестре после выполнения всех видов учебной работы, предусмотренных рабочей программой дисциплины в соответствии с П ВГУИТ 4.1.02-Положением о рейтинговой оценке текущей успеваемости и П ВГУИТ 2.4.03- Положением о курсовых экзаменах и зачетах.