

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

(подпись) **Василенко В.Н.**
(ф.и.о.)

«25» мая 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
ДИСЦИПЛИНЫ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ И ПРИРОДНЫХ СИСТЕМ

Направление подготовки

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

Направленность (профиль)

Экологическая безопасность и рациональное использование природных ресурсов
Квалификация выпускника

магистр

(в соответствии с Приказом Министерства образования и науки РФ от 12 сентября 2013 г. N 1061 "Об утверждении перечней специальностей и направлений подготовки высшего образования" (с изменениями и дополнениями))

Воронеж

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

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой Промышленной экологии, оборудования химических и нефтехимических производств

_____ Корчагин В. И. _____
(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

1. Цели и задачи дисциплины

Целями освоения дисциплины «Моделирование технологических и природных систем» является формирование компетенций обучающегося в области профессиональной деятельности и сфере профессиональной деятельности:

26 Химическое, химико-технологическое производство (в сферах: защита окружающей среды и ликвидация последствий вредного на нее воздействия; сбор, переработка, утилизация и хранение отходов производства; обеспечение экологически и санитарно-эпидемиологически безопасного обращения с отходами производства и потребления; разработка энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии; разработка, создание и эксплуатация энерго- и ресурсосберегающих машин и аппаратов химических производств);

40 Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии)

Дисциплина направлена на решение задач профессиональной деятельности следующих типов: *научно-исследовательский; технологический; организационно-управленческий; проектный; экспертно-аналитический.*

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки/специальности 18.04.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии».

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	Формулировка компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
1	УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	ИД1 _{УК-1} – Критически анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
			ИД2 _{УК-1} – Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе системного подхода, вырабатывает стратегию действий
2	УК-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	ИД1 _{УК-2} – Разрабатывает концепцию проектного решения в рамках обозначенной проблемы, представляет публично результаты проекта и предлагает возможные пути внедрения их в практику
			ИД2 _{УК-2} – Организует разработку плана реализации проекта, его корректировку и контроль за выполнением на всех этапах жизненного цикла
3	ПК-3	Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем	ИД1 _{ПК-3} – Проводит лабораторные исследования, наблюдения и измерения и осуществляет оформление результатов исследований и разработок в виде отчетов
			ИД2 _{ПК-3} – Проводит опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем, направленные на повышение экологической безопасности
4	ПК-6	Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения	ИД1 _{ПК-6} – Осуществляет технологические расчеты, составление компоновочных решений для технологических линий в области охраны окружающей среды с использованием пакетов прикладных программ
			ИД2 _{ПК-6} – Использует системы автоматизированного проектирования и программного обеспечения, информационные технологии при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения предприятий

Код и наименование индикатора	Результаты обучения (показатели оценивания)
-------------------------------	---

достижения компетенции	
ИД1 _{ук-1} – Критически анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними	Знает: Методику анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними.
	Умеет: Анализировать проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними.
	Владеет: Навыками сбора, анализа и обработки информации о проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними
ИД2 _{ук-2} – Организует разработку плана реализации проекта, его корректировку и контроль за выполнением на всех этапах жизненного цикла	Знает: основные требования, предъявляемые к проектной работе
	Умеет: планировать действия для достижения данного результата
ИД1 _{пк-3} – Проводит лабораторные исследования, наблюдения и измерения и осуществляет оформление результатов исследований и разработок в виде отчетов	Знает: современные методы исследования технологических процессов и природных средств, способы применения компьютерных средств в научных исследованиях
	Умеет: планировать экспериментальные исследования, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты
	Владеет: базовыми приемами организации и проведения научных исследований
ИД2 _{пк-3} – Проводит опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем, направленные на повышение экологической безопасности	Знает: основные методики проведения исследований и разработок
	Умеет: планировать и проводить исследования и разработки, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты
	Владеет: базовыми приемами организации и проведения исследований и разработок
ИД1 _{пк-6} – Осуществляет технологические расчеты, составление компоновочных решений для технологических линий в области охраны окружающей среды с использованием пакетов прикладных программ	Знает: математический аппарат технологических расчетов
	Умеет: составлять технические задания на разработку технологических расчетов
	Владеет: навыками разработки проектной документации на реконструкцию или строительство объектов производства
ИД2 _{пк-6} – Использует системы автоматизированного проектирования и программного обеспечения, информационные технологии при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения предприятий	Знает: Основные пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ
	Умеет: Использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ
	Владеет: Навыками выбора и использования пакетов прикладных программ для расчета технологических параметров процесса с учетом реализации задач энерго- и ресурсосбережения

3. Место дисциплины в структуре ООП ВО

Дисциплина относится к *части, формируемой участниками образовательных отношений* Блока 1 ООП. Дисциплина является обязательной к изучению

Дисциплина «Моделирование технологических и природных систем» базируется на знаниях, умениях и компетенциях, сформированных при изучении дисциплин Неорганическая химия, Органическая химия, Экология, Процессы и аппараты, «Математика», «Информатика».

Дисциплина «Моделирование технологических и природных систем» является предшествующей для освоения практики, выполнения выпускной квалификационной работы.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 5 зачетных единиц.

Виды учебной работы	Всего часов акад	Семестр 2
		акад
Общая трудоемкость дисциплины (модуля)	180	180
Контактная работа в т.ч. аудиторные занятия	49,65	49,65
Лекции	9	9
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>		
Практические занятия (ПЗ)	38	38
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>		
Подготовка к экзамену	33,8	33,8

Консультации текущие	0,45	0,45
Консультация перед экзаменом	2	2
Виды аттестации (зачет, экзамен)	Экзамен 0,2	Экзамен 0,2
Самостоятельная работа:	96,55	96,55
Подготовка к практическим занятиям:	20	20
- проработка конспекта лекций	10	10
- проработка материалов учебника	46,55	46,55
Реферат	10	10
Подготовка к решению кейс-задания	10	10

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

5.1 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (указываются темы и дидактические единицы)	Трудоемкость раздела, часы
1	Понятие математической модели. Основы исследования различных химико-технологических объектов с использованием ЭВМ с точки зрения уменьшения их воздействия на окружающую среду	Общие принципы математического моделирования. Составление уравнений математического описания. Типовые математические структуры, используемые при математическом моделировании технологических систем в защите окружающей среды от загрязнения. Исследование химико-технологических и экологических систем методом математического моделирования с целью оптимизации параметров процесса, уменьшения образования побочных продуктов и отходов производства. Основные понятия моделирования. Классификация моделей. Этапы математического моделирования. Требования к математической модели. Адекватность математической модели. Универсальность, экономичность, точность.	25,55
2	Построение и использование математических моделей химико-технологических процессов. Методы моделирования технологических процессов в реакторах различных типов. Решение задач оптимизации технологических процессов.	Использование математических моделей для исследования кинетики химической реакции. Математические выражения для скорости простой химической реакции в закрытой и открытой системах. Скорость по компоненту. Скорость по стадии. Кинетическая функция. Полная система кинетических уравнений сложной химической реакции. Вектор скоростей по стадиям. Вектор по компонентам. Кинетическая вектор-функция. Преобразование полной системы кинетических уравнений с целью замены части дифференциальных или нелинейных алгебраических уравнений линейными алгебраическими уравнениями для стехиометрически невырожденных и вырожденных сложных химических реакций на основе понятия о ключевых веществах. Степень завершенности реакции. Преобразование полной системы кинетических уравнений к виду в безразмерных переменных. Математическое моделирование химических	48

		реакций в реакторе идеального смешения. Математическая структура модели (системы алгебраических уравнений). Полная система кинетических уравнений и ее возможное преобразование. Математические модели химической реакции в открытых системах типа реактор идеального вытеснения в стационарном режиме. Общие стационарные итерационные методы. Итерация, изображение итерационного процесса, сходимости, скорость сходимости к точному решению. Теорема глобальной и локальной сходимости процесса. Метод Ньютона. Решение системы алгебраических уравнений. Кривая итерационного процесса.	
3	Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах	Методы корреляционного анализа. Проверка статистической значимости коэффициента корреляции. Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах. Корреляционное отношение. Проверка адекватности уравнений регрессии.	35
4	Методы моделирования уровня воздействия промышленных объектов на окружающую среду.	Методы моделирования уровня загрязнения атмосферного воздуха от промышленных источников. Методы моделирования концентраций загрязняющих веществ в воде водных объектов при сбросе сточных вод.	35
Подготовка к экзамену			33,8
Консультации текущие			0,45
Консультация перед экзаменом			2
Виды аттестации (зачет, экзамен)			Экзамен 0,2

5.2 Разделы дисциплины (модуля) и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции, час	ПЗ (или С), час	СРО, час
1	Понятие математической модели. Основы исследования различных химико-технологических объектов с использованием ЭВМ с точки зрения уменьшения их воздействия на окружающую среду	2	2	21,55
2	Построение и использование математических моделей химико-технологических процессов. Методы моделирования технологических процессов в реакторах различных типов. Решение задач оптимизации технологических процессов.	3	20	25
3	Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах	2	8	25
4	Методы моделирования уровня воздействия промышленных объектов на окружающую среду.	2	8	25
Подготовка к экзамену			33,8	
Консультации текущие			0,45	
Консультация перед экзаменом			2	
Виды аттестации (зачет, экзамен)			Экзамен 0,2	

5.2.1 Лекции

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика лекционных занятий	Трудоемкость, час
1	Понятие	Общие принципы математического моделирования.	2

	<p>математической модели. Основы исследования различных химико-технологических объектов с использованием ЭВМ с точки зрения уменьшения их воздействия на окружающую среду</p>	<p>Составление уравнений математического описания. Типовые математические структуры, используемые при математическом моделировании технологических систем в защите окружающей среды от загрязнения. Исследование химико-технологических и экологических систем методом математического моделирования с целью оптимизации параметров процесса, уменьшения образования побочных продуктов и отходов производства. Основные понятия моделирования. Классификация моделей. Этапы математического моделирования. Требования к математической модели. Адекватность математической модели. Универсальность, экономичность, точность.</p>	
2	<p>Построение и использование математических моделей химико-технологических процессов. Методы моделирования технологических процессов в реакторах различных типов. Решение задач оптимизации технологических процессов.</p>	<p>Использование математических моделей для исследования кинетики химической реакции. Математические выражения для скорости простой химической реакции в закрытой и открытой системах. Скорость по компоненту. Скорость по стадии. Кинетическая функция. Полная система кинетических уравнений сложной химической реакции. Вектор скоростей по стадиям. Вектор по компонентам. Кинетическая вектор-функция. Преобразование полной системы кинетических уравнений с целью замены части дифференциальных или нелинейных алгебраических уравнений линейными алгебраическими уравнениями для стехиометрически невырожденных и вырожденных сложных химических реакций на основе понятия о ключевых веществах. Степень завершенности реакции. Преобразование полной системы кинетических уравнений к виду в безразмерных переменных. Математическое моделирование химических реакций в реакторе идеального смешения. Математическая структура модели (системы алгебраических уравнений). Полная система кинетических уравнений и ее возможное преобразование. Математические модели химической реакции в открытых системах типа реактор идеального вытеснения в стационарном режиме. Общие стационарные итерационные методы. Итерация, изображение итерационного процесса, сходимость, скорость сходимости к точному решению. Теорема глобальной и локальной сходимости процесса. Метод Ньютона. Решение системы алгебраических уравнений. Кривая итерационного процесса.</p>	3
3	<p>Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах</p>	<p>Методы корреляционного анализа. Проверка статистической значимости коэффициента корреляции. Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах. Корреляционное отношение. Проверка адекватности уравнений регрессии.</p>	2
4	<p>Методы моделирования уровня воздействия промышленных объектов на окружающую среду.</p>	<p>Методы моделирования уровня загрязнения атмосферного воздуха от промышленных источников. Методы моделирования концентраций загрязняющих веществ в воде водных объектов при сбросе сточных вод.</p>	2

5.2.2 Практические занятия (семинары)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика практических занятий (семинаров)	Трудоемкость, час
1	Понятие математической модели. Основы исследования различных химико-технологических объектов с использованием ЭВМ с точки зрения уменьшения их воздействия на окружающую среду	Методы построения и решения математических моделей в природоохранных технологиях	2
2	Построение и использование математических моделей химико-технологических процессов. Методы моделирования технологических процессов в реакторах различных типов. Решение задач оптимизации технологических процессов.	Построение и решение математической модели кинетики химической реакции с использованием понятия ключевых веществ.	4
		Математическая модель кинетики химической реакции при наличии обратимых стадий.	4
		Построение и решение математической модели кинетики химической реакции с использованием понятия о степени завершенности реакции	4
		Расчет статического режима реактора идеального смешения по методу Ньютона в случае сложной реакции	4
		Расчет статистического режима реактора идеального вытеснения (РИВ) по методу Рунге-Кутты.	4
3	Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах	Методы корреляционного анализа. Проверка статистической значимости коэффициента корреляции.	4
		Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах. Корреляционное отношение. Проверка адекватности уравнений регрессии.	4
4	Методы моделирования уровня воздействия промышленных объектов на окружающую среду	Методы моделирования концентраций загрязняющих веществ от организованных и неорганизованных источников выбросов.	4
		Методы моделирования концентраций загрязняющих веществ в воде водных объектов при сбросе сточных вод. Модель смешения в расчете нормативно допустимого сброса (НДС) в водоем.	4

5.2.3 Лабораторный практикум – не предусмотрен

5.2.4 Самостоятельная работа обучающихся (СРО)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вид СРО	Трудоемкость, час
1	Понятие математической модели. Основы исследования различных химико-технологических объектов с использованием ЭВМ с точки зрения уменьшения их воздействия на окружающую среду	Подготовка к практическим занятиям	21,55
2	Построение и использование математических моделей	Подготовка к практическим занятиям Подготовка к решению кейс-задания	25

	химико-технологических процессов. Методы моделирования технологических процессов в реакторах различных типов. Решение задач оптимизации технологических процессов.		
3	Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах	Подготовка к практическим занятиям Подготовка к решению кейс-задания	25
4	Методы моделирования уровня воздействия промышленных объектов на окружающую среду	Подготовка к практическим занятиям Подготовка к решению кейс-задания реферат	25

6 Учебно-методическое и информационное 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>.

5. Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций : учебник / Ю. Г. Марков, И. В. Маркова. — Санкт-Петербург : Лань, 2013. — 192 с. — ISBN 978-5-8114-1483-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/40052> (дата обращения: 06.05.2022).

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>

Учебно-методический комплекс ЭУМК дисциплины в СДО MOODLE

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

Наименование ресурса сети «Интернет»	Электронный адрес ресурса
«Российское образование» - федеральный портал	https://www.edu.ru/
Научная электронная библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp?
Национальная исследовательская компьютерная сеть России	https://niks.su/
Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»	http://window.edu.ru/
Электронная библиотека ВГУИТ	http://biblos.vsu.ru/megapro/web
Сайт Министерства науки и высшего образования РФ	https://minobrnauki.gov.ru/
Портал открытого on-line образования	https://npoad.ru/
Электронная информационно-образовательная среда ФГБОУ ВО «ВГУИТ»	https://education.vsu.ru/

6.5 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

При изучении дисциплины используется программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы: ЭИОС университета, в том числе на базе программной платформы «Среда электронного обучения ЗКЛ», автоматизированная информационная база «Интернет-тренажеры», «Интернет-экзамен».

При освоении дисциплины используется лицензионное и открытое программное обеспечение – н-р, ОС Windows, ОС ALT Linux.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

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

- лекционные аудитории (оборудованные видеопроеционным 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.vsuet.ru>.

Аудитории для проведения занятий лекционного типа

<p>Учебная аудитория № 6-31 для проведения лекционных, практических, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации</p>	<p>- 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</p>	<p>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</p>
<p>Учебная аудитория № 6-33 для проведения лекционных, практических, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации</p>	<p>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</p>	<p>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</p>
<p>Учебная аудитория № 6-35 для проведения занятий лекционного типа, практических, лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации</p>	<p>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,</p>	<p>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</p>
<p>Учебная аудитория № 24 для проведения практических, лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации</p>	<p>Комплект мебели для учебного процесса: стол ученический – 24 штуки, стул ученический – 49 штук. Компьютер Intel Core 2Duo E7300 - 1 штука; Монитор 18 LG – 1 штука; моноблок ГРАВИТОН M40I EЦРТ.466219.011-01(на баде материнской платы DMB-N310-TM101, EЦРТ.469555.005TY) – 12 штук; Проектор Aser XD 1150. Компьютер Celeron-433. Плоттер HP DesignJet Рабочая станция Intel Celeron 335.</p>	<p>Microsoft Windows 7, Microsoft Open License Microsoft Windows Professional 7 Russian Upgrade Academic OPEN 1 License No Level#47881748 от 24.12.2010г. http://eopen.microsoft.com Microsoft Office 2007 Standart, Microsoft Open License 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/pdfreader/volume-distribution.html</p>

Для проведения практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в распоряжении кафедры имеет ся:

<p>Учебная аудитория № 6-35 для проведения занятий</p>	<p>Комплект мебели для учебного процесса на 32 места Компьютеры Corei5–2300 (10</p>	<p>Microsoft Open License Microsoft WindowsXP Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008</p>
--	---	--

лекционного типа, практических, лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	шт), с доступом к сети интернет, Коммутатор Switch. Проектор Aser XD 1150 – 1 шт,	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
--	--	--

Аудитория для самостоятельной работы студентов

Учебная аудитория № 6-30 для самостоятельной работы студентов	Комплект мебели для учебного процесса на 2 места Компьютер P-4-3,0 – 2 шт. Принтер HP LaserJet P 2015 – 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 КОМПАС 3D LT v 12, (бесплат.ПО) http://zoomexe.net/ofis/project/2767-kompas-3d.html
---	---	---

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.	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 Microsoft Office 2007 Standart, Microsoft Open License Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com Microsoft Windows XP, Microsoft Open License 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/odfreader/volume-distribution.html
----------------------------	--	---

8 Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

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

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

ОМ представляются отдельным комплектом и **входят в состав рабочей программы дисциплины (модуля)**.

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

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

по дисциплине/практике

Моделирование технологических и природных систем

1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования

№ п/п	Код компетенции	Формулировка компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
1	УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	ИД1 _{УК-1} – Критически анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
			ИД2 _{УК-1} – Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе системного подхода, выработывает стратегию действий
2	УК-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	ИД1 _{УК-2} – Разрабатывает концепцию проектного решения в рамках обозначенной проблемы, представляет публично результаты проекта и предлагает возможные пути внедрения их в практику
			ИД2 _{УК-2} – Организует разработку плана реализации проекта, его корректировку и контроль за выполнением на всех этапах жизненного цикла
3	ПК-3	Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем	ИД1 _{ПК-3} – Проводит лабораторные исследования, наблюдения и измерения и осуществляет оформление результатов исследований и разработок в виде отчетов
			ИД2 _{ПК-3} – Проводит опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем, направленные на повышение экологической безопасности
4	ПК-6	Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения	ИД1 _{ПК-6} – Осуществляет технологические расчеты, составление компоновочных решений для технологических линий в области охраны окружающей среды с использованием пакетов прикладных программ
			ИД2 _{ПК-6} – Использует системы автоматизированного проектирования и программного обеспечения, информационные технологии при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения предприятий

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (показатели оценивания)
ИД1 _{УК-1} – Критически анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними	Знает: Методику анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними.
	Умеет: Анализировать проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними.
	Владеет: Навыками сбора, анализа и обработки информации о проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними
ИД2 _{УК-2} – Организует разработку плана реализации проекта, его корректировку и контроль за выполнением на всех этапах жизненного цикла	Знает: основные требования, предъявляемые к проектной работе
	Умеет: планировать действия для достижения данного результата
	Владеет: навыками составления плана-контроля выполнения проекта
ИД1 _{ПК-3} – Проводит лабораторные исследования, наблюдения и измерения и осуществляет оформление результатов исследований и разработок в виде отчетов	Знает: современные методы исследования технологических процессов и природных средств, способы применения компьютерных средств в научных исследованиях
	Умеет: планировать экспериментальные исследования, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты
	Владеет: базовыми приемами организации и проведения научных исследований
ИД2 _{ПК-3} – Проводит опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем, направленные на повышение экологической безопасности	Знает: основные методики проведения исследований и разработок
	Умеет: планировать и проводить исследования и разработки, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты
	Владеет: базовыми приемами организации и проведения исследований и разработок
ИД1 _{ПК-6} – Осуществляет технологические расчеты, составление компоновочных решений для технологических линий в области охраны окружающей среды с использованием пакетов прикладных программ	Знает: математический аппарат технологических расчетов
	Умеет: составлять технические задания на разработку технологических расчетов
	Владеет: навыками разработки проектной документации на реконструкцию или строительство объектов производства

ИД _{2ПК-6} – Использует системы автоматизированного проектирования и программного обеспечения, информационные технологии при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения предприятий	Знает : Основные пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ
	Умеет: Использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ
	Владеет: Навыками выбора и использования пакетов прикладных программ для расчета технологических параметров процесса с учетом реализации задач энерго- и ресурсосбережения

2 Паспорт оценочных материалов по дисциплине

№ п/п	Разделы дисциплины	Индекс контролируемой компетенции (или ее части)	Оценочные средства		Технология/процедура оценки (способ контроля)
			наименование	№№ заданий	
1	Понятие математической модели. Основы исследования различных химико-технологических объектов с использованием ЭВМ с точки зрения уменьшения их воздействия на окружающую среду	УК-1	<i>Тест</i>	1- 10	Бланочное тестирование
			<i>Кейс-задача</i>	107-116	Проверка преподавателем
			<i>Экзамен</i>	151-155	Проверка преподавателем
2	Построение и использование математических моделей химико-технологических процессов. Методы моделирования технологических процессов в реакторах различных типов. Решение задач оптимизации технологических процессов.	УК-2	<i>Тест</i>	11-34	Бланочное тестирование
			<i>Кейс-задача</i>	117-126	Проверка преподавателем
			<i>Экзамен</i>	156-166	Проверка преподавателем
3	Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах	ПК-3	<i>Тест</i>	35-80	Бланочное тестирование
			<i>Кейс-задача</i>	127-128	Проверка преподавателем
			<i>Реферат</i>	131-145	Проверка преподавателем
			<i>Экзамен</i>	167-180	Проверка преподавателем
4	Методы моделирования уровня воздействия промышленных объектов на окружающую среду	ПК-6	<i>Тест</i>	81—106	Бланочное тестирование
			<i>Кейс-задача</i>	129-130	Проверка преподавателем
			<i>Реферат</i>	146-150	Проверка преподавателем
			<i>Экзамен</i>	181-196	Проверка преподавателем

3. Оценочные материалы для промежуточной аттестации

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

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

Тесты (тестовые задания)

УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий

№ задания	Правильный ответ	Тестовое задание
1	1,2,3,4,5,6	Установить правильную последовательность этапов математического моделирования 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
2	2	Способы вывода уравнений статики динамики на основе теоретического анализа физических и химических процессов, происходящих в исследуемом процессе – это метод 1) экспериментальный 2) аналитический 3) комбинированный
3	1	Метод составления математического описания для уравнения и исследования объектов в узком диапазоне изменения входных и выходных переменных это 1) экспериментальный 2) комбинированный 3) аналитический
4	2	Общим требованием для всех математических моделей является 1) возможность составления дифференциальных уравнений 2) число уравнений, включаемых в описание должно быть равно числу находимых переменных
5	1-1 2-2 3-3 4-4	Установить соответствие между основными видами математических моделей и их свойствами 1. модели с сосредоточенными параметрами 2. модели с распределенными параметрами 3. статистические модели 4. динамические модели 1. используются для нестационарных процессов 2. изменяются как во времени, так и в пространстве 3. используются в стационарных условиях 4. отражают изменения объекта во времени
6	1	Метод аналитического составления моделей описания с одновременным проведением экспериментальных исследований это 1) комбинированный

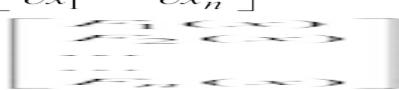
16	1	<p>При построении математической модели кинетики сложной химической реакции обратимость реакции по стадии учитывается</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) вектором скоростей по стадии 2) вектором скоростей по компонентам 3) матрицей стехиометрических коэффициентов
17	1	<p>Выбрать уравнение, устанавливающее связь между степенью завершенности химической реакции и концентрацией компонентов</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) $C = C_0 + X \cdot \rho$ 2) $X \cdot V^s = \omega$ 3) $U_{HK} = X_{HK} \cdot X^{-1}_K$
18	1	<p>В уравнении $C = C_0 + X \cdot \rho$ ρ это</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) вектор степени завершенности реакции 2) вектор начальных концентраций компонентов реакции 3) время химического равновесия
19	1	<p>Для двухстадийной последовательной реакции первого порядка $A \rightarrow P \rightarrow D$ концентрация вещества P будет</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) в начальный момент времени будет расти, а затем падает 2) уменьшается 3) увеличивается
20	1	<p>Для какого типа реактора используется следующая математическая модель для реакции $A \rightarrow P \rightarrow D$</p> $\frac{1}{t}(C_{Ao} - C_A) + k_1 C_A = 0$ $\frac{1}{t}(-C_P) + k_1 C_A - k_2 C_P = 0$ $\frac{1}{t}(-C_D) + k_1 C_A = 0$ <ol style="list-style-type: none"> 1) стационарный реактор идеального смешения 2) реактор идеального смешения в изотермическом режиме 3) реактор идеального вытеснения в изотермическом режиме
21	1	<p>Число компонентов вектора скоростей по компонентам определяется</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) количеством веществ 2) количеством стадий 3) числом компонент вектора скоростей по стадиям
22	1	<p>Каждая компонента вектора по стадиям определяется</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) как скорость по стадии, произведение соответствующей компоненты скорости реакции на концентрацию веществ 2) количеством веществ 3) числом строк матрицы стехиометрических коэффициентов
23	1	<p>Число дифференциальных уравнений математической модели кинетики сложной химической реакции определяется</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) числом ключевых веществ 2) количеством стадий 3) количеством веществ
24	1	<p>В уравнении $C_{HK} = C_{HK}^0 + U_{HK}(C_K - C_K^0)$ U_{HK} это</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) матрица преобразования 2) вектор концентрации веществ в начальный момент времени 3) вектор концентрации неключевых веществ
25	1	<p>В методе построения математической модели кинетики сложной химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах число алгебраических уравнений определяется</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) числом неключевых веществ 2) числом ключевых веществ 3) количеством стадий
26	1	<p>Для чего используется метод ключевых веществ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) для упрощения математической модели химической реакции 2) для решения математической модели химической реакции 3) для определения ранга матрицы стехиометрических коэффициентов

27	1-1 2-2 3-3	Установить соответствие в формуле $X \cdot V^s = \omega$ между обозначением характеристик и их наименованием 1. X 2. V^s 3. ω	1. матрица стехиометрических коэффициентов 2. вектор скоростей по стадиям 3. вектор скоростей по компонентам
28	1-1 2-2 3-3 4-4 5-5	19. Установить соответствие в формуле $C_{нк} = C_{нк}^0 + U_{нк}(C_k - C_k^0)$ между обозначением характеристик и их наименованием 1. $C_{нк}$ 2. $C_{нк}^0$ 3. $U_{нк}$ 4. C_k 5. C_k^0	1. концентрация неключевых веществ в текущий момент времени 2. концентрация неключевых веществ в начальный момент времени 3. функция преобразования 4. концентрация ключевых веществ в текущий момент времени 5. концентрация ключевых веществ в начальный момент времени
29	1-1 2-2 3-3	Установить соответствие в формуле $U_{нк} = X_{нк} \cdot X_k^{-1}$ между обозначением характеристик и их наименованием 1. $U_{нк}$ 2. $X_{нк}$ 3. X_k^{-1}	1. функция преобразования 2. матрица стехиометрических коэффициентов неключевых веществ 3. обратная матрица ключевых веществ
30	1-1 2-2 2-3	Установить соответствие в формуле $C = C_0 + X \cdot \rho$ между обозначением характеристик и их наименованием 1. C 2. C_0 3. X 4. ρ	1. концентрация компонентов реакции в текущий момент времени 2. концентрация компонентов реакции в начальный момент времени 3. матрица стехиометрических коэффициентов компонентов реакции 4. степень завершенности реакции
31	1	В уравнении $X \cdot V^s = \omega$ ω это 1) вектор скоростей по компонентам 2) вектор скоростей по стадиям 3) матрица стехиометрических коэффициентов	
32	1	В формуле $C = C_0 + X \cdot \rho$ X это 1) матрица стехиометрических коэффициентов компонентов, участвующих в реакции 2) матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ 3) обратная матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ	
33	1	Для двухстадийной последовательной реакции первого порядка $A \rightarrow P \rightarrow D$ концентрация вещества A с течением времени будет 1) уменьшаться 2) увеличиваться 3) в начале будет расти, а затем убывать	
34	2	Для двухстадийной последовательной реакции первого порядка $A \rightarrow P \rightarrow D$ концентрация вещества D с течением времени будет 1) уменьшаться 2) увеличиваться 3) в начале будет расти, а затем убывать	

ПК-3 Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем

35	2	В матрице стехиометрических коэффициентов знак «-» перед коэффициентом ставиться, если 1) вещество образуется 2) вещество расходуется	
----	---	---	--

		3) вещество не участвует в реакции
36	1	Количеством веществ, участвующих в реакции, определяется 1) число компонентов вектора скорости по компонентам 2) число компонентов вектора скоростей по стадиям 3) число столбцов матрицы стехиометрических коэффициентов
37	1	Количеством стадий определяется 1) число компонент вектора скоростей по стадиям 2) число компонент вектора скоростей по компонентам 3) количество строк матрицы стехиометрических коэффициентов
38	1-2-3-4-5-6	Установить последовательность этапов построения математической модели кинетики химической реакции методом с понятием о степени завершенности 1) построение матрицы стехиометрических коэффициентов 2) определение ранга матрицы стехиометрических коэффициентов 3) определение вектора ρ 4) построение системы уравнений для ключевых веществ 5) определение связи между степенью завершенности и концентрацией компонентов 6) запись системы уравнений исследуемой реакции
39	1-2-3-4-5-6-7	Установить последовательность этапов построения математической модели кинетики химической реакции методом ключевых веществ 1) построение матрицы стехиометрических коэффициентов 2) определение ранга матрицы стехиометрических коэффициентов 3) построение системы уравнений для ключевых веществ 4) нахождение обратной матрицы ключевых веществ 5) нахождение функции преобразования 6) построение системы уравнений для неключевых веществ 7) запись системы уравнений исследуемой реакции
40	1	В формуле $\frac{C - C_0}{\tau} = X \cdot V^s$ τ это 1) среднее время пребывания реагирующих веществ в реакторе 2) начальное время 3) текущее время
41	вытеснения	Объект с распределенными параметрами, в котором параметры процесса меняются от точки к точке – это аппарат идеального _____
42	1	Какое уравнение лежит в основе построения математической модели кинетики сложной химической реакции, протекающей в реакторе идеального смешения 1) $\frac{C - C_0}{\tau} = X \cdot V^s$ 2) $U_{нк} = X_{нк} \cdot X^{-1}_к$ 3) $X \cdot V^s = \omega$
43	1	По какому уравнению рассчитывается концентрация неключевых веществ 1) $C_{нк} = C_{нк}^0 + U_{нк}(C_к - C_к^0)$ 2) $U_{нк} = X_{нк} \cdot X^{-1}_к$ 3) $\frac{C - C_0}{\tau} = X \cdot V^s$
44	1	Какое уравнение лежит в основе построения математической модели кинетики реакции в реакторе идеального вытеснения 1) $X \cdot V^s = \frac{dC}{dt}$ 2) $C_{нк} = C_{нк}^0 + U_{нк}(C_к - C_к^0)$ 3) $\frac{d\rho}{dt} = V^s$
45	1	Построение разностной схемы аппроксимации дифференциального уравнения на шаге с определенным порядком точности – это сущность метода 1) Рунге-Кутта 2) Ньютона 3) простой итерации

		3) $X^{(k+1)} = X^k + hF(X^k)$
57	1	4. В формуле $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h$ это 1) параметр шага 2) номер итерации 3) вектор неизвестных
58	1-2-3	5. Установить правильную последовательность основных этапов при формализации задачи оптимизации 1) формирование задачи 2) нахождение оптимальных условий 3) реализация оптимальных условий на практике
59	Целевая	_____ функция – это функция, которая количественно характеризует качество системы
60	Безусловный	Если экстремум функции F ищется в неограниченной области x , то это _____ экстремум
61	глобальный	Точка, в которой целевая функция имеет наибольшее или наименьшее значение среди локальных экстремумов области определения – это _____ экстремум
62	1-1 2-2	Установить соответствие между названием методов и их свойствами 1) прямые методы 1) методы решения дифференциальных уравнений без ограничений 2) не прямые методы 2) методы решения задач с ограничениями
63	градиент	n -мерный вектор, компоненты которого равны частным производным функции $F(X)$, вычисленным в точке X^k по всем управляемым параметрам – это _____ функции $F(X)$ в какой-либо точке X^k
64	1-2-5-3-5	11. Установить правильную последовательность этапов поиска области функции 1) вычислить значение функции в точке X_0 2) вычислить значение переменной X на следующем шаге и найти y 3) определить направление итерации процесса 4) вычислить значения функции на каждом последующем шаге 5) сравнить $F(X_2)$ и $F(X_1)$
65	1	Итерации называются сходящимися, если 1) $\lim X^k = X^*$ 2) $X^{(k+1)} = J(X^k)$ 3) $r(I + hJ) < 1$
66	1	Основные характеристики итерационных методов это 1) сходимость итераций и скорость сходимости к точному решению 2) вектор погрешности на k -ой итерации 3) вектор неизвестных переменных и функция, определяемая способом построения итерационного метода
67	1	Матрица Якоби записывается 1) $\begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$ 2)  3) $\begin{bmatrix} \frac{dq_1}{dx_1} & \dots & \frac{dq_m}{dx_1} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{dq_1}{dx_m} & \dots & \frac{dq_m}{dx_m} \end{bmatrix}$

68	1-2-3-4	Установить правильную последовательность формулирования задачи оптимизации 1) выбор критерия оптимальности 2) наложение ограничений 3) нахождение зависимости критерия оптимальности от входных параметров 4) окончательная формулировка задачи (нахождение оптимальных факторов)
69	1	Переменные системы, которые являются аргументами целевой функции, называются 1) управляемые переменные 2) неуправляемые переменные 3) комбинированные переменные
70	1	Если экстремум функции F ищется в неограниченной области x_0 , то его называют 1) безусловным 2) условным 3) максимальным
71	1	Если функция F(x) имеет один экстремум, то она называется 1) одноэкстремальная 2) многоэкстремальная 3) среднеэкстремальная
72	1	Прямые ограничения, это ограничения вида 1) $x_{ni} \leq x_i \leq x_{ii}$; $i = \bar{1}, \bar{n}$ 2) $f(x) > 0$ 3) $j(x) = 0$
73	1	В основе прямых методов лежит 1) сравнение значений F в соседних точках 2) определение положения минимума 3) определение безусловно локального экстремума
74	1	Градиент функции определяется по формуле 1) $\nabla F(x^*) = \left[\frac{dF(x^*)}{dx_1}, \frac{dF(x^*)}{dx_2}, \dots, \frac{dF(x^*)}{dx_n} \right]^T$ 2) $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ 3) $x^{k+1} = x^k + hF(x^k)$
75	1	Важной характеристикой прямых методов поиска безусловного минимума является 1) их скорость сходимости 2) минимум целевой функции 3) выбор исходной точки
76	1	Ограничения типа равенств 1) фиксируют значения каких-либо параметров процесса 2) устанавливают пределы изменения параметров процесса 3) определяют физико-химическую природу процесса
77	1	Ограничения типа неравенств 1) устанавливают пределы изменения параметров 2) фиксируют значения каких-либо параметров 3) определяют физико-химическую природу
78	окрестность	Множество точек $S \in \varepsilon(x)$, которые находятся от точки x^P на расстоянии, не превышающем заданное число $\varepsilon > 0$ это _____ точки x^P
79	корреляции	Тесноту линейной связи между двумя параметрами количественно характеризует коэффициент парной (_____)
80	1	Корреляционный метод в экологических исследованиях используется для оценки 1) тесноты связи между анализируемыми показателями 2) изменчивости показателя 3) достоверности результатов анализов

ПК-6 Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения

81	3	В формуле $E = E_m - \exp[-k^m \cdot \lambda \cdot C_m(t_{\text{общ}} - t_{\text{равн}})]$ C это
----	---	--

90	1-1 2-2 3-3 4-4	Установить соответствие между обозначением и названием в уравнении $Risk = 1 - \exp(-UnitRisk \cdot c^b \cdot t)$ 1) Risk 2) UnitRisk 3) c 4) b	1) потенциальный риск 2) единица риска 3) реальная концентрация вещества 4) коэффициент, учитывающий особенности токсических свойств вещества
91	1-1 2-2 3-3	Установить соответствие между обозначением и названием в уравнении $\Phi = f(D, t)$ 1) Φ 2) D 3) t	1) токсический эффект 2) доза воздействия факторов 3) время воздействия факторов
92	1-1 2-2 3-3	Установить соответствие между обозначением и названием в формуле $E = E_m - \exp[-k^m \cdot \lambda \cdot C_m(t_{общ} - t_{равн})]$ 1) m 2) k 3) λ	1) коэффициент, учитывающий степень опасности токсиканта 2) константа скорости лимитирующей реакции 3) коэффициент распределения организмов в окружающей среде
93	1	К какому типу риска относится возникновение канцерогенных эффектов 1) риск специфического действия 2) риск немедленных эффектов 3) риск длительного воздействия	
94	2	К какому типу риска относятся неприятные запахи, раздражающие эффекты 1) риск специфического действия 2) риск немедленных эффектов 3) риск длительного воздействия	
95	3	К какому типу риска относятся снижение иммунного статуса, возникновение патологий организма 1) риск специфического действия 2) риск немедленных эффектов 3) риск длительного воздействия	
96	1	В результате расчета программы «Эколог» выдаются 1) значения приземных концентраций, карты изолиний концентраций 2) высота и диаметр устья источника 3) объем и температура выходящей газовой смеси	
97	1	Программа, которая позволяет по данным об источниках выброса примесей и условиях местности рассчитать разовые приземные концентрации примесей при неблагоприятных условиях это 1) «Эколог» 2) «2-ТП-воздух» 3) «2-ТП-отходы»	
98	1	Какие из перечисленных программ обеспечивают формирование отчета об охране атмосферного воздуха и инвентаризации и накопления отходов производства 1) «2-ТП-воздух», «2-ТП-отходы» 2) «Эколог» 3) ППА	
99	1	Какая из перечисленных программ позволяет осуществить оперативный прогноз последствий аварийных выбросов 1) ППА 2) «Эколог» 3) «2-ТП-воздух»	
100	1	Возможность установления связи между типами данных и выделения пространственных взаимоотношений между объектами на карте	

		представляет 1) ГИС 2) ОБУВ 3) ПДВ
101	1	«Методику расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий» (ОНД-86) реализует компьютерная программа 1) «Эколог» 2) «2-ТП-воздух» 3) ППА 4) Интеграл
102	1	Каждая из изолиний карты полей концентраций вредных веществ соответствует 1) определенной доле ПДК загрязняющего воздух вещества 2) определенной высоте рельефа местности 3) определенному объему выбросов загрязняющих веществ
103	1	Компьютерная программа ППА предназначена 1) для прогноза последствий аварий, связанных с попаданием в окружающую среду ядовитых веществ 2) для подбора приборов и автоматизированных средств контроля для дистанционного мониторинга 3) для прогноза потребления атмосферного воздуха для технологических нужд
104	1	Представление данных мониторинга на компьютерной карте получило название 1) географической информационной системы 2) глобальной информационной системы 3) информационного обеспечения
105	1,2,3,4	Информационное обеспечение мониторинга окружающей среды включает в себя 1) сбор информации 2) хранение информации 3) алгоритм обработки информации 4) анализ информации
106	эколог	Название серии Российских компьютерных программ, предназначенных для проведения оценки воздействия на окружающую среду соответствии с нормативными документами это _____

3.2. Кейс - задания

УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий

Задание: дать развернутые ответы на следующие ситуационные задания

Номер задания	Текст задания
107	<p>Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции 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 Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):</p>

$$\begin{cases} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}); \end{cases} \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

C_{HK} – вектор концентрации неключевых веществ;

C_{K0} , C_{HK0} – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{HK} = X_{HK} \cdot X_K^{-1}, \quad (2)$$

где X_{HK} – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе – структуру алгебраических.

Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X :

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

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):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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 $X_K^{(-1)}$ и U_{HK} . Обратная матрица имеет вид:

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

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

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

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

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

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

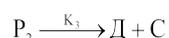
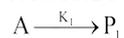
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

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

108

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\begin{cases} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{\text{нк}} = C_{\text{нк0}} + U_{\text{нк}} \cdot (C_K - C_{\text{к0}}); \end{cases} \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

$C_{\text{нк}}$ – вектор концентрации неключевых веществ;

$C_{\text{к0}}$, $C_{\text{нк0}}$ – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{\text{нк}} = X_{\text{нк}} \cdot X_K^{-1}, \quad (2)$$

где $X_{\text{нк}}$ – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе – структуру алгебраических.

Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X :

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ D \\ C \end{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \left. \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_{\text{к}} \\ \\ \\ X_{\text{нк}} \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P_1, P_2 , т.к. $\det(X_{\text{к}}) \neq 0$ и

следовательно, $X_{\text{к}}$ – матрица невырожденная и имеет обратную $X_{\text{к}}^{(-1)}$;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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 $U_{\text{нк}}$:

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

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

$C_{P_1} = C_{P_2} = C_D = C_C = 0.$

$$\begin{bmatrix} C_D \\ C_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{AO} \\ C_{P_1} & - & 0 \\ C_{P_2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

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

$$C_C = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}.$$

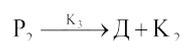
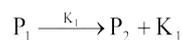
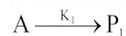
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_2}, \\ C_D = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}, \\ C_C = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{array} \right.$$

109

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

C_{HK} – вектор концентрации неключевых веществ;

C_{K0} , C_{HK0} – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{HK} = X_{HK} \cdot X_K^{-1}, \quad (2)$$

где X_{HK} – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе - структуру алгебраических.
Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X:

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ K_1 \\ D \\ K_2 \end{matrix} \left[\begin{array}{ccc} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \left. \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_K \\ \\ \\ X_{HK} \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P₁, P₂, т.к. det(X_K) ≠ 0 и следовательно, X_K – матрица невырожденная и имеет обратную X_K⁽⁻¹⁾;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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_K⁽⁻¹⁾ и U_{HK}.
Обратная матрица имеет вид:

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

Далее находим матрицу U_{HK}:

$$U_{HK} = X_{HK} \times X_{HK}^{(-1)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Реализуем второе уравнение системы (1) при начальных условиях: t=0, C_A = C_{A0},
C_{P₁} = C_{P₂} = C_D = C_{K1} = C_{K2} = 0.

$$\begin{bmatrix} C_{K1} \\ C_D \\ C_{K2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{A0} \\ C_{P1} & - & 0 \\ C_{P2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_{K1} = C_{A0} - C_A - C_{P1}$$

$$C_D = C_{A0} - C_A - C_{P1} - C_{P2}.$$

$$C_{K2} = C_{A0} - C_A - C_{P1} - C_{P2}.$$

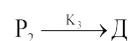
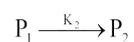
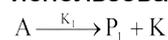
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P1}, \\ \frac{dC_{P2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P1} - K_3 \cdot C_{P2}, \\ C_{K1} = C_{A0} - C_A - C_{P1} \\ C_D = C_{A0} - C_A - C_{P1} - C_{P2} . \\ C_{K2} = C_{A0} - C_A - C_{P1} - C_{P2} . \end{array} \right.$$

110

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{HK} = C_{HKO} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{KO}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

C_{HK} – вектор концентрации неключевых веществ;

C_{KO} , C_{HKO} – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{\text{нк}} = X_{\text{нк}} \cdot X_{\text{к}}^{-1}, \quad (2)$$

где $X_{\text{нк}}$ – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе – структуру алгебраических.

Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X :

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ K \\ C \end{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \left. \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_{\text{к}} \\ \\ \\ X_{\text{нк}} \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P_1, P_2 , т.к. $\det(X_{\text{к}}) \neq 0$ и

следовательно, $X_{\text{к}}$ – матрица невырожденная и имеет обратную $X_{\text{к}}^{(-1)}$;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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 $U_{\text{нк}}$:

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

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

$$\begin{bmatrix} C_K \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{AO} \\ C_{P_1} & - & 0 \\ C_{P_2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_K = C_{AO} - C_A,$$

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

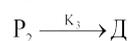
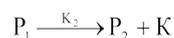
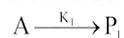
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_1}, \\ \\ C_K = C_{AO} - C_A \\ C_D = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{array} \right.$$

111

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

C_{HK} – вектор концентрации неключевых веществ;

C_{K0} , C_{HK0} – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{HK} = X_{HK} \cdot X_K^{-1}, \quad (2)$$

где X_{HK} – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений,

второе - структуру алгебраических.

Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X:

$$X = \left. \begin{array}{l} A \\ P_1 \\ P_2 \\ K \\ C \end{array} \right\} \begin{array}{l} \left[\begin{array}{ccc} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{array} \right] \\ \\ \\ \left[\begin{array}{ccc} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \end{array} \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} X_{\kappa} \\ \\ \\ X_{\text{нк}} \end{array}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P₁, P₂, т.к. det (X_κ) ≠ 0 и

следовательно, X_κ – матрица невырожденная и имеет обратную X_κ⁽⁻¹⁾;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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_κ⁽⁻¹⁾ и U_{нк}.

Обратная матрица имеет вид:

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

Далее находим матрицу U_{нк}:

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

Реализуем второе уравнение системы (1) при начальных условиях: t=0, C_A = C_{А0},

C_{P₁} = C_{P₂} = C_д = C_к = 0.

$$\begin{bmatrix} C_K \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{AO} \\ C_{P_1} & - & 0 \\ C_{P_2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_K = C_{AO} - C_A - C_{P_1}$$

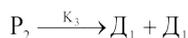
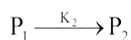
$$C_D = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}$$

Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_1}, \\ \\ C_K = C_{AO} - C_A - C_{P_1} \\ C_D = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{array} \right.$$

112 Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

C_{HK} – вектор концентрации неключевых веществ;

C_{K0} , C_{HK0} – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{HK} = X_{HK} \cdot X_K^{-1}, \quad (2)$$

где X_{HK} – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе - структуру алгебраических.
 Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X:

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ K \\ D_1 \\ D_2 \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_K \\ X_{HK} \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P₁, P₂, т.к. det(X_K) ≠ 0 и следовательно, X_K – матрица невырожденная и имеет обратную X_K⁽⁻¹⁾;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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_K⁽⁻¹⁾ и U_{HK}.
 Обратная матрица имеет вид:

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

Далее находим матрицу U_{HK}:

$$U_{HK} = X_{HK} \times X_{HK}^{(-1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Реализуем второе уравнение системы (1) при начальных условиях: t=0, C_A = C_{A0},
 C_{P₁} = C_{P₂} = C_K = C_{D1} = C_{D2} = 0.

$$\begin{bmatrix} C_K \\ C_{D1} \\ C_{D2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{AO} \\ C_{P1} & - & 0 \\ C_{P2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_K = C_{AO} - C_A$$

$$C_{D1} = C_{AO} - C_A - C_{P1} - C_{P2}.$$

$$C_{D2} = C_{AO} - C_A - C_{P1} - C_{P2}.$$

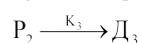
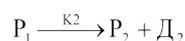
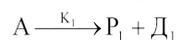
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P1}, \\ \frac{dC_{P2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P1} - K_3 \cdot C_{P2}, \\ C_K = C_{AO} - C_A \\ C_{D1} = C_{AO} - C_A - C_{P1} - C_{P2} . \\ C_{D2} = C_{AO} - C_A - C_{P1} - C_{P2} . \end{array} \right.$$

113

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V^{(s)}, \\ C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

C_{HK} – вектор концентрации неключевых веществ;

C_{K0} , C_{HK0} – значения соответствующих векторов при начальных условиях;

X_K – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;

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

$$U_{\text{ннк}} = X_{\text{ннк}} \cdot X_{\text{к}}^{-1}, \quad (2)$$

где $X_{\text{ннк}}$ – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.

Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе - структуру алгебраических.

Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X :

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{matrix} \left[\begin{array}{ccc} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \left. \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_{\text{к}} \\ \\ \\ X_{\text{ннк}} \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P_1, P_2 , т.к. $\det(X_{\text{к}}) \neq 0$ и

следовательно, $X_{\text{к}}$ – матрица невырожденная и имеет обратную $X_{\text{к}}^{(-1)}$;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A \\ K_2 \times C_{P_1} \\ K_3 \times C_{P_2} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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 $U_{\text{ннк}}$.

Обратная матрица имеет вид:

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

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

$$U_{\text{ннк}} = X_{\text{ннк}} \times X_{\text{к}}^{(-1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

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

$$C_{P_1} = C_{P_2} = C_{D_1} = C_{D_2} = C_{D_3} = 0.$$

$$\begin{bmatrix} C_K \\ C_{D_1} \\ C_{D_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{A0} \\ C_{P_1} & - & 0 \\ C_{P_2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_{D_1} = C_{A0} - C_A$$

$$C_{D_2} = C_{A0} - C_A - C_{P_1}.$$

$$C_{D_3} = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}.$$

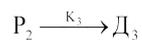
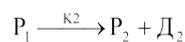
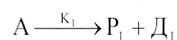
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \cdot C_A - K_2 \cdot C_{P_1}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \cdot C_{P_1} - K_3 \cdot C_{P_2}, \\ C_{D_1} = C_{A0} - C_A \\ C_{D_2} = C_{A0} - C_A - C_{P_1} \\ C_{D_3} = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{array} \right.$$

114

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о ключевых веществах



(вместо символа \rightarrow во всех стадиях нужно \leftrightarrow , константы обратных реакций k_{-1} k_{-2} k_{-3})

Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V(s), \\ C_{HK} = C_{HK0} + U_{HK} \cdot (C_K - C_{K0}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_k – вектор концентрации ключевых веществ;
 $C_{нк}$ – вектор концентрации неключевых веществ;
 $C_{к0}, C_{нк0}$ – 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)

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:

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix} \right\} \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ X_{нк} \\ \\ \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P₁, P₂, т.к. det (X_к) ≠ 0 и следовательно, X_к – матрица невырожденная и имеет обратную X_к⁽⁻¹⁾;

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} \\ K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} \\ K_3 \times C_{P_2} - K_{-3} \times C_{D_3} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - C_{P_1} - K_2 \times C_{P_1} + K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} - K_3 \times C_{P_2} + K_{-3} \times C_{D_3}. \end{cases} \quad (4)$$

Конкретизируем второе уравнение системы (1). Для этого находим матрицы X_к⁽⁻¹⁾ и U_{нк}.
 Обратная матрица имеет вид:

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

Далее находим матрицу U_{нк}:

$$U_{\text{HK}} = X_{\text{HK}} \times X_{\text{HK}}^{(-1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Реализуем второе уравнение системы (1) при начальных условиях: $t=0, C_A = C_{A0}, C_{P_1} = C_{P_2} = C_{D_1} = C_{D_2} = C_{D_3} = 0$.

$$\begin{bmatrix} C_K \\ C_{D_1} \\ C_{D_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A - C_{A0} \\ C_{P_1} - 0 \\ C_{P_2} - 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_{D_1} = C_{A0} - C_A$$

$$C_{D_2} = C_{A0} - C_A - C_{P_1}$$

$$C_{D_3} = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}$$

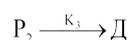
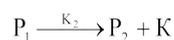
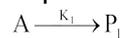
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - C_{P_1} - K_2 \times C_{P_1} + K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} - K_3 \times C_{P_2} + K_{-3} \times C_{D_3}, \\ C_{D_1} = C_{A0} - C_A \\ C_{D_2} = C_{A0} - C_A - C_{P_1} \\ C_{D_3} = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2} \end{array} \right.$$

115

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции при наличии обратимых стадий с использованием понятия о ключевых веществах



(вместо символа \rightarrow во всех стадиях нужно \leftrightarrow , константы обратных реакций k_{-1} k_{-2} k_{-3})

Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V(s), \\ C_{\text{HK}} = C_{\text{HK0}} + U_{\text{HK}} \cdot (C_K - C_{\text{K0}}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_k – вектор концентрации ключевых веществ;
 $C_{нкк}$ – вектор концентрации неключевых веществ;
 $C_{к0}, C_{нкк0}$ – значения соответствующих векторов при начальных условиях;
 X_k – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;
 $V^{(s)}$ – вектор скоростей по стадиям.
 $U_{нкк} = X_{нкк} \cdot X_k^{-1}$, (2)

где $X_{нкк}$ – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.
 Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе - структуру алгебраических.
 Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X:

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ K \\ Д \end{matrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \left. \begin{matrix} \\ \\ \\ \end{matrix} \right\} X_k \right\} X_{нкк}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P₁, P₂, 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):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{Д_1} \\ K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{Д_2} \\ K_3 \times C_{P_2} - K_{-3} \times C_{Д_3} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{Д_1} - K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{Д_1} - C_{P_1} - K_2 \times C_{P_1} + K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{Д_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{Д_2} - K_3 \times C_{P_2} + K_{-3} \times C_{Д_3}. \end{cases} \quad (4)$$

Конкретизируем второе уравнение системы (1). Для этого находим матрицы $X_k^{(-1)}$ и $U_{нкк}$. Обратная матрица имеет вид:

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

Далее находим матрицу $U_{нкк}$:

$$U_{\text{HK}} = X_{\text{HK}} \times X_{\text{HK}}^{(-1)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

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

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

$$C_K = C_{A0} - C_A - C_{P_1}.$$

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

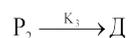
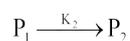
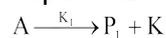
Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - C_{P_1} - K_2 \times C_{P_1} + K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} - K_3 \times C_{P_2} + K_{-3} \times C_{D_3}, \\ C_K = C_{A0} - C_A - C_{P_1} \\ C_D = C_{A0} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{array} \right.$$

116

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции при наличии обратимых стадий с использованием понятия о ключевых веществах



(вместо символа \rightarrow во всех стадиях нужно \leftrightarrow , константы обратных реакций k_{-1} k_{-2} k_{-3})

Решение

Математическая модель кинетики сложной химической реакции в изотермических условиях может быть представлена системой (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_K}{dt} = X_K \cdot V(s), \\ C_{\text{HK}} = C_{\text{HK0}} + U_{\text{HK}} \cdot (C_K - C_{\text{K0}}); \end{array} \right. \quad (1)$$

где C_K – вектор концентрации ключевых веществ;

$C_{\text{нк}}$ – вектор концентрации неключевых веществ;
 $C_{\text{к0}}, C_{\text{нк0}}$ – значения соответствующих векторов при начальных условиях;
 $X_{\text{к}}$ – матрица стехиометрических коэффициентов ключевых веществ;
 $V^{(s)}$ – вектор скоростей по стадиям.
 $U_{\text{нк}} = X_{\text{нк}} \cdot X_{\text{к}}^{-1}$, (2)

где $X_{\text{нк}}$ – матрица стехиометрических коэффициентов не ключевых веществ.
 Первое уравнение системы (1) определяет структуру дифференциальных уравнений, второе - структуру алгебраических.
 Строим матрицу стехиометрических коэффициентов X:

$$X = \begin{matrix} A \\ P_1 \\ P_2 \\ K \\ C \end{matrix} \left[\begin{array}{ccc} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \left. \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \right\} \begin{matrix} X_{\text{к}} \\ \\ \\ X_{\text{нк}} \end{matrix}$$

Компоненты, соответствующие независимым строкам преобразованной матрицы стехиометрических коэффициентов, называют ключевыми.

В данном случае выбираем ключевыми веществами A, P₁, P₂, т.к. det(X_к) ≠ 0 и следовательно, X_к – матрица невырожденная и имеет обратную X_к⁽⁻¹⁾

Для исследуемой химической реакции конкретизируем первое уравнение системы (1):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} \\ K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} \\ K_3 \times C_{P_2} - K_{-3} \times C_{D_3} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

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

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - C_{P_1} - K_2 \times C_{P_1} + K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} - K_3 \times C_{P_2} + K_{-3} \times C_{D_3}. \end{cases} \quad (4)$$

Конкретизируем второе уравнение системы (1). Для этого находим матрицы X_к⁽⁻¹⁾ и U_{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_{нк}:

$$U_{\text{ннк}} = X_{\text{ннк}} \times X_{\text{ннк}}^{(-1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

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

$$\begin{bmatrix} C_K \\ C_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_A & - & C_{AO} \\ C_{P_1} & - & 0 \\ C_{P_2} & - & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$C_K = C_{AO} - C_A.$$

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

Уравнение (5) представляет алгебраическое уравнение исследуемой математической модели.

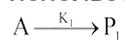
Система (4) и уравнение (5) составляют математическую модель кинетики исследуемой химической реакции:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - K_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_{P_1}}{dt} = K_1 \times C_A - K_{-1} \times C_{P_1} \times C_{D_1} - C_{P_1} - K_2 \times C_{P_1} + K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2}, \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} = K_2 \times C_{P_1} - K_{-2} \times C_{P_2} \times C_{D_2} - K_3 \times C_{P_2} + K_{-3} \times C_{D_3}, \\ C_K = C_{AO} - C_A \\ C_D = C_{AO} - C_A - C_{P_1} - C_{P_2}. \end{array} \right.$$

УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла

117

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с 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:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\rho}{dt} = V^{(s)} \\ C = C_0 + X \cdot \rho \end{array} \right. \quad (1)$$

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):

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

Имеем:

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

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

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

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:

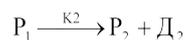
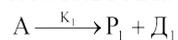
$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1) \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2) \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3) \end{cases} \quad (4)$$

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

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

118

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с 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:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\rho}{dt} = V^{(s)} \\ C = C_0 + X \cdot \rho \end{array} \right. \quad (1)$$

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):

$$\begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \\ C_{D_1} \\ C_{D_2} \\ C_{D_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{A0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix}$$

Имеем:

$$\begin{bmatrix} C_A \\ C_{P_1} \\ C_{P_2} \\ C_{D1} \\ C_{D2} \\ C_{D3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{A0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\rho_1 & & \\ \rho_1 & - & \rho_2 \\ \rho_2 & - & \rho_3 \\ & \rho_3 & \\ & \rho_3 & \\ & \rho_3 & \end{bmatrix}$$

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

$$\begin{cases} C_A = C_{A0} - \rho_1 \\ C_{P_1} = \rho_1 - \rho_2 \\ C_{P_2} = \rho_2 - \rho_3 \\ C_{D1} = \rho_3 \\ C_{D2} = \rho_3 \\ C_{D3} = \rho_3 \end{cases} \quad (3)$$

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:

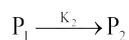
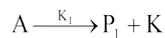
$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1) \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2) \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3) \end{cases} \quad (4)$$

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

$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1) \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2) \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3) \\ C_A = C_{A0} - \rho_1 \\ C_{P_1} = \rho_1 - \rho_2 \\ C_{P_2} = \rho_2 - \rho_3 \\ C_{D1} = \rho_3 \\ C_{D2} = \rho_3 \\ C_{D3} = \rho_3 \end{cases} \quad (5)$$

119

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с 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):

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

Имеем:

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

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

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

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:

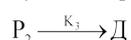
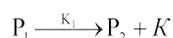
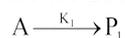
$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1) \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2) \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3). \end{cases} \quad (4)$$

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

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

120

Задание: построить математическую модель кинетики химической реакции с использованием понятия о степени завершенности реакции



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):

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

Имеем:

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

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

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

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:

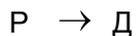
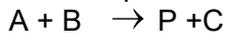
$$\begin{cases} \frac{d\rho_1}{dt} = K_1 \cdot (C_{A0} - \rho_1) \\ \frac{d\rho_2}{dt} = K_2 \cdot (\rho_1 - \rho_2) \\ \frac{d\rho_3}{dt} = K_3 \cdot (\rho_2 - \rho_3) \end{cases} \quad (4)$$

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

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

121

В РИС протекает химическая реакция



Задание: построить математическую модель кинетики 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;

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

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

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

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

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_C - C_C^0 \\ C_D - C_D^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix} \quad (2)$$

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

Модель (2) можно упростить, используя понятие о ключевых веществах. Исходя из структуры матрицы X в качестве ключевых веществ можно выбрать, например А и Р (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;

$C_{HK} = [C_B \ C_C \ C_D]^T$ – 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:

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

В рассматриваемом случае

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

Вычисляем U_{HK} по формуле (6):

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

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

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (7)$$

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

После перемножения:

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_1 \cdot C_A \cdot C_B - K_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (8)$$

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

По условию равенства векторов:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} (C_A - C_A^0) = -k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{1}{\tau} C_D = k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_P \\ C_B = C_B^0 - C_A^0 + C_A \\ C_C = C_A^0 - C_A \\ C_D = C_A^0 - C_A - C_P \end{cases}, \quad (9)$$

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

122

В РИС протекает химическая реакция



Задание: построить математическую модель кинетики 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;

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

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

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

$$f(C) = \begin{bmatrix} f_1(C) \\ f_2(C) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ k_2 \cdot C_P \end{bmatrix},$$

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_C - C_C^0 \\ C_D - C_D^0 \\ C_K - C_K^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix} \quad (2)$$

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

Модель (2) можно упростить, используя понятие о ключевых веществах. Исходя из структуры матрицы X в качестве ключевых веществ можно выбрать, например А и Р (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;

$C_{HK} = [C_B \ C_C \ C_D \ C_K]^T$ – 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:

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

В рассматриваемом случае

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

Вычисляем U_{HK} по формуле (6):

$$U_{HK} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \\ -1 & -1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}$$

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

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

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

После перемножения:

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

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

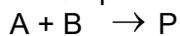
По условию равенства векторов:

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

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

123

В РИС протекает химическая реакция



Задание: построить математическую модель кинетики 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;

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

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

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

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

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_D - C_D^0 \\ C_K - C_K^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix} \quad (2)$$

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

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

Исходя из структуры матрицы X в качестве ключевых веществ можно выбрать, например А и Р (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;

$C_{HK} = [C_B \ C_C \ C_D \ C_K]^T$ – 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:

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

В рассматриваемом случае

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

Вычисляем $U_{нк}$ по формуле (6):

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

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

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

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

После перемножения:

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

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

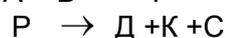
По условию равенства векторов:

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

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

124

В РИС протекает химическая реакция



Задание: построить математическую модель кинетики 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;

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

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

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

$$f(C) = \begin{bmatrix} f_1(C) \\ f_2(C) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ k_2 \cdot C_P \end{bmatrix},$$

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_D - C_D^0 \\ C_K - C_K^0 \\ C_C - C_C^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ k_2 \cdot C_P \end{bmatrix} \quad (2)$$

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

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;

$C_{HK} = [C_B \ C_D \ C_K \ C_C]^T$ – 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:

$$X_{\kappa} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad X_{\text{нк}} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

В рассматриваемом случае

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

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

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

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

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

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

После перемножения:

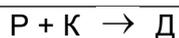
$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \kappa_1 \cdot C_A \cdot C_B - \kappa_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (8)$$

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

По условию равенства векторов:

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

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



Задание: построить математическую модель кинетики 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;

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

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

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

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

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_C - C_C^0 \\ C_K - C_K^0 \\ C_D - C_D^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix} \quad (2)$$

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

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

Исходя из структуры матрицы X в качестве ключевых веществ можно выбрать, например А и Р (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;

$C_{HK} = [C_B \ C_C \ C_K \ C_D]^T$ – 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:

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

В рассматриваемом случае

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

Вычисляем U_{HK} по формуле (6):

$$U_{HK} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}$$

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

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (7)$$

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

После перемножения:

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_1 \cdot C_A \cdot C_B - K_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (8)$$

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

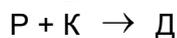
По условию равенства векторов:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} (C_A - C_A^0) = -k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{1}{\tau} C_D = k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_P \\ C_B = C_B^0 - C_A^0 + C_A \\ C_C = C_A^0 - C_A \\ C_K = C_K^0 + C_A - C_A^0 \\ C_D = C_A^0 - C_A - C_P \end{cases}, \quad (9)$$

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

126

В РИС протекает химическая реакция



Задание: построить математическую модель кинетики 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;

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

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

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

$$f(C) = \begin{bmatrix} f_1(C) \\ f_2(C) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ k_2 \cdot C_P \end{bmatrix},$$

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_B - C_B^0 \\ C_P - C_P^0 \\ C_K - C_K^0 \\ C_D - C_D^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} k_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ k_2 \cdot C_P \end{bmatrix}. \quad (2)$$

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 А и Р (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;

$C_{HK} = [C_B \ C_C \ C_K \ C_D]^T$ – 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:

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

В рассматриваемом случае

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

Вычисляем U_{HK} по формуле (6):

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

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

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (7)$$

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

После перемножения:

$$\frac{1}{\tau} \begin{bmatrix} C_A - C_A^0 \\ C_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K_1 \cdot C_A \cdot C_B \\ K_1 \cdot C_A \cdot C_B - K_2 \cdot C_P \end{bmatrix}, \quad (8)$$

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

По условию равенства векторов:

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

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

ПК-3 Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем

127

Рассчитать коэффициент парной корреляции и оценить его статистическую значимость для следующих рядов данных

	6,28	5,25	9,34	4,39	5,98	6,77	2,25	1,28	2,27	2,29
X	5,08	3,64	5,26	2,23	3,93	7,84	2,46	1,97	1,70	1,46

Какую встроенную функцию для расчета средних значений и коэффициента парной корреляции Вы будете использовать в электронных таблицах Microsoft Excel

Решение

Коэффициент парной корреляции рассчитывается по формуле

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

где $\bar{x}_i = \frac{\sum_{i=1}^n x_{it}}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$ – средние

Статистическая значимость коэффициента парной корреляции оценивается на основе критерия Стьюдента (t), который рассчитывается по формуле:

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

Рассчитаем средние значения x и y, затем коэффициент парной корреляции:

среднее значение x = 4,61

среднее значение y = 3,57

коэффициент парной корреляции $r_{xy} = 0,80$

Имеем

$$t = \frac{0,80\sqrt{10-2}}{\sqrt{1-0,80^2}} = 6,28$$

поскольку $t=6,28 > t_{\text{табл.}} = 2,31$ можно утверждать, что коэффициент парной корреляции статистически значим.

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

128 Рассчитать коэффициент парной корреляции и оценить его статистическую значимость для следующих рядов данных

X	5,49	3,17	2,84	2,90	2,07	2,33	1,88	1,19	1,20	1,14
---	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

Y	1498,3	1328,1	1379,3	1322,2	1393,1	1529,9	1428,7	1325,2	1250,3	1112,3
---	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

Какую встроенную функцию для расчета средних значений и коэффициента парной корреляции Вы будете использовать в электронных таблицах Microsoft Excel

Решение

Коэффициент парной корреляции рассчитывается по формуле

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

где $\bar{x}_i = \frac{\sum_{i=1}^n x_{it}}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_{it}}{n}$ средние

Статистическая значимость коэффициента парной корреляции оценивается на основе критерия Стьюдента (t), который рассчитывается по формуле:

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

Рассчитаем средние значения x и y, затем коэффициент парной корреляции:

среднее значение x = 2,42

среднее значение y = 13,56

коэффициент парной корреляции $r_{xy} = 0,58$

Имеем

$$t = \frac{0,58\sqrt{10-2}}{\sqrt{1-0,58^2}} = 2,44$$

поскольку $t=2,44 > t_{\text{табл.}}=2,31$ можно утверждать, что коэффициент парной корреляции статистически значим.

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

ПК-6 Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения

129 С использованием программных средств дисплейного класса кафедры: определить максимальные значения приземной концентрации вредного вещества;

	<p>расстояние от источника выбросов, на котором приземная концентрация при неблагоприятных метеорологических условиях достигает максимального значения. Исходные данные:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Масса вредного вещества, выбрасываемого в атмосферу М, г/с 12 2. Высота источника выброса над уровнем земли Н, м 35 3. Средняя скорость выхода газовой смеси из устья w_0, м/с 7 4. Разность между температурой выбрасываемой смеси и температурой окружающей среды в градусах Цельсия, t 50 5. Коэффициент А 200 6. Коэффициент F 3 7. Коэффициент, учитывающий влияние рельефа местности * 1 8. Диаметр устья источника выброса D, м 1,4 9. Скорость ветра u, м/с 2,2 10. ПДК, мг/м³ 0,04 <p>Введя исходные данные в программу УПРЗА «Эколог» имеем:</p> <p>Максимальное значение приземной концентрации вредного вещества (См) См = 0,00008 мг/м³ Расстояние от источника выбросов, на котором приземная концентрация при неблагоприятных метеорологических условиях достигает максимального значения (X) X=357 м.</p>
130	<p>С использованием программных средств дисплейного класса кафедры: определить максимальные значения приземной концентрации вредного вещества; расстояние от источника выбросов, на котором приземная концентрация при неблагоприятных метеорологических условиях достигает максимального значения. Исходные данные:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Масса вредного вещества, выбрасываемого в атмосферу М, г/с 5 2. Высота источника выброса над уровнем земли Н, м 60 3. Средняя скорость выхода газовой смеси из устья w_0, м/с 4 4. Разность между температурой выбрасываемой смеси и температурой окружающей среды в градусах Цельсия, t 30 5. Коэффициент А 200 6. Коэффициент F 1 7. Коэффициент, учитывающий влияние рельефа местности * 1 8. Диаметр устья источника выброса D, м 1,5 9. Скорость ветра u, м/с 1,5 10. ПДК, мг/м³ 0,006 <p>Введя исходные данные в программу УПРЗА «Эколог» имеем:</p> <p>Максимальное значение приземной концентрации вредного вещества (См) См = 0,0000007 мг/м³ Расстояние от источника выбросов, на котором приземная концентрация при неблагоприятных метеорологических условиях достигает максимального значения (X) X=209 м.</p>

3.1 Реферат

ПК-3 Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем

Номер задания	Текст задания
131	Понятие химико-технологической системы
132	Типовые задачи анализа, синтеза и управления ХТС
133	Синтез оптимальной структуры и управление ХТС
134	Классификация объектов математического моделирования
135	Модель. Виды моделей. Классификация математических моделей по порядку расчета
136	Степень соответствия математической модели объекту
137	Основные требования к математической модели элемента ХТС
138	Этапы построения математических моделей
139	Блочный принцип построения математических моделей.
140	Типовые математические модели. Модель реактора идеального перемешивания
141	Типовые математические модели. Модель реактора идеального вытеснения
142	Типовые математические модели. Диффузионная модель
143	Типовые математические модели. Ячеечная и комбинированная модели
144	Состав математического описания объекта
145	Выбор метода решения и реализация его в виде алгоритма решения и моделирующей программы

ПК-6 Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения

146	Моделирование при решении задач экологии
147	Имитационные и качественные модели
148	Модели популяционной динамики
149	Анализ изменений состояния экосистем, экологические системы в случайной среде.
150	Статистические модели регрессионного типа для анализа экологических систем

3.4 Экзамен

УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий

№ вопроса	Текст вопроса
151	Понятие о математических моделях и математическом моделировании.
152	Этапы математического моделирования.
153	Требования, предъявляемые к математическим моделям.
154	Классификация систем уравнений математического описания.
155	Основные виды математических моделей.

УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла

№ вопроса	Текст вопроса
156	Типовые математические структуры, используемые при математическом моделировании ХТС.
157	Построение математической модели кинетики сложной химической реакции и ее анализ.
158	Метод ключевых веществ для упрощения математической модели кинетики химической реакции.
159	Построение математической модели последовательной реакции $A \rightarrow P \rightarrow D$ с использованием понятия о ключевых веществах.
160	Аналитическое решение кинетической модели последовательной реакции первого порядка и ее анализ.

161	Сущность обратной кинетической задачи. Обратная кинетическая задача для последовательной реакции первого порядка.
162	Построение математической модели кинетики химической реакции при наличии обратных стадий.
163	Построение математических моделей с использованием понятия о степени завершенности реакции на примере реакции $A \rightarrow P \rightarrow D$.
164	Метод квазистационарных концентраций. Общие положения.
165	Кинетическая модель реакции в условиях применимости метода квазистационарных концентраций на примере реакции $A \rightarrow P \rightarrow D$.
166	Сравнение решений математических моделей, построенных по методу ключевых веществ и методу квазистационарных концентраций. Оценка времени квазистационарности на примере реакции $A \rightarrow P \rightarrow D$.

ПК-3 Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем

№ вопроса	Текст вопроса
167	Модели идеальных потоков.
168	Математические модели химических реакций в реакторах различных типов. Математическая модель кинетики реакции в реакторе идеального смешения.
169	Математические модели химических реакций в реакторах различных типов. Математическая модель кинетики реакции в реакторе идеального вытеснения.
170	Метод Ньютона для решения нелинейных алгебраических уравнений.
171	Метод Рунге-Кутты для решения систем дифференциальных уравнений.
172	Постановка задачи оптимизации.
173	Целевая функция. Локальный и глобальный экстремумы.
174	Прямые функциональные ограничения на управляемые переменные.
175	Непрямые методы поиска безусловного минимума.
176	Непрямые методы относительного экстремума. Метод исключения.
177	Прямые методы поиска безусловного минимума.
178	Градиентный метод поиска экстремума функции нескольких переменных.
179	Метод корреляционного анализа.
180	Проверка статистической значимости коэффициента корреляции.

ПК-6 Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения

№ вопроса	Текст вопроса
181	Методы построения уравнений регрессионных моделей для описания процессов в технологических и природных системах.
182	Проверка адекватности уравнений регрессии.
183	Математические модели в оценке экологической безопасности среды обитания и потенциального риска состояния биосистем. Линейная модель.
184	Математические модели в оценке экологической безопасности среды обитания и потенциального риска состояния биосистем. Пороговая модель.
185	Математические модели в оценке экологической безопасности среды обитания и потенциального риска состояния биосистем. Модель индивидуальных порогов действия.
186	Математические модели в оценке экологической безопасности среды обитания и потенциального риска состояния биосистем. Гамма-модель.
187	Математические модели в оценке экологической безопасности среды обитания и потенциального риска состояния биосистем. Многостадийные модели.
188	Математические модели оценки экологического риска возникновения неспецифических и специфических токсических эффектов в результате воздействия загрязнения

	атмосферы.
189	Информационные технологии в системе экологического мониторинга и экологической экспертизы.
190	Принципы организации компьютерного информационно-аналитического обеспечения в системе экологического мониторинга.
191	Требования к информационному обеспечению в экологических исследованиях.
192	ГИС-технологии в экологических исследованиях.
193	Формирование баз данных показателей состояния окружающей среды.
194	Статистические методы, используемые в экологических и химико-технологических системах.
195	Методы моделирования уровня загрязнения атмосферного воздуха от промышленных источников.
196	Методы моделирования концентраций загрязняющих веществ в воде водных объектов при сбросе сточных вод.

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.

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.

5. Матрица соответствия результатов обучения, показателей, критерием и шкал оценки

Результаты обучения по этапам формирования компетенций	Предмет оценки (продукт или процесс)	Показатель оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	Шкала оценки	
				Академическая оценка или баллы	Уровень освоения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий ИД1 _{УК-1} – Критически анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними					
Знать: Методику анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними,	Тест	Знание методов моделирования технологических и природных систем	Магистр знает методику анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними,	Зачтено	Освоена
			Магистр не знает методику анализа проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними,	Не зачтено	Не освоена
Уметь: Анализировать проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними,	экзамен	Умение подобрать метод построения математической модели, умение подобрать метод её решения,	Обучающийся полностью раскрыл содержание материала в объеме, предусмотренном программой, изложил материал грамотным языком в определенной логической последовательности	отлично	освоена (повышенный)
			Обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, но допускает в ответе некоторые неточности	хорошо	освоена (повышенный)
			Обучающийся неполно или непоследовательно раскрыл содержание материала, но показал общее понимание вопроса, недостаточно правильные формулировки базовых понятий	удовлетворительно	освоена (базовый)
			Обучающийся не раскрыл содержание материала, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины	не удовлетворительно	не освоена (недостаточный)
Владеть: Навыками сбора, анализа и обработки информации о проблемной ситуации как системы, выявляя ее составляющие и связи между ними,	Кейс-задание	Решение кейс-задачи	Магистр разобрался в предложенной конкретной ситуации, самостоятельно решил поставленную задачу на основе знаний методов математического моделирования	Зачтено	Освоена
			Магистр не разобрался в предложенной конкретной ситуации, и не решил поставленную задачу.	Не зачтено	Не освоена

УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла					
ИД _{УК-2} – Организует разработку плана реализации проекта, его корректировку и контроль за выполнением на всех этапах жизненного цикла					
Знать: основные требования , предъявляемые к проектной работе	Тест	Знание принципов формирования концепции проекта в рамках обозначенной проблемы, основных требований , предъявляемые к проектной работе	Магистр знает основные требования , предъявляемые к проектной работе	Зачтено	Освоена
			Магистр не знает основные требования , предъявляемые к проектной работе	Не зачтено	Не освоена
Уметь: планировать действия для достижения данного результата	экзамен	планировать действия для достижения данного результата	Обучающийся полностью раскрыл содержание материала в объеме, предусмотренном программой, изложил материал грамотным языком в определенной логической последовательности	отлично	освоена (повышенный)
			Обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, но допускает в ответе некоторые неточности	хорошо	освоена (повышенный)
			Обучающийся неполно или непоследовательно раскрыл содержание материала, но показал общее понимание вопроса, недостаточно правильные формулировки базовых понятий	удовлетворительно	освоена (базовый)
			Обучающийся не раскрыл содержание материала, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины	не удовлетворительно	не освоена (недостаточный)
Владеть: навыками составления плана-контроля выполнения проекта	Кейс-задание	Решение кейс-задачи	Магистр разобрался в предложенной конкретной ситуации, самостоятельно решил поставленную задачу на основе знаний методов математического моделирования	Зачтено	Освоена
			Магистр не разобрался в предложенной конкретной ситуации, и не решил поставленную задачу.	Не зачтено	Не освоена
ПК-3. Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем					
ИД _{ПК-3} – Проводит лабораторные исследования, наблюдения и измерения и осуществляет оформление результатов исследований и разработок в виде отчетов					
ИД _{ПК-3} – Проводит опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем, направленные на повышение экологической безопасности					
Знать: современные методы исследования технологических процессов и	Тест	Знание современных методов исследования технологических процессов и природных средств, способов применения компьютерных средств в научных исследованиях	Магистр знает современные методы исследования технологических процессов и природных средств, способы применения компьютерных средств в научных исследованиях	Зачтено	Освоена

природных средств, способы применения компьютерных средств в научных исследованиях, основные методики проведения исследований и разработок			Магистр не знает современные методы исследования технологических процессов и природных средств, способы применения компьютерных средств в научных исследованиях	Не зачтено	Не освоена
Уметь: планировать экспериментальные исследования, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты, планировать и проводить исследования и разработки, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты	Экзамен реферат	Умение планировать экспериментальные исследования, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты	Обучающийся полностью раскрыл содержание материала в объеме, предусмотренном программой, изложил материал грамотным языком в определенной логической последовательности	отлично	освоена (повышенный)
			Обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, но допускает в ответе некоторые неточности	хорошо	освоена (повышенный)
			Обучающийся неполно или непоследовательно раскрыл содержание материала, но показал общее понимание вопроса, недостаточно правильные формулировки базовых понятий	удовлетворительно	освоена (базовый)
			Обучающийся не раскрыл содержание материала, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины	не удовлетворительно	не освоена (недостаточный)
Владеть: базовыми приёмами организации и проведения научных исследований базовыми приёмами организации и проведения исследований и разработок	Кейс-задание	Навыки владения базовыми приёмами организации и проведения научных исследований, углублёнными знаниями в области промышленной экологии и рационального использования природных ресурсов.	Магистр разобрался в предложенной конкретной ситуации, самостоятельно решил поставленную задачу на основе знаний методов математического моделирования	Зачтено	Освоена
			Магистр не разобрался в предложенной конкретной ситуации, и не решил поставленную задачу.	Не зачтено	Не освоена
ПК-6 Способен использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения ИД1 _{ПК-6} – Осуществляет технологические расчеты, составление компоновочных решений для технологических линий в области охраны окружающей среды с использованием пакетов прикладных программ ИД2 _{ПК-6} – Использует системы автоматизированного проектирования и программного обеспечения, информационные технологии при выполнении проектных работ по повышению энерго- и ресурсосбережения предприятий					
Знать: математический аппарат технологических расчетов,	Тест	Знание основных пакетов прикладных программ при выполнении проектных работ	Магистр знает основные пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ	Зачтено	Освоена

Основные пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ			Магистр не знает основные пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ	Не зачтено	Не освоена
Уметь: составлять технические задания на разработку технологических расчетов Использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ	Экзамен реферат	Умение использовать пакеты прикладных программ при выполнении проектных работ	Обучающийся полностью раскрыл содержание материала в объеме, предусмотренном программой, изложил материал грамотным языком в определенной логической последовательности	отлично	освоена (повышенный)
			Обучающийся твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, но допускает в ответе некоторые неточности	хорошо	освоена (повышенный)
			Обучающийся неполно или непоследовательно раскрыл содержание материала, но показал общее понимание вопроса, недостаточно правильные формулировки базовых понятий	удовлетворительно	освоена (базовый)
			Обучающийся не раскрыл содержание материала, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины	не удовлетворительно	не освоена (недостаточный)
разработки проектной документации на реконструкцию или строительство объектов производства, навыками выбора и использования пакетов прикладных программ для расчета технологических параметров процесса с учетом реализации задач энерго- и ресурсосбережения	Кейс-задание	Навыки выбора и использования пакетов прикладных программ для расчета технологических параметров процесса с учетом реализации задач энерго- и ресурсосбережения	Магистр разобрался в предложенной конкретной ситуации, самостоятельно решил поставленную задачу на основе знаний методов математического моделирования	Зачтено	Освоена
			Магистр не разобрался в предложенной конкретной ситуации, и не решил поставленную задачу.	Не зачтено	Не освоена

