

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

СИЛАБУС

Шифр і назва спеціальності	161 Хімічні технології та інженерія	Інститут / факультет	Навчально-науковий інститут хімічних технологій та інженерії
Назва програми	Хімічні технології та інженерія	Кафедра	Інтегрованих технологій, процесів та апаратів
Тип програми	професійна, обов'язкова	Мова навчання	Українська

Викладач

Євгенія Пономаренко, yevgeniya.ponomarenko@gmail.com



Доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів та апаратів (НТУ «ХПІ»).

Авторка понад 50 наукових і навчально-методичних публікацій. Провідна лекторка з курсів: «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів фармацевтичної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні», «Методи оптимізації в хімічній технології»

Член Української асоціації хімічної і харчової інженерії CFE-UA, що є структурною складовою Європейської федерації хімічної інженерії EFCE.

Загальна інформація про курс

Анотація	Дисципліна дає уявлення про створення моделей об'єктів хімічної технології для вивчення, прогнозування та оптимізації їх функціонування, що базується на знаннях закономірностей фізичних явищ та процесів, що мають місце у вказаних об'єктах, володінні відповідним математичним апаратом, творчому інженерному підході та вмінні використовувати комп'ютерне програмне забезпечення..
Цілі курсу	Мета вивчення дисципліни – отримання навичок з математичних та комп'ютерних засобів моделювання об'єктів хімічної технології.
Формат	Лекційні, лабораторні роботи, консультації. Підсумковий контроль – іспит.
Семестр	5

Обсяг дисципліни: 4 кредити ECTS 120 годин.

Лекцій: 16 годин.

Лабораторних занять: 32 годин.

Практичних занять: годин.

Форма контролю: іспит.

Термін викладання для освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр/магістр»: 5 семестр

Мета: Надати студентам знання з побудови теоретичних математичних моделей об'єктів хімічної технології: реакторів, теплообмінників, гідравлічних систем, а також знання з побудови експериментально-статистичних математичних моделей на основі пасивного та планованого експерименту. Надати студентам вміння з комп'ютерної реалізації отриманих моделей, проведення аналізу отриманих моделей та прогнозування їх функціонування; вміння знати та використовувати чисельні методи оптимізації.

Компетентності

- ФК–4 Здатність використовувати знання та розуміння загальної хімічної технології, процесів і апаратів хімічних виробництв для аналізу, оцінювання і проектування технологічних процесів і устаткування.
- ФК–5 Здатність обробляти та інтерпретувати дані, що належать до хімічної технології та інженерії, співвідносити їх з відповідними теоріями
- ФК–9 Здатність обробляти результати експериментів за допомогою сучасних статистичних методів та програмних засобів.

Результати навчання

РН–7. Здатність здійснювати пошук літератури, консультуватися і критично використовувати наукові бази даних та інші відповідні джерела інформації, здійснювати моделювання та аналіз з метою детального вивчення і дослідження інженерних питань відповідно до спеціалізації.

РН–8. Здатність співвідносити результати експериментальних досліджень та математичного моделювання хімічних і хіміко-технологічних процесів з відповідними теоріями.

Теми що розглядаються

Тема 1. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОБ'ЄКТІВ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ – ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ. ІДЕАЛІЗОВАНІ ТЕОРЕТИЧНІ МОДЕЛІ

Загальні питання математичного моделювання. Поняття системного аналізу. Основні етапи математичного моделювання. Класифікація та аналіз систем рівнянь математичних описів. Кількісне та якісне дослідження математичних моделей. Загальний підхід до складання математичного опису об'єктів хімічної технології. Джерела (стоки) речовини та теплоти. Моделі ідеального змішування МІЗ, моделі ідеального витиснення МІВ.

Тема 2. МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ

Кінетика хімічних процесів. Метод розв'язання системи диференціальних рівнянь математичного опису. Моделювання проточного реактора ідеального змішування (РІЗ). Моделювання реактора ідеального витиснення (РІВ).

Тема 3 МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ.

Розробка математичних моделей теплообмінників типу «труба в трубі» на основі моделі ідеального витиснення МІВ з рухом теплоносіїв «прямоток» та «протиток». Вибір метода розв'язання рівнянь математичного опису.

Тема 4. МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРАВЛІЧНИХ СИСТЕМ

Розробка математичної моделі гідравлічних систем в стаціонарному режимі. Побудова інформаційної матриці. Застосування методу ітерацій з релаксацією для рішення рівнянь математичного опису гідравлічної системи. Побудова математичних моделей гідравлічних систем за різними складними прикладами.

Тема 5. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ОБ'ЄКТІВ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ ЇХ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ВИВЧЕННЯ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ МЕТОДІВ МАТЕМАТИЧНОЇ СТАТИСТИКИ

Поняття експериментально-статистичної моделі. Загальний підхід до розробки статистичної моделі. Пасивний та активний експеримент. Основні положення регресійного аналізу. Рівняння регресії. Метод найменших квадратів. Побудова статистичних моделей за результатами пасивного експерименту для випадку лінійної одновимірної моделі 1-го порядку. Статистичний аналіз рівняння регресії, оцінка значимості регресії.

Тема 6. ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНУ

Побудова математичного опису процесу, що вивчається, за результатами повного факторного експерименту (ПФЕ). Обробка результатів ПФЕ, оцінка адекватності. Дробовий факторний експеримент (ДФЕ). Особливий випадок ПФЕ (ДФЕ) за наявності паралельних дослідів в одній точці факторного простору. Обробка результатів, оцінка адекватності

Тема 7. ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ ОПТИМІЗАЦІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ ПЕРЕБІГУ ПРОЦЕСІВ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ.

Постановка задачі оптимізації. Критерій оптимальності, урахування обмежень. Модель оптимізації. Стратегія розв'язання задач оптимізації. Вибір методу оптимізації. Визначення оптимальних значень критерію оптимальності в задачах без обмежень та з обмеженнями. Метод множників Лагранжа для задач оптимізації з обмеженнями типу рівностей. Алгоритми безградієнтних методів оптимізації. «золотого перетину» та «сканування». Градієнтні методи оптимізації. Методи «градієнта», «релаксації», «найшвидшого спуску».

Форма та методи навчання

1. Студенти одержують знання при вивченні дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» на лекціях, лабораторних заняттях, при виконанні самостійної роботи, на консультаціях.

Проведення лекційних занять ґрунтується на пояснювально-ілюстративному методі або інформаційно-рецептивному. Студенти здобувають знання у «готовому» вигляді, слухаючи лекцію, або з навчальної (або методичної) літератури, або за допомогою Інтернет-посібника. Студенти сприймають і осмислюють факти, оцінки, висновки й залишаються в рамках репродуктивного (відтворюючого) мислення. Такий метод якнайширше застосовують для передавання значного масиву інформації. Його можна

використовувати для викладення й засвоєння фактів, підходів, оцінок, висновків..

2. На лабораторних заняттях у студентів формуються навички для застосування в практичній діяльності отриманих знань та вмінь. Для цього визначаються проблемні області та шляхи їх рішення. Цілями проведення лабораторних занять є застосування знань різних окремих дисциплін і креативних методів для вирішування проблем, утворення командних навичок взаємодії, закріплення основ теоретичних знань. Такий підхід є реалізацією методу навчання дією.

При виконанні самостійної роботи студентів використовується частково-пошуковий, або евристичний метод. Його суть – в організації активного пошуку розв'язання висунутих педагогом пізнавальних завдань або під керівництвом педагога, або на основі евристичних програм і вказівок. Процес мислення поетапно направляється й контролюється педагогом або самими учнями на основі роботи над завданнями і навчальними посібниками

Методи контролю

1. Поточний контроль реалізується у формі опитування, у ході відпрацювання та захисту лабораторних робіт, виконання індивідуального розрахункового завдання, проведення двох контрольних робіт. Результати поточного контролю враховуються як допоміжна інформація для виставлення оцінки з дисципліни.

2. Підсумковий семестровий контроль – екзамен, проводиться за екзаменаційними білетами. Екзамен проводиться в усній/письмовій формі по білетах. Білет містить два теоретичні питання та одну задачу. Екзаменаційна оцінка виставляється з урахуванням перевірки якості засвоєння лекційного матеріалу, результатів виконання розрахункової роботи.

РОЗПОДІЛ БАЛІВ, ЯКІ ОТРИМУЮТЬ СТУДЕНТИ, ТА ШКАЛА ОЦІНЮВАННЯ ЗНАНЬ ТА УМІНЬ (НАЦІОНАЛЬНА ТА ECTS)

Таблиця 1. Розподіл балів для оцінювання поточної успішності студента

Контрольні роботи	Лабораторні роботи	Індивідуальні завдання	тощо	іспит	Сума
20.....	...20..	...40	...10.	10	100

Таблиця – Шкала оцінювання знань та умінь: національна та ECTS

Рейтингова Оцінка, бали	Оцінка ECTS та її визначення	Національна оцінка	Критерії оцінювання	
			позитивні	негативні
1	2	3	4	5
90-100	A	Відмінно	<ul style="list-style-type: none"> - Глибоке знання навчального матеріалу модуля, що містяться в основних і додаткових літературних джерелах; - вміння аналізувати явища, які вивчаються, в їхньому взаємозв'язку і розвитку; - вміння проводити теоретичні розрахунки; - відповіді на запитання чіткі, лаконічні, логічно послідовні; - вміння вирішувати складні практичні задачі. 	Відповіді на запитання можуть містити незначні неточності
82-89	B	Добре	<ul style="list-style-type: none"> - Глибокий рівень знань в обсязі обов'язкового матеріалу, що передбачений модулем; - вміння давати аргументовані відповіді на запитання і проводити теоретичні розрахунки; - вміння вирішувати складні практичні задачі. 	Відповіді на запитання містять певні неточності ;
75-81	C	Добре	<ul style="list-style-type: none"> - Міцні знання матеріалу, що вивчається, та його практичного застосування; - вміння давати аргументовані відповіді 	- невміння використовувати теоретичні знання для вирішення складних

			на запитання і проводити теоретичні розрахунки; - вміння вирішувати практичні задачі.	практичних задач.
64-74	Д	Задовільно	- Знання основних фундаментальних положень матеріалу, що вивчається, та їх практичного застосування; - вміння вирішувати прості практичні задачі.	Невміння давати аргументовані відповіді на запитання; - невміння аналізувати викладений матеріал і виконувати розрахунки; - невміння вирішувати складні практичні задачі.
60-63	Е	Задовільно	- Знання основних фундаментальних положень матеріалу модуля, - вміння вирішувати найпростіші практичні задачі.	Незнання окремих (непринципових) питань з матеріалу модуля; - невміння послідовно і аргументовано висловлювати думку; - невміння застосовувати теоретичні положення при розв'язанні практичних задач
35-59	FX (потрібне додаткове вивчення)	Незадовільно	Додаткове вивчення матеріалу модуля може бути виконане в терміни, що передбачені навчальним планом.	Незнання основних фундаментальних положень навчального матеріалу модуля; - істотні помилки у відповідях на запитання; - невміння розв'язувати прості практичні задачі.
1-34	Ф (потрібне повторне вивчення)	Незадовільно	-	- Повна відсутність знань значної частини навчального матеріалу модуля; - істотні помилки у відповідях на запитання; - незнання основних фундаментальних положень; - невміння орієнтуватися під час розв'язання простих практичних задач

Основна література: (перелік літератури, яка забезпечує цю дисципліну)

Таблиця 3. Перелік літератури

1	Товажнянский Л.Л., Бабак Т.Г., Голубкіна О.О., Пономаренко Є.Д., Сатарин А.В. Комп'ютерне моделювання в хімічній технології. – Харків: НТУ «ХП», 2011, 608 с.
2	Розрахунки і програмування у системі Mathcad Prime : навчальний посібник для студентів хімічних спеціальностей / Л. В. Соловей, Н. М. Мірошніченко, А. М. Миронов, М. В. Ільченко. – Харків : НТУ «ХП», 2022. – 184 с.
3	Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт «Моделювання гідравлічних систем у стаціонарному та нестаціонарному режимах функціонування» за курсами математичного та комп'ютерного моделювання для студентів хімічних спеціальностей усіх форм навчання/Сост. Т.Г. Бабак, О.О. Голубкіна, Є.Д. Пономаренко. – Харків: НТУ «ХП», 2017. – 28 с.
4	Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт «Моделювання процесів масообміну у насадковому абсорбері та процесів розділення розчинів методом ультрафільтрації» за курсами математичного та комп'ютерного моделювання для студентів хімічних спеціальностей усіх форм навчання/Сост. Т.Г. Бабак, О.О. Голубкіна, Є.Д. Пономаренко. – Харків: НТУ «ХП», 2017. – 32 с.
5	Методичні вказівки до виконання розрахункових завдань «Методи планування експерименту в хімічній технології» за курсами математичного та комп'ютерного моделювання для студентів хімічних спеціальностей усіх форм навчання/Сост. Т.Г. Бабак, О.О. Голубкіна, Є.Д. Пономаренко. – Харків: НТУ «ХП», 2022. – 72 с.
6	Методичні вказівки до виконання розрахункових завдань «Побудова статистичних моделей» з дисциплін «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні» /Сост. Т.Г. Бабак, Є.Д. Пономаренко, Г.В. Пономаренко. – Харків: НТУ «ХП», 2022. – 41 с.
7	Бабак Т.Г., Пономаренко Є.Д., Хавін Г.Л. Методи оптимізації в інженерних задачах досліджень процесів хімічної технології: навч. посібник – Харків : ТОВ «Планета - Прінт»– 2022.– 144 с
8	Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт «Моделювання хімічних реакцій та хімічних реакторів» за курсами «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Ідентифікація і моделювання технологічних об'єктів», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні» // уклад. Т. Г. Бабак, Є.Д. Пономаренко, Г.В. Пономаренко, Л.В. Соловей. – Електронна версія, 2022. – 36 с
9	Методичні вказівки до виконання лабораторної роботи «Моделювання теплообмінних апаратів типу «труба у трубі» у стаціонарному режимі функціонування» за курсами «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Ідентифікація і моделювання технологічних об'єктів», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні» / уклад. Т. Г. Бабак, О.А. Голубкіна, Є.Д. Пономаренко. – Електронна версія, 2022. – 24 с.

Структурно-логічна схема вивчення навчальної дисципліни

Таблиця 4. – Перелік дисциплін

Вивчення цієї дисципліни безпосередньо спирається на:	На результати вивчення цієї дисципліни безпосередньо спираються:
Вища математика	Методи інтеграції основних хіміко-технологічних систем
Процеси та апарати хімічних виробництв	Основи імітаційного моделювання промислових виробництв
Інформаційні технології в галузі	
Загальна хімічна технологія	
Типові технології хімічних виробництв	

Провідний лектор: доцент ПОНОМАРЕНКО Є. Д.

(посада, звання, ПІБ)



(підпис)