



## Силабус освітнього компонента Програма навчальної дисципліни



# Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології

**Шифр та назва спеціальності**  
161 Хімічні технології та інженерія

**Інститут**  
ННІ Хімічних технологій та інженерії

**Освітня програма**  
"Технології органічних речовин,  
харчових добавок та косметичних засобів"

**Кафедра**  
Інтегрованих технологій, процесів і апаратів  
(191)

**Рівень освіти**  
Бакалавр

**Тип дисципліни**  
Спеціальна (фахова), обов'язкова

**Семестр**  
5

**Мова викладання**  
Українська

## Викладачі, розробники



### Пономаренко Євгенія Дмитрівна

[yevhenia.ponomarenko@khpі.edu.ua](mailto:yevhenia.ponomarenko@khpі.edu.ua)

доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів та апаратів

Авторка понад 60 наукових і навчально-методичних публікацій, серед яких 4 навчальних посібника з грифом МОНУ. Провідна лекторка з курсів: «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів фармацевтичної технології», «Методи оптимізації в хімічній технології» для студентів хімічних та нехімічних спеціальностей.

Член Української асоціації хімічної та харчової інженерії (CFE-UA), яка є структурною складовою Європейської федерації хімічної інженерії EFCE

[Детальніше про викладача на сайті кафедри](#)

## Загальна інформація

### 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..

### Мета та цілі дисципліни

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, володінні відповідним математичним апаратом, творчому інженерному підході та вмінні використовувати комп'ютерне програмне забезпечення

### **Формат занять**

Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота, консультації. Індивідуальне розрахункове завдання. Підсумковий контроль – іспит.

### **Компетентності**

К-14. Здатність використовувати обчислювальну техніку та інформаційні технології для вирішення складних задач і практичних проблем в галузі хімічної інженерії.

### **Результати навчання**

ПРО8. Використовувати сучасну обчислювальну техніку, спеціалізоване програмне забезпечення та інформаційні технології для розв'язання складних задач і практичних проблем у галузі хімічної інженерії, зокрема, для розрахунків устаткування і процесів хімічних виробництв.

### **Обсяг дисципліни**

Загальний обсяг дисципліни 120 год. (4 кредитів ECTS): лекції – 16 год., лабораторні роботи – 32 год., самостійна робота – 72 год.

### **Передумови вивчення дисципліни (пререквізити)**

Передумовою вивчення дисципліни є знання і компетентності, набуті студентами з вищої математики, обчислювальної математики і програмування, неорганічної та органічної хімії.

### **Особливості дисципліни, методи та технології навчання**

#### **Лекції**

Навчання здійснюється шляхом відвідування лекцій, конспектування лекцій, під час яких студенти сприймають і осмислюють факти, оцінки, висновки надані викладачем. При цьому застосовується метод діалогового спілкування між викладачем та студентами в ході їх пізнавальної діяльності для викладення й засвоєння фактів, підходів, оцінок, висновків. Таким чином організується діяльність студентів за кількаразовим відтворенням засвоєваних знань за різноманітними вправами, 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.

Навчальні матеріали доступні студентам на сайті кафедри.

#### **Лабораторні роботи**

Дозволяють студентам систематизувати інформацію щодо розробки математичних моделей технологічних об'єктів при виконанні завдань під час лабораторних робіт, вибору чисельного методу розв'язання математичного опису, розробки програми розрахунку та проведення обчислювального експерименту з метою аналізу та прогнозування поведінки об'єкта дослідження, вивчати та застосовувати методи оптимізації,

#### **Самостійна робота з інформацією**

Передбачає самостійне вивчення окремих тем курсу з наступним їх аналізом з метою навчання самостійно мислити, практично аналізувати та використовувати опанований матеріал. Студенти працюють з навчальними і науковими джерелами під час виконання розрахункового завдання

## Програма навчальної дисципліни

### Теми лекційних занять

#### 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.

Проведення ідентифікації нелінійних за параметрами моделей

#### Тема 6. Планування експерименту

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».  
Градiєнтні методи оптимізації. Методи «градієнта», «релаксації», «найшорішого спуску».

## **Теми практичних занять**

Практичні заняття в рамках дисципліни не передбачені.

## **Теми лабораторних робіт**

### **Лабораторна робота 1.**

Моделювання на комп'ютері протікання ізотермічних та адіабатичних хімічних реакцій за індивідуальними завданнями

### **Лабораторна робота 2.**

Моделювання на комп'ютері реакторів РІЗ за індивідуальними завданнями. Проведення обчислювального експерименту за моделюючою програмою

### **Лабораторна робота 3.**

Моделювання на комп'ютері реакторів РІВ за індивідуальними завданнями. Проведення обчислювального експерименту за моделюючою програмою.

### **Лабораторна робота 4.**

Реалізація на комп'ютері математичних моделей теплообмінників типу «прямоток» та «протиток» за індивідуальними завданнями. Порівняльний аналіз результатів. Проведення дослідження за моделюючою програмою..

### **Лабораторна робота 5.**

Моделювання гiдравлічних систем в стаціонарному режимі за індивідуальними завданнями на ПК.

### **Лабораторна робота 6.**

Виконання розрахунків параметрів технологічних процесів методом найменших квадратів за експериментальними залежностями за індивідуальними завданнями. Ідентифікація моделей. Оцінка значимості.

### **Лабораторна робота 7.**

Оптимізація температурного режиму хімічної реакції методами «золотого перетину» та «сканування»..

### **Лабораторна робота 8.**

Пошук мінімуму критерія оптимальності градієнтними методами

## **Самостійна робота**

Самостійна робота за дисципліною включає опрацювання лекційного матеріалу, підготовку до лабораторних занять, самостійне вивчення тем та питань, які не викладаються на лекційних заняттях, а також виконання індивідуального розрахункового завдання за темою «Побудова математичного опису процесу хімічної технології за результатами пасивного та активного експериментів на ПК" згідно з індивідуальним варіантом для кожного студента. Результати розрахунків оформлюються у звіт.

## Література та навчальні матеріали

### Базова література

1. Комп'ютерне моделювання в хімічній технології: навч. посібник, Оновлений та доповнений/. ТОВАЖНЯНСКИЙ Л.Л., БАБАК Т.Г., ГОЛУБКІНА О.О., ПОНОМАРЕНКО Є.Д., САТАРИН А.В. – Харків: НТУ «ХПІ», Електронна версія 2023, 608 с  
[https://drive.google.com/file/d/1tXn0yW\\_i3Wf0IcMUEgkjb\\_n-Ns17uqpZ/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1tXn0yW_i3Wf0IcMUEgkjb_n-Ns17uqpZ/view?usp=drive_link)
2. Методи оптимізації в інженерних задачах досліджень процесів хімічної технології: навч. посібник. Рекомендовано Вченою радою НТУ «ХПІ»/ Т. Г. Бабак, Є. Д. Пономаренко, Г. Л. Хавін– Харків: 2022. –144 с.  
[https://drive.google.com/file/d/1iAHF5Y3scQbKYb75e-4KCiHVywJfnvid/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1iAHF5Y3scQbKYb75e-4KCiHVywJfnvid/view?usp=drive_link)
- 3 Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт «Моделювання гідравлічних систем у стаціонарному та нестаціонарному режимах функціонування» за дисциплінами «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні». Оновлені та доповнені /Сост. Т.Г. Бабак, Є.Д. Пономаренко, Биканов С.М., Соловей Л.В.. – Харків: НТУ «ХПІ», 2023 електронна версія,.. – 46 с.  
[https://drive.google.com/file/d/16NhlDny9Z9Ca-CB9Ikljil\\_jkQViDEd4/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/16NhlDny9Z9Ca-CB9Ikljil_jkQViDEd4/view?usp=drive_link)
- 4, Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт «Моделювання процесів масообміну у насадковому абсорбері та процесів розділення розчинів методом ультрафільтрації» за дисциплінами «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні». Оновлені та доповнені /уклад. Т.Г. Бабак, Є.Д. Пономаренко, Г.В. Пономаренко,. – Харків: НТУ «ХПІ», 2023. – 32 с,  
[https://drive.google.com/file/d/1brUcCrn1uPv8PmD\\_wr-UhQe1oUqjHW-h/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1brUcCrn1uPv8PmD_wr-UhQe1oUqjHW-h/view?usp=drive_link)
- 5, Методичні вказівки до виконання розрахункових завдань «Методи планування експерименту в хімічній технології» з дисциплін «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні». 2 видання, доповнене та перероблене ./Укл. Бабак Т.Г., Голубкіна О.О., Є.Д. Пономаренко. – Харків : НТУ «ХПІ», 2022. – 72 с.  
[https://drive.google.com/file/d/1TX9dRtcDaYvoeuYKmGq4EAsmVdK59qOp/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1TX9dRtcDaYvoeuYKmGq4EAsmVdK59qOp/view?usp=drive_link)
6. Методичні вказівки до виконання розрахункових завдань «Побудова статистичних моделей» з дисциплін «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» та «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні»/укл. Бабак Т.Г., Є.Д. Пономаренко, Г.В. Пономаренко. – Харків : НТУ «ХПІ», 2022. –41 с  
[https://drive.google.com/file/d/1Fq-eL\\_WFPgYn\\_IWHHOHcntkV\\_dl3og6y/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1Fq-eL_WFPgYn_IWHHOHcntkV_dl3og6y/view?usp=drive_link)
7. 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», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів фармацевтичної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні» / уклад. Т. Г. Бабак, Є.Д. Пономаренко, Г.В. Пономаренко, Л.В. Соловей. – Електронна версія, 2022. – 35 с.  
[https://drive.google.com/file/d/15vDmssUlcFcz0h0J1LFRU0Ix38e5PeY/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/15vDmssUlcFcz0h0J1LFRU0Ix38e5PeY/view?usp=drive_link)
8. Методичні вказівки до виконання лабораторної роботи «Ідентифікація параметрів математичних моделей методом найменших квадратів» за курсами «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Ідентифікація і моделювання технологічних об'єктів», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів фармацевтичної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні» / уклад. Т.Г. Бабак, Є.Д. Пономаренко. –

Електронна версія, 2023. – 22 с

[https://drive.google.com/file/d/1qUrmBbOYK59PN7gB3gJ0SEORu6pZMLf0/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1qUrmBbOYK59PN7gB3gJ0SEORu6pZMLf0/view?usp=drive_link)

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.О. Голубкіна, Є.Д. Пономаренко. – Електронна версія, 2023. – 24 с.

[https://drive.google.com/file/d/1bc00IAF-AWQis1eVwP8ivquX3o5m6cBC/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1bc00IAF-AWQis1eVwP8ivquX3o5m6cBC/view?usp=drive_link)

10, Методичні вказівки до виконання лабораторної роботи «Безградієнтні методи одновимірної оптимізації» за курсами «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології», «Ідентифікація і моделювання технологічних об'єктів», «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів фармацевтичної технології», «Моделювання процесів в галузевому машинобудуванні»/ уклад., Є.Д. Пономаренко, Т. Г. Бабак. – Електронна версія, 2022. – 32 с.

[https://drive.google.com/file/d/1i2qWSKEjgA6XPyрсMjhKyо6p\\_R75ulDo/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1i2qWSKEjgA6XPyрсMjhKyо6p_R75ulDo/view?usp=drive_link)

11. 8. Соловей Л.В. Розрахунки і програмування у системі Mathcad Prime: навчальний посібник. / Л.В. Соловей, Н.М. Мірошніченко, А.М. Миронов, М.В. Ільченко. – Харків: НТУ «ХПІ», 2022. – 184 с.

[https://drive.google.com/file/d/1CtGdonUTQkRym9WolWgh\\_KM\\_jGITH3rQ/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1CtGdonUTQkRym9WolWgh_KM_jGITH3rQ/view?usp=drive_link)

## Допоміжна література

1. . Методичні вказівки для виконання розрахункових завдань «Інженерні розрахунки в середовищах MS Excel і MathCad» з дисциплін «Інформатика», «Обчислювальна математика і програмування»/Укл. Л.В. Соловей, Н.М. Мірошніченко. – Харків: НТУ «ХПІ», 2020. – 44 с.

[https://drive.google.com/file/d/1q\\_Mn9BGpi4gKhFOL6vTlqqYN-YDeFyIT/view?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/file/d/1q_Mn9BGpi4gKhFOL6vTlqqYN-YDeFyIT/view?usp=drive_link)

## Система оцінювання

### Критерії оцінювання успішності студента та розподіл балів

100 % підсумкової оцінки складаються з результатів оцінювання у вигляді екзамену (20 %) та поточного оцінювання (80) %.

Екзамен: (2 запитання з теорії + 2 задачі) та усна доповідь (20 %).

Поточне оцінювання: лабораторні роботи (20 %) та розрахункове завдання (60 %).

### Шкала оцінювання

Сума балів	Національна оцінка	ECTS
90–100	Відмінно	A
82–89	Добре	B
75–81	Добре	C
64–74	Задовільно	D
60–63	Задовільно	E
35–59	Незадовільно (потрібне додаткове вивчення)	FX
1–34	Незадовільно (потрібне повторне вивчення)	F

## Норми академічної етики і політика курсу

Студент повинен дотримуватися «Кодексу етики академічних взаємовідносин та доброчесності НТУ «ХПІ»: виявляти дисциплінованість, вихованість, доброзичливість, чесність, відповідальність.

Конфліктні ситуації повинні відкрито обговорюватися в навчальних групах з викладачем, а при неможливості вирішення конфлікту – доводитися до відома співробітників дирекції інституту. Нормативно-правове забезпечення впровадження принципів академічної доброчесності НТУ «ХПІ» розміщено на сайті: <http://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/nv/akademichna-dobrochesnist/>

## Погодження

Силабус погоджено

В.о. Завідувача кафедри  
Антон МИРОНОВ

Гарант ОП  
Тетяна ФАЛАЛЄЄВА