

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»
(ФГБОУ ВО КНИТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УР
А.В. Бурмистров

« 14 » 09 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине Б1.В.ДВ7.1 «Математическое моделирование химических реакций»

Направление подготовки 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»

Профиль Основные процессы химических производств и химическая кибернетика

Квалификация (степень) выпускника БАКАЛАВР

Форма обучения ОЧНАЯ

Институт, факультет Институт нефти, химии и нанотехнологий.

Факультет нефти и нефтехимии

Кафедра-разработчик рабочей программы Общая химическая технология

Курс 4, семестр 7

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	36	1
Практические занятия	27	0,75
Семинарские занятия	нет	
Лабораторные занятия	нет	
Самостоятельная работа	54	1,5
Всего	144	4
Форма аттестации	экзамен	0,75

Казань, 2018 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования (№ 227 12 марта 2015 г. утверждения)

По направлению 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»

Для профиля (специализации) «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика»,

На основании учебного плана набора обучающихся 2015, 2016, 2017, 2018 года

Типовая программа по дисциплине отсутствует

Разработчик программы:

профессор кафедры ОХТ



Батыршин Н.Н.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ОХТ
протокол от 06 сентября 2018 г. № 1

Зав. кафедрой



Харлампиди Х.Э.

УТВЕРЖДЕНО

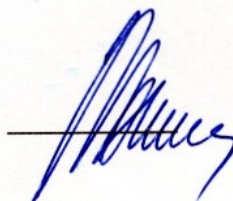
Протокол заседания методической комиссии ФННХ,
от 07 сентября 2018 г. № 1

Председатель комиссии, профессор



Н.Ю. Башкирцева

Начальник УМЦ, доцент



Л.А. Китаева.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины *«Математическое моделирование химических реакций»* являются

- а) формирование знаний о закономерностях протекания во времени простых и сложных, обратимых и необратимых, гомогенных и гетерогенных, каталитических и т.д. реакций и построение их математических моделей.*
- б) обучение способам применения математических методов обработки экспериментальных данных.*
- в) подготовка студента к выполнению расчетов при составлении кинетической модели химической реакции.*

2. Место дисциплины в структуре ООП ВО

Дисциплина *«Математическое моделирование химических реакций»* относится к части Б1.В.ДВ 7.1. (по выбору) математического и естественно-научного цикла ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» набор специальных знаний и компетенций, необходимых для выполнения *научно-исследовательской и производственно-технологической деятельности.*

Для успешного освоения дисциплины *«Математическое моделирование химических реакций»* бакалавр по направлению подготовки 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) Б1.Б6 – Математика (дифференциальное и интегральное исчисление, методы статистической обработки опытных данных, линейная и нелинейная аппроксимация).*
- б) Б.1Б9 – Общая и неорганическая химия (природа химической связи, теория окислительно-восстановительных реакций).*
- в). Б.1.Б10 - Органическая химия (механизм протекания нуклеофильных реакций замещения и присоединения, механизм протекания электрофильных реакций замещения и присоединения, механизм протекания реакций с участием свободных радикалов).*
- г). Б1.Б13 - Физическая химия.*
- д). Б1.В.ДВ 15.2 Вычислительная математика.*
- е). Б1.В.ДВ 10.1 Применение компьютерной техники в научных исследованиях и химических расчетах*

Дисциплина *«Математическое моделирование химических реакций»* является предшествующей и необходима для успешного усвоения последующих дисциплин:

- а) Б1.Б19 Общая химическая технология
- б) Б1.В.ОД.2 Теория технологических процессов
- в) Б1.Б.6 Моделирование технологических и природных систем
- г) Б1.В.ОД.4 Технологические расчеты в химической технологии

Знания, полученные при изучении дисциплины *«Математическое моделирование химических реакций»* могут быть использованы при прохождении практик (учебной, производственной, преддипломной, педагогической) и выполнении выпускных квалификационных работ по направлению подготовки 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Выпускник должен обладать следующими общекультурными и профессиональными компетенциями:

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

ОПК-3. способностью использовать основные естественнонаучные законы для понимания окружающего мира и явлений природы

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

ПК-15. способностью планировать экспериментальные исследования, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

- а) Понятия: механизм химической реакции, скорость и константа скорости химической реакции, кинетические кривые, порядок реакции, энергия активации, математическая модель.
- б) Научные основы влияния различных факторов на скорость химической реакции;
- в) Кинетические закономерности протекания реакций простых типов с различными порядками.

- г) Кинетические закономерности протекания сложных и обратимых реакций.
- д) Кинетические закономерности протекания гомогенных и гетерогенных каталитических процессов, механизмы кислотно-основного, металлокомплексного и ферментативного катализа.
- е) Механизм и кинетику реакций при воздействии на вещество света и частиц высоких энергий.
- ж) Кинетические закономерности протекания цепных и разветвленно-цепных реакций

2) Уметь:

- а) Применять различные способы обработки экспериментальных данных.
- б) Определять порядок реакции по реагентам, скорость реакции, константу скорости и энергию активации.
- в) Составить математическую модель простых, последовательных и параллельных реакций.
- г) Определять константу равновесия обратимых реакций, исследовать комплексообразование и составить математическую модель равновесных процессов.
- д) Составить математическую модель каталитического и радикально-цепного процесса.
- е) На основании математической модели процесса вычислять концентрацию компонентов в любой момент времени.

3) Владеть:

Методами решения прямой и обратной задач химической кинетики процессов различной сложности.

4. Структура и содержание дисциплины «Математическое моделирование химических реакций».

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)				Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекция	Практическое занятие	Лабораторные работы	СРС	
1	Элементы и составные части математической модели химической реакции	7	10	15-	-	17	Контрольная работа
2	Кинетические модели простых и сложных реакций	7	12	10-	-	16	
3	Кинетические модели каталитических реакций	7	8	2-	-	9	
4	Кинетические модели фотохимических и радиохимических реакций	7	2	-	-	4	
5	Математическое моделирование цепных реакций	7	4	-	-	8	
Форма аттестации							Экзамен

5. Содержание лекционных занятий по темам

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Элементы и составные части математической модели химической реакции	10	Элементы и составные части математической модели химической реакции	Цель, объем и содержание курса. Литература по курсу. Задачи курса и его связь с общеобразовательными дисциплинами. Важность правильного выбора и адекватности модели для проектирования химико-технологических систем. Основные понятия и задачи химической кинетики. Механизм химической реакции. Дифференциальная и интегральная формы уравнений, описывающих ход реакции во времени и их графическое выражение. Скорость реакции, экспериментальные методы измерения скоростей. Порядок и молекулярность реакции. Методы определения порядка по реагентам. Константа скорости реакции. Уравнение Аррениуса, энергия активации и способы её экспериментального определения	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
2	Кинетические модели простых и сложных реакций	5	Кинетические модели простых реакций	Необратимые реакции первого, второго и третьего порядков. Простые обратимые реакции различных порядков. Закономерности протекания реакций в замкнутой и открытой системах	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
		7	Кинетические модели сложных реакций	Принцип независимости элементарных стадий. Последовательные реакции. Анализ модели накопления промежуточного продукта в последовательных реакциях. Параллельные (конкурирующие и не конкурирующие) и смешанные реакции. Квазиравновесное и квазистационарное приближение при рассмотрении механизма сложных реакций	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
3	Кинетические модели каталитических реакций	8	Кинетические модели каталитических реакций	Сопряженные реакции. Химическая индукция. Общие закономерности протекания каталитических реакций. Автокатализ. Математическое моделирование реакций с учетом кислотно-основного катализа. Зависимость от кислотности среды. Математическое моделирование реакций с учетом окислительно-восстановительного катализа. Математическое моделирование реакций с учетом металлокомплексного и ферментативного катализа. Уравнение Михаэлиса. Математическое моделирование ингибирования каталитических процессов. Конкурентное и неконкурентное ингибирование.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
4	Кинетические модели фотохимических и радиохимических реакций	2	Кинетические модели фотохимических и радиохимических реакций	Фотохимические реакции. Квантовый выход. Первичные и вторичные процессы. Влияние соотношения фото- и темновых процессов на вид модели. Сенситизированные реакции. Радиохимические реакции. Соотношение продуктов реакции при действии на вещество электромагнитного и корпускулярного излучения	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
5	Математическое моделирование цепных реакций	4	Математическое моделирование цепных реакций	Цепные неразветвленные реакции. Цепной механизм и его элементарные стадии. Длина цепи. Лимитирующая стадия и скорость цепной реакции. Обрыв цепей на стенке и в объеме. Жидкофазное окисление углеводородов. Математическое моделирование цепных неразветвленных процессов с учетом ингибирования. Цепные разветвленные реакции. Механизм разветвления цепей. Анализ модели накопления свободных радикалов в разветвленных процессах. Вырожденное разветвление. Анализ модели накопления разветвляющего продукта. Ингибирование разветвленных и вырожденно разветвленных реакций.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15

6. Содержание практических занятий

Практические занятия по дисциплине «Математическое моделирование химических реакций» преследуют следующие цели:

1. Обучение построению кинетических кривых.
2. Обучение графическому дифференцированию кинетических кривых.
3. Обучение нахождению порядков реакций и энергий активации различными методами.
4. Решение обратной задачи химической кинетики в простых и сложных реакциях в зависимости от полноты исходных данных..

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Элементы и составные части математической модели химической реакции	6	Основные параметры и составные части математической модели химической реакции. Построение кинетических кривых и их обработка дифференциальным методом. Графический и аналитический метод вычисления скорости реакции. Определение порядка по реагентам различными методами: по начальным скоростям, по периоду полураспада. Установление порядка в реакциях с несколькими реагентами. Определение временного порядка.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
		2	Контрольная работа	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
		6	Основные параметры и составные части математической модели химической реакции (продолжение) Влияние температуры на скорость реакции. Вычисление энергии активации реакции различными методами в зависимости от имеющегося экспериментального описания: по температурной зависимости начальной скорости, константы скорости, периода полураспада, коэффициента трансформации кинетических кривых. Определение энthalпии и энтропии активации.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
		2	Контрольная работа	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
2	Кинетические модели простых реакций	2	Построение математической модели простой необратимой реакции первого и второго порядков. Анализ изменения модели в зависимости от начальных условий проведения реакций.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
		2	Кинетические модели простых обратимых реакций первого и второго порядков.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
3	Кинетические модели сложных реакций	2	Модель последовательных реакций первого порядка. Специфика построения модели в зависимости от типа экспериментального описания. Влияние соотношения констант скоростей отдельных стадий на накопление и расходование промежуточного продукта.	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
		3	Модель параллельных не конкурирующих и конкурирующих реакций. Специфика построения модели в зависимости от экспериментального описания и типа реакции	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15
4	Кинетические модели каталитических реакций	2	Математическая модель металлокомплексного и ферментативного катализа. Зависимость скорости реакции от концентрации субстрата	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3 ПК-15

7. Содержание лабораторных занятий (если предусмотрено учебным планом)

Лабораторные работы по дисциплине «*Математическое моделирование химических реакций*» не предусмотрены.

8. Самостоятельная работа бакалавра

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
1	Тема 1 Роль среды в элементарном акте. Первичный и вторичный солевой эффект.	10	Проработка теоретического материала	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-15
2	Тема 2 Кинетические модели реакций, протекающих в открытой системе.	8	Работа с литературой	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-15
3	Тема 3 Энергетический барьер и кинетическая модель гетерогенно - каталитических реакций	9	Работа с литературой	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-15
4	Тема 4 Ионизация и возбуждение электронным ударом. Кинетическая модель реакций в электро-разряде	8	Работа с литературой	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-15
5	Тема 5 Примеры цепных и разветвлено – цепных реакций.	8	Работа с литературой	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-15
6	Тема 6 Элементы Теории абсолютных скоростей	8	Работа с литературой	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-
7	Подготовка к контрольной работе	3	Повторение всего пройденного материала	ОПК-2 ОПК-3 ПК-3, ПК-15

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.

При оценке результатов деятельности студентов в рамках дисциплины «*Математическое моделирование химических реакций*» используется рейтинговая система.

Усвоение учебного материала контролируется по всем видам учебных занятий: лабораторному практикуму и лекционному курсу.

Сумма баллов, выставляемых студентам в процессе изучения ими курса «*Математическое моделирование химических реакций*» составляет **100**. Указанный индекс распределяется между текущим и экзаменационным контролем как **60** и **40**.

Распределение баллов по текущему контролю представлено в таблице.

Максимальные оценки знаний по всем видам занятий

Вид учебного занятия	Количество контрольных точек	Min баллов	Max баллов
1. Контрольная работа	1	18	30
2. Контрольная работа	1	18	30
3. Экзамен	1	24	40
ИТОГО:		60	100

К экзамену допускаются студенты, прошедшие контрольные точки.

Окончательная оценка знаний выставляется на основе качества ответов на вопросы экзаменационных билетов.

Рейтинговую оценку за усвоение учебного материала по курсу ММХР получают путем суммирования баллов, полученных при выполнении всего объема работ.

10. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

10.1. Основная литература

При изучении дисциплины «Математическое моделирование химических реакций» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Основные источники информации	Кол-во экз.
1. Буданов В.В., Ломова Т.Н., Рыбкин В.В. Химическая кинетика «Лань» 2014, 211 с.	ЭБС Лань http://e.lanbook.com/42196/ Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP- адресов КНИТУ
2. Булидорова Г.В., Галяметдинов Ю.Г., Ярошевская Х.М. Формальная кинетика Казань, КНИТУ, 2014, 112 с.	70 экз. в УНИЦ КНИТУ В Электронной библиотеке УНИЦ КНИТУ: http://ft.kstu.ru/ft/Bulidoroova-formalnaya_kinetika.pdf Доступ с IP- адресов КНИТУ
3. Заиков, Г.Е. Химическая кинетика. Теория и практика [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Казанский нац. исслед. технол. ун-т ; Г.Е. Заиков [и др.] .— Казань : КНИТУ, 2013 .— 80 с.	70 экз. в УНИЦ КНИТУ В Электронной библиотеке УНИЦ КНИТУ: http://ft.kstu.ru/ft/Zaikov-khimicheskaya.pdf Доступ с IP- адресов КНИТУ

10.2. Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Дополнительные источники информации	Кол-во экз.
1. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Т.И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000, 318 с.	55 экз. УНИЦ КНИТУ
2. Булидорова, Ю.Г. Электрохимия и химическая кинетика [Электронный ресурс] : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. "Хим. технология" / Казанский нац. исслед. технол. ун-т ; Ю.Г. Булидорова [и др.] .— Казань : КНИТУ, 2014 .— 371 с. : ил. — ISBN 978-5-7882-1658-4 .—	В Электронной библиотеке УНИЦ КНИТУ: http://ft.kstu.ru/ft/Bulidoroova-elektrokhimiya.pdf Доступ с IP- адресов КНИТУ
3. Мельников, М.Я. Практическая химическая кинетика. Химическая кинетика в задачах с решениями / Мельников М.Я. — Moscow : Издательство МГУ, 2006 .— Практическая химическая кинетика. Химическая кинетика в задачах с решениями [Электронный ресурс]: учебн. пособие / Под общей ред. М.Я. Мельникова - М. : Издательство Московского государственного университета, 2006.	ЭБС Консультант студента http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5211052331.html Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP- адресов КНИТУ

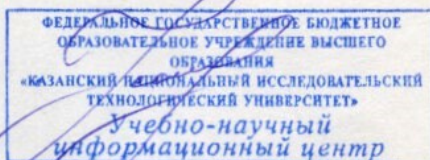
10.3 Электронные источники информации

При изучении дисциплины «Математическое моделирование химических реакций.» в качестве электронных источников информации, рекомендуется использовать следующие источники:

1. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ – Режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru/>
2. Электронная библиотека УНИЦ КНИТУ – режим доступа: <http://ft.kstu.ru/ft/>
3. Научная Электронная Библиотека (НЭБ) – Режим доступа: <http://elibrary.ru>
4. ЭБС «Юрайт» – Режим доступа: <http://www.biblio-online.ru>
5. ЭБС «Лань» – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/books/>
6. ЭБС «КнигаФонд» – Режим доступа: <http://www.knigafund.ru>
7. ЭЧЗ «БиблиоТех» – Режим доступа: <https://kstu.bibliotech.ru>
8. ЭБС «Консультант студента»- Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru>
9. ЭБС «Znanium.com» - Режим доступа: <http://znanium.com/>
10. ЭБС «Book.ru» - Режим доступа <https://www.book.ru/>
11. ЭБС «Университетская библиотека онлайн» – режим доступа: <https://biblioclub.ru>
12. Романовский Б.В. Основы химической кинетики [Электронный ресурс]. М.: Экзамен 2006, 415 с. – Режим доступа: Chem.msu.ru>rus/books/2006/romanovsky_welcome.html, свободный.

Согласовано:

Зав. сектором ОКУФ



11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной итоговой) аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

В качестве материально-технического обеспечения дисциплины используются мультимедийные средства; наборы слайдов.

1. Лекционные занятия:

- a. комплект электронных презентаций/слайдов,
- b. аудитории, оснащенные презентационной техникой (проектор, экран, компьютер),

2. Прочее

- a. рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет,
- b. рабочие места студентов.

13. Образовательные технологии

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах в учебном процессе, составляет 27 часов. Они проводятся в форме:

- 1). Индивидуального обучения
- 2). Лекций с запланированными ошибками.

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине

«Математическое моделирование химических реакций»

пересмотрена на заседании кафедры Общей химической технологии

п/п	Дата переутверждения РП (прот. засед. кафедры)	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП	Подпись заведующего кафедрой	Подпись начальника УМЦ
	№__ от __20__	нет	нет			