

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 19.01.2026 18:20:04
Уникальный программный ключ:
d56ba45a9b6e5c64a319e2c5ae3bb2c1b840af0

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Пермская государственная фармацевтическая академия»

Министерства здравоохранения Российской Федерации

Кафедра общей и органической химии

Полное наименование кафедры

УТВЕРЖДЕНЫ

решением кафедры

Протокол от «10» ноября 2025 г. № 5

МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Б1.О.28 Моделирование химико-технологических процессов

Шифр и полное наименование дисциплины

18.03.01 Химическая технология

(код, наименование направления подготовки (специальности))

Химическая технология лекарственных средств

(направленность(и) (профиль (и)/специализация(ии))

Год набора: 2026

Пермь, 2025 г.

1. Рекомендации по подготовке к лекционным занятиям.

Изучение дисциплины требует систематического и последовательного накопления знаний, следовательно, пропуски отдельных тем не позволяют глубоко освоить предмет. Именно поэтому контроль над систематической работой обучающихся всегда находится в центре внимания кафедры.

Обучающимся необходимо:

- перед каждой лекцией просматривать рабочую программу дисциплины, что позволит сэкономить время на записывание темы лекции, ее основных вопросов, рекомендуемой литературы;

- перед очередной лекцией необходимо просмотреть по конспекту материал предыдущей лекции; при затруднениях в восприятии материала следует обратиться к основным литературным источникам; если разобраться в материале не удастся, то необходимо обратиться к преподавателю на семинарских занятиях.

Ведущему преподавателю необходимо объяснить и рассказать наличие учебников по материалу и чем они отличаются по содержанию.

2. Рекомендации по подготовке к практическим занятиям.

Обучающимся следует:

- приносить с собой рекомендованную преподавателем литературу к конкретному занятию;
- до очередного занятия по рекомендованным литературным источникам проработать теоретический материал соответствующей темы занятия и отработать задания, определённые для подготовки к практическому занятию;

- при подготовке к практическим занятиям следует использовать не только лекции, но и учебную литературу;

- в начале занятий задать преподавателю вопросы по материалу, вызвавшему затруднения в его понимании.

Вопросы для самопроверки

Раздел 1 Введение в дисциплину. Расчет теплового и материального баланса.

Тема 1.1

1. Что такое Химико-технологические системы. Цель, задачи дисциплины, ее междисциплинарность.
2. Основные понятия, используемые при моделировании химико-технологических процессов.
3. Химико-технологические системы (ХТС).
4. Как происходит расчет материального и теплового баланса. Какие математические уравнения используются?

Тема 1.2

1. Принципы составления материального баланса.
2. Закон сохранения массы и стехиометрические соотношения.
3. Составление материального баланса с учетом побочных реакции на единицу массы основного продукта или на единицу времени.
4. Теоретический и практический материальный баланс.
5. Расчеты расходных коэффициентов.
6. Понятие расходного коэффициента в химическом производстве.

7. Расчет коэффициентов с учетом видов сырья, воды, топлива, электроэнергии на единицу выработанной продукции.

Тема 1.3

1. Сопоставление материальных балансов необратимых химико-технологических процессов. Характеристика необратимых химико-технологических процессов.
2. Составление уравнений материального баланса для необратимых процессов.
3. Сопоставление материального баланса промышленных процессов, основанных на обратимых реакциях. Характеристика обратимых химико-технологических процессов.
4. Составление уравнений материального баланса для обратимых процессов.

Тема 1.4

1. Принципы составления энергетического (теплового) баланса.
2. Закон сохранения энергии.
3. Эндо- и экзотермические процессы.
4. Уравнение теплового баланса.
5. Тепловой баланс с учетом тепловых эффектов (экзотермических и эндотермических) химических реакций и физических превращений (испарение, конденсация и т.п.).
6. Расчет теплот химических и физических превращений.
7. Тепловой эффект химической реакции. Закон Гесса. Теплоемкость.
8. Зависимости теплового эффекта реакции от температуры.
9. Уравнение Нернста.
10. Вычисление теплоты при сжигании топлива или при превращении электрической энергии в тепловую.
11. Теплоты сгорания топлива по его элементарному составу.
12. Расчет теплового баланса промышленных процессов.
13. Тепловой баланс конкретного аппарата/реактора.
14. Составление теплового баланса с учетом тепловых эффектов (экзотермических и эндотермических).

Тема 1.5

1. Общие принципы составления и расчета материальных и тепловых балансов культивирования микроорганизмов.
2. Алгоритм составления материального и теплового балансов на примере культивирования микроорганизмов.

Раздел 2. Математическое моделирование кинетики химических реакций в потоке

Тема 2.1.

1. Общие кинетические закономерности реакций в потоке.
2. Скорость химической реакции. Кинетическое уравнение химической реакции.
3. Влияние различных условий на скорость реакции.
4. Кинетические кривые для реакций, протекающих в потоке.

Тема 2.2.

1. Классификация химических реакторов.
2. Химические реакторы и их классификация.
3. Требования к химическим реакторам как основному элементу ХТС.
4. Математическое и физическое моделирование химических реакторов.
5. Материальный баланс реакторов, работающих в стационарном и нестационарном режимах.
6. Вывод характеристических уравнений для реакторов идеального смешения и вытеснения.

Тема 2.3.

1. Кинетика реакций в реакторах идеального смешения.
2. Материальный баланс для РИС.
3. Уравнение теплового баланса для непрерывнодействующего РИС с внешним теплообменом.
4. Для непрерывнодействующего РИС, работающего в автотермическом.
5. Режим. Интегральная селективность для непрерывнодействующего РИС.
6. Кинетика реакций в реакторах идеального вытеснения.
7. Уравнение материального баланса в дифференциальной форме.
8. Характеристическое уравнение для РИВ.
9. Уравнение теплового баланса для непрерывно действующего РИВ с внешним теплообменом при постоянных температуре и составе по поперечному сечению потока.
10. Уравнение теплового баланса для непрерывнодействующего РИВ с внутренним теплообменом между исходными веществами и реакционной смесью (при подогреве исходных веществ)

Раздел 3. Характеристика химико-технологической системы.

Тема 3.1

1. Элементы ХТС и их классификация.
2. Типовые технологические операторы.
3. Классификации элементов ХТС с использованием иерархического принципа. Основные уровни иерархии элементов (подсистем) ХТС.
4. Типовые технологические операторы: основные и вспомогательные технологические операторы.

Тема 3.2.

1. Виды технологических связей между операторами.
2. При всей сложности ХТС существуют типовые соединения операторов между собой, объединяющие их в единую схему.

Тема 3.3.

1. Интегральные и декомпозиционные методы ХТС.
2. Суть методов расчета ХТС. Составление и описание моделей и уравнений для каждого метода.
3. Сравнение особенностей интегрального и декомпозиционного методов расчёта ХТС.

Тема 3.4.

1. Представление ХТС в виде графов, матриц и таблиц.
2. Анализ структуры ХТС. Рассмотрение структуры ХТС в терминах теории графов.
3. Решение задач графы с помощью матриц.
4. Структура ХТС в виде матрицы смежности или в виде списка смежности.

Тема 3.5.

1. Применение информационных технологий для моделирования химико-технологических процессов.
2. Детерминированные и статистические модели элементов Химико-Технологической системы. специализированное программное обеспечение, содержащее в своих базах данных адекватные математические модели различных процессов.

Тема 3.6.

1. Использование пакета chemCAD для моделирования ХТС.
2. Этапы моделирования химико-технологического процесса в ХЕМКАД: десять основных этапов: 1. Создание нового задания. 2. Выбор единиц измерения. 3. Построение технологической схемы. 4. Выбор компонентов. 5. Выбор термодинамических моделей. 6. Задание потоков питания.

7. Ввод параметров оборудования. 8. Запуск программы моделирования. 9. Просмотр результатов. 10. Распечатка данных.

3. Рекомендации по работе с литературой.

Любая форма самостоятельной работы студента (подготовка к семинарскому занятию, написание эссе) начинается с изучения соответствующей литературы, как в библиотеке, так и дома.

Рекомендации студенту:

- выбранный источник литературы целесообразно внимательно просмотреть; следует ознакомиться с оглавлением, прочитать аннотацию и предисловие; целесообразно ее пролистать, рассмотреть иллюстрации, таблицы, диаграммы, приложения; такое поверхностное ознакомление позволит узнать, какие главы следует читать внимательно, а какие прочитать быстро;

- в книге или журнале, принадлежащие самому студенту, ключевые позиции можно выделять маркером или делать пометки на полях; при работе с Интернет-источником целесообразно также выделять важную информацию;

- если книга или журнал не являются собственностью студента, то целесообразно записывать номера страниц, которые привлекли внимание, позже следует вернуться к ним, перечитать или переписать нужную информацию; физическое действие по записыванию помогает прочно заложить данную информацию в «банк памяти».

Выделяются следующие виды записей при работе с литературой:

Конспект - краткая схематическая запись основного содержания научной работы. Целью является не переписывание литературного источника, а выявление системы доказательств, основных выводов. Конспект должен сочетать полноту изложения с краткостью.

Цитата - точное воспроизведение текста. Заключается в кавычки. Точно указывается страница источника.

Тезисы - концентрированное изложение основных положений прочитанного материала.

Аннотация - очень краткое изложение содержания прочитанной работы.

Резюме - наиболее общие выводы и положения работы, ее концептуальные итоги.

Записи в той или иной форме не только способствуют пониманию и усвоению изучаемого материала, но и помогают вырабатывать навыки ясного изложения в письменной форме тех или иных теоретических вопросов.

4. Рекомендации по работе с научной литературой.

Организация сбора и отбора информации предполагает:

- определение круга вопросов, которые будут изучаться;
- хронологические рамки поиска необходимой литературы;
- уточнение возможности использования литературы зарубежных авторов;
- уточнение источников информации (книги, статьи, патентная литература, стандарты и т.д.);
- определение степени отбора литературы – всю по данному вопросу, или только отдельные материалы;
- изучение архивных документов, научно-технических отчетов;
- поиск информации в Интернете.

При поиске информации следует придерживаться определенных принципов ее формирования, а именно:

- актуальность - информации должна реально отражать состояние объекта исследования в каждый момент времени;
- достоверность - это доказательство того, что названный результат является истинным, правдивым;
- информационное единство, т. е. представление информации в такой системе показателей, при которой исключалась бы вероятность противоречий в выводах и несогласованность первичных и полученных данных.

Информационный поиск – это совокупность операций, направленных на поиск документов, которые нужны для разработки темы проблемы.

Определение состояния изученности темы целесообразно начать со знакомства с информационными изданиями, которые содержат оперативные систематизированные сведения о документах, существенные стороны их содержания. Информационные издания (в отличие от библиографических) включают не только сведения об опубликованных работах, но и идеи, факты, которые в них содержатся. Кроме оперативности, их характеризует новизна представленной информации, полнота охваченных источников и наличие справочного аппарата, что облегчает поиск и систематизацию литературы.

Изучение источников информации начинается с подбора и составления списка (картотеки) Интернет - источников, учебников, учебных пособий, монографий, журнальных и газетных статей. Необходимо просмотреть в библиотеках систематические, алфавитные и предметные каталоги, каталоги авторефератов диссертаций, журнальных и газетных статей.

В алфавитном каталоге названия книг (карточки) расположены в алфавитном порядке, который определяется по первому слову библиографического описания издания (фамилии автора или названию издания, автор которого не указан).

В систематическом каталоге карточки расположены по отдельным отраслям знаний в порядке, определяемом библиографической классификацией. Разновидностью такого каталога является каталог новых поступлений, в котором содержатся названия книг, поступивших в библиотеку в течение последних месяцев.

В предметном каталоге названия книг размещены по определенным предметам (темам) исследования, отраженным в рубриках. Сами рубрики и названия книг в этом каталоге следуют друг за другом в алфавитном порядке.

Для подбора литературы полезно воспользоваться библиографическими и реферативными изданиями. Можно просмотреть постраничные ссылки на использованную литературу в монографиях, учебных пособиях и журнальных статьях. Нельзя упускать из вида сборники научных трудов ВУЗов и научно-исследовательских учреждений, тезисы и материалы научно-практических конференций. Ценную информацию, особенно при изучении спорных вопросов темы, можно получить из рецензий на работы ученых и преподавателей. Некоторые учебники, учебные пособия, учебные программы, планы семинаров и практических занятий по дисциплине, к которой имеет отношение выбранная тема исследования, содержат списки основной и дополнительной литературы.

Работу с литературой рекомендуется проводить поэтапно:

- общее ознакомление с материалом в целом по его содержанию;
- быстрый просмотр всего содержания;
- проработка в порядке последовательности размещения материала;
- выборочное чтение любой части монографии, пособия, диссертации, статьи;

- выписка материала, относящегося к теме и являющегося интересным;
- критическая оценка записанного, его редактирование, чистовая запись как фрагмент текста будущей работы.

При изучении литературы по выбранной теме используется не вся информация, содержащаяся в ней, а лишь та, которая имеет непосредственное отношение к теме. Критерием оценки прочитанного является возможность его практического использования в работе.

Для эффективного анализа этой информации необходимо знать методы ее учета, проработки и анализа.

Учет проработанной информации сводится к составлению библиографии. Библиография – это перечень различных информационных документов с указанием следующих данных: фамилия и инициалы автора, наименование источника, место издания, издательство, год издания, объем в страницах.

Библиографическое описание нужно приводить в соответствии с действующими стандартами по библиографическому и издательскому делу.

Библиографический перечень удобнее всего составлять на отдельных карточках. Это облегчит работу в дальнейшем, когда надо будет располагать источники либо в алфавитном порядке, либо в порядке упоминания в работе.

Проработка информации сводится к ее изучению и запоминанию.

Изучение научной литературы позволяет:

- выявить достижения науки, ее достоинства и недостатки;
- определить основные тенденции во взглядах специалистов на проблему, учитывая то, что уже достигнуто в науке;
- определить актуальность и уровень изученности проблемы;
- выбрать направление, аспекты исследования;
- обеспечить достоверность выводов и результатов ученого, связь его концепции с общим развитием науки.

Первым условием эффективной проработки документа является установка, т.е. цель чтения, направленность.

Внимание и сосредоточенность во многом определяют качество проработки информации.

Самостоятельность труда. Каждая страница должна быть неторопливо проанализирована, обдумана и сопоставлена с намеченной целью.

Настойчивость и систематичность. Часто, особенно при чтении сложного нового текста четко осмыслить его с первого раза невозможно. Приходится читать и перечитывать, добиваясь полного понимания материала.

Прорабатывая текст, необходимо добиваться, чтобы все было понятно. В отдельных случаях нужно не только понять, но и запомнить текст на тот или другой период.

Каждый ученый должен владеть *искусством запоминания*. Существуют различные способы запоминания.

1. Механический – основан на многократном повторении и заучивании прочитанного («зазубривание»). В этом случае отсутствует логическая связь между отдельными элементами. Этот способ наименее эффективен, он применим в ограниченных случаях: даты, формулы, иностранные слова и др.

2. Смысловой способ запоминания основан на запоминании логических связей между отдельными элементами. При чтении необходимо понять не отдельные элементы, а весь текст в целом, его смысл, направленность, значение.

3. Повторение – один из эффективных способов запоминания. Повторение бывает пассивным (перечитывание несколько раз) и активным (перечитывание с пересказом). Второй способ сочетает заучивание с самоконтролем, поэтому, он более эффективен.

Неотъемлемым требованием проработки научно-технической информации является запись прочитанного. Она позволяет лучше его понять, удлинить процесс восприятия информации, лучше запомнить, восстановить в памяти забытое, развить мышление, проанализировать текст, отобрать наиболее важные фрагменты для разрабатываемой темы.

Прорабатывая научно-техническую информацию, применяют выписки, аннотации, конспекты.

Выписка – краткое (или полное) содержание отдельных разделов, глав, страниц информации.

Ценность выписок очень высока. Они могут заменить сплошное конспектирование текста, их краткость позволяет в малом объеме накопить большую информацию.

Аннотация – это краткая характеристика текста с точки зрения содержания, назначения, формы и др. Аннотации составляют на данный документ информации в целом.

Аннотации удобно накапливать на отдельных карточках по разным вопросам прорабатываемой темы. Аннотации позволяют быстро восстановить в памяти текст.

Конспект – это подробное изложение содержания информации.

Главное в составлении конспекта – это уметь выделить рациональное зерно применительно к исследуемой теме. Конспект должен быть содержательным, полным и по возможности кратким. Полнота здесь означает не объем, а все то, что является главным в данной информации.

Правило: чтобы конспект был кратким, его нужно составлять своими словами, что требует осмысливания, анализа прочитанного. Рекомендуется применять сокращенные слова, но так, чтобы не потерять смысл. В сокращенном тексте следует сохранить все знаки препинания. Полезно каждому ученому иметь свой словарь сокращенных слов.

Конспект должен быть правильно оформлен. Каждое произведение желательно конспектировать в отдельной тетради. Запись вести только с одной стороны листа с полями около $\frac{1}{4}$ ширины листа. Текст нужно разбивать на абзацы и иерархические пункты, например, 1.1.1, 1.1.2, 1.1.3, ..., 1.2.1, 1.2.2 и т.д. Для выделения главных мыслей нужно применять подчеркивание сплошной, волнистой, пунктирной и т.п. линиями.

Иногда конспект нужно пополнять новыми материалами, своими мыслями, анализом и т.д. По тексту ставят номера, которыми отмечают соответствующие дополнения на полях или обратной стороне листа.

Существуют два способа составления конспектов.

Первый – подобранная информация по теме прорабатывается последовательно. Вначале составляют конспект на каждую информацию, а затем все объединяют в одно обзорное произведение. Этот способ наиболее распространен, но он не достаточно эффективен, т.к. требует большой затраты времени.

Второй способ, выборочный, заключается в следующем. Подобранную информацию располагают в ряд по степени полноты, актуальности, новизны.

Вначале изучают самую полную современную информацию высокого научного уровня. С помощью оглавления составляют полный план темы. Далее приступают к беглой проработке менее важной, второстепенной, информации, дополняя ею план основного первоисточника. В случае повторения второстепенную информацию опускают.

Второй способ сокращает время на подготовку обобщенного конспекта.

Особенно внимательно нужно пользоваться цитатами, чтобы без искажений передать мысль автора первоисточника. При цитировании следует придерживаться таких правил:

- цитаты должны быть точными;
- нельзя искажать основное содержание взглядов автора;
- использование цитат должно быть оптимальным, то есть определяться потребностью научной темы;
- следует точно указать источник цитирования;
- цитаты должны вписываться в контекст темы исследования.

Изучение и анализ литературы требует определенной культуры исследователя. Все фамилии авторов, которые придерживаются единой точки зрения по тому или иному вопросу, необходимо указать в алфавитном порядке. Алфавитный порядок подчеркивает одинаковое отношение исследователя к научным концепциям ученых.

На завершающем этапе работы с литературой целесообразно сделать сравнительный *анализ* полученной информации. Это позволит оценить актуальность, новизну и перспективность информации. По данным критического анализа следует сделать выводы. Их обобщение позволит методологически правильно поставить и сформулировать тему исследования, наметить цели и конкретные задачи.

5. Рекомендации по переводу литературы

При переводе научной литературы рекомендуется следующая последовательность работы над текстом:

1. Прочитать весь текст или абзац и постараться уяснить его общее содержание.
2. Каждое сложное предложение разбить на отдельные предложения: сложноподчиненные на главное и придаточное, а сложносочиненные – на простые.
3. При анализе сложных по своей структуре предложений, в которых не сразу можно определить составляющие их элементы, рекомендуется, прежде всего, найти сказуемое главного и придаточных предложений.
4. В каждом предложении определить группу сказуемого (по личной форме глагола), затем найти группу подлежащего и группу дополнения.
5. Перевод предложения начинать с группы подлежащего, затем переводить группу сказуемого, дополнения и обстоятельства.
6. Отыскать незнакомые слова в словаре, уяснив предварительно, какой частью речи они являются в данном предложении. При этом не брать первое значение слова, а прочесть все значения, дающиеся для данной части речи, и выбрать наиболее подходящее по содержанию переводимого текста. Выписать незнакомые слова в терминологический словарь, указать перевод на русский язык.