

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева» (РХТУ им. Д.И. Менделеева)

**Программа вступительных испытаний в магистратуру
по направлению**
**18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической
технологии, нефтехимии и биотехнологии**

Магистерская программа
«Кибернетика для инновационных технологий»

Москва 2024

Разработчики программы:

- руководитель магистерской программы «Кибернетика для инновационных технологий» – заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н., проф. Глебов М.Б.
- профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н., проф. Савицкая Т.В.;
- профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н. Писаренко Е.В.
- профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н., проф. Егоров А.Ф.;
- доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов, к.т.н., доц. Скичко А.С.

1. Введение

Программа вступительных испытаний предназначена для лиц, желающих поступить в магистратуру ФГБОУ ВО «РХТУ им. Д.И. Менделеева» по направлению подготовки 18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии (магистерская программа: «Кибернетика для инновационных технологий»). Программа разработана в соответствии с Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденным приказом Министерства образования и науки РФ от 6 апреля 2021 года № 245. Программа рекомендуется для подготовки к вступительным испытаниям выпускников бакалавриата и специалитета классических университетов, технических и технологических вузов. Содержание программы базируется на следующих учебных дисциплинах: «Процессы и аппараты химической технологии», «Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», «Моделирование типовых процессов химической технологии», «Системы управления химико-технологическими процессами», «Макрокинетика химических процессов», «Методы кибернетики химико-технологических процессов» и других специальных учебных дисциплинах, преподаваемых в РХТУ им. Д.И. Менделеева в рамках направления подготовки 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии и других направлений подготовки технической и технологической направленности.

2. Содержание программы

2.1 Тема 1. Процессы и аппараты химической технологии

Классификация процессов по временному признаку.

Жидкости и газы. Массовые и поверхностные силы действующие в жидкости. Законы переноса массы, энергии, импульса. Гидравлическое сопротивление при течении жидкостей и газов.

Гидростатика. Основное уравнение гидростатики. Уравнения Навье-Стокса. Критерий Рейнольдса.

Теплообменные процессы. Температурное поле, градиент температуры и тепловой поток. Теплоотдача и теплопередача. Конвективный перенос теплоты. Основное уравнение теплопередачи. Расчет кожухотрубного теплообменника.

Массообменные процессы. Способы выражения состава фаз. Механизмы переноса массы. Понятия о массоотдаче и массопередаче. Движущая сила массопередачи. Механизмы переноса массы. Основное уравнение массопередачи.

Процессы абсорбции и ректификации. Процессы жидкостной экстракции, сушки, массовой кристаллизации из растворов.

2.2. Тема 2. Макрокинетика химических процессов

Стехиометрический анализ реагирующей химической системы. Структурная и стехиометрическая матрицы. Независимые химические реакции. Стехиометрическое правило Гиббса.

Равновесные химические реакции. Определение меры завершенности химической реакции. Расчет равновесных составов сложных реагирующих химических систем. Принципы выбора оптимальной совокупности независимых реакций.

Химические инварианты, определение и свойства. Оценка общего числа химических инвариантов. Вывод уравнений химических инвариантов для заданной системы реагентов.

Кинетические исследования гетерогенно-каталитических реакций. Построение кинетических моделей сложных многомаршрутных химических реакций. Методы Боденштейна и Хориути. Определение боденштейновских и небоденштейновских веществ. Стехиометрические числа Хориути. Правило Хориути. Расчет вектора скоростей итоговых реакций по маршрутам.

Активность, селективность и стабильность эксплуатации катализаторов. Каталитические яды, промоторы, модификаторы. Активация, регенерация и дезактивация катализаторов.

Моделирование процесса в зерне катализатора. Процессы переноса массы и тепла в зерне катализатора. Математические модели зерна катализатора. Расчет факторов эффективности работы зерна катализатора для

неключевых веществ и независимых химических реакций.

2.3 Тема 3. Моделирование типовых процессов химической технологии

Теория математического моделирования, определение модели, классификация моделей по временному и пространственному признакам. Диалектическое соотношение физического и математического моделирования. Этапы математического моделирования, включая составление математического описания, выбор метода решения задачи, установление адекватности модели объекту исследования и ее использование. Примеры применения методов теории искусственного интеллекта (искусственные нейронные сети).

Законы сохранения и переноса. Гидродинамические, массообменные и теплообменные процессы. Теория Навье-Стокса и принимаемые допущения для конкретного случая течения. Эффективность применения эмпирико-аналитического подхода при построении математической модели.

Термодинамика состояния химико-технологических систем, отличающихся многофазностью и многокомпонентностью.

Модели конкретных химико-технологических процессов движения сред, тепло-, массопереноса и химических превращений в аппаратах химической технологии.

2.4 Тема 4. Системы управления химико-технологическими процессами

Основные понятия и определения в области управления химико-технологическими процессами. Химико-технологический процесс (ХТП). Регулируемая переменная. Управляющие и возмущающие воздействия. Система автоматического регулирования (САР). Блок-схема САР.

Основные понятия о системах автоматического регулирования ХТП. Блок-схема СУ ХТП.

Классификация систем управления (СУ) ХТП. По виду математического описания: линейные и нелинейные СУ ХТП. По принципу регулирования: разомкнутые, замкнутые, комбинированные и адаптивные. По функциональному назначению: стабилизирующие, следящие и программные. По числу контуров управления: одноконтурные и многоконтурные. По числу управляемых переменных и управляющих воздействий: односвязные и многосвязные.

Основные показатели устойчивости, быстродействия и качества СУ ХТП.

Этапы анализа и синтеза САР. Последовательности этапов синтеза СУ ХТП: анализ ХТП как объекта управления (выявление управляемых переменных, управляющих и возмущающих воздействий), синтез структуры СУ ХТП и выбор закона регулирования. Расчет оптимальных параметров

настроек регуляторов и проведение имитационного моделирования САР. Выбор технических средств реализации САР и ее внедрение.

Линейные системы автоматического регулирования. Статические и динамические характеристики элементов САР. Линейные и нелинейные статические характеристики ХТП. Методы линеаризации: аналитические и численные. Динамические характеристики элементов САР. Переходные процессы в линейных системах.

Типовые звенья САР. Временные характеристики элементарных звеньев САР: усилительного, интегрирующего, идеального дифференцирующего, инерционного.

Применение операционного исчисления для решения дифференциальных уравнений. Преобразование Лапласа. Расчет передаточных функций элементарных звеньев САР: усилительное звено, интегрирующее звено, идеальное дифференцирующее звено, инерционное звено первого порядка.

Частотные характеристики элементарных звеньев САР. Метод частотных характеристик. Амплитудно-частотные и фазочастотные характеристики линейных систем. Вещественные и мнимые частотные характеристики. Расчет частотных характеристик элементарных звеньев: усилительного интегрирующего, дифференцирующего, инерционного звеньев первого и второго порядков и звена чистого запаздывания.

Типовые законы регулирования. Временные и частотные характеристики законов регулирования. Временные и частотные характеристики П, И, ПИ, ПД и ПИД-законов регулирования.

Анализ работы одноконтурной САР. Устойчивость САР. Критерии устойчивости. Передаточные функции разомкнутой и замкнутой одноконтурной САР. Алгебраические и частотные критерии устойчивости линейных САР.

2.5 Тема 5. Методы вычислительной математики. Численные методы решения математических моделей в химической технологии

Методы численного расчёта определённых интегралов. Методы левых, правых и средних прямоугольников. Метод трапеций.

Решение систем линейных алгебраических уравнений методом обратной матрицы. Обоснование метода. Последовательность действий при реализации метода.

Метод наименьших квадратов. Система линейных уравнений для расчёта коэффициентов аппроксимирующего полинома. Привести пример вывода указанной системы линейных уравнений для случая аппроксимирующего полинома 2-го порядка.

Классификация дифференциальных уравнений математических моделей ХТП. Понятие начальных и граничных условий. Необходимость задания начальных и граничных условий. Виды граничных условий.

Виды разностной аппроксимации производной 1-го порядка. Понятия порядка аппроксимации и ошибки аппроксимации. Методика оценки ошибки аппроксимации производной 1-го порядка.

Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка: явный и неявный методы Эйлера, метод Рунге–Кутты 2-го порядка.

Понятия разностной сетки, разностной схемы и разностного шаблона. Явные и неявные разностные схемы. Методика определения порядка аппроксимации разностной схемы. Разностная аппроксимация начальных и граничных условий на разностной сетке.

Понятие устойчивости разностных схем. Методы анализа устойчивости разностных схем.

Явные и неявные разностные схемы, аппроксимирующие одномерное дифференциальное уравнение параболического типа. Методика записи схемы. Порядок аппроксимации схемы. Анализ устойчивости схемы. Методика численного решения схемы.

Примеры химико-технологических процессов, описываемых многомерными дифференциальными уравнениями. Разностная сетка для двумерных дифференциальных уравнений параболического типа. Методы решения.

2.6 Тема 6. Методы кибернетики химико-технологических процессов

Основные характеристики случайной величины. Функция и плотность распределения. Моменты распределения. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины.

Генеральная совокупность и случайная выборка. Метод максимального правдоподобия.

Доверительные интервалы и доверительная вероятность. Статистические гипотезы. Проверка статистических гипотез.

Метод корреляционного анализа. Стохастическая связь. Выборочный коэффициент корреляции. Коэффициенты частной корреляции.

Приближенная регрессия. Метод наименьших квадратов. Регрессионный анализ. Использование метода наименьших квадратов для регрессии. Линейная регрессия от одного параметра. Описание регрессионного анализа.

Метод множественной корреляции. Проведение регрессионного анализа в матричной форме.

Основные понятия теории планирования эксперимента. Свойства плана, регрессионный анализ результатов. Полный факторный эксперимент (уровни, факторы, факторное пространство, параметры оптимизации). Полный факторный эксперимент 2^k .

Классификация процессов химической технологии. Характеристика параметров систем, математические модели и их роль в решении задач оптимизации. Методы оптимизации, основанные на классическом математическом анализе. Необходимые и достаточные условия существования экстремума функции одной и многих переменных.

Метод геометрического программирования, вывод общих соотношений. Общая схема решения задач методом геометрического программирования.

Метод линейного программирования. Математическая формулировка метода линейного программирования. Геометрическое представление. Симплекс-метод.

3. Примерные вопросы для подготовки к вступительному испытанию

1. Закон внутреннего трения Ньютона. Динамический и кинематический коэффициенты вязкости.

2. Характеристики и режимы течения жидкости по трубопроводу. Профили скоростей при различных режимах.

3. Основное уравнение гидростатики. Практические приложения этого уравнения.

4. Теплоотдача и теплопередача: математическое описание, физический смысл коэффициентов, температурный градиент.

5. Водяной пар как теплоноситель, его преимущества. Определение расхода пара на нагревание и испарение жидкости.

6. Расчет средней движущей силы процесса теплопередачи. $\Delta T_{\text{ср}}$ при прямотоке и противотоке теплоносителей.

7. Порядок расчета теплообменных аппаратов на примере кожухотрубного теплообменника.

8. Соотношение между коэффициентами массопередачи и массоотдачи. Из каких уравнений получают коэффициенты массоотдачи?

9. Сравнение процессов простой перегонки и ректификации. Устройство аппаратов для их осуществления.

10. Химический процесс. Классификация химических процессов. Иерархическая структура процесса и его математической модели для химического реактора.

11. Стехиометрические закономерности химических процессов. Стехиометрическое уравнение, стехиометрические коэффициенты. Расчет основных показателей: степень превращения, селективность, выход продукта.

12. Кинетические закономерности химических процессов. Понятия скорости реакции и скорости превращения вещества. Кинетическое уравнение, порядок реакции.

13. Гомогенный химический процесс. Определение, примеры.

Скорости превращения от концентрации, степени превращения и температуры для простых необратимых реакций и для простых обратимых реакций.

14. Каталитический химический процесс. Определение катализа и катализатора. Химический процесс в пористом зерне катализатора. Схема процесса.

15. Основные понятия стехиометрического анализа химических реагирующих систем: структурные и молекулярные виды, матрицы структурных коэффициентов, матрицы стехиометрических коэффициентов.

16. Равновесные химические реакции. Прямая и обратная задачи химических равновесий. Использование независимых химических реакций при расчете равновесных составов сложных реагирующих химических систем.

17. Значение и роль кинетических исследований при моделировании промышленных каталитических процессов.

18. Химические инварианты, определение и свойства. Оценка общего числа химических инвариантов. Построение уравнений химических инвариантов по стехиометрической матрице.

19. Построение кинетической модели сложной многостадийной химической реакции с использованием методов Боденштейна и Хориути.

20. Отравление, промотирование и модифицирование гетерогенных катализаторов. Каталитические яды, промоторы, модифицирующие добавки. Дезактивация катализаторов в процессе эксплуатации и регенерация дезактивированных катализаторов.

21. Квазигомогенная модель зерна катализатора. Граничные условия Дирихле и Неймана.

22. Бидисперсная модель зерна катализатора. Граничные условия.

23. Капиллярная модель зерна катализатора. Граничные условия.

24. Фактор эффективности работы зерна катализатора. Уравнения инвариантов для расчета факторов эффективности неключевых веществ и независимых химических реакций.

25. Классификация математических моделей по временному и пространственному признакам.

26. Основные этапы математического моделирования.

27. Индикаторные методы исследования структуры потоков. Моменты кривых отклика.

28. Реактор идеального смешения непрерывного действия. Математическое описание изотермического процесса в реакторе.

29. Реактор идеального смешения периодического действия. Математическое описание изотермического процесса в реакторе.

30. Ячеечная модель структуры потоков.

31. Установление адекватности математической модели по критерию Фишера.

32. Установление адекватности математической модели по Хи-квадрат

критерию.

33. Характеристика метода нейросетевого моделирования.
34. Сушка сыпучих материалов.
35. Массовая кристаллизация из растворов. Движущая сила процесса кристаллизации.
36. Теплообмен в аппарате типа «Труба в трубе».
37. Жидкостная экстракция.
38. Установление адекватности математических моделей.
39. Доверительные интервалы, доверительная вероятность.
40. Статистические гипотезы. Проверка статистических гипотез.
41. Методы корреляционного анализа. Стохастическая связь. Выборочный коэффициент корреляции. Коэффициенты частной корреляции.
42. Полный факторный эксперимент 2^k . Свойства плана и регрессионный анализ результатов.
43. Приближенная регрессия. Использование метода наименьших квадратов для регрессии. Линейная регрессия от одного параметра. Описание регрессионного анализа.
44. Алгоритм определения коэффициентов уравнения множественной регрессии. Регрессионный анализ результатов.
45. Основные понятия теории планирования эксперимента. Полный факторный эксперимент (уровни, факторы, факторное пространство, параметры оптимизации).
46. Градиентные и безградиентные методы поиска экстремума функции многих переменных.
47. Методы приближенного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем. Сходимость и устойчивость методов.
48. Необходимые и достаточные условия экстремума функции одной и многих переменных.
49. Математическая формулировка задач линейного программирования. Геометрическое представление задачи линейного программирования, симплексный метод решения задач линейного программирования.
50. Метод максимального правдоподобия.
51. Общая классификация методов оптимизации.
52. Методы численного расчёта определённых интегралов. Методы левых, правых и средних прямоугольников. Метод трапеций.
53. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом обратной матрицы.
54. Метод наименьших квадратов. Система линейных уравнений для расчёта коэффициентов аппроксимирующего полинома 2-го порядка.
55. Классификация дифференциальных уравнений математических моделей ХТП. Понятие начальных и граничных условий.

56. Виды разностной аппроксимации производной 1-го порядка. Понятия порядка аппроксимации и ошибки аппроксимации.

57. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка.

58. Понятия разностной сетки, разностной схемы и разностного шаблона. Явные и неявные разностные схемы. Методика определения порядка аппроксимации разностной схемы. Понятие устойчивости разностных схем.

59. Блок-схема системы автоматического регулирования (САР). Описание процессов регулирования САР.

60. Классификация систем управления химико-технологическими процессами.

61. Основные показатели устойчивости систем автоматического регулирования.

62. Основные показатели качества работы систем автоматического регулирования.

63. Основные этапы анализа и синтеза систем автоматического регулирования.

64. Статические и динамические характеристики элементов систем автоматического регулирования.

65. Временные характеристики элементарных звеньев систем автоматического регулирования.

66. Преобразование Лапласа. Передаточные функции усилительного, интегрирующего и дифференцирующего звеньев.

67. Преобразование Лапласа. Расчет передаточной функции инерционного звена первого порядка.

68. Частотные характеристики элементарных звеньев систем автоматического регулирования.

69. Типовые законы регулирования.

70. Алгебраические критерии устойчивости линейных систем автоматического регулирования.

71. Частотные характеристики устойчивости линейных систем автоматического регулирования.

4. Рекомендованная литература

1. Разинов А.И. Процессы и аппараты химической технологии: учебное пособие /А.И.Разинов, А.В.Клинов, Г.С.Дьяконов; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2017. – 860 с.

2. Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Вент Д.П. Процессы и аппараты химической технологии (в 5-ти томах). М.: Химия, 2011. – 1230 с.

3. Равичев Л.В., Ильина С.И., Комляшев Р.Б., Носырев М.А., Сальникова Л.С., Бобылев В.Н. Задачник-тренажер по процессам и

аппаратам химической технологии: учебное пособие. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. С. 264.

4. Романков, П. Г. Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии (примеры и задачи): учебное пособие для вузов / Романков П. Г., Фролов В. Ф., Флисюк О. М. - 3-е изд., испр. - Санкт-петербург: ХИМИЗДАТ, 2010. - 544 с. - ISBN 978-5-93808-182-6. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента".

5. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учеб. пособие для академического бакалавриата/ Кафаров В.В., Глебов М.Б. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Издательство Юрайт, 2019.- 403 с.

6. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991. – 401 с.

7. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1984. – 370 с.

8. Дудоров А.А., Глебов М.Б. Лабораторный практикум по моделированию основных процессов химической технологии. Лабораторный практикум: учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 83 с.

9. Ахназарова, С. Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии [Текст]: учебное пособие для вузов / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1985. –327 с.

10. Ахназарова С.Л. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов с неполной информацией о механизме [Текст]: учебное пособие для вузов/ Ахназарова С.Л., Гордеев Л.С., Глебов М.Б. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2010. – 100с.

11. Бояринов А.И. Методы оптимизации в химической технологии [Текст]: учебное пособие для вузов / Бояринов А.И., Кафаров В.В. - М. : Химия, 1969, - 563 с.

12. Дубровский И. И. Системы управления химико-технологическими процессами. Лабораторный практикум: учеб. пособие/И. И. Дубровский, В. Л. Лукьянов. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2013. – 64 с.

13. Плютто В. П. Элементы теории управления химико-технологическими процессами и системами. Конспект лекций: учеб. пособие/В. П. Плютто, И. И. Дубровский. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2003. – 127 с.

14. Беспалов А.В. Системы управления химико-технологическими процессами. – М.: Академкнига, 2007. – 696 с.

15. Перов В.Л. Основы теории автоматического регулирования химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1970. – 352 с.

16. Дубровский И.И., Лукьянов В.Л. Проектирование автоматизированных систем управления химико-технологическими процессами и системами. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2015. 212 с.
17. Дударов С.П., Папаев П.Л. Использование численных методов в табличном процессоре Microsoft Excel. Лабораторный практикум: учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. 115 с.
18. Кольцова Э.М., Скичко А.С., Женса А.В. Численные методы решения уравнений математической физики и химии: учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2009. 224 с.
19. Кольцова Э.М., Скичко А.С., Женса А.В. Численные методы решения уравнений математической физики и химии: учебное пособие для вузов. 2-е изд., испр. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2020. 220 с. [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://urait.ru/book/chislennyye-metody-resheniya-uravneniy-matematicheskoy-fiziki-i-himii-454210> (дата обращения: 10.02.2024).
20. Скичко А.С., Кольцова Э.М. Численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных: учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2016. 56 с.
21. Писаренко Е.В. Кинетика и макрокинетика химических процессов. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2018. 132 с.
22. Писаренко Е.В. Современные промышленные процессы переработки природного газа и расчет реакторов. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2022. 260 с.