

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
 высшего образования
 «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
 дизайна»
 (СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ
 Директор ВШТЭ



Рабочая программа дисциплины

Б1.В.08

Моделирование химико-технологических процессов

Учебный план: _____ ФГОС3++z150302.22-1_22-15.plx

Кафедра: Органической химии

Направление подготовки:
 (специальность) 15.03.02 Технологические машины и оборудование

Профиль подготовки: Оборудование химических производств
 (специализация)

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: заочная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоё мкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Практ. занятия				
5	УП	6	8	126	4	4	Зачет
	РПД	6	8	126	4	4	
Итого	УП	6	8	126	4	4	
	РПД	6	8	126	4	4	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 15.03.02 Технологические машины и оборудование, утверждённым приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 09.08.2021 г. № 728

Составитель (и):

Кандидат химических наук, доцент

Курзин А.В.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой органической химии

Тришин Ю.Г.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Евдокимов А.Н.

Методический отдел:

Смирнова В.Г.

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать компетенции обучающегося в области моделирования химико-технологических процессов.

1.2 Задачи дисциплины:

- Сформировать основные понятия процесса моделирования отдельных химико-технологических объектов и химико-технологических систем;
- Дать обучающимся принципы построения математической модели химико-технологического объекта и основные положения анализа и синтеза химико-технологических систем;
- Привить студентам навыки решения математических моделей как отдельных химико-технологических объектов, так и химико-технологических систем в целом.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Общая химическая технология

Сырьевые источники химической промышленности

Теория механизмов и машин

Химические реакторы

Высшая математика

Химия

Материаловедение

Метрология, стандартизация и сертификация

Учебная практика, научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы)

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ПК-5: Способен разрабатывать рабочую, проектную и техническую документацию, принимать участие в работах по расчету и проектированию деталей, узлов и другого химического оборудования в соответствии с техническими заданиями
--

Знать: методы расчета химико-технологических процессов с точки зрения выбора оптимального оборудования.
--

Уметь: рассчитывать отдельные элементы оборудования и химико-технологического процесса в целом.
--

Владеть: методиками расчета и проектирования систем химико-технологических производств.
--

3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Инновац. формы занятий
		Лек. (часы)	Пр. (часы)		
Раздел 1. Общие вопросы моделирования химических производств					
Тема 1. Химико-технологические системы (ХТС) Иерархическая структура современного химического предприятия. Химико-технологическая система как большая система. Основные положения системного анализа. Понятие физико-химической системы	5	0,5		11	ГД
Тема 2. Компьютерные технологии как основа современного подхода к управлению технологическими процессами переработки растительного сырья Общая характеристика задач химической технологии, решаемых с применением компьютерных технологий: автоматизированные системы научных исследований, автоматизированное проектирование, автоматизированные системы управления технологическим процессом.		0,5		10	ГД
Тема 3. Общие принципы моделирования ХТС Математическое моделирование ХТС. Понятие модели, классификация моделей. Виды моделирования (физическое, математическое). Классификация математических моделей. Принципы математического моделирования процессов химической технологии. Исследование химико-технологических процессов методом математического моделирования. Блочный принцип построения математической модели ХТС. Классификация уравнений модели. Этапы построения математической модели ХТС переработки растительного сырья.		0,5	3	10	ИЛ
Раздел 2. Детерминированный подход к моделированию					

<p>Тема 4. Гидродинамическая структура однофазных потоков Время пребывания элементов потока как случайная величина. Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока. Интегральная и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока. Типовые модели структуры потоков: модель идеального перемешивания, модель идеального вытеснения, однопараметрическая диффузионная модель, ячеечная модель, комбинированные модели. Алгоритм идентификации математического описания структуры потоков.</p>	1		10	ГД
<p>Тема 5. Теплообменные процессы Основы теплового расчета. Проектный расчет теплообменного аппарата. Проверочный расчет теплообменного аппарата. Математические модели теплообменников: «перемешивание-перемешивание», «перемешивание-вытеснение», «вытеснение-вытеснение». Оптимальное проектирование теплообменного аппарата. Постановка задачи оптимального проектирования. Алгоритм расчета критерия оптимизации.</p>	0,5		12	ИЛ
<p>Тема 6. Кинетика химических реакций Основные понятия химической кинетики. Классификация реакций. Скорость химической реакции. Кинетические уравнения. Механизм химической реакции. Простые и сложные реакции. Степень превращения. Степень полноты реакции. Стехиометрические уравнения. Стехиометрическая матрица. Методы упрощения математической модели кинетики. Стехиометрически линейно зависимые и стехиометрически линейно независимые реакции. Линейные инварианты. Ключевые вещества. Этапы идентификации математической модели кинетики химических реакций. Экспериментальное исследование кинетики химических реакций. Формулирование гипотез о возможных механизмах реакции. Разработка математической модели кинетики химических реакций. Формулирование критерия адекватности. Отыскание кинетических констант (параметрическая идентификация модели).</p>	1		15	ГД

Тема 7. Массообменные процессы Постановка задачи. Блочный принцип построения моделей массопередачи. Общая характеристика математического описания: уравнение баланса массы, уравнение равновесия, уравнение кинетики. Пример моделирования процесса адсорбции. Уравнение материального баланса. Уравнение кинетики сорбции. Уравнение равновесия сорбции. Уравнение теплового баланса. Уравнение передачи тепла. Начальные и граничные условия.			0,5		15	
Тема 8. Химические реакторы Классификация химических реакторов. Математические модели процессов в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения. Каскад реакторов идеального смешения. Сравнение химических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения и каскада реакторов идеального смешения.			0,5	5	13	ИЛ
Раздел 3. Вероятностный подход к моделированию						
Тема 9. Функция одной переменной Выбор вида и определение параметров эмпирической зависимости. Пример монотонной зависимости. Выбор вида и определение параметров немонотонной зависимости.			0,5		15	АС
Тема 10. Функции многих переменных Множественная регрессия. Планирование эксперимента. Полный факторный эксперимент. Планирование второго порядка.			0,5		15	АС
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)			6	8	126	
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)			0,25			
Всего контактная работа и СР по дисциплине			14,25		126	

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ПК-5	1. Может применить принципы и методы построения	1. Вопросы устного

	<p>математических моделей основных процессов химической технологии при разработке и эксплуатации современных крупнотоннажных промышленных предприятий.</p> <p>2. Использует компьютерные моделирующие системы для разработки и исследования эффективных процессов и аппаратов химической технологии.</p> <p>3. Применяет базовые навыки использования программных продуктов для решения конкретных задач по моделированию химико–технологических процессов.</p>	<p>собеседования;</p> <p>2. Практико-ориентированные задания.</p>
--	---	---

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает всестороннее и глубокое знание моделирования процессов в области химической технологии, свободно ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях; усвоил основную и знаком с дополнительной литературой; проявляет творческие способности в использовании учебного материала.	Предложенное задание выполнено верно либо с небольшими недочетами, соблюдается логичность выводов, проявлены знания в области предмета
Не зачтено	Обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины; не владеет современными представлениями о моделировании в области химической технологии; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе на зачете существенные ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя.	Предложенное практическое задание не выполнено, отсутствует знание теоретической базы дисциплины.

5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Курс 5	
1	Иерархическая структура современного химического предприятия. Химико-технологическая система как большая система.
2	Основные положения системного анализа.
3	Автоматизированные системы научных исследований.
4	Автоматизированное проектирование.
5	Автоматизированные системы управления технологическим процессом.
6	Математическое моделирование ХТС.
7	Классификация моделей. Виды моделирования (физическое, математическое).
8	Классификация математических моделей.
9	Принципы математического моделирования процессов химической технологии. Исследование химико-технологических процессов методом математического моделирования.
10	Блочный принцип построения математической модели ХТС. Этапы построения математической модели ХТС.
11	Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока. Интегральная и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока.
12	Типовые модели гидродинамической структуры однофазных потоков: модель идеального перемешивания, модель идеального вытеснения, однопараметрическая диффузионная модель, ячеечная модель, комбинированные модели.
13	Алгоритм идентификации математического описания гидродинамической структуры однофазных потоков.
14	Основы теплового расчета. Проектный и проверочный расчеты теплообменного аппарата.
15	Математические модели теплообменников: «перемешивание-перемешивание», «перемешивание-вытеснение», «вытеснение-вытеснение».

16	Оптимальное проектирование теплообменного аппарата.
17	Основные понятия химической кинетики. Классификация реакций. Скорость химической реакции. Кинетические уравнения.
18	Степень превращения. Степень полноты реакции. Стехиометрические уравнения Стехиометрическая матрица.
19	Методы упрощения математической модели кинетики.
20	Идентификация математической модели кинетики химических реакций.
21	Экспериментальное исследование кинетики химических реакций. Формулирование гипотез о возможных механизмах реакции.
22	Разработка математической модели кинетики химических реакций. Формулирование критерия адекватности.
23	Параметрическая идентификация модели.
24	Блочный принцип построения моделей массопередачи.
25	Общая характеристика математического описания процесса массопередачи: уравнение баланса массы, уравнение равновесия, уравнение кинетики.
26	Классификация химических реакторов.
27	Математические модели процессов в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения.
28	Каскад реакторов идеального смешения.
29	Сравнение химических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения и каскада реакторов идеального смешения.
30	Вероятностный подход к моделированию: выбор вида и определение параметров эмпирической монотонной зависимости.
31	Вероятностный подход к моделированию: выбор вида и определение параметров эмпирической немонотонной зависимости.
32	Вероятностный подход к моделированию: планирование эксперимента. Варианты факторных экспериментов.

5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Определите число опытов дробного факторного эксперимента с числом факторов $k=5$ и показателем дробности $r=2$, приведите пример матрицы планирования.

2. В некоей мономолекулярной реакции расходуется вещество А. В ходе экспериментального изучения реакции получены следующие данные, представленные в виде пар чисел «время; концентрация»:

(0; 100), (1; 54,78), (2; 30,01), (3; 16,44), (4; 9,01), (5; 4,93), (6; 2,70), (7; 1,48), (8; 0,81), (9; 0,44), (10; 0,24).

Представьте зависимость концентрации веществ от времени в виде уравнения.

3. На примере системы реакций первого порядка

$A \rightarrow B$ (k_1)

$B \rightarrow C$ (k_2)

$B \rightarrow A$ (k_3)

составьте математическую модель кинетики химического процесса в соответствии с исходными данными:

$k_1 = 1,5$ [1/с]; $k_2 = 0,5$ [1/с]; $k_3 = 0,1$ [1/с]; $C_{a0} = 100$ [моль/л]; $C_{b0} = C_{c0} = 0$.

4. Графически определите кинетические параметры уравнения модели кинетики процесса $aA + bB \rightarrow cC$.

5. Для системы реакций

$A_1 + A_2 \rightarrow A_3 \rightarrow A_4 = 0$

$-A_1 + 2A_3 \rightarrow A_4 = 0$

определите количество инвариантов и ключевых веществ.

6. Рассчитайте стоимость однопоточного теплообменника «труба в трубе» массой 860 кг, приняв оптовую цену теплообменника $Ц_{Топт} = 650$ руб/кг.

5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная + Письменная + Компьютерное тестирование Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

В течение семестра выполняются контрольные работы.

Возможность пользоваться справочными таблицами, калькулятором;

В том случае, если ответ требует выхода в сеть Интернет для демонстрации навыков обучающегося, такой выход может быть предоставлен.

Время на подготовку ответа по билету 40 минут, время ответа на билет не более 10 минут.

Письменный конспект подготовки по билету может быть использован при обязательном устном собеседовании.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Заварухин, С. Г.	Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2017	http://www.iprbooks.hop.ru/91236.html
Воробьев, Е. С., Каралин, Э. А., Воробьева, Ф. И.	Моделирование химико-технологических процессов. В 2 частях. Ч.1. Статистические расчеты и обработка эксперимента. Реализация решений в среде Microsoft Excel	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2019	http://www.iprbooks.hop.ru/100562.html
Берестова, С. А., Мисюра, Н. Е., Митюшов, Е. А., Рощевой, Т. А.	Математическое моделирование в инженерии	Екатеринбург: Издательство Уральского университета	2018	http://www.iprbooks.hop.ru/106406.html
Клинов, А. В., Мухаметзянова, А. Г.	Математическое моделирование химико-технологических процессов	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2009	http://www.iprbooks.hop.ru/62483.html
Гайфуллин, А. А., Воробьева, Ф. И., Тунцева, С. Н.	Математическое моделирование гидродинамических характеристик реактора	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2016	http://www.iprbooks.hop.ru/62187.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
А.Н. Евдокимов, А.В. Курзин	Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели) [Текст]: учеб. пособие	М-во образования и науки РФ, ВШТЭ СПбГУПТД. - СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД	2018	http://nizrp.narod.ru/metod/kaforgchem/2018_08_30_01.pdf
Закгейм А. Ю.	Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учеб. Пособие	Москва: Логос	2012	https://ibooks.ru/reading.php?short=1&productid=28124

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/>

Электронная библиотека ВШТЭ СПб ГУПТД [Электронный ресурс]. URL: <http://nizrp.narod.ru>

Электронно-библиотечная система «Айбукс» [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ibooks.ru/>

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftWindows 8

MicrosoftOfficeProfessional 2013

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска