

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по
УР

_____ А.Е. Рудин

«21» февраля 2023 года

Рабочая программа дисциплины

Б1.О.31

Моделирование химико-технологических процессов

Учебный план: 2023-2024 18.03.01 ИПХиЭ ХТОиНВ ОО №1-1-94.plx

Кафедра: **18** Инженерной химии и промышленной экологии

Направление подготовки:
(специальность) 18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки: Химическая технология органических и неорганических веществ
(специализация)

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся			Сам. работа	Контроль, час.	Трудоём- кость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации	
	Лекции	Практ. занятия	Лаб. занятия					
8	УП	9	9	18	71,75	0,25	3	Зачет
	РПД	9	9	18	71,75	0,25	3	
Итого	УП	9	9	18	71,75	0,25	3	
	РПД	9	9	18	71,75	0,25	3	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, утверждённым приказом Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 922

Составитель (и):

кандидат технических наук, Доцент

Самарин Виталий
Павлович

От кафедры составителя:
Заведующий кафедрой инженерной химии и
промышленной экологии

Бусыгин Николай Юрьевич

От выпускающей кафедры:
Заведующий кафедрой

Сашина Елена Сергеевна

Методический отдел:

Макаренко С. В. _____

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

1.2 Задачи дисциплины:

изучение основных понятий математического моделирования химико-технологических процессов, оптимизации эксперимента в химии и химической технологии;

рассмотрение методов построения моделей и их качественного исследования;

изучение методов оптимизации параметров химико-технологических процессов на основе построенных математических моделей;

закрепление у студентов практических навыков по использованию численных методов оптимизации и компьютерного решения систем уравнений математического описания.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

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

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

Общая и неорганическая химия

Математика

Информационные технологии

Процессы и аппараты химической технологии

Общая химическая технология

Системы управления и автоматизации химико-технологических процессов

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ОПК-4: Способен обеспечивать проведение технологического процесса, использовать технические средства для контроля параметров технологического процесса, свойств сырья и готовой продукции, осуществлять изменение параметров технологического процесса при изменении свойств сырья

Знать: методы построения эмпирических (статистических) и физико-химических (теоретических) моделей химико-технологических процессов, методы оптимизации химико-технологических процессов с применением эмпирических и/или физико-химических моделей

Уметь: выбирать необходимые методы для получения моделей химико-технологических процессов, применять методы вычислительной математики и математической статистики для моделирования и оптимизации химико-технологических процессов

Владеть: пакетами прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов

ОПК-5: Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные

Знать: методы идентификации математических описаний технологических процессов на основе экспериментальных данных

Уметь: применять методы вычислительной математики и математической статистики для обработки результатов эксперимента

Владеть: методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов

3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа			СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)	Лаб. (часы)			
Раздел 1. Математическое моделирование сложных химико-технологических систем	8						О,Л
Тема 1. Химико-технологическая система как объект моделирования. Практическое занятие "Постановка задач синтеза и анализа ХТС"		1	1		10	ИЛ	
Тема 2. Интегральные методы расчета параметров химико-технологических систем. Практическое занятие "Расчет материальных потоков в замкнутой ХТС матричным методом" Лабораторная работа "Реализация матричного метода расчета замкнутых ХТС в среде Mathcad"		1	1	2	6	ИЛ	
Тема 3. Декомпозиционные методы расчета параметров химико-технологических систем. Практическое занятие "Структурный анализ замкнутой ХТС" Лабораторная работа "Реализации декомпозиционного метода расчета замкнутых ХТС в среде Mathcad"		1	1	4	8	ИЛ	
Раздел 2. Математические модели элементов химико-технологических систем							
Тема 4. Общие подходы к построению детерминированных математических моделей объектов химической технологии. Практическое занятие "Типовые математические модели элементов ХТС и их применение"		1	1		10	ИЛ	
Тема 5. Моделирование гидравлических систем. Практическое занятие " Построение математической модели процесса истечения жидкости" Лабораторная работа "Расчет параметров истечения жидкости"		1	1	2	6	ИЛ	
Тема 6. Моделирование структуры потоков. Практическое занятие "Определение параметров моделей структуры потока" Лабораторная работа "Определение модели промышленного реактора с использованием ПЭВМ"	1	1	2	8	ИЛ		
Тема 7. Моделирование процессов теплообмена. Практическое занятие "Моделирование теплообменных аппаратов с учетом структуры потоков" Лабораторная работа "Определение параметров теплообмена с использованием ПЭВМ"	1	1	2	6	ИЛ	О,Л	

Тема 8. Моделирование процессов химического превращения. Практическое занятие "Моделирование химических реакторов с учетом выбранной гидродинамической модели структуры потоков" Лабораторная работа "Определение кинетических характеристик сложной химической реакции в реакторах различного типа"		1	1	4	10	ИЛ	
Тема 9. Эмпирические математические модели. Практическое занятие "Метод наименьших квадратов" Лабораторная работа "Реализация метода наименьших квадратов в среде Mathcad"		1	1	2	7,75	ИЛ	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		9	9	18	71,75		
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25					
Всего контактная работа и СР по дисциплине		36,25			71,75		

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
ОПК-4	Приводит общее определение математической модели и описание ее параметров, характеризует подходы к постановке задачи расчета по моделям, определяет роль математического моделирования в технологических расчетах и научных исследованиях. Определяет исходные данные, выбор формы уравнения, обосновывает выбор необходимых методов для получения моделей химико-технологических процессов. Выполняет проектные или поверочные расчеты по модели (моделирование гидравлических систем, химической кинетики, теплообменной аппаратуры и др.), анализирует результаты моделирования, проводит вычислительный эксперимент.	Вопросы устного собеседования Практико-ориентированные задания Тестовые задания
ОПК-5	Описывает подходы к решению задачи аппроксимации таблично заданной функции (таблицы наблюдений), формулирует принцип наименьших квадратов, дает определения базовых понятий регрессионного анализа. Преобразует эмпирико-статистические модели для оценки их коэффициентов с использованием программного обеспечения, рационально использует математической статистики для обработки результатов эксперимента. Оценивает коэффициент эмпирических моделей на основе регрессионного анализа, оценивает результаты аппроксимации при обработке результатов активных и пассивных экспериментов.	Вопросы устного собеседования Практико-ориентированные задания Тестовые задания

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	обучающийся показывает всестороннее знание основ экологии, ориентируется в	

	основных понятиях, терминах и определениях, не допускает существенных ошибок во время устного собеседования. Обучающийся даёт ответы на все поставленные вопросы, содержание ответов позволяет положительно характеризовать сформированность компетенций. Обучающийся правильно и в достаточном объеме выполняет практическое задание	
Не зачтено	обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины, плохо ориентируется в основных понятиях и определениях, некорректно понимает сущность поставленных вопросов, допускает при ответе на вопросы существенные ошибки, содержание ответов позволяет отрицательно характеризовать сформированность компетенций. Обучающийся не может выполнить практическое задание	

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
Семестр 8	
1	Понятие химико-технологической системы (ХТС). Элементы ХТС. Технологические операторы, их назначение и условные обозначения.
2	Принципы постановки задач расчета ХТС. Понятия синтеза и анализа ХТС.
3	Разомкнутые и замкнутые ХТС. Типы связей между элементами системы. Особенности расчета разомкнутых и замкнутых ХТС.
4	Сущность интегральных методов расчета ХТС. Применимость, достоинства и недостатки интегральных методов. Расчет материальных потоков ХТС интегральным методом на основе уравнений материального баланса и линейных уравнений связи.
5	Сущность декомпозиционных методов расчета ХТС, их применимость, достоинства и недостатки. Структурный анализ замкнутой ХТС. Реализация итерационных алгоритмов расчета ХТС на основе результатов структурного анализа схемы.
6	Детерминированные математические модели: определение, подходы к построению, основные составляющие моделей.
7	Принципы учета особенностей гидродинамической структуры потоков вещества при построении детерминированных математических моделей. Типовые модели структуры потоков вещества в аппаратах: основные допущения и области применения.
8	Математическое моделирование гидравлических систем. Параметры гидравлических систем. Модель трубопровода. Моделирование процессов истечения жидкостей из емкостей
9	Моделирование теплообменного аппарата на основе модели идеального смешения и ячеечной модели.
10	Моделирование теплообменного аппарата без изменения агрегатного состояния теплоносителей на основе модели идеального вытеснения. Особенности решения системы уравнений для противоточной и противоточной схемы движения теплоносителей.
11	Математическое моделирование химической кинетики.
12	Моделирование химического превращения в реакторах. Модель химического реактора идеального смешения. Модель химического реактора идеального вытеснения.
13	Эмпирико-статистические математические модели в автоматизированных расчетах. Исходные данные для построения моделей. Выбор формы уравнений. Общая постановка задачи построения моделей данного типа.
14	Основные принципы построения эмпирико-статистических моделей: независимые переменные, факторы, функции отклика, объем выборки, выборочные оценки и др.
15	Метод наименьших квадратов и его использование при оценке коэффициентов линейных регрессионных уравнений. Вывод системы уравнений.

5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрены.

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Примеры практико-ориентированных заданий приведены в приложении к РПД.

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»

Обязательное выполнение программы практических занятий, лабораторных работ, успешное прохождение текущего контроля

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная Письменная Компьютерное тестирование Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Необходимо исключить возможность использования текстовых и иных материалов, в т. ч. материалов, размещенных в информационно-телекоммуникационной сети Интернет, во время проведения промежуточной аттестации

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Бусыгин Н. Ю., Багров И. В.	Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии. Лабораторный практикум	СПб.: СПбГУПТД	2017	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2017897
Закгейм, А. Ю.	Общая химическая технология. Введение в моделирование химико-технологических процессов	Москва: Логос	2014	http://www.iprbookshop.ru/66419.html
Евдокимов, А. Н., Курзин, А. В.	Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели)	Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна	2018	https://www.iprbookshop.ru/102527.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Фролов В. Ф.	Лекции по курсу «Процессы и аппараты химической технологии»	Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ	2017	http://www.iprbookshop.ru/67349.html
Бусыгин Н. Ю., Самарин В. П.	Моделирование химико-технологических процессов. Контрольная работа	СПб.: СПбГУПТД	2019	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2019135
Романков П. Г., Фролов В. Ф., Флисюк О. М.	Массообменные процессы химической технологии	Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ	2017	http://www.iprbookshop.ru/67361.html
Бусыгин Н. Ю., Багров И. В.	Автоматизированные расчеты химико-технологических систем. Интегральные и декомпозиционные методы	СПб.: СПбГУПТД	2015	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2493

Евдокимов А.Н., Курзин А.В.	Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели)	Санкт-Петербург: ВШТЭ СПбГУПТД	2018	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=201912897
Романков, П. Г., Фролов, В. Ф., Флисюк, О. М.	Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии (примеры и задачи)	Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ	2020	http://www.iprbookshop.ru/97815.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

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

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

Microsoft Windows

MicrosoftOfficeProfessional

Mathcad Education – University Edition Term

Интернет-тренажеры в сфере образования

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

Аудитория	Оснащение
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска

Приложение

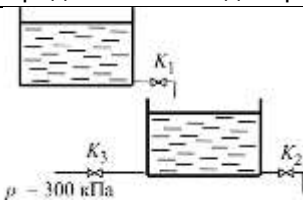
рабочей программы дисциплины Моделирование химико-технологических процессов

наименование дисциплины

по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология

наименование ОП (профиля): Наноинженерия, композиты и биоматериалы

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

№ п/п	Условия типовых задач (задач, кейсов)																		
1	Проанализируйте уравнение Аррениуса $k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$ с точки зрения подхода к оценке предэкспоненциального множителя и энергии активации методом линейной регрессии. Определите вид функции отклика и факторов. Предложите программные средства решения задачи.																		
2	В аппарат поступают 2 входных потока, для которых заданы объемные расходы V_1 и V_2 (в м ³ /ч), и 2 выходных с объемными расходами V_3 и V_4 . Плотности всех потоков известны, обозначим их как ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 , ρ_4 соответственно. Запишите уравнения материального баланса.																		
3	Для химической реакции, протекающей по схеме $A_1 + A_2 \rightarrow 2 A_3$ запишите кинетические уравнения. Предложите метод и программные средства для решения уравнений.																		
4	 <p>Постройте математическую модель гидравлической системы. Определите изменение уровня жидкости (бензол – толуол) в емкостях на интервале [0, 60]. В начальный момент времени уровень жидкости в сосудах $H_1 = 10$, $H_2 = 8$ м. Концентрация бензола-50%. $\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta_3 = 1$. Диаметр патрубков 0,021 м. Сечение резервуаров $S_1 = S_2 = 2$ м². Температура жидкости – 25 °С.</p>																		
5	<p>В таблице приведена зависимость давления насыщенного пара диметилацетамида от температуры.</p> <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <thead> <tr> <th style="text-align: center;">$Xt, ^\circ C$</th> <th style="text-align: center;">25</th> <th style="text-align: center;">40</th> <th style="text-align: center;">70</th> <th style="text-align: center;">90</th> <th style="text-align: center;">110</th> <th style="text-align: center;">130</th> <th style="text-align: center;">150</th> <th style="text-align: center;">165</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">$Yp, \text{кПа}$</td> <td style="text-align: center;">0,17</td> <td style="text-align: center;">1,1</td> <td style="text-align: center;">3,36</td> <td style="text-align: center;">5,94</td> <td style="text-align: center;">9,68</td> <td style="text-align: center;">15,1</td> <td style="text-align: center;">34,7</td> <td style="text-align: center;">50</td> </tr> </tbody> </table> <p>Найдите коэффициенты уравнений и установите, какое из приведенных соотношений наилучшим образом описывает экспериментальные данные?</p> $\ln p = \frac{A}{T} + B; \quad \ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T; \quad \ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T + D_1 T;$ $\ln p = \frac{A}{T} + B + C \ln T + D_1 T + D_2 T^2.$	$Xt, ^\circ C$	25	40	70	90	110	130	150	165	$Yp, \text{кПа}$	0,17	1,1	3,36	5,94	9,68	15,1	34,7	50
$Xt, ^\circ C$	25	40	70	90	110	130	150	165											
$Yp, \text{кПа}$	0,17	1,1	3,36	5,94	9,68	15,1	34,7	50											
6	<p>Определите оптимальное время проведения химической реакции $A_1 \xrightarrow{k_1} A_2 \xrightarrow{k_2} A_3$ в реакторе идеального вытеснения, приняв в качестве критерия оптимальности выход целевого компонента A_2.</p> <p>Значения констант скоростей реакции: $k_1 = 0,4$ мин⁻¹; $k_2 = 0,1$ мин⁻¹.</p> <p>Начальные концентрации компонентов: $c_1^0 = 0,5$ кмоль/м³; $c_2^0 = 0$; $c_3^0 = 0$.</p>																		