

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.О.30

Моделирование химико-технологических процессов

Учебный план: _____ ФГОСЗ++b180301.12-4 24-14.plx

Кафедра: 12 Органической химии

Направление подготовки:
(специальность) 18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки:
(специализация) Химическая технология органических веществ

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоё мкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Практ. занятия				
8	УП	20	30	22	36	3	Экзамен
	РПД	20	30	22	36	3	
Итого	УП	20	30	22	36	3	
	РПД	20	30	22	36	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 химических наук, доцент

Курзин А.В.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой органической химии

Тришин Ю.Г.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Тришин Ю.Г.

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

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:

Процессы и аппараты химической технологии

Системы управления и автоматизации химико-технологических процессов

Общая химическая технология

Учебная практика, технологическая (проектно-технологическая) практика

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: применением пакетов 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 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)		
Раздел 1. Общие вопросы моделирования химических производств	8				С
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		1		2	
Тема 2. Компьютерные технологии как основа современного подхода к управлению технологическими процессами органического синтеза Общая характеристика задач химической технологии, решаемых с применением компьютерных технологий: автоматизированные системы научных исследований, автоматизированное проектирование, автоматизированные системы управления технологическим процессом.		1		1	
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 органического синтеза.		1	2		
Раздел 2. Детерминированный подход к моделированию					3,С
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.		3	4	1	

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.		2	2	1	
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 ре-акций. 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).		4	4	2	
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.		2	2	1	
Тема 8. Химические реакторы Классификация химических реакторов. Математические модели процес-сов в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения. Каскад реакторов идеального смешения. Сравнение химических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения и каскада реакторов идеального смешения.		2	2		
Раздел 3. Вероятностный подход к моделированию					РГР,С

Тема 9. Функция одной переменной Выбор вида и определение параметров эмпирической зависимости. Пример монотонной зависимости. Выбор вида и определение параметров немонотонной зависимости.		2	10	10	
Тема 10. Функции многих переменных Множественная регрессия. Планирование эксперимента. Полный факторный эксперимент. Планирование второго порядка.		2	4	4	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		20	30	22	
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)		2,5		33,5	
Всего контактная работа и СР по дисциплине		52,5		55,5	

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ОПИСАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ, КРИТЕРИЕВ, СИСТЕМЫ И СРЕДСТВ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

5.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения
ОПК-4	1. Может применить принципы и методы построения математических моделей основных процессов химической технологии при разработке и эксплуатации современных крупнотоннажных промышленных предприятий. 2. Использует компьютерные моделирующие системы для разработки и исследования эффективных процессов и аппаратов химической технологии. 3. Применяет базовые навыки использования программных продуктов для решения конкретных задач по моделированию химико-технологических процессов.
ОПК-5	1. Способен применить модульный принцип разработки математического описания химико-технологических процессов промышленного основного и тонкого органического синтеза, а также производства высокомолекулярных соединений и переработки природного сырья. 2. Проводит практические расчеты при исследовании реальных процессов и аппаратов, химических реакторов; 3. Оценивает влияние параметров техно-логического процесса на экономические показатели производства и состояние окружающей среды.

5.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	Полный, исчерпывающий ответ, явно демонстрирующий знание основных принципов математического моделирования химико-технологических процессов и компьютерных технологий, а также широкую эрудицию в оцениваемой области. Обучающийся может объяснить принципы создания моделей на основе имеющихся сведений о процессах, а также вероятные ограничения применения разрабатываемых моделей. Могут присутствовать несущественные ошибки, не связанные с сутью обсуждаемой проблемы. Критический, оригинальный подход к материалу.	Обучающийся показывает глубокое знание предложенной модели химико-технологического процесса целевого продукта, свободно применяет на практике основные понятия, термины и определения при разработке темы; хорошо знаком с литературой по теме; может свободно составлять и описывать технологические схемы химических процессов; проявляет творческие способности и широкую эрудицию в использовании учебного материала.

	Обучающийся показывает правильное понимание условия задачи, владение навыками его анализа. Умеет применять математический аппарат для реализации плана решения задачи. Получил правильный ответ и может его интерпретировать.	
4 (хорошо)	Ответ стандартный, в целом качественный, основан на всех обязательных источниках информации (материалы практических занятий, рекомендованная литература). Присутствуют небольшие пробелы в знаниях или несущественные ошибки, большая часть которых может быть исправлена самостоятельно при устном собеседовании с преподавателем. Обучающийся показывает достаточное понимание условия задачи, владение навыками его анализа, выбора нужных законов. Допускает незначительные погрешности при применении математического аппарата при решении задачи. Получил правильный ответ, но испытывает затруднения с его интерпретацией.	Обучающийся показывает достаточный уровень знания предложенной модели химико-технологического процесса целевого продукта, может применить на практике основные понятия, термины и определения при разработке темы; в общих чертах знаком с литературой по теме; составляет модели химико-технологических процессов и способен описать их.
3 (удовлетворительно)	Ответ неполный, основанный только на материалах лекций. Может перечислить основные виды моделей и области их применения. При понимании сущности предмета в целом – существенные ошибки или пробелы в знаниях сразу по нескольким темам, незнание (путаница) важных терминов. Обучающийся вникает в смысл условия задачи, понимает план ее решения, но не может в полной мере с помощью математического аппарата реализовать ее решение.	Обучающийся показывает минимальный уровень знания предложенной модели химико-технологического процесса целевого продукта, плохо знает основные понятия, термины и определения при разработке темы; плохо знаком с дополнительной литературой по теме; составляет с ошибками модели химико-технологических процессов.
2 (неудовлетворительно)	Неспособность ответить на вопрос без помощи экзаменатора. Незнание значительной части принципиально важных элементов дисциплины. Многочисленные грубые ошибки. Обучающийся не способен проанализировать условие задачи, наметить план ее решения. Представление чужой работы, отказ от выполнения задания. Неспособность интерпретировать наблюдаемые или описываемые явления с позиций основных положений изученной дисциплины.	Обучающийся показывает недостаточный уровень знания предложенной модели химико-технологического процесса целевого продукта, не знает основные понятия, термины и определения при разработке темы; не знаком с дополнительной литературой по теме; не способен описать модель химико-технологического процесса.

5.3 Типовые контрольные задания и/или иные материалы, используемые для оценки результатов обучения

5.3.1 Типовые контрольные вопросы

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 8	
1	Иерархическая структура современного химического предприятия. Химико-технологическая система как большая система.
2	Основные положения системного анализа.
3	Физико-химическая система.
4	Автоматизированные системы научных исследований.
5	Автоматизированное проектирование.

6	Автоматизированные системы управления технологическим процессом.
7	Математическое моделирование ХТС.
8	Классификация моделей. Виды моделирования (физическое, математическое).
9	Классификация математических моделей.
10	Принципы математического моделирования процессов химической технологии. Исследование химико-технологических процессов методом математического моделирования.
11	Блочный принцип построения математической модели ХТС. Этапы построения математической модели ХТС.
12	Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока. Интегральная и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока.
13	Типовые модели гидродинамической структуры однофазных потоков: модель идеального перемешивания, модель идеального вытеснения, однопараметрическая диффузионная модель, ячеечная модель, комбинированные модели.
14	Алгоритм идентификации математического описания гидродинамической структуры однофазных потоков.
15	Основы теплового расчета. Проектный и проверочный расчеты теплообменного аппарата.
16	Математические модели теплообменников: «перемешивание-перемешивание», «перемешивание-вытеснение», «вытеснение-вытеснение».
17	Оптимальное проектирование теплообменного аппарата.
18	Основные понятия химической кинетики. Классификация реакций. Скорость химической реакции. Кинетические уравнения.
19	Механизм химической реакции Простые и сложные реакции.
20	Степень превращения. Степень полноты реакции. Стехиометрические уравнения Стехиометрическая матрица.
21	Методы упрощения математической модели кинетики.
22	Идентификация математической модели кинетики химических реакций.
23	Экспериментальное исследование кинетики химических реакций. Формулирование гипотез о возможных механизмах реакции.
24	Разработка математической модели кинетики химических реакций. Формулирование критерия адекватности.
25	Параметрическая идентификация модели.
26	Блочный принцип построения моделей массопередачи.
27	Общая характеристика математического описания процесса массопередачи: уравнение баланса массы, уравнение равновесия, уравнение кинетики.
28	Классификация химических реакторов.
29	Математические модели процессов в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения.
30	Каскад реакторов идеального смешения.
31	Сравнение химических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения и каскада реакторов идеального смешения.
32	Вероятностный подход к моделированию: выбор вида и определение параметров эмпирической монотонной зависимости.
33	Вероятностный подход к моделированию: выбор вида и определение параметров эмпирической немонотонной зависимости.
34	Вероятностный подход к моделированию: планирование эксперимента. Варианты факторных экспериментов.

5.3.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено

5.3.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Определите число опытов дробного факторного эксперимента с числом факторов $k=5$ и показателем дробности $p=2$, 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 $C_{\text{Топт}} = 650$ руб/кг.

5.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения

5.4.1 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»

5.4.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

+

Письменная

+

Компьютерное тестирование

Иная

5.4.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

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				
Гайфуллин, А. А., Воробьева, Ф. И., Тунцева, С. Н.	Математическое моделирование гидродинамических характеристик реактора	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2016	http://www.iprbookshop.ru/62187.html
Берестова, С. А., Мисюра, Н. Е., Митюшов, Е. А., Рощевой, Т. А.	Математическое моделирование в инженерии	Екатеринбург: Издательство Уральского университета	2018	http://www.iprbookshop.ru/106406.html

Заварухин, С. Г.	Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2017	http://www.iprbookshop.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.iprbookshop.ru/100562.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Клинов, А. В., Мухаметзянова, А. Г.	Математическое моделирование химико-технологических процессов	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет	2009	http://www.iprbookshop.ru/62483.html
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