

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»

Кафедра химии и химической технологии

“УТВЕРЖДАЮ”

ДЕКАН МТФ

к.т.н. Янпольский В. В.

“ ____ ” _____ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов

Образовательная программа: 18.03.01 Химическая технология, профиль: Химические технологии функциональных материалов

Курс: 3, семестр : 5

Механико-технологический факультет,

		Семестр
№	Вид деятельности	5
1	Всего зачетных единиц (кредитов)	4
2	Всего часов	144
3	Всего занятий в контактной форме, час.	83
4	Лекции, час.	18
5	Практические занятия, час.	36
6	Лабораторные занятия, час.	18
7	из них в активной и интерактивной форме, час.	18
8	Аттестация, час.	2
9	Консультации, час.	9
10	Самостоятельная работа, час.	61
11	Виды самостоятельной работы (курсовой проект, курсовая работа, РГЗ, подготовка к контрольной работе)	РГЗ
12	Вид аттестации	ДЗ

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению (специальности): 18.03.01 Химическая технология

ФГОС введен в действие приказом №1005 от 11.08.2016 г. , дата утверждения: 29.08.2016 г.

Место дисциплины в структуре учебного плана: Блок 1, вариативная

Рабочая программа разработана на основе компетентностной модели выпускника по направлению (специальности): 18.03.01 Химическая технология

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры

ХХТ, протокол заседания кафедры №2/1 от 20.06.2017

Утверждена на совете механико-технологического факультета, протокол № 5 от 21.06.2017

Программу разработал:

доцент, к.т.н. Заварухин С. Г.

Заведующий кафедрой:

д.х.н. Уваров Н. Ф.

Ответственный за образовательную программу:

доцент Апарнев А. И.

1. Внешние требования

Таблица 1.1

Компетенция ФГОС: ПК.16 способность планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования; в части следующих результатов обучения:	
38. знать основы построения моделей на принципах системного анализа химико-технологических процессов; основные математические методы для решения данных задач и их программную реализацию с использованием приемов программирования или применения стандартных прикладных пакетов, ориентированных на решение математических задач	
y10. уметь осуществлять идентификацию параметров математической модели, моделирование, оптимизацию и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	
Компетенция ФГОС: ПК.2 готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования; в части следующих результатов обучения:	
y1. уметь проводить обработку информации с использованием пакетов прикладных программных средств сферы в своей профессиональной области	

2. Требования НГТУ к результатам освоения дисциплины

Таблица 2.1

Результаты изучения дисциплины по уровням освоения (иметь представление, знать, уметь, владеть)	Формы организации занятий
<i>Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов</i>	
ПК.2.y1 уметь проводить обработку информации с использованием пакетов прикладных программных средств сферы в своей профессиональной области	
1. Уметь проводить обработку информации с использованием прикладной математической программы Mathcad	Самостоятельная работа
ПК.16.38 знать основы построения моделей на принципах системного анализа химико-технологических процессов; основные математические методы для решения данных задач и их программную реализацию с использованием приемов программирования или применения стандартных прикладных пакетов, ориентированных на решение математических задач	
2. Уравнения, описывающие химико-технологические процессы в аппаратах различного типа.	Лекции; Практические занятия; Самостоятельная работа
ПК.16.y10 уметь осуществлять идентификацию параметров математической модели, моделирование, оптимизацию и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	
3. Методы решения уравнений с использованием программы Mathcad	Лабораторные работы; Самостоятельная работа
4. Рассчитывать и совершенствовать химико-технологические процессы в аппаратах различного типа с использованием программы Mathcad.	Лабораторные работы; Самостоятельная работа

3. Содержание и структура учебной дисциплины

Таблица 3.1

Темы лекций	Активные формы, час.	Часы	Ссылки на результаты обучения	Учебная деятельность
Семестр: 5				

Дидактическая единица: Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии; уравнения баланса вещества, энергии и импульса				
1. Расчет гидродинамических характеристик центробежно-барботажного аппарата	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
Дидактическая единица: Математическое моделирование процессов химической технологии				
2. Расчет процесса очистки газа в циклоне	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
3. Математическое описание процессов разделения	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
4. Моделирование процесса получения нановолокнистого углерода из метана в изотермическом реакторе идеального перемешивания	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
Дидактическая единица: Химическое равновесие				
5. Методы расчета химического равновесия	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
Дидактическая единица: Основные математические модели процессов в химических реакторах, изотермические и неизотермические процессы в химических реакторах				
6. Расчет химических процессов в изотермических реакторах	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
7. Расчет химических процессов в адиабатических реакторах	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
8. Расчет химических процессов с рециркуляцией потока	0	2	2	Прослушивание и конспектирование
9. Расчет теплообмена в теплообменниках различного типа	0	2	2	Прослушивание и конспектирование

Таблица 3.2

Темы лабораторных работ	Активные формы, час.	Часы	Ссылки на результаты обучения	Учебная деятельность
Семестр: 5				
Дидактическая единица: Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии; уравнения баланса вещества, энергии и импульса				
1. Расчет гидродинамических характеристик центробежно-барботажного аппарата	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
Дидактическая единица: Математическое моделирование процессов химической технологии				
2. Расчет характеристик циклона СК-ЦН-34 при очистке газа крекинг-установки ГК-3 от пыли	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
3. Расчет оптимального режима работы циклона при разделении дисперсного материала на два класса	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
4. Расчет процесса образования НВУ из метана на катализаторе ИКУ-59-1 в изотермическом реакторе идеального перемешивания	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
Дидактическая единица: Химическое равновесие				

5. Анализ равновесной степени превращения метана для метано-водородной и метано-азотной смесей	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
Дидактическая единица: Основные математические модели процессов в химических реакторах, изотермические и неизотермические процессы в химических реакторах				
6. Расчет процесса окисления SO ₂ на ванадиевом катализаторе в изотермических реакторах идеального перемешивания и вытеснения	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
7. Расчет процесса окисления SO ₂ на ванадиевом катализаторе при атмосферном давлении в адиабатических реакторах	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
8. Расчет химических процессов с рециркуляцией потоков на примере процесса $CH_4 + CO_2 = C + H_2O$	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad
9. Расчет теплообмена в теплообменниках различного типа	1	2	3, 4	Проведение расчетов с использованием программы Mathcad

Таблица 3.3

Темы практических занятий	Активные формы, час.	Часы	Ссылки на результаты обучения	Учебная деятельность
Семестр: 5				
Дидактическая единица: Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии; уравнения баланса вещества, энергии и импульса				
1. Расчет гидродинамических характеристик центробежно-барботажного аппарата	1	4	2	Решение задач
Дидактическая единица: Математическое моделирование процессов химической технологии				
2. Расчет процесса очистки газа в циклоне	1	4	2	Решение задач
3. Математическое описание процессов разделения	1	4	2	Решение задач
4. Моделирование процесса получения нановолокнистого углерода из метана в изотермическом реакторе идеального перемешивания	1	4	2	Решение задач
Дидактическая единица: Химическое равновесие				
5. Методы расчета химического равновесия	1	4	2	Решение задач
Дидактическая единица: Основные математические модели процессов в химических реакторах, изотермические и неизотермические процессы в химических реакторах				
6. Расчет химических процессов в изотермических реакторах	1	4	2	Решение задач
7. Расчет химических процессов в адиабатических реакторах	1	4	2	Решение задач
8. Расчет химических процессов с рециркуляцией потока	1	4	2	Решение задач

9. Расчет теплообмена в теплообменниках различного типа	1	4	2	Решение задач
---	---	---	---	---------------

4. Самостоятельная работа обучающегося

№	Виды самостоятельной работы	Ссылки на результаты обучения	Часы на выполнение	Часы на консультации
Семестр: 5				
1	Выполнение РГЗ	1, 2, 3, 4	7	3
Вывод уравнений, метода решения и выполнение расчетов, подробная информация приведена в приложении №3 : Прикладная математическая программа MATHCAD : методические указания по курсу "Прикладные программы в инженерных расчетах" для 2 курса механико-технического факультета по специальности 170500 и 251800 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост. С. Г. Заварухин]. - Новосибирск, 2005. - 20, [2] с. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000047031				
2	Подготовка к лабораторным работам	2, 3	18	2
Повторение алгоритмов расчета, расчетных формул и методов расчета: Прикладная математическая программа MATHCAD : методические указания по курсу "Прикладные программы в инженерных расчетах" для 2 курса механико-технического факультета по специальности 170500 и 251800 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост. С. Г. Заварухин]. - Новосибирск, 2005. - 20, [2] с. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000047031				
3	Изучение теоретических основ курса	3	18	2
Изучение теоретических основ курса на основе лекций и рекомендованной литературы, подробная информация приведена в приложении №2 : Прикладная математическая программа MATHCAD : методические указания по курсу "Прикладные программы в инженерных расчетах" для 2 курса механико-технического факультета по специальности 170500 и 251800 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост. С. Г. Заварухин]. - Новосибирск, 2005. - 20, [2] с. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000047031				
4	Подготовка к зачету	2, 4	18	2
Повторение теоретического материала и методов решения задач, данных на лекциях и практических занятиях., подробная информация приведена в приложении №2 : Прикладная математическая программа MATHCAD : методические указания по курсу "Прикладные программы в инженерных расчетах" для 2 курса механико-технического факультета по специальности 170500 и 251800 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост. С. Г. Заварухин]. - Новосибирск, 2005. - 20, [2] с. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000047031				

5. Технология обучения

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии (табл. 5.1).

Таблица 5.1

Деятельность	Информационно-коммуникационные технологии
Информирование	e-mail; Среда электронного обучения НГТУ
Консультирование	e-mail; Среда электронного обучения НГТУ
Контроль	Среда электронного обучения НГТУ; ЭБС
Размещение учебных материалов	Среда электронного обучения НГТУ; ЭБС

Таблица 5.2

Активные и интерактивные формы проведения занятий

№	Наименование активных форм	Коды формируемых компетенций
1	Дискуссия	ПК.16;
Формируемые умения: з8. знать основы построения моделей на принципах системного анализа химико-технологических процессов; основные математические методы для решения данных задач и их программную реализацию с использованием приемов программирования или применения стандартных прикладных пакетов, ориентированных на решение математических задач; у10. уметь осуществлять идентификацию параметров математической модели, моделирование, оптимизацию и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии		
Краткое описание применения: 1. Проведении расчетов с использованием программы Mathcad; 2. Решении задач используя программу Mathcad.		
Подробная информация об использовании технологии приводится в приложении №4 "Прикладная математическая программа MATHCAD : методические указания по курсу "Прикладные программы в инженерных расчетах" для 2 курса механико-технического факультета по специальности 170500 и 251800 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост. С. Г. Заварухин]. - Новосибирск, 2005. - 20, [2] с. - Режим доступа: http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000047031 "		

6. Правила аттестации обучающихся по учебной дисциплине

Для аттестации обучающихся по дисциплине используется балльно-рейтинговая система (БРС), позволяющая выставять оценки по традиционной шкале и 15-уровневой ECTS.

Краткая информация о БРС приведена в табл. 6.1.

Таблица 6.1

Оцениваемые виды деятельности обучающихся	Мин. балл	Максимальный балл
Семестр: 5		
<i>Лабораторная:</i>	18	36
Контролирующие материалы - Задание ЛР		
<i>Практические занятия:</i>	18	36
Контролирующие материалы - Задачи		
<i>РГЗ:</i>	4	8
Контролирующие материалы - Задание РГЗ		
<i>Зачет:</i>	10	20
Контролирующие материалы - Задачи		

В таблице 6.2 представлено соответствие форм контроля заявляемым требованиям к результатам освоения дисциплины.

Таблица 6.2

Коды компетенций ФГОС	Результаты обучения	Формы контроля		
		Защита ЛР	Защита РГЗ	Зачет
ПК.16	з8. знать основы построения моделей на принципах системного анализа химико-технологических процессов; основные математические методы для решения данных задач и их программную реализацию с использованием приемов программирования или применения стандартных прикладных пакетов, ориентированных на решение математических задач	+	+	+
	у10. уметь осуществлять идентификацию параметров математической модели, моделирование, оптимизацию и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	+	+	+
ПК.2	у1. уметь проводить обработку информации с использованием пакетов прикладных программных средств сферы в своей профессиональной области	+	+	+

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в приложении № 1 к рабочей программе.

7. Литература

Основная литература

1. Заварухин С. Г. Прикладная математическая программа Mathcad : учебное пособие / С. Г. Заварухин. - Сочи, 2012. - 32 с. - Парал. тит. л. и огл. англ..
2. Гартман Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : [учебное пособие для вузов по направлениям "Химическая технология и биотехнология" и химико-технологическим направлениям] / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. - М., 2008. - 415 с. : ил.
3. Моделирование химико-технологических процессов: Учебник/Ефремов Г.И. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 255 с.: 60х90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат) (Переплёт) ISBN 978-5-16-011030-1, 500 экз. - Режим доступа: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=510221> - Загл. с экрана.

Дополнительная литература

1. Заварухин С. Г. Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов : учебное пособие / С. Г. Заварухин ; Новосиб. гос. техн. ун-т. - Новосибирск, 2007. - 58, [1] с. : ил. - Режим доступа: <http://www.library.nstu.ru/fulltext/metodics/2007/zavar.rar>
2. Справочник по пыле- и золоулавливанию / [М. И. Биргер и др.] ; под общ. ред А. А. Русанова. - М., 1983. - 312 с. : ил., табл.
3. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов : практическое руководство : [учебное пособие для вузов по направлению 553000 - "Системный анализ и управление" дисциплине Системный анализ химических технологий"] / В. А. Холоднов [и др.]. - СПб., 2003. - 478 с. : ил.
4. Кувшинов Г. Г. Введение в анализ химических реакторов : учебное пособие / Г. Г. Кувшинов ; Новосиб. гос. техн. ун-т. - Новосибирск, 2006. - 118, [1] с. : ил. - Режим доступа: <http://www.library.nstu.ru/fulltext/metodics/2006/kuvsh.rar>

Интернет-ресурсы

1. ЭБС НГТУ : <http://elibrary.nstu.ru/>

2. ЭБС «Издательство Лань» : <https://e.lanbook.com/>

3. ЭБС IPRbooks : <http://www.iprbookshop.ru/>

4. ЭБС "Znaniium.com" : <http://znaniium.com/>

5. :

8. Методическое и программное обеспечение

8.1 Методическое обеспечение

1. Прикладная математическая программа MATHCAD : методические указания по курсу "Прикладные программы в инженерных расчетах" для 2 курса механико-технического факультета по специальности 170500 и 251800 / Новосиб. гос. техн. ун-т ; [сост. С. Г. Заварухин]. - Новосибирск, 2005. - 20, [2] с. - Режим доступа:http://elibrary.nstu.ru/source?bib_id=vtls000047031

8.2 Специализированное программное обеспечение

1 Office

2 MathCAD

9. Материально-техническое обеспечение

Компьютерный класс

№	Наименование	Назначение
1	Компьютерный класс (Компьютеры объединены в локальную сеть с выходом в Internet)	Выполнение расчетов на компьютере с использованием программы Mathcad

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»

Кафедра химии и химической технологии

“УТВЕРЖДАЮ”
ДЕКАН МТФ
к.т.н., доцент В.В. Янпольский
“ ” г.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов
Образовательная программа: 18.03.01 Химическая технология, профиль: Химические технологии функциональных материалов

1. Обобщенная структура фонда оценочных средств учебной дисциплины

Обобщенная структура фонда оценочных средств по дисциплине Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов приведена в Таблице.

Таблица

Формируемые компетенции	Показатели сформированности компетенций (знания, умения, навыки)	Темы	Этапы оценки компетенций	
			Мероприятия текущего контроля (курсовой проект, РГЗ(Р) и др.)	Промежуточная аттестация (экзамен, зачет)
ПК.16/НИ способность планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	з8. знать основы построения моделей на принципах системного анализа химико-технологических процессов; основные математические методы для решения данных задач и их программную реализацию с использованием приемов программирования или применения стандартных прикладных пакетов, ориентированных на решение математических задач	Математическое описание процессов разделения Методы расчета химического равновесия Моделирование процесса получения нановолокнистого углерода из метана в изотермическом реакторе идеального перемешивания Расчет гидродинамических характеристик центробежно-барботажного аппарата Расчет процесса очистки газа в циклоне Расчет теплообмена в теплообменниках различного типа Расчет химических процессов в адиабатических реакторах Расчет химических процессов в изотермических реакторах Расчет химических процессов с рециркуляцией потока	Отчет по лабораторной работе (ЛР № 1-9). Отчет по РГЗ (РГЗ № 1-16). Задачи ПЗ по темам 1-9.	Зачет. Задачи по темам 1-9.
ПК.16/НИ	у10. уметь осуществлять идентификацию параметров математической модели, моделирование, оптимизацию и проектирование процессов химической технологии, нефтехимии и биотехнологии	Анализ равновесной степени превращения метана для метано-водородной и метано-азотной смесей Выполнение РГЗ Расчет гидродинамических характеристик центробежно-барботажного аппарата Расчет оптимального режима работы циклона при разделении дисперсного материала на два класса Расчет процесса образования НВУ из метана на катализаторе ИКУ-59-1 в изотермическом реакторе идеального перемешивания Расчет процесса окисления SO ₂ на ванадиевом катализаторе в изотермических реакторах идеального перемешивания и вытеснения Расчет процесса окисления SO ₂ на ванадиевом катализаторе при атмосферном давлении в адиабатических реакторах Расчет теплообмена в теплообменниках различного	Отчет по лабораторной работе (ЛР № 1-9). Отчет по РГЗ (РГЗ № 6-11,13,14,16). Задачи ПЗ по темам 1-9.	Зачет. Задачи по темам 1-9.

		типа Расчет характеристик циклона СК-ЦН-34 при очистке газа крекинг-установки Г К-3 от пыли Расчет химических процессов с рециркуляцией потоков на примере процесса $\text{CH}_4 + \text{CO}_2 = \text{C} + \text{H}_2\text{O}$		
ПК.2/ПТ готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования	у1. уметь проводить обработку информации с использованием пакетов прикладных программных средств сферы в своей профессиональной области	Выполнение РГЗ с использованием программы Mathcad.	Отчет по РГЗ (РГЗ № 1-16)	Зачет. Задачи по темам 1-9.

2. Методика оценки этапов формирования компетенций в рамках дисциплины.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в 5 семестре - в форме дифференцированного зачета, который направлен на оценку сформированности компетенций ПК.16/НИ, ПК.2/ПТ.

Зачет проводится в письменной форме по билетам. Варианты билетов составляются из задач, приведенных в паспорте зачета, позволяющих оценить показатели сформированности соответствующих компетенций.

В 5 семестре обязательным этапом текущей аттестации является расчетно-графическое задание (работа) (РГЗ(Р)). Требования к выполнению РГЗ(Р), состав и правила оценки сформулированы в паспорте РГЗ(Р).

Общие правила выставления оценки по дисциплине определяются балльно-рейтинговой системой, приведенной в рабочей программе дисциплины.

На основании приведенных далее критериев можно сделать общий вывод о сформированности компетенций ПК.16/НИ, ПК.2/ПТ, за которые отвечает дисциплина, на разных уровнях.

Общая характеристика уровней освоения компетенций.

Ниже порогового. Уровень выполнения работ не отвечает большинству основных требований, теоретическое содержание курса освоено частично, пробелы могут носить существенный характер,

необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы не достаточно, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий не выполнены или выполнены с существенными ошибками.

Пороговый. Уровень выполнения работ отвечает большинству основных требований, теоретическое содержание курса освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые виды заданий выполнены с ошибками.

Базовый. Уровень выполнения работ отвечает всем основным требованиям, теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые из выполненных заданий, возможно, содержат ошибки.

Продвинутый. Уровень выполнения работ отвечает всем требованиям, теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному.

Паспорт зачета

по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов», 5 семестр

1. Методика оценки

Дифференцированный зачет проводится в письменной форме, по билетам. Билет содержит три задачи, первая задача выбирается из списка задач по темам 1, 6, 7 (оценивается от 3 до 6 баллов), вторая задача - из списка задач по темам 2, 3, 8 (оценивается от 3 до 6 баллов), третья задача - из списка задач по темам 4, 5, 9 (оценивается от 4 до 8 баллов).

Форма билета для зачета

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет МТФ

Билет № _____

к зачету по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов»

1. Задача 1.
2. Задача 2.
3. Задача 3.

Утверждаю: зав. кафедрой _____ должность, ФИО
(подпись) (дата)

Пример билета для зачета

1. Для обратимой реакции $2\text{HCl} = \text{H}_2 + \text{Cl}_2$ при атмосферном давлении вывести формулы для расчета парциальных давлений компонент смеси от степени превращения HCl , если исходная смесь содержит только HCl . Зная константу равновесия K_p , записать уравнение для расчета равновесных парциальных давлений компонент смеси и найти равновесную степень превращения HCl .
2. Имеется пыль с плотностью функции распределения массы пыли по размерам частиц $f(x) = 2x/x_0^2$, где x_0 – константа, $0 < x < x_0$. Запыленный газ подается в циклон с функцией фракционного улавливания пыли $g(x) = x/x_0$. Определить степень очистки газа.
3. В реактор поместили 1 г катализатора и подали метан с расходом 110 нл/ч. Объемная доля метана на выходе реактора составила 70 %. Рассчитать скорость образования углерода.

2. Критерии оценки

- Решение задачи билета для зачета считается **неудовлетворительным**, если студент при ответе на вопросы не дает определений основных понятий, не способен показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи допускает принципиальные ошибки, оценка составляет менее 10 баллов.
- Решение задачи билета для зачета засчитывается на **пороговом** уровне, если студент при ответе на вопросы дает определение основных понятий, может показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи допускает не принципиальные ошибки, например, вычислительные, оценка составляет 10-13 баллов.
- Решение задачи билета для зачета засчитывается на **базовом** уровне, если студент при ответе на вопросы формулирует основные понятия, законы, дает характеристику процессов, явлений, проводит анализ причин, условий, может представить качественные характеристики процессов, не допускает ошибок при решении задачи, оценка составляет 14-16 баллов.
- Решение задачи билета для зачета засчитывается на **продвинутом** уровне, если студент при ответе на вопросы проводит сравнительный анализ подходов, проводит комплексный анализ, выявляет проблемы, предлагает механизмы решения, способен представить количественные характеристики определенных процессов, приводит конкретные примеры из практики, не допускает ошибок и способен обосновать выбор метода решения задачи, оценка составляет 17-20 баллов.

3. Шкала оценки

Зачет считается сданным, если сумма баллов по всем заданиям билета оставляет не менее 10 баллов из 20 возможных.

В общей оценке по дисциплине баллы за зачет учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, приведенными в рабочей программе дисциплины.

4. Задачи к зачету по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов»

1. Расчет химического равновесия

1.1. Для обратимой реакции $2 \text{NH}_3 = \text{N}_2 + 3 \text{H}_2$ при атмосферном давлении вывести формулы для расчета парциальных давлений компонент смеси от степени превращения NH_3 , если исходная смесь содержит только NH_3 .

Зная константу равновесия K_p , найти равновесную степень превращения NH_3 .

1.2. Для обратимой реакции $2 \text{HCl} = \text{H}_2 + \text{Cl}_2$ при атмосферном давлении вывести формулы для расчета парциальных давлений компонент смеси от степени превращения HCl , если исходная смесь содержит только HCl .

Зная константу равновесия K_p , записать уравнение для расчета равновесных парциальных давлений компонент смеси и найти равновесную степень превращения HCl .

1.3. Для обратимой реакции $\sum \nu_i A_i = 0$ вывести формулы для расчета числа молей каждого компонента смеси от степени превращения реагента с номером j , если в начальный момент времени количество молей каждого компонента было N_{i0} .

1.4. Доказать, что для реакции $\text{SO}_2 + 0.5 \text{O}_2 = \text{SO}_3$ справедливо соотношение

$$x = \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2} + p_{\text{SO}_3}}, \text{ где } x - \text{степень превращения } \text{SO}_2, p_{\text{SO}_2} \text{ и } p_{\text{SO}_3} - \text{парциальные давления } \text{SO}_2$$

и SO_3 . Предполагается, что исходная смесь SO_3 не содержит.

2. Расчет характеристик циклонов при очистке газа от пыли

2.1. Имеется пыль с плотностью функции распределения массы пыли по размерам частиц $f(x) = 2x/x_0^2$, где x_0 – константа, $0 < x < x_0$. Запыленный газ подается в циклон с функцией фракционного улавливания пыли $g(x) = x/x_0$. Определить степень очистки газа.

2.2. Имеется пыль с равномерным распределением частиц по размерам. Размер частиц пыли x меняется в пределах $0 < x < x_0$. Запыленный газ подается в циклон с функцией фракционного улавливания пыли $g(x) = x/(a + x)$, где x_0 и a – константы. Определить степень очистки газа.

2.3. Имеется пыль с плотностью функции распределения массы пыли по размерам частиц $f(x) = 2x/x_0^2$, где x_0 – константа, $0 < x < x_0$. Определить средний размер пыли, интегральную функцию распределения и медиану.

3. Математическое описание процессов разделения

3.1. Содержание золота в золотосодержащем песке составляет 1 г/т. После обогащения песка был получен концентрат с содержанием золота 100 г/т. Выход концентрата составил 0.9 %. Определить эффективность обогащения золотосодержащего песка.

3.2. Содержание металла в руде составляет 10 г/т. После обогащения руды был получен концентрат с содержанием металла 100 г/т. Выход концентрата составил 5 %. Определить эффективность обогащения руды.

3.3. Из 1 т смеси песка и магнетита с содержанием магнетита 100 г/т с помощью магнитного сепаратора извлекли 95 г магнетита. Определить эффективность обогащения.

4. Расчет химических процессов в изотермических реакторах

4.1. Расход реакционной смеси Q . Имеется два одинаковых РИП объемом V каждый. Протекает реакция первого порядка. Как лучше расположить реакторы последовательно или параллельно, чтобы достичь максимальную конверсию?

4.2. Реакция первого порядка проводится в двух последовательно установленных РИП. Показать, что результат не изменится при перестановке реакторов.

4.3. Реакция первого порядка проводится в двух последовательно установленных РИП. Суммарный объем реакторов фиксирован. При каком соотношении объемов реакторов конверсия будет максимальной?

4.4. Реакция $A+B \rightarrow C$ протекает в газовой фазе при постоянных P и T со скоростью $r = kC_A C_B$, где C_A и C_B – концентрации реагентов. При каком отношении реагентов в исходной смеси скорость реакции будет максимальной?

4.5. Реакцию первого порядка $A \rightarrow B$ исследовали в реакторе с временем контакта τ и начальной концентрации реагента c_0 . Концентрации реагента на выходе реактора составила c_1 . Рассчитать константу скорости реакции при проведении процесса в РИП и РИВ.

5. Расчет химических процессов в адиабатических реакторах

5.1. В реакторе закрытого типа протекает реакция $A \rightarrow B$. Известно число молей каждого компонента в начальный момент N_{A0} и N_{B0} , теплота реакции q и удельная (на 1 моль) теплоемкость смеси c_p . В некоторый момент времени число молей реагента стало N_A . Найти на сколько градусов нагреется смесь.

5.2. В реакторе закрытого типа протекает реакция $A \rightarrow B$. Известно число молей каждого компонента в начальный момент N_{A0} и N_{B0} , теплота реакции q и удельная (на 1 моль) теплоемкость смеси c_p . В некоторый момент времени конверсия реагента равнялась x . Найти на сколько градусов нагреется смесь.

5.3. В реакторе закрытого типа протекает реакция $A+B \rightarrow C+D$. Исходная смесь состоит из реагентов в стехиометрическом соотношении ($N_{A0} = N_{B0} = 1$), теплота реакции q и удельная (на 1 моль) теплоемкость смеси c_p . В некоторый момент времени смесь нагрелась на ΔT градусов. Найти какая часть реагентов вступила в реакцию.

6. Расчет процессов получения НВУ из метана

6.1. В реактор поместили 1 г катализатора и подали метан с расходом 110 нл/ч. Объемная доля водорода на выходе реактора составила 30 %. Рассчитать скорость образования углерода.

6.2. В реактор поместили 1 г катализатора и подали метан с расходом 110 нл/ч. Объемная доля метана на выходе реактора составила 70 %. Рассчитать скорость образования углерода.

6.3. Доказать, что для реакции $\text{CH}_4 = 2 \text{H}_2 + \text{C}$ справедливо соотношение $x = \frac{p_{\text{H}_2}}{p_{\text{H}_2} + 2 p_{\text{CH}_4}}$,

где x – степень превращения CH_4 , p_{H_2} и p_{CH_4} – парциальные давления H_2 и CH_4 . Предполагается, что исходная смесь содержит CH_4 и N_2 .

7. Расчет химических процессов в реакторах с рециркуляцией потока

7.1. Дана реакция $A \rightarrow B$ со скоростью реакции $r(c)$, где c – концентрация реагента A . Показать, что для реактора идеального перемешивания рециркуляция потока не влияет на концентрацию реагента на выходе реактора.

7.2. Показать, что для каталитического РИП рециркуляция не влияет на выходную концентрацию.

7.3. В РИП с катализатором массы m (г) подается газ, состоящий из реагента A , с объемным расходом Q (л/с). В реакторе идет реакция $A \rightarrow B$ со скоростью $r = k \cdot c$ (моль/с·г), где c – концентрация реагента A (моль/л), k – константа скорости реакции. На выходе реактора смесь разделяется и непрореагировавший реагент A подается на рециркуляцию. Определить кратность рециркуляции для стационарного режима. Всегда ли существует стационарное решение?

8. Расчет процессов в теплообменниках.

8.1. Емкость идеального перемешивания с раствором массой m и теплоемкостью s контактирует с термостатом через поверхность S с коэффициентом теплопередачи K . Температура термостата равна t_τ , температура раствора в начальный момент времени t_0 . Найти, как будет меняться со временем температура раствора.

8.2. Две емкости идеального перемешивания контактируют друг с другом через поверхность S с коэффициентом теплопередачи K . В каждой емкости находится раствор массой m с теплоемкостью s . В начальный момент температуры растворов равнялись T_{10} и T_{20} . Найти, как будут меняться со временем температуры каждого раствора.

8.3. Температура меняется вдоль теплообменника по экспоненциальному закону $t(\xi) = t_n e^{k\xi}$, $0 \leq \xi \leq 1$. Доказать, что среднее значение температуры можно вычислить по формуле среднего логарифмического $t_{\text{cp}} = (t_k - t_n) / \ln(t_k / t_n)$, где $t_k = t_n e^k$.

9. Гидродинамика центробежно-барботажного аппарата

9.1. Найти выражение для скорости всплытия пузыря газа в жидкости для ламинарного ($F_c = 6\pi R\mu v$) и турбулентного ($F_c = 2\xi\rho v^2\pi R^2$) режима всплытия, где v – скорость всплытия, R – радиус пузыря, μ – вязкость жидкости, ξ – коэффициент гидравлического сопротивления, ρ – плотность жидкости.

9.2. Цилиндрический слой жидкости, расположенный между радиусами r_1 и r_2 вращается с угловой скоростью ω . Найти перепад давления в слое, если плотность жидкости ρ .

Паспорт расчетно-графического задания (работы)

по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов», 5 семестр

1. Методика оценки

В рамках расчетно-графического задания (работы) по дисциплине студенты с использованием программы Mathcad должны выполнить расчет заданного химического процесса или по имеющимся экспериментальным данным определить кинетические параметры процесса.

При выполнении расчетно-графического задания (работы) студентам требуется найти метод решения поставленной задачи и реализовать его с использованием программы Mathcad.

Обязательные структурные части РГЗ:

1. Обоснование метода решения.
2. Проведение расчетов.

Каждая часть оценивается от 0 до 4 баллов.

Оцениваемые позиции:

При выполнении ргз оценивается умение вывода и решения уравнений, знание метода наименьших квадратов, умение выполнять расчеты с использованием программы Mathcad.

2. Критерии оценки

- Работа считается **не выполненной**, если выполнены не все части РГЗ(Р), неверно выведены уравнения или выбран неправильный метод расчета, оценка составляет менее 4 баллов.
- Работа считается выполненной **на пороговом** уровне, если части РГЗ(Р) выполнены формально: уравнения выведены верно, но выбран неправильный метод расчета, оценка составляет 4-5 баллов.
- Работа считается выполненной **на базовом** уровне, если анализ объекта выполнен в полном объеме, уравнения выведены верно, выбран правильный метод расчета, но в расчетах допущены ошибки, оценка составляет 6-7 баллов.
- Работа считается выполненной **на продвинутом** уровне, если анализ объекта выполнен в полном объеме, уравнения выведены верно, выбран правильный метод расчета, все расчеты выполнены верно, оценка составляет 8 баллов.

3. Шкала оценки

РГЗ считается сданным, если количество баллов за РГЗ оставляет не менее 4 баллов (из 8 возможных).

В общей оценке по дисциплине баллы за РГЗ(Р) учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, приведенными в рабочей программе дисциплины.

4. Примерный перечень тем РГЗ(Р)

Ниже приводятся тексты расчетно-графических заданий.

1. Рассчитать процесс получения нановолокнистого углерода из метана на катализаторе $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ в реакторе с движущимся слоем катализатора при прямоточном

движении газа и катализатора.

Исходные данные: расход метана 120 л/ч (при н.у.)
расход катализатора 0.074 г/ч
масса катализатора в реакторе 1 г
температура в реакторе 550 °С.

Построить зависимости степени превращения метана, давления водорода, относительной активности катализатора и содержания углерода на катализаторе от продольной координаты реактора. В качестве продольной координаты выбрать массу катализатора между входным и текущим сечениями реактора.

Процесс образования нановолокнистого углерода из метана на катализаторе Ni/Al₂O₃ описывается следующими уравнениями

$$\frac{dc}{dt} = r_m (p_{H_2}) a$$
$$\frac{da}{dt} = -k_a r_m^2 (p_{H_2}) c a$$

где

c - количество углерода на 1 г катализатора, г/г_к;

t - время, ч;

r_m - максимальная скорость образования углерода, г/(ч·г_к);

$$r_m (p_{H_2}) = k \frac{P - p_{H_2} - \frac{p_{H_2}^2}{K_p}}{(1 + k_H \sqrt{p_{H_2}})^2}$$

k - коэффициент, зависящий от температуры, $k = \exp(20.492 - \frac{104200}{RT})$;

T - температура, К;

R - универсальная газовая постоянная, $R = 8.314$ Дж/моль;

P - общее давление смеси, $P = 1$ бар;

p_{H_2} - парциальное давление водорода, бар;

K_p - константа равновесия, бар, $K_p = \exp(13.14 - \frac{91.2 \cdot 10^3}{RT})$;

k_H - коэффициент, зависящий от температуры, $k_H = \exp(\frac{163200}{RT} - 22.426)$;

a - относительная активность катализатора;

k_a - коэффициент, зависящий от температуры, $k_a = \exp(\frac{135600}{RT} - 32.077)$;

2. Рассчитать процесс получения нановолокнистого углерода из метана на катализаторе Ni/Al₂O₃ в реакторе с движущимся слоем катализатора при противоточном движении газа и катализатора.

Исходные данные: расход метана 120 л/ч (при н.у.)
расход катализатора 0.13 г/ч
масса катализатора в реакторе 1 г
температура в реакторе 550 °С.

Построить зависимости степени превращения метана, давления водорода, относительной активности катализатора и содержания углерода на катализаторе от продольной координаты реактора. В качестве продольной координаты выбрать массу катализатора между входным и текущим сечениями реактора.

Процесс образования нановолокнистого углерода из метана на катализаторе Ni/Al₂O₃ описывается следующими уравнениями

$$\frac{dc}{dt} = r_m (p_{H_2}) a$$

$$\frac{da}{dt} = -k_a r_m^2 (p_{H_2}) c a$$

где

c - количество углерода на 1 г катализатора, г/г_к;

t - время, ч;

r_m - максимальная скорость образования углерода, г/(ч·г_к);

$$r_m (p_{H_2}) = k \frac{P - p_{H_2} - \frac{p_{H_2}^2}{K_p}}{(1 + k_H \sqrt{p_{H_2}})^2}$$

k - коэффициент, зависящий от температуры, $k = \exp(20.492 - \frac{104200}{RT})$;

T - температура, К;

R - универсальная газовая постоянная, $R = 8.314$ Дж/моль;

P - общее давление смеси, $P = 1$ бар;

p_{H_2} - парциальное давление водорода, бар;

K_p - константа равновесия, бар, $K_p = \exp(13.14 - \frac{91.2 \cdot 10^3}{RT})$;

k_H - коэффициент, зависящий от температуры, $k_H = \exp(\frac{163200}{RT} - 22.426)$;

a - относительная активность катализатора;

k_a - коэффициент, зависящий от температуры, $k_a = \exp(\frac{135600}{RT} - 32.077)$;

3. Рассчитать процесс получения нановолокнистого углерода из метана на катализаторе Ni/Al₂O₃ в реакторе с движущимся слоем катализатора при идеальном перемешивании по газу.

Исходные данные: расход метана 120 л/ч (при н.у.)

расход катализатора 0.053 г/ч

масса катализатора в реакторе 1 г

температура в реакторе 550 °С.

Построить зависимости содержания углерода от продольной координаты реактора. В качестве продольной координаты выбрать массу катализатора между входным и текущим сечениями реактора. Рассчитать степень превращения метана и давление водорода на выходе реактора.

Процесс образования нановолокнистого углерода из метана на катализаторе Ni/Al₂O₃ описывается следующими уравнениями

$$\frac{dc}{dt} = r_m (p_{H_2}) a$$

$$\frac{da}{dt} = -k_a r_m^2 (p_{H_2}) c a$$

где

c - количество углерода на 1 г катализатора, г/г_к;

t - время, ч;

r_m - максимальная скорость образования углерода, г/(ч·г_к);

$$r_m (p_{H_2}) = k \frac{P - p_{H_2} - \frac{p_{H_2}^2}{K_p}}{(1 + k_H \sqrt{p_{H_2}})^2}$$

k - коэффициент, зависящий от температуры, $k = \exp(20.492 - \frac{104200}{RT})$;

T - температура, К;

R - универсальная газовая постоянная, $R = 8.314$ Дж/моль;

P - общее давление смеси, $P = 1$ бар;

p_{H_2} - парциальное давление водорода, бар;

K_p - константа равновесия, бар, $K_p = \exp(13.14 - \frac{91.2 \cdot 10^3}{RT})$;

k_H - коэффициент, зависящий от температуры, $k_H = \exp(\frac{163200}{RT} - 22.426)$;

a - относительная активность катализатора;

k_a - коэффициент, зависящий от температуры, $k_a = \exp(\frac{135600}{RT} - 32.077)$;

4. Для реакции первого порядка $A \rightarrow B$ рассчитать и построить график зависимости безразмерной концентрации реагента от безразмерной продольной координаты реактора в реакторе с частичным продольным перемешиванием. Расчеты выполнить при $\lambda_0 = 1$ и $Pe = 0.1; 1; 10$. Для сравнения построить аналогичные графики для реакторов идеального вытеснения и идеального перемешивания.

Обозначения:

l - длина реактора;

S - площадь поперечного сечения реактора, $S = 1$;

x - продольная координата реактора;

ξ - безразмерная продольная координата, $\xi = \frac{x}{l}$;

c - концентрация реагента А;

c_0 - концентрация реагента А на входе в реактор;

y - безразмерная концентрация реагента А, $y = \frac{c}{c_0}$;

k - константа скорости реакции;

r - объемная скорость реакции, $r = kc$;

D - эффективный коэффициент диффузии продольного перемешивания;

u - скорость движения реакционной смеси в реакторе;

Pe - число Пекле, $Pe = \frac{ul}{D}$;

λ_0 - безразмерный параметр, $\lambda_0 = \frac{kl}{u}$.

Уравнения и граничные условия, описывающие процесс в реакторе с частичным продольным перемешиванием:

$$u \frac{dc}{dx} = -kc + D \frac{d^2c}{dx^2},$$

$$u(c_0 - c) = -D \frac{dc}{dx} \text{ при } x = 0, \quad \frac{dc}{dx} = 0 \text{ при } x = l \quad (\text{граничные условия Данквертса}).$$

Рекомендации:

1. Записать уравнения и граничные условия для реактора с продольным перемешиванием в безразмерном виде.
2. Получить аналитическое решение в безразмерном виде.
3. Построить графики безразмерной концентрации при $\lambda_0 = 1$ и $Pe = 0.1; 1; 10$. Для

сравнения построить аналогичные графики для реакторов идеального вытеснения и идеального перемешивания. Сделать выводы.

5. Для реакции первого порядка $A \rightarrow B$ процесс на плоском зерне катализатора описывается уравнением $D \frac{d^2 c}{dx^2} = kc$ с граничными условиями $c = c_0$ при $x = a$ и $x = -a$,

где

D – коэффициент диффузии;

c – концентрация реагента А;

c_0 – концентрация реагента А на границе зерна;

y – безразмерная концентрация реагента А, $y = \frac{c}{c_0}$;

x – продольная координата зерна;

a – полутолщина зерна.

ξ – безразмерная продольная координата, $\xi = \frac{x}{a}$;

k – константа скорости реакции;

ψ – параметр Тиле, $\psi = a \sqrt{\frac{k}{D}}$.

Задание:

Записать уравнения и граничные условия в безразмерном виде.

Рассчитать и построить графики зависимости безразмерной концентрации реагента от безразмерной продольной координаты при $\psi = 0.1, 1$ и 10 .

Расчеты выполнить двумя способами – путем аналитического и численного решения дифференциального уравнения.

6. Для реакции первого порядка $A \rightarrow B$ в реакторе идеального перемешивания закрытого типа при различных температурах получены экспериментальные данные зависимости безразмерной концентрации от времени и температуры, которые приведены в таблице. Определить методом наименьших квадратов энергию активации и предэкспоненциальный множитель для константы скорости реакции.

Обозначения:

c – концентрация реагента А;

c_0 – концентрация реагента А в начальный момент времени;

y – безразмерная концентрация реагента А, $y = \frac{c}{c_0}$;

t – время;

T – температура;

k – константа скорости реакции, $k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$;

k_0 – предэкспоненциальный множитель;

E – энергия активации;

R – универсальная газовая постоянная.

Таблица. Результаты измерения безразмерной концентрации реагента

		t, мин					
		0	1	2	3	4	5
T, °C	500	1	0.92	0.84	0.77	0.71	0.65
	520	1	0.88	0.77	0.68	0.60	0.52
	540	1	0.83	0.69	0.57	0.47	0.39
	560	1	0.77	0.59	0.45	0.34	0.26

	580	1	0.69	0.47	0.32	0.22	0.15
	600	1	0.60	0.35	0.21	0.13	0.08

7. Вещество состоит из двух компонент. Известно, что пиролиз каждого компонента протекает по реакции первого порядка с образованием только летучих веществ, причем одно вещество пиролизуется гораздо быстрее другого. Экспериментальные данные по зависимости массы образца (m) от времени (t) приведены в таблице.

t , мин	0	0.3	0.6	0.9	1.2	1.5	1.8	2.1	2.4	2.7	3.0
m , г	1	0.43	0.28	0.20	0.15	0.11	0.083	0.061	0.045	0.034	0.025

Найти состав образца и константы скорости реакций, используя метод наименьших квадратов.

8. Пиролиз вещества происходит согласно двум последовательным реакциям первого порядка. Первая реакция – разложение исходного образца с образованием летучих веществ и углистого остатка. Выход углистого остатка равен f . Вторая реакция – разложение углистого остатка с образованием только летучих веществ.

Экспериментальные данные зависимости массы образца от времени приведены в таблице

t , мин	0	1	2	3	5	7	11	15	26	40	60	80
m , мг	1.00	0.80	0.68	0.60	0.53	0.49	0.46	0.44	0.39	0.34	0.28	0.23

Найти константы скорости реакций и выход углистого остатка в первой реакции, используя метод наименьших квадратов.

9. Пиролиз образца протекает по реакции первого порядка с образованием только летучих веществ. В экспериментах измерялась масса образца в зависимости от температуры при скорости нагрева 3 К/мин. Экспериментальные данные зависимости массы образца от температуры приведены в таблице

T , К	500	520	533	545	555	565	570	577	585	590	595	600
m , мг	1.00	0.99	0.97	0.92	0.82	0.64	0.51	0.32	0.13	0.051	0.014	0.002

Найти энергию активации и предэкспоненциальный множитель константы скорости реакции, используя метод наименьших квадратов.

Рекомендация: получить зависимость массы образца от температуры в виде интеграла, решая исходное уравнение методом разделения переменных. Начальное приближение для энергии активации и предэкспоненциального множителя получить методом спрямляющих координат.

10. Пиролиз образца протекает по двум параллельным реакциям первого порядка. Первая реакция – разложение исходного образца с образованием летучих. Вторая реакция – разложение исходного образца с образованием углистого остатка. Экспериментальные данные зависимости массы образца от времени приведены в таблице

t , мин	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20
m , мг	1.00	0.86	0.74	0.64	0.56	0.49	0.44	0.40	0.36	0.33	0.31

Найти константы скорости реакций.

11. Биодизель (метиловые эфиры жирных кислот) получают путем переэтерификации триглицеридов растительных масел метанолом при температуре 60 °С с использованием гомогенного щелочного катализатора. При этом протекают три обратимые реакции

1. $T + S \leftrightarrow D + E$
2. $D + S \leftrightarrow M + E$
3. $M + S \leftrightarrow G + E$

где введены обозначения:

T – триглицерид,
D – диглицерид,
M – моноглицерид,
S – метиловый спирт,
E – метиловый эфир,
G – глицерин.

Известны константы равновесия для каждой реакции:

$$K1 = 2 \quad K2 = 0.3 \quad K3 = 22$$

Считая, что реакции протекают без изменения объема, и известен исходный состав смеси – 1 моль триглицерида и 6 молей метанола, найти равновесный состав смеси и конверсию триглицеридов. Построить зависимость количества эфира от количества метанола при изменении последнего от 3 до 30 молей.

12. На поверхность тела нанесли катализатор ИКУ-59-1 с поверхностной плотностью 0.2 г/м^2 . Тело нагрели до температуры 550°C и поместили в среду метана при атмосферном давлении. Считая плотность образовавшегося НВУ равной 1 г/см^3 , рассчитать зависимость толщины пленки НВУ от времени.

Уравнения кинетической модели образования НВУ:

$$\begin{aligned} \frac{dc}{dt} &= r_m a & k &= \exp\left(20.492 - \frac{104200}{RT}\right) \\ \frac{da}{dt} &= -k_a r_m^2 c a & K_p &= \exp\left(13.14 - \frac{91200}{RT}\right) \\ r_m &= k \frac{p_{CH_4} - \frac{p_{H_2}^2}{K_p}}{(1 + k_H \sqrt{p_{H_2}})^2} & k_H &= \exp\left(\frac{163200}{RT} - 22.426\right) \\ & & k_a &= \exp\left(\frac{135600}{RT} - 32.077\right) \end{aligned}$$

13. Результаты газификации образца биомассы углекислым газом при температуре 800°C приведены в таблице

Таблица. Зависимость конверсии (x) от времени (t).

t, мин	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
x, %	0	1	3.5	6	8	10	13.2	17	20	22.5	25.8	28

Известно, что данная зависимость описывается следующим уравнением (модель случайных пор)

$$\frac{dx}{dt} = k(1-x)\sqrt{1-\psi \ln(1-x)}$$

где k и ψ – параметры модели.

Найти значения параметров модели, используя метод наименьших квадратов.

Рекомендации:

1. Методом разделения переменных решить дифференциальное уравнение.
2. Найти спрямляющие координаты для оценки k и ψ .

14. В реакторе идеального вытеснения исследовали реакцию первого порядка при различных температурах и одном времени контакта. Результаты зависимости конверсии от температуры приведены в таблице

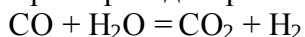
T, °C	190	200	205	212	215	217	220	230
x, %	25	40	50	62	66	72	75	95

Определить энергию активации.

15. Известен состав исходной газовой смеси (моль):

CO - 0.36, H₂ - 0.355, CO₂ - 0.055, H₂O - 1, N₂ - 0.23 .

При переходе к равновесию протекает реакция



Давление смеси равно 1 атм.

Известна зависимость константы равновесия от температуры (K) для обратной реакции (CO₂ + H₂ = CO + H₂O)

$$\log K_p = \frac{-2059}{T} + 1.5904 \cdot \log(T) - 1.817 \cdot 10^{-3} \cdot T + 5.65 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 - 8.24 \cdot 10^{-11} \cdot T^3 - 1.5313$$

1. Рассчитать степень превращения CO и равновесный состав смеси (мольные доли) при температуре 500 °С.

2. Рассчитать степень превращения CO в диапазоне температур 400 - 600 °С.

16. При исследовании испарения сферической частицы плотностью 1 г/см³ измерили зависимость массы частицы (m) от времени (t)

t, с	0	10	20	30	40	50
m, мг	4.19	2.42	1.24	0.52	0.16	0.02

Считая, что скорость испарения пропорциональна поверхности частицы, определить значение коэффициента пропорциональности.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ

ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ

ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Кафедра химии и химической технологии

РАСЧЕТНО-ГРАФИЧЕСКАЯ РАБОТА

по дисциплине: *«Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов»*

Выполнил(а):

Студент(ка) гр. КХ-501, МТФ

Иванова С.А.

«___» _____ 2017 г.

Проверил:

к.т.н., доцент

Заварухин С.Г.

«___» _____ 2017 г.

Новосибирск

2017

Паспорт практического занятия (ПЗ)

по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов», 5 семестр

1. Методика оценки

Оценка практического занятия проводится в письменной форме, по билетам. Билет содержит одну задачу, относящуюся к теме ПЗ. Задача оценивается в диапазоне от 0 до 4 баллов. Список тем и задач приводится ниже.

Пример билета для оценки ПЗ

Для обратимой реакции $2 \text{HCl} = \text{H}_2 + \text{Cl}_2$ при атмосферном давлении вывести формулы для расчета парциальных давлений компонент смеси от степени превращения HCl , если исходная смесь содержит только HCl .

Зная константу равновесия K_p , записать уравнение для расчета равновесных парциальных давлений компонент смеси и найти равновесную степень превращения HCl .

2. Критерии оценки

- ПЗ выполнено **неудовлетворительно**, если студент при ответе на вопросы не дает определений основных понятий, не способен показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи допускает принципиальные ошибки, оценка составляет менее *18 баллов*.
- ПЗ выполнено на **пороговом** уровне, если студент при ответе на вопросы дает определение основных понятий, может показать причинно-следственные связи явлений, при решении задачи допускает непринципиальные ошибки, например, вычислительные, оценка составляет *18-24 балла*.
- ПЗ выполнено на **базовом** уровне, если студент при ответе на вопросы формулирует основные понятия, законы, дает характеристику процессов, явлений, проводит анализ причин, условий, может представить качественные характеристики процессов, не допускает ошибок при решении задачи, оценка составляет *25-30 баллов*.
- ПЗ выполнено на **продвинутом** уровне, если студент при ответе на вопросы проводит сравнительный анализ подходов, проводит комплексный анализ, выявляет проблемы, предлагает механизмы решения, способен представить количественные характеристики определенных процессов, приводит конкретные примеры из практики, не допускает ошибок и способен обосновать выбор метода решения задачи, оценка составляет *31-36 баллов*.

3. Шкала оценки

ПЗ считается сданным, если количество баллов за задачу оставляет не менее 2 баллов (из 4 возможных).

В общей оценке по дисциплине баллы за ПЗ учитываются в соответствии с правилами

балльно-рейтинговой системы, приведенными в рабочей программе дисциплины.

4. Задачи для оценки ПЗ по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов»

1. Расчет химического равновесия

1.1. Для обратимой реакции $2 \text{NH}_3 = \text{N}_2 + 3 \text{H}_2$ при атмосферном давлении вывести формулы для расчета парциальных давлений компонент смеси от степени превращения NH_3 , если исходная смесь содержит только NH_3 .

Зная константу равновесия K_p , найти равновесную степень превращения NH_3 .

1.2. Для обратимой реакции $2 \text{HCl} = \text{H}_2 + \text{Cl}_2$ при атмосферном давлении вывести формулы для расчета парциальных давлений компонент смеси от степени превращения HCl , если исходная смесь содержит только HCl .

Зная константу равновесия K_p , записать уравнение для расчета равновесных парциальных давлений компонент смеси и найти равновесную степень превращения HCl .

1.3. Для обратимой реакции $\sum \nu_i A_i = 0$ вывести формулы для расчета числа молей каждого компонента смеси от степени превращения реагента с номером j , если в начальный момент времени количество молей каждого компонента было N_{i0} .

1.4. Доказать, что для реакции $\text{SO}_2 + 0.5 \text{O}_2 = \text{SO}_3$ справедливо соотношение $x = \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2} + p_{\text{SO}_3}}$, где x – степень превращения SO_2 , p_{SO_2} и p_{SO_3} – парциальные давления SO_2

и SO_3 . Предполагается, что исходная смесь SO_3 не содержит.

2. Расчет характеристик циклонов при очистке газа от пыли

2.1. Имеется пыль с плотностью функции распределения массы пыли по размерам частиц $f(x) = 2x/x_0^2$, где x_0 – константа, $0 < x < x_0$. Запыленный газ подается в циклон с функцией фракционного улавливания пыли $g(x) = x/x_0$. Определить степень очистки газа.

2.2. Имеется пыль с равномерным распределением частиц по размерам. Размер частиц пыли x меняется в пределах $0 < x < x_0$. Запыленный газ подается в циклон с функцией фракционного улавливания пыли $g(x) = x/(a + x)$, где x_0 и a – константы. Определить степень очистки газа.

2.3. Имеется пыль с плотностью функции распределения массы пыли по размерам частиц $f(x) = 2x/x_0^2$, где x_0 – константа, $0 < x < x_0$. Определить средний размер пыли, интегральную функцию распределения и медиану.

3. Математическое описание процессов разделения

3.1. Содержание золота в золотосодержащем песке составляет 1 г/т. После обогащения песка был получен концентрат с содержанием золота 100 г/т. Выход концентрата составил 0.9 %. Определить эффективность обогащения золотосодержащего песка.

3.2. Содержание металла в руде составляет 10 г/т. После обогащения руды был получен концентрат с содержанием металла 100 г/т. Выход концентрата составил 5 %. Определить эффективность обогащения руды.

3.3. Из 1 т смеси песка и магнетита с содержанием магнетита 100 г/т с помощью магнитного сепаратора извлекли 95 г магнетита. Определить эффективность обогащения.

4. Расчет химических процессов в изотермических реакторах

4.1. Расход реакционной смеси Q . Имеется два одинаковых РИП объемом V каждый. Протекает реакция первого порядка. Как лучше расположить реакторы последовательно или параллельно, чтобы достичь максимальную конверсию?

4.2. Реакция первого порядка проводится в двух последовательно установленных РИП. Показать, что результат не изменится при перестановке реакторов.

4.3. Реакция первого порядка проводится в двух последовательно установленных РИП. Суммарный объем реакторов фиксирован. При каком соотношении объемов реакторов конверсия будет максимальной?

4.4. Реакция $A+B \rightarrow C$ протекает в газовой фазе при постоянных P и T со скоростью $r = kC_A C_B$, где C_A и C_B – концентрации реагентов. При каком отношении реагентов в исходной смеси скорость реакции будет максимальна?

4.5. Реакцию первого порядка $A \rightarrow B$ исследовали в реакторе с временем контакта τ и начальной концентрации реагента c_0 . Концентрации реагента на выходе реактора составила c_1 . Рассчитать константу скорости реакции при проведении процесса в РИП и РИВ.

5. Расчет химических процессов в адиабатических реакторах

5.1. В реакторе закрытого типа протекает реакция $A \rightarrow B$. Известно число молей каждого компонента в начальный момент N_{A0} и N_{B0} , теплота реакции q и удельная (на 1 моль) теплоемкость смеси c_p . В некоторый момент времени число молей реагента стало N_A . Найти на сколько градусов нагреется смесь.

5.2. В реакторе закрытого типа протекает реакция $A \rightarrow B$. Известно число молей каждого компонента в начальный момент N_{A0} и N_{B0} , теплота реакции q и удельная (на 1 моль) теплоемкость смеси c_p . В некоторый момент времени конверсия реагента равнялась x . Найти на сколько градусов нагреется смесь.

5.3. В реакторе закрытого типа протекает реакция $A+B \rightarrow C+D$. Исходная смесь состоит из реагентов в стехиометрическом соотношении ($N_{A0} = N_{B0} = 1$), теплота реакции q и удельная (на 1 моль) теплоемкость смеси c_p . В некоторый момент времени смесь нагрелась на ΔT градусов. Найти какая часть реагентов вступила в реакцию.

6. Расчет процессов получения НВУ из метана

6.1. В реактор поместили 1 г катализатора и подали метан с расходом 110 нл/ч. Объемная доля водорода на выходе реактора составила 30 %. Рассчитать скорость образования углерода.

6.2. В реактор поместили 1 г катализатора и подали метан с расходом 110 нл/ч. Объемная доля метана на выходе реактора составила 70 %. Рассчитать скорость образования углерода.

6.3. Доказать, что для реакции $CH_4 = 2 H_2 + C$ справедливо соотношение $x = \frac{p_{H_2}}{p_{H_2} + 2 p_{CH_4}}$,

где x – степень превращения CH_4 , p_{H_2} и p_{CH_4} – парциальные давления H_2 и CH_4 . Предполагается, что исходная смесь содержит CH_4 и N_2 .

7. Расчет химических процессов в реакторах с рециркуляцией потока

7.1. Дана реакция $A \rightarrow B$ со скоростью реакции $r(c)$, где c – концентрация реагента A . Показать, что для реактора идеального перемешивания рециркуляция потока не влияет на концентрацию реагента на выходе реактора.

7.2. Показать, что для каталитического РИП рециркуляция не влияет на выходную концентрацию.

7.3. В РИП с катализатором массы m (г) подается газ, состоящий из реагента A , с объемным расходом Q (л/с). В реакторе идет реакция $A \rightarrow B$ со скоростью $r = k \cdot c$ (моль/с·г), где c – концентрация реагента A (моль/л), k – константа скорости реакции. На выходе реактора смесь разделяется и непрореагировавший реагент A подается на рециркуляцию. Определить кратность рециркуляции для стационарного режима. Всегда ли существует стационарное решение?

8. Расчет процессов в теплообменниках.

8.1. Емкость идеального перемешивания с раствором массой m и теплоемкостью c контактирует с термостатом через поверхность S с коэффициентом теплопередачи K . Температура термостата равна t_r , температура раствора в начальный момент времени t_0 . Найти, как будет меняться со временем температура раствора.

8.2. Две емкости идеального перемешивания контактируют друг с другом через поверхность S с коэффициентом теплопередачи K . В каждой емкости находится раствор массой m с теплоемкостью c . В начальный момент температуры растворов равнялись T_{10} и

Т₂₀. Найти, как будут меняться со временем температуры каждого раствора.

8.3. Температура меняется вдоль теплообменника по экспоненциальному закону $t(\xi) = t_n e^{k\xi}$, $0 \leq \xi \leq 1$. Доказать, что среднее значение температуры можно вычислить по формуле среднего логарифмического $t_{cp} = (t_k - t_n) / \ln(t_k / t_n)$, где $t_k = t_n e^k$.

9. Гидродинамика центробежно-барботажного аппарата

9.1. Найти выражение для скорости всплытия пузыря газа в жидкости для ламинарного ($F_c = 6\pi R\mu v$) и турбулентного ($F_c = 2\xi\rho v^2\pi R^2$) режима всплытия, где v – скорость всплытия, R – радиус пузыря, μ – вязкость жидкости, ξ – коэффициент гидравлического сопротивления, ρ – плотность жидкости.

9.2. Цилиндрический слой жидкости, расположенный между радиусами r_1 и r_2 вращается с угловой скоростью ω . Найти перепад давления в слое, если плотность жидкости ρ .

Паспорт лабораторной работы (ЛР)

по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов», 5 семестр

1. Методика оценки

В рамках лабораторной работы по дисциплине студенты с использованием программы Mathcad должны выполнить расчет заданного химического процесса.

Оценка выполнения ЛР проводится путем проверки расчетов, выполненных с использованием программы Mathcad. Список тем ЛР приводится ниже.

Оцениваемые позиции:

При выполнении ЛР оценивается знание методики расчетов (уравнений и расчетных формул, оценка 0-4 балла) и умение выполнения расчетов и решения уравнений с использованием программы Mathcad (оценка 0-4 балла).

2. Критерии оценки

- Работа считается не выполненной, если выполнены не все части ЛР, неверно выполнены расчеты или неправильно использовались функции Mathcad, оценка составляет менее 18 баллов.
- Работа считается выполненной на пороговом уровне, если части ЛР выполнены формально: использовались нужные функции, но нарушены правила их применения, оценка составляет 18-24 балла
- Работа считается выполненной на базовом уровне, если ЛР выполнена в полном объеме, функции использовались верно, выбран правильный метод расчета, но в расчетах допущены ошибки, оценка составляет 25-30 баллов.
- Работа считается выполненной на продвинутом уровне, если ЛР выполнена в полном объеме, функции применялись верно, выбран правильный метод расчета, все расчеты выполнены верно, оценка составляет 31-36 баллов.

3. Шкала оценки

ЛР считается сданной, если количество баллов за ЛР оставляет не менее 2 баллов (из 4 возможных).

В общей оценке по дисциплине баллы за ЛР учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, приведенными в рабочей программе дисциплины.

4. Перечень тем ЛР по дисциплине «Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов»

Лабораторная работа № 1

"Анализ равновесной степени превращения метана для смеси, состоящей из метана, водорода и азота"

Цель работы. Расчет равновесных состава и степени превращения метана для газовой смеси, состоящей из метана, водорода и азота, при

варьировании температуры, давления и состава исходной смеси.

Обозначения и некоторые расчетные формулы.

a, b, c - объемные доли метана, водорода и азота в исходной газовой смеси;

$p_{CH_4}, p_{H_2}, p_{N_2}$ - парциальные давления метана, водорода и азота в смеси, атм;

P - давление смеси, атм;

T - температура, К;

R - универсальная газовая постоянная, $R = 8.314$ Дж/моль;

K_p - константа равновесия для реакции $CH_4 = 2H_2 + C$

$$K_p = \frac{p_{H_2}^2}{p_{CH_4}};$$

$$K_p = 5.088 \cdot 10^5 \exp\left(-\frac{9.12 \cdot 10^4}{RT}\right), \text{ атм.}$$

Задание 1.

Зная объемные доли метана, водорода и азота в исходной газовой смеси, вывести формулы для расчета объемных долей компонент смеси и изменения объема смеси в зависимости от степени превращения метана.

Задание 2.

Исходная газовая смесь содержит только метан. Рассчитать равновесные состав смеси и степень превращения метана при температуре 550 °С и давлении 1 атм.

Построить график зависимости степени превращения метана от температуры в диапазоне (200 - 1000) °С при давлении 1 атм.

Построить график зависимости степени превращения метана от давления в диапазоне (1 - 10) атм при температуре 550 °С.

Задание 3.

Исходная газовая смесь состоит из метана и водорода. Построить график зависимости степени превращения метана от объемной доли водорода в диапазоне (0 – 0.4) при температуре 550 °С и давлении 1 атм.

Задание 4.

Исходная газовая смесь состоит из метана и азота. Построить график зависимости степени превращения метана от объемной доли азота в диапазоне (0 – 0.4) при температуре 550 °С и давлении 1 атм.

Лабораторная работа № 2
"Расчет характеристик циклона СК-ЦН-34 при очистке
газа крекинг-установки ГК-3 от пыли"

Задание:

По заданным параметрам запыленного газа и циклона СК-ЦН-34 рассчитать геометрические размеры циклона, гидравлическое сопротивление, степень очистки газа и запыленность газа на выходе циклона. Расчет степени очистки газа выполнить двумя способами – путем вычисления интеграла и по точной формуле. Построить графики функции распределения массы пыли по размерам частиц и функции фракционного улавливания пыли в циклоне.

Исходные данные:

Расход газа $Q = 2400 \text{ м}^3/\text{ч}$

Плотность газа $\rho_{\text{г}} = 1.06 \text{ кг/м}^3$

Вязкость газа $\mu = 20.1 \cdot 10^{-6} \text{ Па} \cdot \text{с}$

Запыленность газа $c_{\text{вх}} = 10 \text{ г/м}^3$

Дисперсный состав пыли подчиняется логарифмически-нормальному распределению с параметрами $x_m = 16 \text{ мкм}$, $\lg \sigma = 0.25$

Плотность пыли $\rho_{\text{п}} = 2000 \text{ кг/м}^3$

Функция фракционного улавливания пыли в циклоне описывается интегралом вероятности с параметрами при стандартных условиях $x_{50}^c = 1.95 \text{ мкм}$, $\lg \sigma_1 = 0.308$

Коэффициент гидравлического сопротивления $\xi = 1050$

Рекомендуемая среднерасходная по сечению циклона скорость газа, $v = 1.7 \text{ м/с}$

Минимальный диаметр частиц пыли $x_{\text{min}} = 0.1 \text{ мкм}$

Максимальный диаметр частиц пыли $x_{\text{max}} = 1000 \text{ мкм}$

Лабораторная работа № 3
"Расчет оптимального режима работы циклона
при разделении дисперсного материала на два класса"

Имеется дисперсный материал (каменноугольная пыль) с плотностью частиц $\rho_{\text{п}} = 1400 \text{ кг/м}^3$. Известно, что распределение массы пыли по размерам частиц подчиняется логарифмически-нормальному распределению с параметрами $x_m = 15 \text{ мкм}$ и $\lg \sigma = 0,334$. Максимальный размер пыли $x_{\text{max}} = 1000 \text{ мкм}$.

Требуется разделить материал на два класса с граничным размером $x_r = 10 \text{ мкм}$.

Для разделения используется циклон ЦН–24, функция фракционного улавливания пыли которого описывается интегралом вероятности с параметрами при стандартных условиях $x_{50}^c = 8,5 \text{ мкм}$, $\lg \sigma_1 = 0,308$.

Диаметр циклона $D = 0,6 \text{ м}$, вязкость воздуха $\mu = 18,1 \cdot 10^{-6} \text{ Па}\cdot\text{с}$.

Определить при какой среднерасходной скорости газа в циклоне эффективность разделения материала максимальна.

Лабораторная работа № 4
"Расчет процесса окисления SO_2 на ванадиевом катализаторе в
изотермических реакторах идеального перемешивания и вытеснения"

1. Зная объемные доли SO_2 , O_2 и N_2 в исходной газовой смеси, вывести формулы для расчета объемных долей компонент смеси в зависимости от степени превращения SO_2 , предполагая, что протекает следующая реакция



2. Исходная газовая смесь состоит из SO_2 (7.58 об.%), O_2 (11.16 об.%) и N_2 (81.26 об.%). Рассчитать равновесную степень превращения SO_2 и равновесный состав смеси при $T = 500^\circ\text{C}$ и $P = 1 \text{ атм}$. Константа равновесия для вышеприведенной реакции равна $K_1 = 58.16 \text{ атм}^{-0.5}$.

3. В изотермический проточный реактор идеального перемешивания, содержащий 20 г катализатора ИК-1-4, подается газовая смесь (SO_2 – 7.58 %, O_2 – 11.16 %, N_2 – 81.26 об.%) с расходом 100 л/ч при $T = 500^\circ\text{C}$ и $P = 1 \text{ атм}$. Рассчитать степень превращения SO_2 и состав смеси на выходе реактора. Наблюдаемая скорость окисления SO_2 на ванадиевом катализаторе вычисляется по формуле

$$r_{\text{SO}_2} = k \frac{p_{\text{O}_2} p_{\text{SO}_2}}{p_{\text{SO}_2} + 0.8 p_{\text{SO}_3}} \left(1 - \left(\frac{p_{\text{SO}_3}}{K_1 p_{\text{SO}_2} \sqrt{p_{\text{O}_2}}} \right)^2 \right)$$

где r_{SO_2} – количество SO_2 (л), окисляемое на 1 г катализатора за 1 ч.

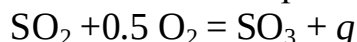
k – константа скорости реакции, л/(ч г_к атм), $k = 23.9 \text{ л/(ч г}_k \text{ атм)}$.

4. При тех же условиях газовая смесь подается в изотермический проточный реактор идеального вытеснения. Рассчитать степень превращения SO_2 и состав смеси на выходе реактора.

Лабораторная работа № 5
"Расчет процесса окисления SO₂ на ванадиевом катализаторе при
атмосферном давлении в адиабатических реакторах"

Исходные данные для расчета и некоторые расчетные формулы:

1. Температура исходной газовой смеси – 400 °С.
2. Состав исходной газовой смеси, об. доли: SO₂ – 0.07, O₂ – 0.11, N₂ – 0.82 .
3. Процесс проводится при давлении $P = 1$ атм.
4. Теплоемкость газовой смеси $c_p = 34$ Дж/(моль·К).
5. Окисление SO₂ до SO₃ протекает согласно реакции



где q – теплота реакции, $q = 97 \cdot 10^3$ Дж/моль.

6. Константа равновесия для вышеприведенной реакции K_1 (атм⁻¹)

рассчитывается на основе зависимости $\lg K_1 = \frac{4905}{T} - 4.6455$, где T –

температура, К.

7. Наблюдаемая скорость окисления SO₂ на ванадиевом катализаторе
вычисляется по формуле

$$r_{\text{SO}_2} = k \frac{P_{\text{O}_2} P_{\text{SO}_2}}{P_{\text{SO}_2} + 0.8 P_{\text{SO}_3}} \left(1 - \left(\frac{P_{\text{SO}_3}}{K_1 P_{\text{SO}_2} \sqrt{P_{\text{O}_2}}} \right)^2 \right)$$

где r_{SO_2} – количество SO₂ (л), окисляемое на 1 г катализатора за 1 ч,

k – константа скорости реакции, л/(ч·г_к·атм),

$P_{\text{SO}_2}, P_{\text{SO}_3}, P_{\text{O}_2}$ – парциальные давления SO₂, SO₃ и O₂ (атм).

8. Зависимость k от температуры имеет вид

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

где A – предэкспоненциальный множитель, $A = 1.285 \cdot 10^6$ л/(ч·г_к·атм),

E – энергия активации, $E = 70 \cdot 10^3$ Дж/моль·К,

R – универсальная газовая постоянная, $R = 8.314$ Дж/моль·К.

Задание 1. Рассчитать равновесные состав смеси, температуру и степень превращения SO₂ при адиабатическом переходе к равновесию.

Задание 2. В адиабатический проточный реактор идеального перемешивания, содержащий 20 г катализатора, подается газовая смесь с расходом 100 л/ч. Рассчитать степень превращения SO₂, состав и температуру смеси на выходе из реактора.

Задание 3. При тех же условиях газовая смесь подается в адиабатический проточный реактор идеального вытеснения. Рассчитать степень превращения SO₂, состав и температуру смеси на выходе из реактора.

Лабораторная работа № 6
"Расчет процесса получения нановолокнистого углерода из метана на катализаторе ИКУ-59-1 в изотермическом реакторе идеального перемешивания"

Обозначения:

p_{H_2} - парциальное давление водорода, бар;
 P - общее давление смеси, $P = 1$ бар;
 T - температура, К;
 R - универсальная газовая постоянная, $R = 8.314$ Дж/моль·К;
 t - время, ч;
 t_m - время работы реактора, ч;
 c - количество углерода на 1 г катализатора, г/г_к;
 c_m - количество образовавшегося углерода на 1 г катализатора в момент остановки реактора, г/г_к;
 a - относительная активность катализатора;
 r_m - максимальная скорость образования углерода, г/(ч·г_к);
 K_p - константа равновесия, бар;
 k_a, k, k_H - коэффициенты, зависящие от температуры;
 m_k - масса катализатора в реакторе, г;
 Q - расход метана, подаваемого в реактор, л/ч при н.у.;
 V - объем одного моля газа при н.у., $V = 22.4$ л/моль;
 M - масса одного моля углерода, $M = 12$ г/моль;
 j_c - поток углерода, поступающего с газом в реактор в пересчете на один грамм катализатора в реакторе, г/(ч·г_к);
 x - степень превращения метана;
 x_{cp} - средняя степень превращения метана;

Задание:

В реактор идеального перемешивания поместили 1 г катализатора и подали метан с расходом 120 л/ч, поддерживая температуру в реакторе 550 °С. Реактор остановили при $x = 0.01$. Рассчитать $c(t)$, $a(t)$, $x(t)$, t_m , c_m и x_{cp} .

Уравнения и некоторые расчетные формулы:

$$j_c x(p_{H_2}) = r_m(p_{H_2})a \quad (1)$$

$$\frac{dc}{dt} = r_m(p_{H_2})a \quad (2)$$

$$\frac{da}{dt} = -k_a r_m^2(p_{H_2})ca \quad (3)$$

$$c(0) = 0$$

$$a(0) = 1$$

$$j_c = \frac{QM}{Vm_k}$$

$$x(p_{H_2}) = \frac{p_{H_2}}{2P - p_{H_2}} \quad x_{cp} = \frac{c_m}{j_c \cdot t_m}$$

$$r_m(p_{H_2}) = k \frac{P - p_{H_2} - \frac{p_{H_2}^2}{K_p}}{(1 + k_H \sqrt{p_{H_2}})^2}$$

$$k = \exp\left(20.492 - \frac{104200}{RT}\right) \quad K_p = \exp\left(13.14 - \frac{91.2 \cdot 10^3}{RT}\right)$$

$$k_H = \exp\left(\frac{163200}{RT} - 22.426\right) \quad k_a = \exp\left(\frac{135600}{RT} - 32.077\right)$$

Лабораторная работа № 7

"Расчет химических процессов с рециркуляцией потоков на примере процесса $CH_4 + CO_2 = 2C + 2H_2O$ "

1. Исходная газовая смесь содержит 50 % CH_4 и 50 % CO_2 по объему. Рассчитать равновесный состав смеси при температуре 550 °С и атмосферном давлении ($P = 1$ бар), используя константы равновесия следующих химических реакций

$$CH_4 = 2 H_2 + C \quad K_1 = \frac{p_{H_2}^2}{p_{CH_4}} = 1.013$$

$$CO_2 + C = 2 CO \quad K_2 = \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}} = 0.02044$$

$$CO + H_2 = H_2O + C \quad K_3 = \frac{p_{H_2O}}{p_{CO} p_{H_2}} = 13.47$$

Рассчитать степени превращения CH_4 и CO_2 и коэффициент изменения объема.

2. Смесь (50 % CH_4 и 50 % CO_2) подают в равновесный реактор с температурой 550 °С. На выходе реактора H_2O и C отделяют, а остальные компоненты смеси (CH_4 , CO_2 , CO , H_2) возвращают на вход реактора.

Рассчитать состав смеси в реакторе и кратность рециркуляции.

3. Исходная газовая смесь содержит 45 % CH_4 , 45 % CO_2 и 10 % N_2 . Рассчитать равновесный состав смеси при температуре 550 °С и атмосферном давлении, степени превращения CH_4 и CO_2 и коэффициент изменения объема.

4. Смесь (45 % CH_4 , 45 % CO_2 , 10 % N_2) подают в равновесный реактор с температурой 550 °С. На выходе реактора H_2O и C отделяют, а 95 % оставшихся компонент смеси возвращают на вход реактора.

Рассчитать состав смеси в реакторе, степени превращения CH_4 и CO_2 и кратность рециркуляции.

Лабораторная работа № 8
Расчет теплообмена в теплообменниках различного типа

Обозначения:

c_1, c_2 – удельные теплоемкости теплоносителей (ТН), Дж/кг·К;

G_1, G_2 – массовые расходы ТН, кг/с;

$t_{1н}, t_{2н}$ – температуры ТН на входе в теплообменник (ТО), °С;

$t_{1к}, t_{2к}$ – температуры ТН на выходе ТО, °С;

S – поверхность теплообмена, м²;

K – коэффициент теплопередачи, Вт/м²·К;

Q – поток тепла, поступающий от горячего ТН к холодному, Дж/с.

Дано:

$$c_1 = 4.18 \cdot 10^3, \quad c_2 = 10^3$$

$$G_1 = 0.4, \quad G_2 = 1$$

$$t_{1н} = 10, \quad t_{2н} = 100$$

$$K = 10^4, \quad S = 1$$

Рассчитать $Q, t_{1к}$ и $t_{2к}$ для следующих моделей ТО:

1. Идеальное перемешивание по обоим ТН.
2. Идеальное перемешивание по холодному ТН и идеальное вытеснение по горячему.
3. Идеальное вытеснение по обоим ТН, прямоток.
4. Идеальное вытеснение по обоим ТН, противоток.

Для моделей 2, 3 и 4 построить профили температур.

Сделать вывод о наиболее эффективном теплообменнике.

Лабораторная работа № 9
"Расчет гидродинамических характеристик
центробежно-барботажного аппарата (ЦБА)"

1. Цель работы. Расчет скорости вращения газожидкостного слоя в ЦБА и гидравлического сопротивления ЦБА.
2. Схема аппарата и завихрителя показаны на рисунке.
3. Обозначения и основные расчетные формулы.

Параметры завихрителя:

R – радиус;

H – высота;

N – число щелей;

b – ширина щели;

θ – угол наклона щели к радиусу в горизонтальной плоскости;

S – суммарная площадь щелей в направлении, перпендикулярном движению газа, $S = NbH$ (предполагается, что высота щели

завихрителя совпадает с его высотой);

$\bar{s}$ - относительное проходное сечение, отношение площади щелей

к боковой поверхности завихрителя, $\bar{s} = \frac{S}{2\pi RH}$;

$R_{ц}$ - радиус центрального патрубка;

δ - толщина газожидкостного слоя, $\delta = R - R_{ц}$;

ρ_g - плотность газа;

$\rho_{жс}$ - плотность жидкости;

Q_g - объемный расход газа;

$V_{щ}$ - скорость газа в щелях завихрителя, $V_{щ} = Q_g/S$;

$V_{сл}$ - линейная скорость вращения газожидкостного слоя;

φ - среднее объемное газосодержание слоя, $\varphi = 0.7$;

c_f - эмпирический коэффициент трения газожидкостного потока о стенку, $c_f = 0.025$;

Δp - гидравлическое сопротивление;

A, B - эмпирические константы, $A = 0.4, B = 0.7$;

Безразмерные величины:

$$\bar{H} = \frac{H}{R} \quad \xi = \frac{R_{ц}}{R} \quad \bar{V}_{сл} = \frac{V_{сл}}{V_{щ}}$$

$$Eu = \frac{\Delta p}{\rho_g V_{щ}^2} \quad \alpha = \frac{\rho_g}{\rho_{жс}} \frac{3\bar{s}\bar{H}}{c_f (1 - \varphi) \sin \theta (1 - \xi^3)}$$

Расчетные формулы:

$$\bar{V}_{сл} = \frac{\sin \theta}{\frac{\xi}{2} + \sqrt{\frac{\xi^2}{4} + \frac{1}{\alpha}}}$$

$$Eu = A + B (1 - \varphi) \frac{\rho_{жс}}{\rho_g} \bar{V}_{сл}^{-2} \ln \left(\frac{1}{\xi} \right)$$

4. Параметры рассчитываемого аппарата.

$$R = 150 \text{ мм}$$

$$H = 150 \text{ мм}$$

$$N = 30$$

$$b = 4 \text{ мм}$$

$$\theta = 70^\circ$$

$$R_{ц} = 110 \text{ мм}$$

В аппарат подается воздух с $\rho_g = 1.2 \text{ кг/м}^3$ и вода с $\rho_{жс} = 10^3 \text{ кг/м}^3$.

5. Задание:

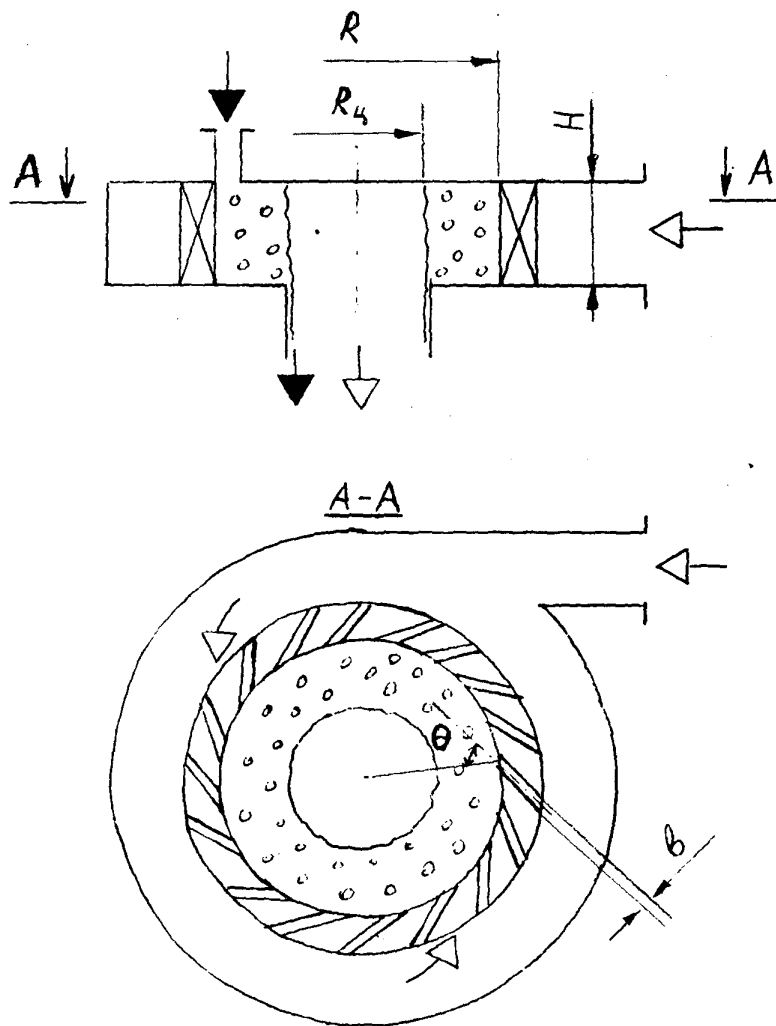
1) Рассчитать $V_{сл}$ и Δp при $Q_g = (1100 - 1500) \text{ м}^3/\text{ч}$.

Построить графики $V_{сл}(Q_g)$ и $\Delta p(Q_g)$.

2) Проанализировать как меняются $V_{сл}$ и Δp при $Q_g = 1300 \text{ м}^3/\text{ч}$ при изменении толщины газожидкостного слоя от 20 мм до 60 мм (δ меняется путем изменения $R_{ц}$ при постоянном R).

Построить графики $V_{сл}(\delta)$ и $\Delta p(\delta)$.

Схема
центробежно-барботажного аппарата



◁ - ГАЗ , ◼ - ЖИДКОСТЬ