



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

«УТВЕРЖДАЮ»
Декан ХТФ
_____ Погребенков В.М.
« ____ » _____ 2009г

МАКРОКИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И РАСЧЕТ РЕАКТОРОВ

Рабочая программа по направлению «Химическая технология и биотехнология»,
специальности 240802- Основные процессы химических производств и химическая
кибернетика

Факультет - химико-технологический (ХТФ)
Кафедра — химической технологии топлива и химической кибернетики

Курс - четвертый
Семестр - восьмой

Учебный план набора 2008 года

Распределение учебного времени

Лекции -	24 часа
Лабораторные работы -	24 часа
Всего аудиторных занятий -	48 часов
Самостоятельная (внеаудиторная) работа-	80 часов
Общая трудоемкость-	128 часов
Экзамен в восьмом семестре	



Предисловие

1. Рабочая программа составлена на основе ГОС ВПО по направлению 655400 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» утвержденного 27 марта 2000г., №220 ТЕХ/ДС, ОС ТПУ по специальности 240802- «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика».

РАССМОТРЕНА и ОДОБРЕНА на заседании кафедры химической технологии топлива от 31 августа 2009 года, протокол N 7 .

2. Разработчик доцент каф. ХТТ Н.В.Ушева

3. Зав. обеспечивающей кафедрой ХТТ проф. _____ Кравцов А.В.

4. Рабочая программа согласована с факультетом ; соответствует действующему учебному плану.

Зав. выпускающей кафедрой ХТТ проф. _____ Кравцов А.В.

Аннотация

МАКРОКИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И РАСЧЕТ РЕАКТОРОВ(МХПиРР)

240100 – ХТТ – ХТФ - 21

240100 (б) – 240802 (с)

Каф. ХТТ ХТФ

Доцент, к.х.н. Ушева Наталья Викторовна

Тел.(3822) 415443, E-mail: usheva@tpu.ru

Цель: подготовка специалистов, владеющих системой знаний и умений в области теории и практики моделирования химических процессов с учетом влияния переноса вещества и тепла при протекании химических реакций.

Содержание: кинетика химических реакций на макроуровне. Селективность химических реакций при диффузионном торможении. Оптимальные форма и размер зерна катализатора. Математическое моделирование гетерогенных химических процессов и расчет реакторов.

Курс 4 (8 сем. – экзамен)

Всего 128ч., в т.ч. Лк – 24ч., Лб – 24ч.

Рабочая программа по дисциплине «Макрокинетика химических процессов» предназначена для подготовки специалистов химико-технологического факультета по специальности 240802 «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика» и составлена в соответствии с государственным образовательным стандартом. Структура, содержание и оформление программы соответствует стандарту ТПУ «СТП ТПУ 2.0.0.1-02». Рабочая программа включает основные концепции и принципы построения математических моделей химико-технологических процессов (ХТП), с учетом влияния физических процессов переноса вещества и тепла при протекании химических реакций. Порядок чтения лекций, выполнения практических и лабораторных работ с указанием аудиторных часов, рейтинг-план и рекомендуемая литература приведены в конце рабочей программы.

Macrokinetics of chemical processes

The syllabus on discipline “Macrokinetics of chemical processes_” is design for preparation of the experts of chemical-technological faculty on the speciality 240802 “Basic processes of chemical manufactures and chemical cybernetics ” and is drawn up according to the state educational standard. The structure, content and design of the program correspond to the TPU standard “STI TPU 2.0.0.1-02 ”. The syllabus includes the basic concepts and principles of developing the mathematical models of chemical-technological processes (CTP) subject to physicochemical processes influence such as the substance and heat transfer and chemical reactions. The lectures, practical classes and laboratory works (with the instruction of contact hours), a rating - plan and recommended literature are at the end of .the syllabus.

The syllabus is designed by the assistant professor of chair “Chemical technology of fuel and chemical cybernetics” of chemical-technological faculty Ucheva N. V., E-mail: usheva @ ht. Tpu.ru

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Цели преподавания дисциплины

Дисциплина «Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов» является специальной дисциплиной и логическим продолжением дисциплины "Математическое моделирование ХТП" .

Целью преподавания дисциплины является:

- Освоить методологию решения задач по прикладной кинетике с оценкой степени внутри– и внешне диффузионного торможения химического процесса ;
- привить студентам навыки разработки математических моделей химических процессов с учетом влияния физических этапов переноса вещества и тепла;
- развить навыки использования численных методов решения задач макроскопической кинетики;
- привить навыки применения алгоритмов и методов анализа химических реакторов;
- закрепить опыт практического использования вычислительной техники и привить навыки применения компьютерных технологий при исследовании ХТП.

В результате изучения дисциплины «Макрокинетика химических процессов» студент должен **иметь представление:**

Федеральные требования (ФТ). О роли и месте методов математического моделирования при разработке, эксплуатации и исследовании реальных объектов химической технологии, о принципах, методах построения и областях применения математических моделей химических реакторов с учетом макрокинетических осложнений.

Региональные и вузовские требования (РВт). О современных методах исследования каталитических химических процессов, об оптимальных свойствах катализаторов, о возможности применения современных компьютерных технологий и пакетов прикладных программ при исследовании и анализе химических процессов осложненных переносом вещества и тепла.

Знать и уметь использовать:

ФТ.:

- методы разработки математических моделей типовых процессов химической технологии с учетом динамических свойств и саморегулирования в химических процессах;
- методы алгоритмизации расчета процессов и аппаратов химической технологии;
- методы разработки программных продуктов для инженерного оформления технологических процессов;

РВт.:

- методы разработки математических моделей каталитических химических процессов;
- методы построения математических моделей зерна катализатора ,слоя катализатора ;
- методы анализа и выбора оптимальной формы и размеров зерна катализатора;
- современные способы приготовления промышленных катализаторов;
- компьютерные технологии при исследовании и анализе различных типов химических реакторов.

Иметь опыт:

- решения конкретных макрокинетических задач при моделировании и оптимизации ХТП;
- практических расчетов при исследовании реальных химических процессов и реакторов;
- работы на современных компьютерах; практического использования современных программных средств, офисных и программных оболочек.

1.2. Задачи изложения и изучения дисциплины

Для достижения целей при совместной и индивидуальной познавательной деятельности студентов в овладении теоретическими знаниями и практическими умениями используется набор методического материала: лекции, методические разработки к проведению практических занятий, контрольные задания для проверки знаний студентов, методические указания к лабораторным работам, компьютерные моделирующие системы и другие методические разработки кафедры.

Важной частью дисциплины является лабораторный практикум, при прохождении которого студентами приобретаются практические навыки построения и исследования математических моделей каталитических процессов, расчета макрокинетических параметров химических реакций, моделирования химических реакторов.

2. Содержание теоретического раздела дисциплины (лекции 24 часа)

2.1. Введение.

Цели и задачи макрокинетики, ее роль в совершенствовании современных химических производств. История развития макрокинетики. Основные методы решения макрокинетических задач. Основные разделы макрокинетики. Процессы переноса в каталитических реакциях. (2 часа)

2.2. Кинетика химических реакций на макроуровне (8 часов).

Основы диффузионной кинетики. Понятия о макрокинетических областях протекания реакции.

Влияние диффузии на наблюдаемую скорость реакции.

Внешнедиффузионное торможение и разогрев внешней поверхности катализатора. Протекание экзотермической реакции первого порядка во внешнедиффузионной области.

Влияние различных факторов на протекание химической реакции во внешнедиффузионной области. Критерии влияния внешней диффузии.

Внутريدиффузионная область. Скорость реакций в пористых катализаторах. Модели пористой структуры катализатора.

Анализ процессов простой цилиндрической и сферической порых катализатора. Параметр Тиле и фактор эффективности.

Внутريدиффузионное торможение и внутренний разогрев поверхности катализатора.

Влияние внутреннедиффузионных факторов на скорость процессов. Критерии влияния диффузии веществ в порах катализатора. Переходные области. Внутренняя переходная область. Внешняя переходная область. Внешняя кинетическая область.

2.3. Селективность сложных реакций при диффузионном торможении процесса. Селективность последовательных и параллельных реакций во внешне- и внутреннедиффузионных областях (2 часа).

2.4. 2.5. Оптимальная форма и размеры катализатора. Фактор формы. Основные факторы, влияющие на гидравлическое сопротивление частиц катализатора. Оценка фактора эффективности для частиц различной формы. Влияние диффузионного торможения на дезактивацию катализатора. Соотношение между наблюдаемой скоростью и фактором эффективности при дезактивации катализатора. (2 часа).

2.6. Математическое моделирование гетерогенных химических процессов. (6 часов)

Типы промышленных катализаторов, способы получения.

Зернистый слой катализатора. Прохождение потока через зернистый слой. Анализ процессов в зернистом слое. Перенос вещества и тепла в продольном и поперечном направлении. Теплопроводность зернистого слоя. Системный анализ при моделировании каталитических химических реакторов.

Моделирование каталитических химических реакторов. Моделирование гетерогенных химических процессов. Уравнения тепловых и материальных балансов. Методы исследования на ЭВМ.

Моделирование реакторов с кипящим и движущимся слоем катализатора; жидкофазных химических реакторов.

2.7. Нестационарные процессы в химической технологии.(4 часа) Искусственно создаваемые нестационарные условия. Особенности моделирования нестационарных процессов. Анализ параметрической чувствительности при расчете химических реакторов

3. СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОГО РАЗДЕЛА

3.1. Перечень лабораторных работ (24 часа)

- 3.2.1. Исследование динамических режимов реакторов идеального вытеснения (4 часа).
- 3.2.2. Расчет эффективных коэффициентов диффузии при протекании гетерогенных химических реакций (4 часа).
- 3.2.3. Моделирование процессов в пористом зерне катализатора.(4 часа).
- 3.2.4. Моделирование химической реакции в зерне катализатора полидисперсной структуры(4часа).
- 3.2.5. Моделирование каталитических химических реакторов (4 часа).
- 3.2.6. Расчет химических реакторов с кипящим слоем катализатора (4 часа)

4. ПРОГРАММА САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Самостоятельная (внеаудиторная) работа студентов состоит в проработке лекционного материала, подготовке к практическим занятиям и лабораторным работам и в выполнении индивидуальных домашних заданий. Она составляет 80 часов и включает следующие пункты:

1. Текущая проработка теоретического материала и материала для самостоятельной аудиторной работы (36 часов)
2. Проработка методических указаний для выполнения лабораторных работ (24 часов)
3. Изучение физико–химических закономерностей, технологии и математических моделей нефтехимических процессов. Выполнение индивидуальных домашних заданий (20 часов).

Проработка лекционного материала контролируется предварительным опросом материала и выполнением самостоятельных работ по дисциплине. Подготовка к лабораторным работам контролируется проверкой отчетов и “защитой “ работ.

Эффективной формой самостоятельной работы является выполнение домашних заданий с элементами научных исследований.

5. ТЕКУЩИЙ И ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

При изучении дисциплины «Макрокинетика химических процессов» используется рейтинговая система оценка знаний студентов. В течение семестра студент может набрать 1000 баллов.

Максимальная рейтинговая оценка (общий рейтинг ОР) дисциплины составляет 1000 баллов. В нее входят: 1) рейтинг лекций (РЛ) ; 2) рейтинг лабораторных работ (РЛР); 3) рейтинг рубежного контроля (РРК); 4) рейтинг домашнего задания (РДЗ); 5) рейтинг экзамена (РЭ).

Лекционный рейтинг –это оценка за участие в лекционном занятии. Оценка лекции–6 баллов. Посетив все лекционные занятия и участвуя в них , студенты имеют максимальный РЛ 72 балла.

Рейтинг лабораторных работ (РЛР)- это оценки за лабораторные работы. Максимальная оценка одной работы 70-80 баллов. Выполняя 5 лабораторных работ, студенты имеют максимальный РЛР 450 баллов.

Рейтинг домашнего задания (РДЗ)- это оценка трех индивидуальных домашних заданий. Если задание решено правильно и сдано в срок, то оно оценивается в 30-35 баллов, максимальный РДЗ равен 100 баллов. Задания, сданные с опозданием, оцениваются меньшим количеством баллов.

В семестре студенты выполняют 3 рубежных контроля, максимальный РРК равен 150 баллов.

В конце семестра подсчитывается рейтинг семестра (РС), максимальное значение которого 800 баллов:

$$РС = РЛ + РЛР + РДЗ + РРК = 72 + 450 + 98 + 150 = 800 \text{ баллов.}$$

Студент допускается к сдаче экзамена, если он полностью выполнил учебный план и если его рейтинг (РС) не менее 450 баллов.

Максимальный рейтинг экзамена (РЭ) 200 баллов. Форма проведения экзамена – по билетам. Экзамен считается сданным, если его оценка не менее 100 баллов. Эта оценка суммируется с рейтингом семестра и подсчитывается общий рейтинг: $ОР = РС + РЭ$.

Общий рейтинг переводится в оценку по соотношению:

550 –700 баллов -	УДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО
701- 850 баллов	ХОРОШО
851-1000 баллов	ОТЛИЧНО

Если оценка экзамена менее 100 баллов, то экзамен считается не сданным, и студент теряет рейтинг семестра.

Рейтинг поощряет активных студентов **дополнительными баллами** за написание рефератов, досрочную сдачу домашнего задания, выполнение заданий повышенной сложности. Преподаватель имеет право выставлять студенту оценку «отлично» без экзамена, если рейтинг студента в семестре превышает 900 баллов.

Контролирующие материалы

В соответствии с рейтинговой системой при изучении курса «Макрокинетика химических процессов» проводится 3 рубежные контрольные работы. Рубежные контроли проводятся в часы лекционных занятий в письменной форме и включают задания по теоретическим разделам дисциплины с использованием практических заданий. Билеты рубежных контрольных работ составлены лектором Ушевой Н.В.

В контрольную работу № 1 входят основные понятия диффузионной кинетики, характеристика макрокинетических областей протекания химических реакций, математические модели зерна катализатора (60 баллов).

В контрольную работу № 2 входят составление материальных и тепловых балансов во внешне и внутренне–диффузионных областях, анализ селективности химических процессов с учетом влияния явлений переноса вещества и тепла. (60 баллов).

В контрольную работу №3 входят вопросы по разработке математических моделей слоя катализатора и анализа макрокинетических осложнений при моделировании различных типов химических реакторов (60 баллов).

Итоговый контроль изучения дисциплины - экзамен проводится в период экзаменационной сессии. Экзамен проводится в устном виде по билетам. Ушевой Н.В. составлены экзаменационные билеты по курсу, куда включены теоретические вопросы и задачи по дисциплине .

6.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В каталоге НТБ ТПУ имеется 4 наименования учебников и учебных пособий, которые могут быть использованы для изучения дисциплины «Макрокинетика химических процессов». Кроме того, на кафедре ХТТ имеется комплексное методическое обеспечение (КМО) дисциплины, которое включает:

1. Рабочую программу дисциплины , рейтинг-план и памятку.
2. Задания для самостоятельной аудиторной работы.
3. Задания для рубежных, итоговых контролей.
4. Индивидуальные домашние задания.

Компьютерными компонентами КМО являются:

5. Курс лекций «Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов».
6. Моделирующие системы расчета нефтехимических процессов, процессов первичной подготовки нефти и газа
7. Методические указания к лабораторным работам.
8. Лабораторный практикум «Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов»

7. ПЕРЕЧЕНЬ РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

7.1. Основная литература

7.1.1. Франк Каменецкий Д. А. Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – Долгопрудный: Интеллект, 2008. – 408 с.

7.1.2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.

7.1.3. Ушева Н.В., Кравцов А.В., Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов. Лабораторный практикум. – Томск., 2007. – 99 с.

7.1.4. Бесков В. С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов. – М.: Химия, 1991. – 252 с.

7.2. Дополнительная литература:

7.2.1. Ермакова А. Методы макрокинетики, применяемые при математическом моделировании химических процессов и реакторов. – Новосибирск.: Наука. 2001. – 188 с.

7.2.2. Жоров Ю.М. Кинетика промышленных органических реакций. – М.: Химия, 1989. – 384 с.

7.2.3. Турчак Л.И. Основы численных методов. – М.: Наука, 1987. – 120 с.

7.2.4. Бесков В.С. Общая химическая технология: Учебное пособие для вузов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 446 с.

7.3. Перечень методических указаний, наглядных пособий и других материалов.

7.3.1. Ушева Н.В., Мойзес О.Е. Моделирующая система расчета процессов гидрирования оксида углерода. – Томск, ПЭВМ. – 2005 г.

7.3.2. Ушева Н.В. Моделирующая система расчета процесса циклизации лёгких алканов. – Томск, ПЭВМ. – 2008 г.

7.3.3. Ушева Н.В., Кузьменко Е.А. Моделирование химических реакторов изомеризации n - пентана, пентановой и пентан - гексановой фракций прямогонного бензина. – Томск : ТПУ, 2003. – 15 с.

Приложение 1.

Примеры экзаменационных билетов по дисциплине «Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов»

Экзаменационный билет № 1

по дисциплине
факультет
курс

Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов
ХТ
4

1. Реальная температурная зависимость скорости химической реакции в различных областях протекания процесса.
2. Двухфазная модель реактора с кипящим слоем катализатора. (плотная фаза- идеальное перемешивание; пузырьковая фаза- идеальное вытеснение).
3. Составить материальный и тепловой балансы во внешне и внутреннедиффузионной области (зерно сферической частица). Описать численную реализацию модели. В – целевой продукт. Обосновать влияние явлений переноса вещества и тепла на селективность процесса.



Составил _____ Ушева Н.В.

Утверждаю: Зав. кафедрой _____ Кравцов А.В.

Декан ХТФ _____ Погребенков В.М.

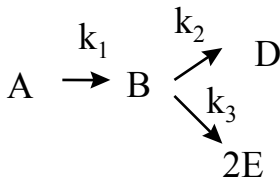
« _____ » _____ 2009 г.

Экзаменационный билет № 2

по дисциплине
факультет
курс

Макрокинетика химических процессов и расчет реакторов
ХТ
4

1. Квазигомогенные модели. Влияние формы зерна катализатора на скорость химического процесса.
2. Проведение каталитических процессов в нестационарных условиях в промышленности. Нестационарные математические модели химических реакторов.
3. Составить материальный и тепловой балансы во внешне и внутреннедиффузионной области (зерно катализатор цилиндрической формы). Описать численную реализацию модели. В – целевой продукт. Обосновать влияние явлений переноса вещества и тепла на селективность процесса.



Составил _____ Ушева Н.В.

Утверждаю: Зав. кафедрой _____ Кравцов А.В.

Декан ХТФ _____ Погребенков В.М.

« _____ » _____ 2009 г.