



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

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химико-технологического факультета

_____ Погребенков В. М.

" ____ " _____ 2009 г.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ
ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Рабочая программа для специальности 240802- Основные процессы химических производств и химическая кибернетика

Факультет - химико-технологический (ХТФ)

Кафедра — химической технологии топлива и химической кибернетики

курс - пятый

семестр – девятый

Учебный план приема 2008 г.

лекции - 36 часов.

лабораторные занятия - 54 часов

Всего аудиторных занятий – 90 час

Самостоятельная работа – 108 часов

Общая трудоемкость в семестре - 198 часов

Экзамен в девятом семестре

2009 г.



Предисловие

1. Рабочая программа составлена на основе ОС ВПО по направлению 240800 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» утвержденного 29 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

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ (МСМХП)

240802 (с)

Каф. ХТТ ХТФ

Доцент, к.х.н. Ушева Наталья Викторовна

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

Цель: формирование у обучающихся системы знаний и умений в области теории и практики моделирования многокомпонентных химических процессов, расчета промышленных химических реакторов и процессов промышленной подготовки нефти и газа.

Содержание: основные методы и принципы построения математических моделей многокомпонентных химико-технологических процессов, с элементами агрегирования и упорядочивания свойств и параметров системы. Разработка математических моделей и моделирование процессов нефтепереработки, нефтехимии и процессов первичной подготовки нефти и газов.

Курс 5 (9 сем. – экзамен)

Всего 198ч., в т.ч. Лк – 36ч., Лб – 54ч.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина "Моделирование многокомпонентных химических процессов" является дисциплиной специализации, в которой обобщаются и развиваются знания и умения полученные при изучении специальных дисциплин « Математическое моделирование ХТП», « Макрокинетика химических процессов», « Теоретические и технологические основы нефтехимических производств». Данная дисциплина является теоретической основой для решения вопросов по инженерному оформлению, математическому моделированию и оптимальной эксплуатации химико-технологических процессов и многокомпонентных массообменных процессов промышленной подготовки нефти и газа. Изучение данной дисциплины необходимо для понимания влияния физических этапов химических процессов на производительность и селективность катализаторов, оптимальные условия проведения процесса, освоения методов разработки математических моделей сложных многокомпонентных процессов, разработки и применения новейших химических технологий.

1.1. Целями преподавания дисциплины являются:

- Освоение методов построения математических моделей многокомпонентных процессов;
- Развитие навыков применения методов численного анализа химико-технологических процессов;
- Развитие навыков разработки и исследования на математических моделях сложных многокомпонентных промышленных химико-технологических процессов.
- Закрепление опыта практического использования вычислительной техники и получение навыков применения компьютерных технологий при исследовании ХТП.

В результате изучения дисциплины «Моделирование сложных многокомпонентных химических процессов» студент должен **иметь представление:**

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 и массообменных процессов.

Знать и уметь использовать:

- методы разработки математических моделей каталитических химических процессов;
- методы построения математических моделей зерна катализатора, слоя катализатора;
- методы построения математических моделей массообменных процессов промышленной подготовки нефти и газа;

Иметь опыт:

- моделировании и оптимизации процессов нефтепереработки и нефтехимии, промышленной подготовки нефти и газа;
- практических расчетов при исследовании химических процессов и реакторов;
- практического использования компьютерных моделирующих систем .

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, 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 кинетических моделей сложных каталитических, методов идентификации кинетических параметров, моделирования химических реакторов. Для закрепления теоретических знаний, в дисциплине предусмотрена самостоятельная познавательная деятельность студентов.

2. Содержание теоретического раздела дисциплины (лекции 36 часов)

2.1. Наименование тем и их содержание

Модуль 1

2.1.1. Роль математического моделирования в разработке и совершенствовании современных химических производств. История развития моделирования сложных химических процессов. Основные подходы и принципы построения математического описания многокомпонентных процессов: технологический, групповой, индивидуальный, комбинированный.

Методы построения кинетических моделей сложных химических реакций
Основные принципы построения кинетических моделей. Построение кинетических моделей стационарных реакций. Определение базиса стехиометрических уравнений. Методы определения уравнений скоростей химических реакций по маршрутам. Анализ механизмов сложных химических реакций. Кинетика многостадийных реакций. Форма кинетических уравнений.

2.1.2. Методы сокращения размерности математического описания: математическое агрегирование, упорядочивание системы по физико-химическим признакам. Агрегирование по характеристикам связей в молекулах, по термодинамическим параметрам, по кинетическим данным.

2.1.3. Агрегирование механизмов сложных химических реакций с использованием элементов лампинг – анализа. Анализ детального механизма и формирование совокупности реакций. Выбор и обоснование формы кинетических уравнений. Иерархическая структура построения математического описания многокомпонентных процессов.

2.1.4. Методы прикладной термодинамики при математическом моделировании химических процессов. Применение термодинамических методов при решении кинетических задач и расчете химических реакторов. Расчет равновесных составов на примере процесса изомеризации углеводородов.

2.1.5. Методы идентификации кинетических параметров многокомпонентных химических процессов. Методы расчёта кинетических констант, основанные на использовании экспериментальных данных. Оценка кинетических параметров многокомпонентных процессов в случае постоянства сохранения формы кинетического уравнения. Методы упорядочивания и закономерного изменения физико-химических свойств при оценке кинетических параметров. Автоматизированные методики оценки кинетических параметров многокомпонентных систем.

Модуль 2

2.1.6. Моделирование нефтехимических процессов.

Моделирование процесса циклизации лёгких алканов. Перспективы развития процесса. Превращение низших алканов на оксидных и металлооксидных катализаторах. Механизм и кинетика превращения лёгких алканов на цеолитных катализаторах. Особенности технологии. Построение кинетического описания. Разработка математической модели каталитического химического реактора.

Моделирование процесса гидрирования оксида углерода. Обоснование и выбор формы кинетических уравнений. Выбор типа реактора и разработка его математического описания. Исследование влияния параметров на выход целевых продуктов синтеза. Технология производства органических продуктов на основе синтез-газа.

Модуль 3

2.1.7. Моделирование процессов первичной подготовки нефти, газа и газового конденсата.

Сбор и подготовка нефти на промысле. Основные понятия и определения. Технологическая схема, система сбора и подготовки нефти и газа.

2.1.8. Сепарация. Ступени сепарации. Типы сепараторов, горизонтальные и вертикальные сепараторы. Основные секции в сепарационных аппаратах. Процессы сепарации. Расчет процесса сепарации с учетом коэффициентов эффективности. Пропускная способность сепаратора по нефти и газу. Методы расчета пропускной способности аппарата. Газовый фактор.

2.1.9. Основы процессов каплеобразования. Эффективность внутритрубной деэмульсации. Расчет диаметра капель. Гидродинамические каплеобразователи. Конструкции, основные параметры

2.1.10. Процессы отстаивания при промышленной подготовке нефти. Конструкции отстойной аппаратуры. Расчет скорости осаждения и остаточной обводненности. Подбор наиболее эффективных деэмульгаторов. Исследование сравнительной эффективности деэмульгаторов.

Модуль 4

2.1.11. Моделирование процессов первичной подготовки нефти

Технологические основы промышленной подготовки нефти. Унифицированные схемы промышленной подготовки нефти. Технология промышленной подготовки нефти месторождений Западной Сибири. Применение комплексных технологий, совмещенного и блочного оборудования при промышленной подготовке нефти.

2.1.12. Моделирование процессов подготовки газов и газовых конденсатов. Технологические схемы установок комплексной подготовки газов. Критерии качества при промышленной подготовке газа. Классификация продукции газовой промышленности. Требования к качеству товарной продукции газовой промышленности. Моделирование процессов деэтанализации и стабилизации газового конденсата.

Математическое моделирование и разработка технологических моделирующих систем процессов подготовки нефти и газа

3. СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОГО РАЗДЕЛА

3.1. Перечень лабораторных работ (54 часа)

3.1.1. Моделирование кинетики процесса циклизации легких алканов – 14 часов

3.1.2. Моделирование процесса циклизации легких алканов на цеолитных катализаторах – 8 часов

3.1.3. Моделирование процесса синтеза Фишера-Тропша – 8 часов

3.1.4. Моделирование процесса изомеризации пентан-гексановой фракции – 8 часов

3.1.5. Моделирование процессов промышленной подготовки газа и газового конденсата – 8 часов

3.1.6. Моделирование процессов промышленной подготовки нефти – 8 часов

4. ПРОГРАММА САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Самостоятельная (внеаудиторная) работа студентов состоит в изучении литературных источников, проработке лекционного материала, подготовки к лабораторным занятиям и выполнении индивидуальных домашних заданий. Она составляет 108 часов и включает следующие разделы:

1. Текущая проработка теоретического материала и материала для самостоятельной аудиторной работы (36 часов);
2. Проработка методических указаний для выполнения лабораторных работ (27 часов);
3. Выполнение индивидуальных домашних заданий (45 часов):

Разработка математических моделей, исследование физико-химических закономерностей и влияния технологических параметров для следующих многокомпонентных химических процессов:

- циклизации лёгких алканов;
- синтезов из CO и H₂
- каталитического риформинга;
- каталитического крекинга.
- изомеризации углеводородов
- сепарации нефти, газа и газовых конденсатов
- каплеобразования
- отстаивания
- первичной подготовки нефти

- первичной подготовки газа

При проведении исследований применяются информационно-моделирующие системы процессов нефтепереработки и промысловой подготовки нефти и газа, разработанные на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики.

Проработка лекционного материала контролируется предварительным опросом материала и выполнением самостоятельных работ по дисциплине. Выполнение лабораторных работ контролируется предварительным опросом, проверкой отчетов и “защитой” работ.

Эффективной формой самостоятельной работы является выполнение домашних заданий с элементами научных исследований, докладом и презентацией полученных результатов.

5. ТЕКУЩИЙ И ИТоговый КОНТРОЛЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

При изучении дисциплины «Моделирование многокомпонентных 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-8 баллов. Посетив все лекционные занятия и участвуя в них, студенты имеют максимальный РЛ - 72 балла.

Рейтинг лабораторных работ (РЛР)- это оценка за выполнение лабораторной работы, оформление, обсуждение результатов и защиту. Максимальная оценка лабораторных работ 388баллов.

В семестре студенты выполняют 2 рубежных контроля, максимальный РРК равен 100 баллов.

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

$$РС = РЛ + РЛР + РРК + РДЗ = 108 + 492 + 200 = 800 \text{ баллов.}$$

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.

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 «Моделирование многокомпонентных химических процессов» проводятся рубежные контрольные работы.

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.

6.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В каталоге НТБ ТПУ имеется 8 наименований учебников и учебных пособий, которые могут быть использованы для изучения дисциплины «Моделирование сложных многокомпонентных 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 и итоговых контролей.
4. Индивидуальные домашние задания.

Компьютерными компонентами КМО являются:

5. Информационно– моделирующие системы расчета нефтехимических процессов, процессов первичной подготовки нефти и газа
6. Методические указания к лабораторным работам.

7. ПЕРЕЧЕНЬ РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Основная литература

7.1. Кравцов А.В., Мойзес О.Е., Ушева Н.В., Фёдоров А.Ф. Математическое моделирование многокомпонентных химических процессов.-Томск, 2009.-108с.

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

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

Дополнительная литература:

7.4. Ахметов С.А. Моделирование и инженерные расчеты физико- химических свойств углеводородных систем. Учебное пособие для вузов.- Уфа: РИО РУНМЦ МО РБ, 2003.- 160 с.

7.5. Яблонский Г. С., Быков В. И., Горбань А. Н. Кинетические модели каталитических реакций.– Новосибирск.: Наука. 1983.–256 с.

7.6. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Компьютерный анализ технологических процессов. Новосибирск.: Наука, 1998.-212с.

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

7.8. Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. М.: Химия, 1978.-375с.

7.9. Химические вещества из угля//Под ред. Фальбе Ю..М.: Химия, 1980.-616с.

7.10. Жоров Ю.М. Изомеризация углеводородов. М: Химия, 1983.–301 с

7.11. Ермакова А. Методы прикладной термодинамики, применяемые при математическом моделировании химических процессов и реакторов. Новосибирск.: Институт катализа СО РАН, 2002.- 214 с.

7.12. Тронов В.П. Системы нефтесбора и гидродинамика основных технологических процессов. Казань: ФЭН, 2002.- 509с.

7.13. Эмирджанов Р.Т., Лемберанский Р.А. Основы технологических расчетов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Химия, 1989.-192с.

7.14. Байков Н.М., Позднышев Г.Н., Мансуров Р.И. Сбор и промысловая подготовка нефти , газа и воды. М.: Недра, 1981.-160с.

7.15. Тронов В.П. Промысловая подготовка нефти. М.: Наука, 1977.-271 с.

7.16. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Мойзес О.Е., Рейзлин В.И., Кузьменко Е.А. Информационно-моделирующая система технологии первичной подготовки нефти//Химическая промышленность .-1999.-№7.-с.50-54.

7.17. Иванов В.Г., Маслов А.С., Кравцов А.В., Ушева Н.В., Гавриков А.А. Информационно-моделирующая система технологии первичной подготовки нефти//Газовая промышленность .- 2003.июль-с.54-57.

7.18. Технология переработки природного газа и конденсата/Справочник. под ред. Мурина В.И. в 2 ч.-М.: ООО Недра-Бизнесцентр, 2002.- ч. 1.- 517 с.

7.19. Природный газ/Под ред. Р.С. Басби.-М.: Олимп-Бизнес, 2003.-240 с.

7.20. Паал З., Чичери Ж. Каталитические реакции циклизации углеводородов.- М.: Мир, 1988.- 264 с.

Перечень наглядных пособий, методических указаний, методических материалов к использованию технических средств обучения

- 7.21. Ушева Н.В. Моделирование кинетики процесса циклизации легких алканов на цеолитных катализаторах.- Томск: ТПУ , 2006. - 16 с.
- 7.22. Ушева Н.В. Моделирование процесса циклизации легких алканов на цеолитных катализаторах.- Томск: ТПУ , 2006. - 18 с.
- 7.23. Ушева Н.В. Моделирование процесса синтеза Фишера- Тропша.- Томск : ТПУ , 2005. - 25 с.
- 7.24. Ушева Н.В. Моделирование процесса изомеризации пентан-гесановой фракции.- Томск: ТПУ , 2005. - 16 с.
- 7.25. Ушева Н.В. Расчет химических реакторов с неподвижным слоем катализатора.- Томск: ТПУ , 2006. - 18 с.
- 7.26. Ушева Н.В. Моделирование процессов промышленной подготовки газа и газового конденсата.- Томск : ТПУ , 2007. -27 с.
- 7.27. Ушева Н.В. Моделирование процессов промышленной подготовки нефти.- Томск : ТПУ , 2007. -30 с.
- 7.28. Ушева Н.В., Мойзес О.Е. Моделирующая система расчета процессов гидрирования оксида углерода.- Томск, ПЭВМ. - 2004 г.
- 7.29. Ушева Н.В., Мойзес О.Е. Моделирующая система расчета процесса циклизации лёгких алканов. - Томск , ПЭВМ. - 2006г. 7.16.
- 7.30. Ушева Н.В. Технологическая моделирующая система расчета процессов первичной подготовки газа и газового конденсата. - Томск, ПЭВМ. - 2007г.
- 7.31. Ушева Н.В. Технологическая моделирующая система расчета процессов первичной подготовки нефти.– Томск , ПЭВМ .– 2006г.

Приложение 1

**Томский Политехнический Университет
Экзаменационный билет № 1**

по дисциплине « **Моделирование многокомпонентных химических процессов**», факультет ХТ 5 курс

1. Сформулировать основные принципы построения кинетических моделей сложных многокомпонентных химических реакций.
2. Моделирование процесса циклизации легких алканов.
3. Сепарация газа. Типы газосепараторов. Расчет процессов сепарации.

Составил доцент каф. ХТТ

Ушева Н.В.

Утверждаю: Зав. каф. ХТТ, проф.

Кравцов А.В.