

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 11.09.2023 12:57:13
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Врио проректора по учебной
и методической работе
_____ Б.В. Пекаревский
«21» апреля 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
**«Современные проблемы химии и химической
технологии»**

Направление подготовки
18.04.01 Химическая технология

Направленности программ магистратуры
18.04.01-01 **Химическая технология продуктов тонкого органического синтеза**
18.04.01-02 **Химическая технология синтетических биологически активных веществ**

Квалификация
Магистр

Форма обучения
очная

Факультет **химической и биотехнологии**
Кафедра **химической технологии органических красителей и фототропных соединений**

Санкт-Петербург
2021

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

| Должность | Подпись | Ученое звание, фамилия, инициалы |
|---------------|---------|-------------------------------------|
| Зав. кафедрой | | Рамш С.М. |

Рабочая программа дисциплины «Современные проблемы химии и химической технологии» обсуждена на заседании кафедры химической технологии органических красителей и фототропных соединений
протокол от «01» апреля 2021 г. № 4

Заведующий кафедрой

С.М. Рамш

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии
протокол от «20» апреля 2021 № 9

Председатель

М.В. Рутто

СОГЛАСОВАНО

| | | |
|---|--|------------------|
| Руководитель направления | | М.В. Рутто |
| Директор библиотеки | | Т.Н. Старостенко |
| Начальник методического отдела учебно-методического управления | | Т.И. Богданова |
| Начальник УМУ | | С.Н. Денисенко |

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----------|
| 1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы | 5 |
| 2 Место дисциплины в структуре образовательной программы | 6 |
| 3 Объем дисциплины..... | 6 |
| 4 Содержание дисциплины..... | 7 |
| 4.1 Разделы дисциплины и виды занятий..... | 7 |
| 4.2. Занятия лекционного типа | 9 |
| 4.3 Занятия семинарского типа..... | 11 |
| 4.3.1 Семинары, практические занятия | 11 |
| 4.3.2 Лабораторные занятия..... | 13 |
| 4.4 Самостоятельная работа обучающихся | 14 |
| 4.4.1 Вопросы для самостоятельного изучения | 14 |
| 4.4.2 Темы контрольных работ | 15 |
| 4.4.3 Темы индивидуальных творческих домашних заданий | 17 |
| 5 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине | 17 |
| 6 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации | 18 |
| 7 Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины | 20 |
| 8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины | 20 |
| 8.1. Интернет-ресурсы общего характера | 21 |
| 8.2. Интернет-ресурсы по химии и химической технологии | 21 |
| 9 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины..... | 27 |
| 10 Перечень информационных технологий и программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине..... | 32 |
| 10.1 Информационные технологии..... | 32 |
| 10.2 Программное обеспечение..... | 33 |
| 10.3. Базы данных и информационные справочные системы | 33 |
| 11 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине | 34 |
| 12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья | 36 |
| <i>Приложение № 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии»</i> | <i>37</i> |
| 1. Перечень компетенций и этапов их формирования..... | 37 |
| 2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания..... | 38 |
| 3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации | 40 |
| 3.1 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-3..... | 40 |
| 3.2 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4..... | 40 |
| 4. Контрольные вопросы по дисциплине, используемые при текущем контроле успеваемости (контрольные работы), и варианты индивидуальных творческих домашних заданий..... | 40 |
| 4.1 Вопросы контрольных работ | 40 |
| 4.2. Тестовые задачи, используемые при текущем контроле знаний студентов, и варианты индивидуальных творческих домашних заданий..... | 43 |

| | |
|---|----|
| 5. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций..... | 67 |
| <i>Приложение № 2. Пакет программ по курсу «Современные проблемы химии и химической технологии»</i> | 71 |

1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

| Код и наименование компетенции ¹ | Код и наименование индикатора достижения компетенции ² | Планируемые результаты обучения (дескрипторы) ³ |
|---|---|---|
| <p>ПК-3 для направленности 01 Разработка и сопровождение технологического процесса при производстве продуктов тонкого органического синтеза</p> <p>ПК-5 для направленности 02</p> | <p>ПК-3.1 для направленности 01 Разработка и внедрение технологического процесса для производства продуктов тонкого органического синтеза</p> <p>ПК-5.1 для направленности 02</p> | <p>Знать: основные методы оптимизации (ЗН-1).</p> <p>Уметь: использовать математические модели процессов, определять параметры процессов в промышленных аппаратах (У-1).</p> <p>Владеть: навыками определения оптимальных и рациональных технологических режимов работы оборудования (Н-1).</p> |
| <p>ПК-4 для направленности 01 Управление испытаниями продукции тонкого органического синтеза</p> <p>ПК-8 для направленности 02</p> | <p>ПК-4.3 для направленности 01 Руководство проведением работ по контролю производства продуктов тонкого органического синтеза</p> <p>ПК-8.1 для направленности 02</p> | <p>Знать: основы управления химическими производствами (ЗН-2).</p> <p>Уметь: применять методы и алгоритмы оптимизации, а также соответствующие пакеты прикладных программ для оптимизации задач исследования, проектирования и управления химическими производствами (У-2).</p> <p>Владеть: навыками одномерной и многомерной оптимизации для определения оптимальных условий проведения химико-технологических процессов, управления ими и их проектирования (Н-2).</p> |

¹ Содержание и номер компетенции в точности соответствует ФГОС ВО и отображается в матрице компетенций для конкретной дисциплины.

² Код индикатора присваивается руководителем направления подготовки, отображается в матрице компетенции и доводится разработчикам РПД. Повторение кодов индикаторов для конкретной компетенции, реализуемой разными дисциплинами, не допускается.

³ Дескрипторы переносятся из матрицы компетенций без смены формулировок.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина Б1.В.01/Б1.В.02 «Современные проблемы химии и химической технологии» принадлежит к числу дисциплин части В, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1 ООП магистратуры по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология. Изучается на 2 семестре I курса магистратуры.

Дисциплина базируется на следующих дисциплинах ООП бакалавриата по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, направленность «Химическая технология тонкого органического синтеза»:

Математика,
Физика,
Органическая химия,
Физическая химия,
Процессы и аппараты химической технологии,
Системный анализ химических технологий,
Системы управления химико-технологическими процессами,
Общая химическая технология,
Теория химико-технологических процессов органического синтеза.

Дисциплина Б1.В.01/Б1.В.02 «Современные проблемы химии и химической технологии» рассматривается как связующее звено между указанными математическими, естественнонаучными и профессиональными дисциплинами ООП бакалавриата – с одной стороны, и дисциплиной ООП магистратуры Б1.В.ДВ.02.01 «Прикладная органическая химия» – с другой.

Полученные в рамках изучения данной дисциплины знания будут необходимы студентам при изучении указанной дисциплины ООП магистратуры, а также при подготовке, выполнении и защите выпускной квалификационной работы (ВКР), при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских и производственно-технологических задач в будущей профессиональной деятельности.

3 Объем дисциплины

| Вид учебной работы | Всего, академических часов |
|--|----------------------------------|
| | Очная форма обучения |
| Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов) | 4/144 |
| Контактная работа с преподавателем: | 70 |
| занятия лекционного типа | 16 |
| занятия семинарского типа, в том числе | 48 |
| семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)* | 48 (12) |
| лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)* | – |
| курсовое проектирование (КР или КП) | – |
| КСР | 6 |
| другие виды контактной работы | – |

| | |
|--|-------------------------------|
| Вид учебной работы | Всего, академических часов |
| | Очная форма обучения |
| Самостоятельная работа | 47 |
| Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе) | Кр-1÷Кр-4, ИДЗ-1÷ИДЗ-4 |
| Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен) | Экзамен / 27 |

* практическая подготовка только для дисциплин с ПК

4 Содержание дисциплины

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 академических часа, из них контактные занятия – 70 часов, в том числе: лекции – 16 часов, лабораторные занятия – 0 часов, практические занятия – 48 часов, КСР – 6 часов; СРС – 47 часов; экзамен – 27 часов.

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Занятия лекционного типа, академ. часы | Занятия семинарского типа, академ. часы | | Контролируемая самостоятельная работа, академ. часы | Самостоятельная работа, академ. часы | Формируемые компетенции | Формируемые индикаторы |
|---|--|--|---|---------------------|---|--------------------------------------|-------------------------|------------------------|
| | | | Семинары и/или практические занятия | Лабораторные работы | | | | |
| 1. Основные понятия оптимизации ХТП | | | | | | | | |
| 1.1 | 1. Основные понятия оптимизации ХТП. | 0,5 | 2 | | | 2 | ПК-4 ПК-8 | ПК-4.3 ПК-8.1 |
| 1.2 | 2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП. | 0,5 | 2 | | | 2 | ПК-4 ПК-8 | ПК-4.3 ПК-8.1 |
| 2. Основные математические модели химических реакторов и аппаратов химической технологии. Методы оптимизации | | | | | | | | |
| 2.1 | 3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели. | 1 | 6 | | | 2 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 2.2 | 4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. | 1 | 8 | | | 2 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Занятия лекционного типа, академ. часы | Занятия семинарского типа, академ. часы | | Контролируемая самостоятельная работа, академ. часы | Самостоятельная работа, академ. часы | Формируемые компетенции | Формируемые индикаторы |
|---|--|--|---|---------------------|---|--------------------------------------|-------------------------|------------------------|
| | | | Семинары и/или практические занятия | Лабораторные работы | | | | |
| | Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы. | | | | | | | |
| 3. Управление химико-технологическими процессами | | | | | | | | |
| 3.1 | 5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов. | 1 | 2 | | | 2 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.2 | 6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС. | 1 | 1 | | | 2 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.3 | 7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов. | 1 | 3 | | | 2 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.4 | 8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.5 | 9. Последовательные необратимые реакции. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.6 | 10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.7 | 11. Сложные реакции с обратимыми стадиями. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.8 | 12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.9 | 13. Влияние температуры на селективность и выход. | 1 | 4 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Занятия лекционного типа, академ. часы | Занятия семинарского типа, академ. часы | | Контролируемая самостоятельная работа, академ. часы | Самостоятельная работа, академ. часы | Формируемые компетенции | Формируемые индикаторы |
|-------|--|--|---|---------------------|---|--------------------------------------|-------------------------|------------------------|
| | | | Семинары и/или практические занятия | Лабораторные работы | | | | |
| 3.10 | 14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.11 | 15. Оптимизация сложных равновесных процессов. | 1 | 2 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.12 | 16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход. | 1 | 1 | | 3 | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.13 | 17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП. | 0.5 | 1 | | 3 | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| 3.14 | 18. Современные системы управления ХТП. | 0.5 | 4 | | | 3 | ПК-3 ПК-5 | ПК-3.1 ПК-5.1 |
| | Экзамен (27) | | | | | | | |
| | Всего | 16 | 48 | 0 | | 47 | | |

4.2. Занятия лекционного типа

Количество лекционных часов – 16.

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, академ. часов | Инновационная форма |
|----------------------|---|----------------------|---------------------|
| 1 | <i>Основные понятия оптимизации ХТП</i> | 1 | |
| | Основные понятия и определения, используемые при оптимизации химико-технологических процессов (ХТП). Классификация процессов химической технологии. Входные, управляющие, возмущающие и выходные параметры процесса. Стационарные процессы. Процессы с распределенными параметрами (0.5). Показатели эффективности ХТП. Виды критериев оптимальности. Технологические и экономические критерии эффективности; их использование для оптимизации работы различных ХТП (0.5). | 1 | ПЛ |

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часов | Инновационная форма |
|----------------------------|--|--------------------------|------------------------|
| 2 | <i>Основные математические модели химических реакторов и аппаратов химической технологии. Методы оптимизации</i> | 2 | |
| | <p>Математические модели химических реакторов. Идеальный периодический реактор полного смешения. Непрерывный реактор идеального вытеснения (РИВ). Непрерывный реактор идеального смешения (РИС). Каскад реакторов идеального смешения. Диффузионные, ячеечные, комбинированные модели химических реакторов. Математические модели тепловых и массообменных процессов в химических аппаратах (1).</p> <p>Обзор математических методов оптимизации ХТП. Аналитические методы оптимизации; методы математического программирования; градиентные методы; статистические методы; автоматические самонастраивающиеся системы управления (1).</p> | 2 | ЛВ |
| 3 | <i>Управление химико-технологическими процессами</i> | 13 | |
| | <p>Степень конверсии как параметр оптимизации в простых необратимых гетерогенно-каталитических реакциях (1).</p> <p>Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС (1).</p> | 2 | Л |
| | <p>Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов. Удельная производительность сочетания реакторов РИВ-РИС. Удельная производительность сочетания реакторов РИС-РИВ (1).</p> <p>Селективность и выход – параметры оптимизации. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для параллельных необратимых реакций, протекающих в РИВ (1).</p> | 2 | ЛВ |
| | <p>Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для последовательных необратимых реакций, протекающих в РИВ (1).</p> <p>Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для системы параллельных и последовательных необратимых реакций, протекающих в РИВ (1).</p> | 2 | ЛВ |

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часов | Инновационная форма |
|----------------------|---|--------------------|---------------------|
| | Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для сложных реакций с обратимыми стадиями (1). Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Зависимость селективности и выхода от способа введения исходных реагентов для параллельных и последовательных необратимых реакций (1). | 2 | ЛВ |
| | Влияние температуры на селективность и выход (1). Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов (1). | 2 | ЛВ |
| | Оптимизация сложных равновесных процессов (1). Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход (1). | 2 | ЛВ |
| | Применение экономических критериев при оптимизации ХТП (0.5). Современные системы управления ХТП (0.5). | 1 | Л |
| | Всего: | 16 | |

Примеры образовательных технологий, способов и методов обучения (с сокращениями): традиционная лекция (Л), лекция-визуализация (ЛВ), проблемная лекция (ПЛ), лекция – пресс-конференция (ЛПК), занятие – конференция (ЗК), тренинг (Т), дебаты (Д), мозговой штурм (МШ), мастер-класс (МК), «круглый стол» (КрСт), активизация творческой деятельности (АТД), регламентированная дискуссия (РД), дискуссия типа форум (Ф), деловая и ролевая учебная игра (ДИ, РИ), метод малых групп (МГ), занятия с использованием тренажеров, имитаторов (Тр), компьютерная симуляция (КтСм), использование компьютерных обучающих программ (КОП), интерактивных атласов (ИА), посещение врачебных конференции, консилиумов (ВК), участие в научно-практических конференциях (НПК), съездах, симпозиумах (Сим), учебно-исследовательская работа студента (УИРС), проведение предметных олимпиад (О), подготовка письменных аналитических работ (АР), подготовка и защита рефератов (Р), проектная технология (ПТ), экскурсии (Э), дистанционные образовательные технологии (ДОТ).

4.3 Занятия семинарского типа

4.3.1 Семинары, практические занятия

Количество часов практических занятий – 48.

Количество контрольных работ – 4.

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часов | | Инновационная форма |
|----------------------------|--|-----------------------|--|------------------------|
| | | всего | в том числе на практическую подготовку* | |
| 1 | Основные понятия оптимизации ХТП | 4 | | |
| | 1. Основные понятия оптимизации ХТП. | 2 | | АТД, РД, АР (ИДЗ-1) |
| | 2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП. | 2 | | АТД, РД, АР (ИДЗ-1) |
| 2 | Основные математические модели химических реакторов и аппаратов химической технологии. Методы оптимизации | 14 | | |
| | 3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели. | 6 | | АТД, РД |
| | 4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы. Контрольная работа 1 | 8 | | АТД, РД |
| 3 | Управление химико-технологическими процессами | 30 | 12 | |
| | 5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов. | 2 | 1 | АТД, РД |
| | 6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС. | 1 | 1 | АТД, РД |
| | 7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов. Контрольная работа 2 | 3 | 1 | АТД, РД |

| № раздела дисциплины | Наименование темы и краткое содержание занятия | Объем, акад. часов | | Инновационная форма |
|----------------------------|--|-----------------------|--|------------------------|
| | | всего | в том числе на практическую подготовку* | |
| | 8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции. | 2 | 1 | АТД, РД |
| | 9. Последовательные необратимые реакции. | 2 | 1 | АТД, РД |
| | 10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций. | 2 | 1 | АТД, РД |
| | 11. Сложные реакции с обратимыми стадиями. | 2 | 1 | АТД, РД, АР (ИДЗ-2) |
| | 12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход. | 2 | 1 | АТД, РД, АР (ИДЗ-2) |
| | 13. Влияние температуры на селективность и выход. <i>Контрольная работа 3</i> | 4 | 1 | АТД, РД |
| | 14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов. | 2 | 1 | АТД, РД, АР (ИДЗ-3) |
| | 15. Оптимизация сложных равновесных процессов. | 2 | 2 | АТД, РД, АР (ИДЗ-3) |
| | 16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход. | 1 | | АТД, РД, АР (ИДЗ-4) |
| | 17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП. | 1 | | АТД, РД, АР (ИДЗ-4) |
| | 18. Современные системы управления ХТП. <i>Контрольная работа 4</i> | 4 | | |
| | <i>Всего:</i> | 48 | 12 | |

4.3.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия учебным планом не предусмотрены.

4.4 Самостоятельная работа обучающихся

Количество часов самостоятельной работы студентов – 53, из них под контролем преподавателя (КСР) – 6 час., внеаудиторной самостоятельной работы студентов (СРС) – 47 час.

Самостоятельная работа по дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии», направленная на лучшее усвоение, углубление и закрепление студентами знаний, на развитие у них интеллектуальных и практических умений, творческого мышления, приобретение ими общекультурных и профессиональных компетенций, включает в себя следующие виды работ:

- работа с лекционным материалом;
- изучение разделов дисциплины, вынесенных на самостоятельную проработку, путем самостоятельного поиска, анализа и структурирования учебной информации по соответствующему разделу дисциплины;
- подготовка к практическим занятиям;
- подготовка к контрольным работам (КР);
- решение тестовых задач;
- выполнение индивидуальных домашних заданий (ИДЗ).

4.4.1 Вопросы для самостоятельного изучения

| № раздела дисциплины | Перечень вопросов для самостоятельного изучения | Объем, акад. часов | Форма контроля |
|----------------------|--|--------------------|----------------|
| 1-3 | 1. Работа с лекционным материалом | 5 | |
| 2-3 | 2. Подготовка к практическим занятиям | 6 | |
| 2 | 3. Подготовка к Кр-1 | 4 | Кр-1 |
| 3 | 4. Подготовка к Кр-2 | 4 | Кр-2 |
| 3 | 5. Подготовка к Кр-3 | 4 | Кр-3 |
| 3 | 6. Подготовка к Кр-4 | 4 | Кр-4 |
| 2 | 7. Выполнение ИДЗ-1 «Методы оптимизации ХТП» | 5 | ИДЗ-1 |
| 3 | 8. Выполнение ИДЗ-2 «Оптимизация работы реакционного аппарата, в котором протекает сложная химическая реакция» | 5 | ИДЗ-2 |
| 3 | 9. Выполнение ИДЗ-3 «Оптимизация термодинамически равновесных процессов химической технологии» | 5 | ИДЗ-3 |
| 3 | 10. Выполнение ИДЗ-4 «Нахождение оптимальных условий проведения процесса с использованием экономических критериев оптимизации» | 5 | ИДЗ-4 |
| | Всего СРС: | 47 | |
| 2 | 11. Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку (КСР): | | |
| | 11.1. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход | 3 | тест |

| № раздела дисциплины | Перечень вопросов для самостоятельного изучения | Объем, акад. часов | Форма контроля |
|----------------------|--|--------------------|----------------|
| | 11.2. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП | 3 | тест |
| | Всего КРС: | 6 | |
| | Итого: | 53 | |

Оценка результатов самостоятельной работы организуется как единство двух форм: самоконтроль и контроль со стороны преподавателя.

Самоконтроль зависит от определенных качеств личности, ответственности за результаты своего обучения, заинтересованности в положительной оценке своего труда, материальных и моральных стимулов, от того, насколько обучающийся мотивирован в достижении наилучших результатов. Задача преподавателя состоит в том, чтобы создать условия для самостоятельной работы студента (подготовить ее учебно-методическое обеспечение), привить обучающемуся мотивацию к самостоятельной работе, правильно использовать различные стимулы для выполнения этой работы (система оценок), повышать ее значимость и своевременно осуществлять ее контроль (с помощью фонда оценочных средств).

По учебной дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии» предусмотрены следующие виды контроля знаний студентов:

Оперативный контроль успеваемости. Оперативный контроль проводится с целью мониторинга качества усвоения студентами лекционного и самостоятельно изучаемого материала. Проводится на практических занятиях выборочно в устной (собеседование) и письменной (решение тестовой задачи «у доски») форме в ходе изучения очередного раздела учебной дисциплины. При этом используются контрольные вопросы (см. разд. 6; разд. 3, п. 4.1 Приложения 1) и тестовые задачи (см. п. 4.2 Приложения 2).

Текущий контроль успеваемости. Текущий контроль проводится в письменной форме с целью оценки приобретенных студентами на лекционных и практических занятиях, в процессе самостоятельного изучения материала знаний, умений и навыков по данной учебной дисциплине. В течение семестра студенты, руководствуясь РПД, прорабатывают вопросы для самостоятельного изучения (см. п. 4.4.1), находят ответы на контрольные вопросы (см. разд. 6; разд. 3, п. 4.1 Приложения 1) и решают тестовые задачи (см. п. 4.2 Приложения 1) по каждому разделу учебной дисциплины. Предусмотрено проведение 4 контрольных работ (Кр) (см. п. 4.1 Приложения 1; п. 4.4.2). Каждая контрольная работа содержит по 1 контрольному вопросу. Каждый студент выполняет также 4 индивидуальных домашних задания (ИДЗ) (см. п. 4.4.3, п. 4.2 Приложения 1; п. 4.4.3).

Промежуточная аттестация. Для итоговой оценки качества усвоения данной дисциплины, т. е. качества приобретенных знаний, умений, навыков и компетенций, учебным планом предусмотрена промежуточная аттестация в виде экзамена. На экзамене студенту предлагается ответить на 5 практических вопросов по конкретному процессу (реакции) органического синтеза, охватывающих все разделы дисциплины. Оценка по экзамену является итоговой по данной дисциплине и проставляется в приложение к диплому.

4.4.2 Темы контрольных работ

Каждая контрольная работа (Кр) содержит по 1 вопросу из перечня контрольных вопросов по дисциплине (см. **разд. 6; разд. 3, п. 4.1 Приложения 1**).

Контрольные работы охватывают следующие разделы дисциплины:

Контрольная работа 1

- 1) 1. Основные понятия оптимизации ХТП.
- 2) 2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП.
- 3) 3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели
- 4) 4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы.

Контрольная работа 2

- 1) 5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов.
- 2) 6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС.
- 3) 7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов.

Контрольная работа 3

- 1) 8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции.
- 2) 9. Последовательные необратимые реакции.
- 3) 10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций.
- 4) 11. Сложные реакции с обратимыми стадиями.
- 5) 12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход.
- 6) 13. Влияние температуры на селективность и выход.

Контрольная работа 4

- 1) 14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов.
- 2) 15. Оптимизация сложных равновесных процессов.
- 3) 16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход.
- 4) 17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП.
- 5) 18. Современные системы управления ХТП.

Пример содержания контрольной работы:

Контрольная работа 3

Жидкофазная реакция $A \xrightleftharpoons[-1]{1, +Y} R \xrightarrow{2, +Y} S$ протекает в реакторе идеального смешения без изменения плотности реакционной массы.

Константы скорости реакций: $k_1 = 0,01 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_2 = 0,024 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_{-1} = 0,005 \text{ с}^{-1}$. В начальный момент времени концентрации R и S равны нулю. Процесс проводится при начальных концентрациях исходных веществ A и Y, равных $C_{A,0} = 2,0 \text{ кмоль/м}^3$, $C_{Y,0} = 4,3 \text{ кмоль/м}^3$.

Составить математическую модель процесса. Выходной параметр – выход продукта R; управляющий параметр – степень конверсии исходного вещества A.

Математическую модель оформить в виде отдельной процедуры.

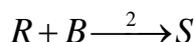
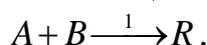
4.4.3 Темы индивидуальных творческих домашних заданий

| № п/п | Тема |
|-------|---|
| 1 | Методы оптимизации ХТП |
| 2 | Оптимизация работы реакционного аппарата, в котором протекает сложная химическая реакция |
| 3 | Оптимизация термодинамически равновесных процессов химической технологии |
| 4 | Нахождение оптимальных условий проведения процесса с использованием экономических критериев оптимизации |

Пример содержания индивидуального задания:

Индивидуальное задание №2

Реакции



протекают в реакторе идеального смешения. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1=0,0352$; $k_2=0,0812$. Начальные концентрации исходных веществ: $C_{A,0} = 0,037 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 0,081 \text{ кмоль/м}^3$.

Определить максимальный выход продукта R; концентрации остальных веществ при максимальном выходе продукта R.

Ответ: 0,158; $C_A = 0,02231$; $C_B = 0,05745$; $C_R = 0,00583$; $C_S = 0,00886$.

5 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ (ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>.

Для организации самостоятельной работы студентов (самостоятельной проработки теоретического материала, подготовки к лекциям и контрольным работам, выполнения индивидуальных домашних заданий) предлагаются также учебно-методические пособия и Интернет-ресурсы, перечисленные в **разделах 7 и 8**.

Особое внимание студентов следует обратить на размещенные на персональном сайте Бочкарева В.В. (корпоративный портал Томского политехнического университета) электронные ресурсы:

1. Бочкарев, В.В. Оптимизация технологических процессов органического синтеза: учебное пособие [Электронный ресурс] / В.В. Бочкарев; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010. – 185 с. URL: http://portal.tpu.ru:7777/SHARED/w/WALERY-W-B/instr_work/Tab1/tutorial15.pdf (дата обращения 17.05.2015).
2. Бочкарев, В.В. Оптимизация технологических процессов органического синтеза: учебное пособие [Электронный ресурс] / В.В. Бочкарев; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во ТПУ, 2014. – 264 с. URL: http://portal.tpu.ru:7777/SHARED/w/WALERY-W-B/instr_work/Tab1/Bochkarev_V.V._Optimization_ChTP_2014.pdf (дата обращения 17.05.2015).
3. Бочкарев, В.А., Троян А.А. Оптимизация химико-технологических процессов. Практикум [Электронный ресурс] / В.В. Бочкарев, А.А. Троян; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 160 с. URL: http://portal.tpu.ru:7777/SHARED/w/WALERY-W-B/instr_work/Tab1/Optimization_ChTP_PracticalWork_2014.pdf (дата обращения 17.05.2015).
4. Бочкарев, В.В. Управление технологическими процессами органического синтеза: учебник [Электронный ресурс] / В.В. Бочкарев. – LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013. – 248 с. URL: http://portal.tpu.ru:7777/SHARED/w/WALERY-W-B/instr_work/Tab2/Bochkarev_V._Management_technologica_processes_organic_s.pdf (дата обращения 17.05.2015).
5. Корпоративный портал ТПУ / Персональные сайты / Бочкарев Валерий Владимирович. URL: http://portal.tpu.ru/SHARED/w/WALERY-W-B/instr_work/Tab2 (дата обращения 17.05.2015).

6 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет достигнуть (оценка «удовлетворительно») или превысить пороговый уровень результатов обучения.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если у обучающегося выявлены индикаторы достижения компетенций, т. е. для всех дескрипторов компетенций достигнут пороговый уровень их усвоения на данном этапе, что соответствует оценке «удовлетворительно».

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля, т. е. получившие положительные оценки за все 4 контрольные работы (КР) и все 4 индивидуальные домашние задания (ИДЗ).

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения студентами предусмотренных дескрипторов достижения компетенций. Экзаменационный билет комплектуется 5 вопросами.

Время подготовки студента к устному ответу – до 45 мин.

Контрольные вопросы по дисциплине, используемые при текущем контроле успеваемости (в качестве теоретической основы контрольной работе и индивидуального задания) и промежуточной аттестации (теоретические вопросы, содержащиеся в экзаменационных билетах)

1. Основные понятия оптимизации ХТП.

2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП.
3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели
4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы.
5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов.
6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС.
7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов.
8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции.
9. Последовательные необратимые реакции.
10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций.
11. Сложные реакции с обратимыми стадиями.
12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход.
13. Влияние температуры на селективность и выход.
14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов.
15. Оптимизация сложных равновесных процессов.
16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход.
17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП.
18. Современные системы управления ХТП.

Пример варианта экзаменационного билета:

| |
|---|
| <p>Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет) Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений Факультет химической и биотехнологии Учебная дисциплина «Современные проблемы химии и химической технологии»</p> <p>Экзаменационный билет №1</p> <p>Продуктами моносульфирования нафталина являются 1- и 2-нафталинсульфокислоты. Сульфирование при низкой температуре и небольшом времени контакта ведет к образованию в основном 1-нафталинсульфокислоты, а при увеличении времени реакции или при повышении температуры – 2-нафталинсульфокислоты.</p> <p>Предложите механизм этой реакции и кинетическую схему процесса.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Как зависит селективность и выход по 1-нафталинсульфокислоте от степени конверсии нафталина? 2) Как зависит селективность и выход по 1-нафталинсульфокислоте от начальной концентрации нафталина? 3) Как зависит селективность и выход по 1-нафталинсульфокислоте от типа реактора, в котором проводится процесс? 4) Как зависит селективность и выход по 1-нафталинсульфокислоте от температуры, при которой проводится процесс? |
|---|

5) Предложите схему реакционного узла и наиболее рациональный способ введения исходных реагентов.

Заведующий кафедрой _____ С.М. Рамш

7 Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1 Потехин, В. М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки : Учебник для бакалавров и магистров по направлениям: «Химическая технология» (бакалавры), «Химическая технология» (магистры) / В. М. Потехин, В. В. Потехин. – 3-е изд., испр. и доп. – Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2014. – 896 с. : ил. – ISBN 978-5-8114-1662-2.

2 Рамш, С. М. Механизмы реакций тонкого органического синтеза в вопросах и ответах : Учебное пособие / С. М. Рамш, А. В. Зиминов, Е. С. Храброва ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2018. – 112 с.

б) электронные учебные издания:

1 Потехин, В. М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки : учебник / В. М. Потехин, В. В. Потехин. – 3-е изд., испр. и доп. – Санкт-Петербург : Лань, 2021. – 896 с. – ISBN 978-5-8114-1662-2. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/168720> (дата обращения: 31.03.2021). – Режим доступа : по подписке.

2 Рамш, С. М. Теория химико-технологических процессов тонкого органического синтеза. Ч. 1. Механизмы реакций тонкого органического синтеза: Текст лекций / С. М. Рамш, Е. С. Храброва; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений. – Электронные текстовые данные. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2016. – 328 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 23.03.2021). – Режим доступа : для зарегистрированных пользователей.

3 Рамш, С. М. Механизмы реакций тонкого органического синтеза в вопросах и ответах : Учебное пособие / С. М. Рамш, А. В. Зиминов, Е. С. Храброва ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений. – Электронные текстовые данные. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2018. – 112 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 23.03.2021). – Режим доступа : для зарегистрированных пользователей.

8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

8.1. Интернет-ресурсы общего характера

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы:
<http://media.technolog.edu.ru>.

Электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

Сайт фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru>.

8.2. Интернет-ресурсы по химии и химической технологии

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать следующие универсальные Интернет-ресурсы для химика-технолога.

Специализированные информационные системы, базы данных, базы знаний, сайты для поиска учебной и научной информации по химии и химической технологии:

<http://www.acscinf.org/>

<http://www.acscinf.org/content/chemical-information-literacy>

<http://scholar.google.ru>

<http://scienceresearch.com>

<http://www.nature.com>

www.chemweb.com

<http://www.iupac.org/>

http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical_Information_Sources

<http://www.chem.vsu.ru/content/links.html> (обширная сводка химических сайтов «Химия в сети Internet»)

<http://www.doaj.org/> (Directory of open access journals)

<http://www.chemport.ru/> (сайт для химиков)

<http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html> («линки» для химиков, University of Liverpool), не работает в настоящее время

<http://geo.gr.isu.ru/leos/index.php> (СИС «Химический ускоритель»), не работает в настоящее время

<http://chemexpress.fatal.ru/Navigator.html> («Химический навигатор»), не работает в настоящее время

<http://www.organic-chemistry.org/>

<http://www.chem.sc.edu/faculty/morgan/resources/links.html>

<http://www.chem.ucla.edu/chempointers.html>

www.abc.chemistry.bsu.by (портал Белорусского государственного университета – Азбука Web-поиска для химиков. Пособия по поиску патентов, баз данных, статей)

www.chem.msu.ru (химический портал МГУ – базы данных, полезная информация, ссылки и т. д.)

Справочники, энциклопедии:

ULLMANN'S Encyclopedia of Industrial Chemistry

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/Section/id-407379.html>

http://media.wiley.com/assets/5018/03/Ullmanns2011_Contents.pdf

<http://online.library.wiley.com/book/10.1002/14356007>

Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302479.html?query=Kirk-Othmer>

Справочник химика 21. Химия и химическая технология. *On-line* ресурс
<http://chem21.info/map/>

List of academic databases and search engines

https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_academic_databases_and_search_engines

Базы данных по химии:

Базы данных Chemical Abstracts Service

<http://www.cas.org/expertise/cascontent/> (поиск с помощью поискового инструмента «SciFinder»)

<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9780470749418>

<http://www.cas.org/products/scifinder/system-requirements-web>

<http://www.cas.org/training/scifinder>

Базы данных STN-International

http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/onlin_db.htm

<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/clusters.htm>

<http://www.cas.org/support/stngen/dbss/index.html>

<https://stnweb.cas.org/>

<http://www.stn-international.com/index.php?id=123>

<http://www.stn-international.de/index.php?id=123>

<https://stneasy.cas.org/html/english/login1.html?service=STN>

Базы данных ELSEVIER/REAXYS (Beilstein&Gmelin)

<https://www.elsevier.com/solutions/reaxys>

<https://www.reaxys.com/reaxys/session.do>

(поиск с помощью поискового инструмента «Reaxys Chemistry Discovery Engine»)

Базы данных ScienceDirect (Elsevier)

<http://www.sciencedirect.com/science>

<http://www.scopus.com/home.url>

<http://www.mendeley.com/features/>

Базы данных Web of Science (Clarivate Analytics)

<http://webofscience.com>

ChemBioFinder.com (PerkinElmer Informatics, Chembridge.com)

<http://chembiofinder.cambridgesoft.com/chembiofinder/Forms/Home/ContentArea/Home.aspx>

База данных Royal Society of Chemistry ChemSpider (бесплатная, the database contains information on more than 40 million molecules from over 500 data sources)

<http://www.chemspider.com>

The Cambridge Structural Database

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd/>

Базы данных MEDLINE (PubChem databases)

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/nlm_eresources/eresources/search_database.cfm

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/help.html>

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/search/search.cgi>

<http://www.hubmed.org/>
<http://www.nioch.nsc.ru/sibstn/databases/medline.htm>
<http://www.disser.ru/library/31/188.htm>
<http://voliadis.ru/pubmed-tips>

Базы спектральных данных органических соединений

<http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/ENTRANCE.cgi>
Free Spectral Database (сотни тысяч спектров) [SpectraBase](#) (Wiley)

Базы данных ВИНТИ

<http://www2.viniti.ru/>

Термические константы веществ

<http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html>

The Merck Index OnlineSM

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bl0304.html>

http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/Chemical_Databases/

<http://www.emolecules.com/> (Find [Suppliers and Information](#) for over 8 Million Unique Chemicals!)

<http://cds.dl.ac.uk/> (the Chemical Database Service)

<http://library.dialog.com/bluesheets/html/bls0016.html#SB0016> (Databases by Subject Category: Science-Chemistry)

<http://www.crct.polymtl.ca/FACT/index.php> (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics)

http://www.google.ru/Top/Science/Chemistry/Chemical_Databases/

<http://chem-v.narod.ru/data.htm> (сводка баз данных)

Патентные базы:

<http://www.abc.chemistry.bsu.by/patent/default.htm> (патентные базы данных, руководство к практикуму)

European Patent Office. Espacenet – Patent search

<http://www.epo.org/searching/free/espacenet.html>
http://worldwide.espacenet.com/advancedSearch?locale=en_EP
<https://worldwide.espacenet.com/> (Европейское патентное ведомство)
https://ru.espacenet.com/?locale=ru_RU (Европейское патентное ведомство, русскоязычный сайт)

The US Patent and Trademark Office

<http://www.uspto.gov/>
<http://www.google.com/googlebooks/uspto.html>
<http://www.google.com/googlebooks/uspto-patents-pair.html>
<http://www.us-patent-search.com/>

<http://www.patentstorm.us/> (патенты США, аннотации)
www.freepatentsonline.com (бесплатные патенты США, доступ к полнотекстовым файлам)

Google Patents

<http://www.google.com/patents>

ФГУ ФИПС

www.fips.ru (Роспатент)

<https://patents.su/> (база авторских свидетельств СССР)

<https://yandex.ru/patents> (сервис поиска патентов компании «Яндекс», созданный при содействии Федеральной службы по интеллектуальной собственности (Роспатента))

Химические библиотеки:

Библиотека химического факультета МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/welcome.html>

Электронная библиотека учебных материалов по химии МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html>

Зарубежные журналы через Интернет МГУ

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/licenced.html>

Научная библиотека им. М. Горького СПбГУ, электронные ресурсы по химии

<http://cufts.library.spbu.ru/CRDB/SPBGU/browse/facets/subject/5>

Информационно-библиотечный центр им. С.И. Сулименко РХТУ им. Д.И. Менделеева, электронные информационные ресурсы

<http://lib.muctr.ru/page/117>

Научная электронная библиотека

<http://elibrary.ru/defaultx.asp>

Поиск электронных книг

<http://www.poiskknig.ru/>

Научная литература в Интернете

<http://www.scintific.narod.ru/literature.htm>

Электронная библиотека по химии и технике

<http://rushim.ru/books/books.htm>

Книги по химии и химической технологии

<http://www.chemport.ru/index.php?cid=29>

НИЦ СПбГТУРП. Химия и химическая технология. Более 1000 наименований учебников и монографий

<http://www.nizrp.narod.ru/chem.htm>

Библиотеки общего профиля:

Российская государственная библиотека

<http://www.rsl.ru>

Российская национальная библиотека

<http://www.nlr.ru>

Государственная публичная научно-техническая библиотека России

<http://www.gpntb.ru>

Библиотека по естественным наукам РАН

<http://www.benran.ru/>

Библиотека РАН (БАН)

<http://www.rasl.ru/>

Фундаментальная библиотека СПбГТИ (ТУ)

<http://bibl.lti-gti.ru/>

Библиотека Конгресса США

<http://www.loc.gov/index.html>

Британская библиотека

<http://portico.bl.uk>

Электронная библиотека диссертаций РГБ

<http://www.diss.rsl.ru>

Издательства научно-технической литературы:

Elsevier

http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws_home

<http://health.elsevier.ru/>

<http://elsevierscience.ru/>

Wiley-VCH

<http://www.chemistryviews.org/view/0/index.html>

<http://onlinelibrary.wiley.com/?CRETRY=1&SRETRY=0>

Springer

<http://www.link.springer.com/>

Хемоинформатика (статья в Википедии):

<https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A5%D0%B5%D0%BC%D0%BE%D0%B8%D0%BD%D1%84%D0%BE%D1%80%D0%BC%D0%B0%D1%82%D0%B8%D0%BA%D0%B0>

*Разработчики программных продуктов по химии, молекулярная графика
(Chem-Soft):*

Advanced Chemistry Development Inc. (ACD/Labs)

<http://www.acdlabs.com/home/>

CambridgeSoft Corporation

<http://www.cambridgesoft.com/>

Dassault Systèmes/BIOVIA/Accelrys/Symyx/MDL

<http://accelrys.com/>

ChemAxon

<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>

<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>

World Index of Molecular Visualization Resources

www.molvisindex.org

<http://molvis.sdsc.edu/visres/index.html>

Mercury – Crystal Structure Visualisation

http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury_csd/

<http://jmol.sourceforge.net/> (Molecular graphic: Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D)

<http://openrasmol.org/> (Home Page for RasMol and OpenRasMol Molecular Graphics Visualisation Tool)

<http://edchemistry.tripod.com/graphics.htm> (visualization and animations in chemistry)

Вычислительная химия:

Hypercube, Inc.

<http://www.hyper.com/>

Разработчики программных продуктов по химической технологии (Chem-Engineering):

Process Systems Enterprise

<http://www.psenterprise.com/>

Invensys SimSci-Esscor

<http://iom.invensys.com/EN/Pages/SimSci-Esscor.aspx>

Aspentech

<http://www.aspentech.com/Company/About-AspenTech/>

http://www.aspentech.com/corporate/press/media_kit.aspx

Aspentech HYSYS

<http://www.aspentech.com/core/asp-hysys.aspx>

Математические вычисления и инженерная графика:

PTC Mathcad

<http://www.ptc.com/product/mathcad/>

Autodesk (Autocad)

<http://www.autodesk.com/products/autodesk-autocad/overview>

АСКОН (КОМПАС)

<http://edu.ascon.ru/download/>

<http://kompas.ru/>

Химические общества, организации, союзы:

Am. Chem. Soc.

<http://www.acs.org/content/acs/en.html>

RSC

<http://www.rsc.org/>

РХО им. Д.И. Менделеева

<http://www.chemsoc.ru/>

<http://www.chemsoc.ru/regions/Spb/index.php>

IUPAC

<http://old.iupac.org/index.html>

http://goldbook.iupac.org/structure_search.html

Производители химической и фармацевтической продукции:

<http://www.chemicalinfo.ru/>

<http://rccnews.ru/Rus/About/>

Стандарты:

Росстандарт

<http://www.gost.ru/wps/portal/pages.Main>

<http://www.technormativ.ru/>

Роспромтест

<http://www.rospromtest.ru/>

Центр по экономическим классификациям

<http://www.okpd.org/index.htm>

NIST

<http://nist.gov/>

<http://webbook.nist.gov/>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

Электронно-библиотечные системы (электронные ресурсы), предлагаемые библиотекой СПбГТИ (ТУ):

<http://bibl.lti-gti.ru/main.html>

9 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТО:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТО СПбГТИ (ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

Рабочей программой дисциплины «Современные проблемы химии и химической технологии» предусмотрена самостоятельная работа студентов (СРС) в объеме 47 часов, а также контролируемая самостоятельная работа студентов (КСР) в объеме 6 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления и расширения знаний по дисциплине и предусматривает:

чтение студентами рекомендованной основной и дополнительной литературы, работа с рекомендованными Интернет-источниками научно-технической информации, в том числе – для усвоения теоретического материала дисциплины, вынесенного на самостоятельное изучение;

- подготовку к лекциям и практическим занятиям;
- подготовку к контрольным работам (ответы на контрольные вопросы);
- решение тестовых задач;
- выполнение индивидуальных домашних заданий;
- работу с рекомендованными Интернет-источниками научно-технической информации;

интерактивное обучение с использованием рекомендованных электронных учебных пособий, доступных программно-обучающих модулей и телекоммуникационных технологий *on line* доступа к соответствующим программным продуктам и обучающим системам, в том числе с помощью компьютерных симуляций.

Планирование времени на самостоятельную работу лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях или полученный в виде раздаточных материалов, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в списке рекомендованной литературы. По каждому из вопросов для самостоятельного изучения следует сначала прочитать рекомендованную литературу, а затем составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания, являющихся основополагающими в этом вопросе и необходимых для усвоения последующих разделов дисциплины. В случае возникновения трудностей при самостоятельном усвоении материала рекомендуется составить перечень непонятных вопросов и обратиться за консультацией к преподавателю.

В течение семестра студенты, руководствуясь РПД, прорабатывают вопросы для самостоятельного изучения (см. п. 4.4.1), находят ответы на контрольные вопросы (см.

разд. 6; разд. 3, п. 4.1 Приложения 1) и решают тестовые задачи (см. п. 4.2 Приложения 1) по каждому разделу учебной дисциплины.

Важной частью СРС является выполнение индивидуальных творческих домашних заданий (см. п. 4.4.3, Приложение 1, п. 4.2). Каждый студент выполняет 4 индивидуальных домашних задания (ИДЗ): ИДЗ-1 (16 вариантов), ИДЗ-2 (32 вариантов), ИДЗ-3 (20 вариантов) и ИДЗ-4 (20 вариантов). По результатам их выполнения проверяется знание теоретического лекционного материала; тем, вынесенных на самостоятельную проработку; усвоение практических умений и навыков. Сроки выполнения ИДЗ определяются сроками прохождения учебного материала на лекционных и практических занятиях в соответствии с учебным планом, графиком учебного процесса, расписанием занятий и РПД (разд. 4).

Все практические занятия, за исключением контрольных работ, проводятся в интерактивном режиме. Они представляют собой компьютерное моделирование для решения тестовых задач на ПК, с последующим разбором конкретных ситуаций; при этом используются учебные, в том числе электронные, пособия, раздаточные материалы, онлайн-ресурсы Интернет-источники информации. Некоторые тестовые задачи повышенной сложности формулируются в виде творческих заданий и решаются методом «мозгового штурма» в малых группах.

Лекции проводятся с использованием раздаточных материалов, электронных учебных пособий, мультимедийных презентаций.

Для достижения планируемых результатов обучения в дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии» используются различные образовательные технологии:

1. *Информационно-развивающие технологии*, направленные на овладение большим запасом знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется лекционно-семинарский метод, самостоятельное изучение литературы, применение современных информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая сетевые телекоммуникационные (Интернет) технологии.

2. *Деятельностные практико-ориентированные технологии*, направленные на формирование системы профессиональных практических умений, обеспечивающих возможность качественно осуществлять профессиональную деятельность. Используется анализ ХТП, выбор метода оптимизации, в зависимости от объекта исследования в конкретной ситуации, и его практическая реализация.

3. *Развивающие проблемно-ориентированные технологии*, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности проблемно мыслить, видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения. Используются следующие виды проблемного обучения: освещение основных проблем изучаемой дисциплины на лекциях, учебные дискуссии, решение задач повышенной сложности. Преподаватель лишь создает проблемную ситуацию, а разрешают ее обучаемые в ходе самостоятельной деятельности.

4. *Личностно-ориентированные технологии обучения*, обеспечивающие в ходе учебного процесса учет различных способностей обучаемых, создание необходимых условий для развития их индивидуальных способностей, развитие активности личности в учебном процессе. Личностно-ориентированные технологии обучения реализуются в результате индивидуального общения преподавателя и студента на консультациях, при выполнении индивидуальных домашних заданий, подготовке отчетов по индивидуальным домашним заданиям, решении тестовых задач.

Для целенаправленного и эффективного формирования запланированных компетенций у обучающихся выбраны следующие сочетания форм организации учебного процесса и методов активизации образовательной деятельности:

| Методы активизации образовательной деятельности | Формы организации обучения | | |
|---|----------------------------|----------------------|-----|
| | Лекции | Практические занятия | СРС |
| IT-методы | + | + | + |
| Работа в команде | | + | |
| Case-study | | + | |
| Методы проблемного обучения | + | | + |
| Обучение на основе опыта | | + | |
| Опережающая самостоятельная работа | | | + |
| Проектный метод | | + | + |
| Поисковый метод | | + | + |
| Исследовательский метод | | + | + |

Интерактивные формы проведения занятий

| № п/п | Наименование темы (раздела) дисциплины | Интерактивные формы проведения занятий | Трудоемкость (час.) |
|-------|--|--|---------------------|
| 1 | 1. Основные понятия оптимизации ХТП. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 2 | 2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 3 | 3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 6 |
| 4 | 4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 8 |
| 5 | 5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 6 | 6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 1 |

| № п/п | Наименование темы (раздела) дисциплины | Интерактивные формы проведения занятий | Трудоемкость (час.) |
|--------------|---|--|----------------------------|
| | производительность каскада РИС. | | |
| 7 | 7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 3 |
| 8 | 8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 9 | 9. Последовательные необратимые реакции. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 10 | 10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 11 | 11. Сложные реакции с обратимыми стадиями. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 12 | 12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 13 | 13. Влияние температуры на селективность и выход. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 4 |
| 14 | 14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 15 | 15. Оптимизация сложных равновесных процессов. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 2 |
| 16 | 16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, | Творческое задание (компьютерное моделирование с | 1 |

| № п/п | Наименование темы (раздела) дисциплины | Интерактивные формы проведения занятий | Трудоемкость (час.) |
|-------|---|--|---------------------|
| | доход. | последующим разбором конкретных ситуаций) | |
| 17 | 17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 1 |
| 18 | 18. Современные системы управления ХТП. | Творческое задание (компьютерное моделирование с последующим разбором конкретных ситуаций) | 4 |
| | Всего, час | | 48 |

10 Перечень информационных технологий и программного обеспечения, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

10.1 Информационные технологии

Для усвоения данной учебной дисциплины используются как традиционные, так и телекоммуникационные (удаленного доступа, сетевые) информационные технологии (ИТ) в приложении к химии и химической технологии. Основной упор сделан на использование на практических занятиях телекоммуникационных технологий.

Под традиционными ИТ подразумеваются *рутинные* методы поиска информации с помощью традиционных библиотечных технологий (с использованием *печатной* учебной, научной, патентной, справочной и периодической литературы по химии и химической технологии).

Под телекоммуникационными ИТ понимаются технологии рационального поиска и обработки информации с помощью *современных устройств* мобильной связи, передачи, хранения (накопления), обработки и представления данных (широкополосный Интернет, персональные компьютеры, планшеты, смартфоны и т. п.) и *современных поисковых инструментов* (машин) – аппаратно-программных комплексов для удаленного доступа к специализированным мировым информационным ресурсам по химии и химической технологии в сети Интернет (сетевые информационные технологии), в том числе – новейшие библиотечные информационные технологии, использующие соответствующее программное обеспечение и источники информации на электронных носителях.

Кроме того, в учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование следующих информационных технологий и возможностей компьютерного класса кафедры:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты, мессенджеров и других сетевых технологий.

10.2 Программное обеспечение

10.2.1 Специальное программное обеспечение:

1. Демонстрационная программа «SynthesGas» нахождения оптимальных условий проведения термодинамически контролируемых промышленных процессов (расчет равновесия сложных химических реакций).
2. Демонстрационная программа «Simplex» нахождения оптимальных условий проведения процессов симплексным методом.
3. Программа «Реактор» моделирования сложных органических реакций в непрерывных реакторах.
4. Пакет программ к лабораторным занятиям и самостоятельной работе студентов по курсу «Современные проблемы химии и химической технологии». Описание пакета программ приведено в *Приложении 2*. Программы доступны на Медиапортале СПбГТИ(ТУ), в разделе «Учебные материалы»/Очное обучение/Магистратура/18.04.01- Химическая технология (Органические вещества и материалы в химической технологии)/Модуль 01 "Химическая технология продуктов тонкого органического синтеза"/Современные проблемы химии и химической технологии.

10.2.2 Универсальное программное обеспечение:

1. Стандартные программные продукты «MICROSOFT OFFICE».
2. Специальные программные средства и технологии (пакеты прикладных программ): «MATHCAD», системы автоматизированного проектирования и компьютерной графики «AUTOCAD», «КОМПАС-3D» и т. п.
3. Программные продукты для расчетов и оптимизации процессов химической технологии: «Aspen Plus», «Aspen HYSYS», «CHEMCAD» и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химической технологии (см. п. 8.3).
4. Компьютерная молекулярная графика: бесплатно распространяемые (no fee, free, trial versions) на соответствующих сайтах (см. ниже) пакеты программ «ACD/Labs» («ACD/ChemSketch»), «MDL/ISIS» / «Symyx» / «Accelrys» / Dassault Systèmes («ISIS Draw» и более поздние версии этого продукта – «Symyx Draw», «Accelrys Draw»), «ChemOffice» («ChemDraw») и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химии (см. п. 8.3).
5. Специальные программные средства и технологии (программные продукты) важнейших информационно-поисковых систем по химии и химической технологии, доступные в режиме *online* на соответствующих сайтах, указанных в п. 8.3: поисковый инструмент БД CAS «SciFinder», поисковый инструмент БД REAXYS «Reaxys Chemistry Discovery Engine», поисковые инструменты БД Science Direct, Scopus, Web of Science, e-LIBRARY, STN International, ВИНТИ, Роспатента, The US Patent and Trademark Office, European Patent Office, MEDLINE (PubChem), Cambridge Structural Database.
6. ИПС «Web ИРБИС» для поиска библиографической информации на сайте ФБ СПбГТИ (ТУ)).

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

См. раздел 8.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс».

11 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для проведения занятий по дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии» имеется необходимая материально-техническая база:

лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным проектором с проекционным экраном; компьютерный класс с подключенными к локальной сети СПбГТИ (ТУ) периферийными устройствами и выходом в Интернет через институтский сервер; компьютерное (*hardware*) и программное (*software*) обеспечение для выполнения практических работ; лабораторные помещения с приборами и оборудованием для выполнения НИР.

Перечень учебных помещений и их оборудования

| Адрес | Наименование оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий | Оснащенность оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий |
|--|---|---|
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, аудитория (помещение №6) | Специализированная мебель (56 посадочных мест), доска меловая/маркерная, мультимедийный проектор с экраном, ноутбук |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, компьютерный класс (помещение №5) | Специализированная мебель (компьютерные столы, 15 рабочих мест), персональные компьютеры, 15 шт., с кабельным подключением к сети Интернет |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, учебная лаборатория (помещение № 29) | Специализированная мебель (лабораторные столы, вытяжные шкафы, 14 рабочих мест), насосы вакуумные мембранные, насосы вакуумные водоструйные, дистиллятор, шкафы сушильные (вакуумные), электронные весы, мешалки магнитные, устройства перемешивающие электромеханические, лабораторная химическая посуда, термометры, установка для перегонки с водяным паром, электрообогревающие устройства, оборудование для тонкослойной хроматографии, хроматоскоп, рН-метр |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, лаборатория спектральных методов исследований (помещения №№3, 4) | УФ-Вид спектрофотометры, ИК спектрофотометр |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, лаборатория синтеза гетероциклических соединений (помещение №2) | Микроволновый реактор, ротационный испаритель |

| Адрес | Наименование оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий | Оснащенность оборудованных учебных кабинетов/объектов для проведения практических занятий |
|--|--|--|
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, помещение для самостоятельной работы студентов (помещение №1) | Специализированная мебель (12 посадочных мест), доска меловая, демонстрационный экран |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования (помещение №20) | Специализированная мебель, оборудование для профилактического обслуживания учебного оборудования |

Перечень компьютерной техники и сетевого оборудования

| Наименование и марка оборудования | Назначение и краткая характеристика оборудования | Год ввода в эксплуатацию |
|--|--|--------------------------|
| Проектор Acer X113PH_800×600 | Презентация иллюстративных материалов | 2016 |
| Компьютерный класс кафедры, компьютеры PC, 15 шт. | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2017 |
| Ноутбук MSI GP72 6QF-273RU Cі7-6700HQ 2.6/17.3"FHD/GTX960/W10/8G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_Blac | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2016 |
| Ноутбук Asus X756UV Cі3-6100U 2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_ | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2016 |
| Ноутбук Asus X756UV Cі3-6100U 2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_ | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2016 |
| Ноутбук Asus X751MA PQC N3530 | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2014 |
| Ноутбук Asus X751MA PQC N3530 | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2014 |

| Наименование и марка оборудования | Назначение и краткая характеристика оборудования | Год ввода в эксплуатацию |
|---|---|--------------------------|
| Компьютер KEY HM Pro H-505- 4G1000_Ci5-4570 | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2014 |
| Компьютер KEY HM Pro H-505- 4G1000_Ci5-4570 | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2014 |
| Общеинститутские серверы | Кабельное сетевое соединение. Широкополосное проводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Кабельная технология Ethernet, скорость 100 Мбит в сек. | |
| Общеинститутские серверы | Беспроводное сетевое соединение. Беспроводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Беспроводная технология WiFi, скорость 50 Мбит в сек. | |

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с «Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГИ (ТУ)», утвержденным ректором 28.08.2014.

Приложение № 1.
Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
«Современные проблемы химии и химической технологии»

1. Перечень компетенций и этапов их формирования

| Компетенции | | |
|----------------------|---|--------------------------|
| Индекс | Формулировка | Этап формирования |
| ПК-3 (1) ПЕ-5 (2) | Разработка и сопровождение технологического процесса при производстве продуктов тонкого органического синтеза | промежуточный |
| ПК-4 (1) ПК-8 (2) | Управление испытаниями продукции тонкого органического синтеза | промежуточный |

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Показатели сформированности (дескрипторы) | Критерий оценивания | Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов) | | |
|---|---|---|---|--|--|
| | | | «удовлетворительно» (пороговый) | «хорошо» (средний) | «отлично» (высокий) |
| ПК-3.1 (1). ПК-5.1 (2). Разработка и внедрение технологического процесса для производства продуктов тонкого органического синтеза | Знает основные методы оптимизации (ЗН-1) | Правильные ответы на вопросы №1, 2, 4 к экзамену | Знание не полное, допускает частые ошибки в ответах на вопросы, но в основном справляется с ответами с помощью наводящих вопросов | Знание полное, допускает отдельные ошибки в ответах на вопросы, но полностью справляется с ответами с помощью наводящих вопросов | Знание полное, безошибочно отвечает на вопросы |
| | Умеет использовать математические модели процессов, определять параметры процессов в промышленных аппаратах (У-1) | Правильные ответы на вопросы №14, 15, 18 к экзамену | Реализует умение не в полной мере, допускает ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя | Реализует умение в полной мере, допускает отдельные ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя | Реализует умение безошибочно, в полной мере |
| | Владеет навыками определения оптимальных и рациональных технологических режимов работы оборудования (Н-1) | Правильные ответы на вопросы №16, 17 к экзамену | Владеет навыками не в полной мере, допускает ошибки в их использовании, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя | Владеет навыками в полной мере, допускает отдельные ошибки в их использовании, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя | Владеет навыками в полной мере |

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Показатели сформированности (дескрипторы) | Критерий оценивания | Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов) | | |
|--|---|--|---|--|--|
| | | | «удовлетворительно» (пороговый) | «хорошо» (средний) | «отлично» (высокий) |
| ПК-4.3 (1). ПК-8.1 (2). Руководство проведением работ по контролю производства продуктов тонкого органического синтеза | Знает основы управления химическими производствами (ЗН-2) | Правильные ответы на вопросы №9-11 к экзамену | Знание не полное, допускает частые ошибки в ответах на вопросы, но в основном справляется с ответами с помощью наводящих вопросов | Знание полное, допускает отдельные ошибки в ответах на вопросы, но полностью справляется с ответами с помощью наводящих вопросов | Знание полное, безошибочно отвечает на вопросы |
| | Умеет применять методы и алгоритмы оптимизации, а также соответствующие пакеты прикладных программ для оптимизации задач исследования, проектирования и управления химическими производствами (У-2) | Правильные ответы на вопросы №6, 8 к экзамену | Реализует умение не в полной мере, допускает ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя | Реализует умение в полной мере, допускает отдельные ошибки в применении знаний и навыков при реализации умения, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя | Реализует умение безошибочно, в полной мере |
| | Владеет навыками одномерной и многомерной оптимизации для определения оптимальных условий проведения химико-технологических процессов, управления ими и их проектирования (Н-2) | Правильные ответы на вопросы №3, 5, 7, 12, 13 к экзамену | Владеет навыками не в полной мере, допускает ошибки в их использовании, но в основном справляется с поставленной задачей с подсказками преподавателя | Владеет навыками в полной мере, допускает отдельные ошибки в их использовании, но полностью справляется с поставленной задачей с небольшими подсказками преподавателя | Владеет навыками в полной мере |

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

(соответствуют контрольным вопросам по дисциплине, см. разд. 6)

3.1 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-3 (1) и ПК-5 (2)

1. Основные понятия оптимизации ХТП.
2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП.
4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы.
14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов.
15. Оптимизация сложных равновесных процессов.
16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход.
17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП.
18. Современные системы управления ХТП.

3.2 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4 (1) и ПК-8 (2)

3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели
5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов.
6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС.
7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов.
8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции.
9. Последовательные необратимые реакции.
10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций.
11. Сложные реакции с обратимыми стадиями.
12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход.
13. Влияние температуры на селективность и выход.

4. Контрольные вопросы по дисциплине, используемые при текущем контроле успеваемости (контрольные работы), и варианты индивидуальных творческих домашних заданий

4.1 Вопросы контрольных работ

Контрольные работы охватывают следующие разделы дисциплины:

Контрольная работа 1

- 1) 1. Основные понятия оптимизации ХТП.
- 2) 2. Показатели эффективности ХТП. Технологические критерии эффективности. Качественные, экономические и другие критерии оптимизации ХТП.
- 3) 3. Модели химических реакторов. Периодический и непрерывный РИС. Реактор идеального вытеснения. Каскад РИС. Диффузионные, ячеечные модели.
- 4) 4. Методы оптимизации ХТП. Аналитические методы. Градиентные методы. Методы математического программирования. Статистические методы.

Контрольная работа 2

- 1) 5. Степень конверсии – параметр оптимизации ХТП. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов.
- 2) 6. Удельная производительность – параметр оптимизации. Сравнение удельной производительности идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС.
- 3) 7. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов.

Контрольная работа 3

- 1) 8. Селективность и выход – параметры оптимизации. Параллельные необратимые реакции.
- 2) 9. Последовательные необратимые реакции.
- 3) 10. Система необратимых последовательных и параллельных реакций.
- 4) 11. Сложные реакции с обратимыми стадиями.
- 5) 12. Влияние типа реакторов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход.
- 6) 13. Влияние температуры на селективность и выход.

Контрольная работа 4

- 1) 14. Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов.
- 2) 15. Оптимизация сложных равновесных процессов.
- 3) 16. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход.
- 4) 17. Применение экономических критериев при оптимизации ХТП.
- 5) 18. Современные системы управления ХТП.

Вопросы к КР-1

Основные понятия оптимизации ХТП

Основные понятия и определения, используемые при оптимизации химико-технологических процессов (ХТП). Классификация процессов химической технологии. Входные, управляющие, возмущающие и выходные параметры процесса. Стационарные процессы. Процессы с распределенными параметрами.

Показатели эффективности ХТП. Виды критериев оптимальности. Технологические и экономические критерии эффективности; их использование для оптимизации работы различных ХТП.

Математические модели химических реакторов. Идеальный периодический реактор полного смешения. Непрерывный реактор идеального вытеснения (РИВ). Непрерывный реактор идеального смешения (РИС). Каскад реакторов идеального смешения. Диффузионные, ячеечные, комбинированные модели химических реакторов. Математические модели тепловых и массообменных процессов в химических аппаратах.

Обзор математических методов оптимизации ХТП. Аналитические методы оптимизации; методы математического программирования; градиентные методы; статистические методы; автоматические самонастраивающиеся системы управления.

Вопросы к КР-2

Управление химико-технологическими процессами. Часть 1

Степень конверсии – параметр оптимизации. Применение степени превращения (конверсии), как параметра оптимизации для различных ХТП. Влияние внешних параметров процесса и аппаратного оформления на степень конверсии в простых реакциях. Влияние внешних параметров процесса и аппаратного оформления на степень конверсии в сложных реакциях. Оптимизация степени конверсии гетерогенно-каталитических процессов.

Удельная производительность химических реакторов и их сочетаний. Удельная производительность идеальных реакторов. Удельная производительность каскада РИС. Взаимосвязь удельных производительностей различных типов реакторов. Удельная производительность различных сочетаний идеальных реакторов. Влияние параметров процесса на удельную производительность реакторов в простых и сложных реакциях.

Вопросы к КР-3

Управление химико-технологическими процессами. Часть 2

Селективность и выход – критерии оптимизации. Селективность и выход в сложных реакциях. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для параллельных необратимых реакций, протекающих в РИС. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для параллельных необратимых реакций, протекающих в РИВ. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для последовательных необратимых реакций, протекающих в РИС. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для последовательных необратимых реакций, протекающих в РИВ. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для системы параллельных и последовательных необратимых реакций, протекающих в РИС. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для системы параллельных и последовательных необратимых реакций, протекающих в РИВ. Влияние способа введения реагентов на селективность и выход в сложных реакциях. Влияние температуры на селективность процесса. Зависимость селективности и выхода от концентрации реагентов и степени конверсии для сложных реакций с обратимыми стадиями.

Вопросы к КР-4

Управление химико-технологическими процессами. Часть 3

Оптимизация равновесных процессов. Постановка задачи. Оптимизация простых равновесных процессов. Оптимизация сложных равновесных процессов.

Оптимизация процессов химической технологии по экономическим критериям эффективности. Экономические критерии эффективности. Себестоимость, приведенные затраты, прибыль, доход. Использование экономических критериев при оптимизации различных ХТП. Современные системы управления ХТП.

4.2. Тестовые задачи, используемые при текущем контроле знаний студентов, и варианты индивидуальных творческих домашних заданий

Темы индивидуальных домашних заданий

| № п/п | Тема |
|-------|---|
| 1 | Методы оптимизации ХТП |
| 2 | Оптимизация работы реакционного аппарата, в котором протекает сложная химическая реакция |
| 3 | Оптимизация термодинамически равновесных процессов химической технологии |
| 4 | Нахождение оптимальных условий проведения процесса с использованием экономических критериев оптимизации |

Индивидуальное задание № 1

1. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения реакции гидролиза эпихлоргидрина, обеспечивающие максимальный выход глицерина, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура, концентрация щелочи.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры 60 – 100 °С;
- концентрации щелочи 10 – 200 г/л.

Координаты исходной точки:

- температура 65°С;
- концентрация щелочи 180 г/л.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_1».

2. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения реакции гидролиза эпихлоргидрина, обеспечивающие максимальный выход глицерина, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура, концентрация щелочи.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры 60 – 100 °С;
- концентрации щелочи 10 – 200 г/л.

Координаты исходной точки:

- температура 95°C;
- концентрация щелочи 70 г/л.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_2».

3. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения реакции гидролиза эпихлоргидрина, обеспечивающие максимальный выход глицерина, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура, концентрация щелочи.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры 60 – 100 °C;
- концентрации щелочи 10 – 200 г/л.

Координаты исходной точки:

- температура 95°C;
- концентрация щелочи 100 г/л.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_3».

4. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения реакции гидролиза эпихлоргидрина, обеспечивающие максимальный выход глицерина, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура, концентрация щелочи.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры 60 – 100 °C;
- концентрации щелочи 10 – 200 г/л.

Координаты исходной точки:

- температура 95°C;
- концентрация щелочи 180 г/л.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_4».

5. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса дегидрирования этилбензола, обеспечивающие максимальный выход стирола, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура процесса, степень разбавления исходного сырья водяным паром.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры 550 – 700 °C;
- массовое отношение пар/этилбензол 1 – 5.

Координаты исходной точки:

- температура 560°C;
- массовое отношение пар:этилбензол 4,5.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_5».

6. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса дегидрирования этилбензола, обеспечивающие максимальный выход стирола, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура процесса, степень разбавления исходного сырья водяным паром.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры $550 - 700 \text{ }^\circ\text{C}$;
- массовое отношение пар/этилбензол 1 – 5.

Координаты исходной точки:

- температура 560°C ;
- массовое отношение пар:этилбензол 3,0.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_6».

7. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса дегидрирования этилбензола, обеспечивающие максимальный выход стирола, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура процесса, степень разбавления исходного сырья водяным паром.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры $550 - 700 \text{ }^\circ\text{C}$;
- массовое отношение пар/этилбензол 1 – 5.

Координаты исходной точки:

- температура 560°C ;
- массовое отношение пар:этилбензол 1,5.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_7».

8. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса дегидрирования этилбензола, обеспечивающие максимальный выход стирола, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает температура процесса, степень разбавления исходного сырья водяным паром.

Допустимые интервалы варьирования:

- температуры $550 - 700 \text{ }^\circ\text{C}$;
- массовое отношение пар/этилбензол 1 – 5.

Координаты исходной точки:

- температура 690°C ;
- массовое отношение пар:этилбензол 1,5.

Провести только поиск максимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_8».

9. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса окисления этилена в ацетальдегид, обеспечивающие минимальный выход побочных продуктов, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает время контакта, концентрация HCl в катализаторном растворе.

Допустимые интервалы варьирования:

- времени контакта 0,1 – 2 с;
- концентрации HCl 5 – 20 % масс.

Координаты исходной точки:

- время контакта 1,8 с;
- концентрация HCl 7 % масс.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_9».

10. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса окисления этилена в ацетальдегид, обеспечивающие минимальный выход побочных продуктов, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает время контакта, концентрация HCl в катализаторном растворе.

Допустимые интервалы варьирования:

- времени контакта 0,1 – 2 с;
- концентрации HCl 5 – 20 % масс.

Координаты исходной точки:

- время контакта 1,3 с;
- концентрация HCl 7 % масс.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_10».

11. Используя симплексный метод для планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса окисления этилена в ацетальдегид, обеспечивающие минимальный выход побочных продуктов, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает время контакта, концентрация HCl в катализаторном растворе.

Допустимые интервалы варьирования:

- времени контакта 0,1 – 2 с;
- концентрации HCl 5 – 20 % масс.

Координаты исходной точки:

- время контакта 0,8 с;
- концентрация HCl 7 % масс.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_11».

12. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса окисления этилена в ацетальдегид, обеспечивающие

минимальный выход побочных продуктов, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает время контакта, концентрация HCl в катализаторном растворе.

Допустимые интервалы варьирования:

- времени контакта 0,1 – 2 с;
- концентрации HCl 5 – 20 % масс.

Координаты исходной точки:

- время контакта 0,6 с;
- концентрация HCl 7 % масс.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_12».

13. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса гидратации этилена в этанол, обеспечивающие минимальный расход этилена, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает давление и мольное отношение этилена к водяному пару.

Допустимые интервалы варьирования:

- давления 50 – 100 атм;
- мольного соотношения этилен/пар 0,5 – 2.

Координаты исходной точки:

- давление 55 атм;
- мольное соотношение этилен/пар 0,6.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_13».

14. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса гидратации этилена в этанол, обеспечивающие минимальный расход этилена, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает давление и мольное отношение этилена к водяному пару.

Допустимые интервалы варьирования:

- давления 50 – 100 атм;
- мольного соотношения этилен/пар 0,5 – 2.

Координаты исходной точки:

- давление 65 атм;
- мольное соотношение этилен/пар 0,6.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_14».

15. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса гидратации этилена в этанол, обеспечивающие минимальный расход этилена, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает давление и мольное отношение этилена к водяному пару.

Допустимые интервалы варьирования:

- давления 50 – 100 атм;
- мольного соотношения этилен/пар 0,5 – 2.

Координаты исходной точки:

- давление 85 атм;
- мольное соотношение этилен/пар 1,9.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_15».

16. Используя симплексный метод планирования экспериментов найти оптимальные условия проведения процесса гидратации этилена в этанол, обеспечивающие минимальный расход этилена, если известно, что наибольшее влияние на реакцию оказывает давление и мольное отношение этилена к водяному пару.

Допустимые интервалы варьирования:

- давления 50 – 100 атм;
- мольного соотношения этилен/пар 0,5 – 2.

Координаты исходной точки:

- давление 95 атм;
- мольное соотношение этилен/пар 1,9.

Провести только поиск минимума.

Примечание: использовать для генерации экспериментальных данных программу «Task_16».

Индивидуальное задание № 2

1. Жидкофазная реакция

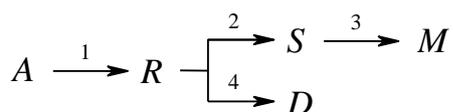


протекает в реакторе идеального смешения без изменения плотности реакционной массы. Константы скорости реакций: $k_1 = 0,01 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,024 \text{ с}^{-1}$. В начальный момент времени концентрации R и S равны нулю.

Определить максимальную относительную концентрацию продукта R ; степень конверсии исходного вещества A и относительную концентрацию продукта S при максимальном выходе продукта R .

Ответ: 0,154; 0,392; 0,238.

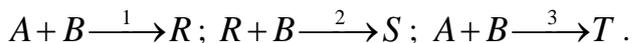
2. Определить объем непрерывного РИС, необходимый для того, чтобы при проведении в нем реакции



получить максимальную относительную концентрацию продукта R при скорости подачи $W_0 = 0,0041 \text{ м}^3/\text{с}$. Константы скорости реакций: $k_1 = 0,001 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,0014 \text{ с}^{-1}$; $k_3 = 0,002 \text{ с}^{-1}$; $k_4 = 0,0016 \text{ с}^{-1}$. Найти при этом степень превращения X_A и относительные концентрации остальных продуктов реакции. В начальный момент времени продукты реакции отсутствуют.

Ответ: $C_R = 0,134$; $X_A = 0,366$; $V = 2,37 \text{ м}^3$; $C_S = 0,0502$; $C_A = 0,634$; $C_M + C_D = 0,182$.

3. В реакторе идеального смешения протекают 3 реакции:



Скорости реакций описываются следующими уравнениями:

$r_R = k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_R \cdot C_B$; $r_S = k_2 \cdot C_R \cdot C_B$; $r_T = k_3 \cdot C_A \cdot C_B$. Известны константы скорости этих реакций, которые равны соответственно [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$]: $k_1 = 0,021$; $k_2 = 0,018$; $k_3 = 0,005$. Процесс проводится при начальных концентрациях исходных веществ A и B , равных $C_{A,0} = 2,0 \text{ кмоль/м}^3$, $C_{B,0} = 2,3 \text{ кмоль/м}^3$. В исходной смеси продукты реакции отсутствуют. Плотность реакционной смеси не изменяется.

Определить максимальную производительность реактора по продукту R , если скорость подачи веществ равна $W_0 = 0,005 \text{ м}^3/\text{с}$ и концентрации веществ A , B и R на выходе из реактора при максимальной производительности реактора по продукту R .

Ответ: $0,00241 \text{ кмоль/с}$; $0,908 \text{ кмоль/м}^3$; $0,807 \text{ кмоль/м}^3$; $0,481 \text{ кмоль/м}^3$.

4. В РИС объемом $0,9 \text{ м}^3$, работающем непрерывно, протекают 2 реакции:

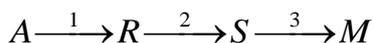


где R – продукт реакции; S – побочный продукт. Константы скорости реакций $k_1 = 0,0009 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_2 = 0,0011 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Концентрации исходных веществ на входе в реактор: $C_{A,0} = 1 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1 \text{ кмоль/м}^3$.

Определить степень конверсии исходного вещества A , при которой достигается максимальный выход продукта R ; максимальный выход продукта R ; скорость подачи исходных реагентов.

Ответ: $0,724$; $0,226$; $0,000247 \text{ м}^3/\text{с}$.

5. Жидкофазная реакция

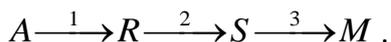


протекает в непрерывном РИВ объемом $V = 1,8 \text{ м}^3$ без изменения плотности реакционной массы. Константы скорости $k_1 = 0,0016 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,0024 \text{ с}^{-1}$; $k_3 = 0,0008 \text{ с}^{-1}$.

Определить степень конверсии исходного вещества A , при которой наблюдается максимальная относительная концентрация продукта R на выходе из реактора; скорость подачи вещества A в реактор при этих условиях.

Ответ: $C_R = 0,296$; $X_A = 0,560$; $W_0 = 0,00356 \text{ м}^3/\text{с}$.

6. В реакторе идеального вытеснения, объемом $V = 1,8 \text{ м}^3$ проходит реакция

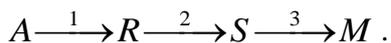


Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,0016$; $k_2 = 0,0024$; $k_3 = 0,0008$. На входе в реактор концентрации веществ R , S и M равны нулю. Изменения плотности реакционной массы не происходит.

Определить максимальную относительную концентрацию продукта S ; степень превращения исходного вещества A и скорость подачи вещества A в реактор при этих условиях.

Ответ: $0,445$; $0,890$; $0,00131 \text{ м}^3/\text{с}$.

7. В реакторе идеального смешения объемом $V = 1,8 \text{ м}^3$ проходит реакция

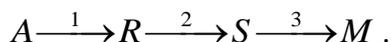


Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,0016$; $k_2 = 0,0024$; $k_3 = 0,0008$. На входе в реактор концентрации веществ R , S и M равны нулю. Изменения плотности реакционной массы не происходит.

Определить максимальную относительную концентрацию продукта R ; степень превращения исходного вещества A и скорость подачи вещества A в реактор при этих условиях.

Ответ: 0,202; 0,449; 0,00353 $\text{м}^3/\text{с}$.

8. В реакторе идеального смешения объемом $V = 1,8 \text{ м}^3$ проходит реакция

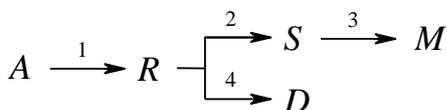


Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,0016$; $k_2 = 0,0024$; $k_3 = 0,0008$. На входе в реактор концентрации веществ R , S и M равны нулю. Изменения плотности реакционной массы не происходит.

Определить максимальную относительную концентрацию продукта S ; степень превращения исходного вещества A и скорость подачи вещества A в реактор при этих условиях.

Ответ: 0,251; 0,695; 0,00126 $\text{м}^3/\text{с}$.

9. Определить объем непрерывного РИВ, необходимый для того, чтобы при проведении в нем реакции

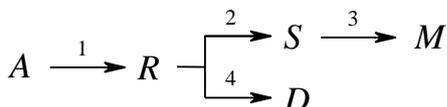


получить максимальную относительную концентрацию продукта R при скорости подачи $W_0 = 0,0041 \text{ м}^3/\text{с}$.

Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,001$; $k_2 = 0,0014$; $k_3 = 0,002$; $k_4 = 0,0016$. Найти при этом степень превращения X_A и относительные концентрации остальных продуктов реакции. В начальный момент времени продукты реакции отсутствуют.

Ответ: $C_R = 0,192$; $X_A = 0,422$; $V = 2,25 \text{ м}^3$; $C_S = 0,072$; $C_A = 0,578$; $C_M + C_D = 0,158$.

10. Определить объем непрерывного РИВ, необходимый для того, чтобы при проведении в нем реакции

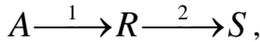


получить максимальную относительную концентрацию продукта S при скорости подачи $W_0 = 0,0041 \text{ м}^3/\text{с}$.

Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,001$; $k_2 = 0,0014$; $k_3 = 0,002$; $k_4 = 0,0016$. Найти при этом степень превращения X_A и относительные концентрации остальных продуктов реакции. В начальный момент времени продукты реакции отсутствуют.

Ответ: $C_S = 0,104$; $X_A = 0,666$; $V = 4,5 \text{ м}^3$; $C_R = 0,148$; $C_A = 0,334$; $C_M + C_D = 0,414$.

11. Жидкофазная реакция

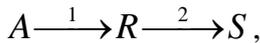


в которой продуктом является вещество R , протекает в реакторе идеального вытеснения без изменения плотности реакционной массы. Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1=0,01$; $k_2=0,024$. В начальный момент времени концентрации R и S равны нулю.

Определить максимальную относительную концентрацию продукта R ; степень конверсии исходного вещества A и относительную концентрацию продукта S при максимальном выходе продукта R .

Ответ: 0,223; 0,465; 0,242.

12. Реакция



проводится в реакторе идеального смешения с рециклом (рис. В.2.1). Константы скорости реакции (с^{-1}) $k_1=0,0037$; $k_2=0,0024$. Объем реактора $V = 1,0 \text{ м}^3$. Исходная концентрация вещества A $C_{A,0 \text{ вх}}=1,0 \text{ кмоль/м}^3$. Производительность системы по исходному веществу $F_{A,0 \text{ вх}}=0,00125 \text{ кмоль/с}$. В исходной смеси продукты отсутствуют. На узле разделения полностью отделяются продукты от непрореагировавшего вещества A . Реакционный узел работает таким образом, что достигается максимальная концентрация продукта R в реакционной смеси.

Определить отношение объемной скорости рецикла к общей скорости подачи; производительность системы по продукту; концентрацию вещества A на входе в реактор, на выходе из реактора, в рециркуляте.

Ответ: 1,383; 0,000692 кмоль/с; 0,757 кмоль/м³; 0,338 кмоль/м³; 0,400 кмоль/м³.

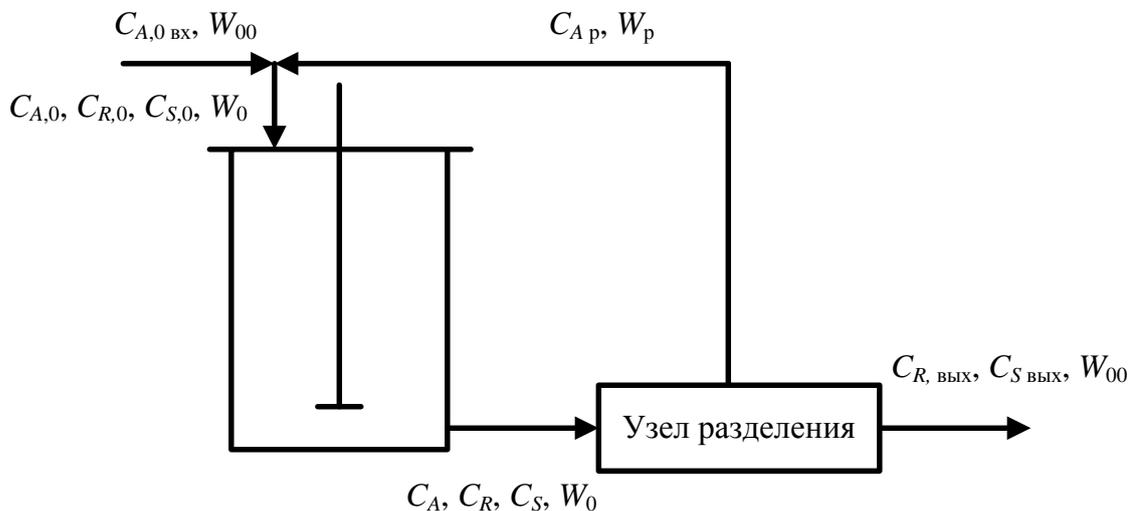
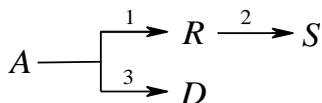


Рис. В.2.1. Проточный реактор идеального смешения с рециклом

13. В непрерывнодействующем реакторе идеального вытеснения проходит реакция

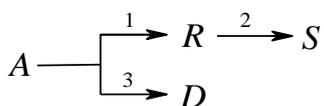


где R – продукт реакции. Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,00021$; $k_2 = 0,00035$; $k_3=0,00018$. На входе в реактор концентрации продуктов реакций равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Определить относительную максимальную концентрацию продукта R ; степень превращения исходного вещества A ; относительные концентрации остальных продуктов.

Ответ: 0,209; 0,651; $C_S = 0,142$; $C_D = 0,300$.

14. В непрерывнодействующем реакторе идеального смешения проходит реакция

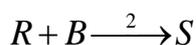
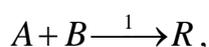


где R – продукт реакции. Константы скорости реакций (с^{-1}): $k_1 = 0,00021$; $k_2 = 0,00035$; $k_3 = 0,00018$. На входе в реактор концентрации продуктов реакций равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Определить относительную максимальную концентрацию продукта R ; степень превращения исходного вещества A ; относительные концентрации остальных продуктов.

Ответ: 0,142; 0,514; $C_S = 0,135$; $C_D = 0,237$.

15. Реакции

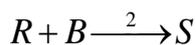
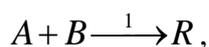


протекают в реакторе идеального вытеснения. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1 = 0,0352$; $k_2 = 0,0812$. Начальные концентрации исходных веществ $C_{A,0} = 0,037$ $\text{кмоль}/\text{м}^3$; $C_{B,0} = 0,081$ $\text{кмоль}/\text{м}^3$.

Определить максимальный выход продукта R ; концентрации остальных веществ при его максимальном выходе.

Ответ: 0,228; $C_A = 0,01954$; $C_B = 0,05452$; $C_R = 0,00845$; $C_S = 0,00902$.

16. Реакции

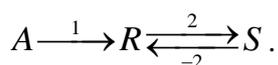


протекают в реакторе идеального смешения. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1 = 0,0352$; $k_2 = 0,0812$. Начальные концентрации исходных веществ: $C_{A,0} = 0,037$ $\text{кмоль}/\text{м}^3$; $C_{B,0} = 0,081$ $\text{кмоль}/\text{м}^3$.

Определить максимальный выход продукта R ; концентрации остальных веществ при максимальном выходе продукта R .

Ответ: 0,158; $C_A = 0,02231$; $C_B = 0,05745$; $C_R = 0,00583$; $C_S = 0,00886$.

17. В реакторе идеального вытеснения объемом $1,1 \text{ м}^3$ протекает реакция

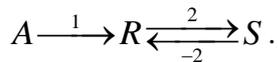


Константы скорости (с^{-1}) $k_1 = 0,0082$; $k_2 = 0,0036$; $k_3 = 0,0014$. На входе в реактор концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Найти максимальный выход по продукту R и скорость подачи исходного вещества A .

Ответ: 0,547; $0,00554 \text{ м}^3/\text{с}$.

18. В реакторе идеального смешения объемом $1,1 \text{ м}^3$ протекает реакция

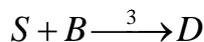
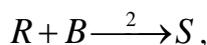
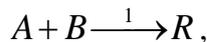


Константы скорости (с^{-1}) $k_1 = 0,0082$; $k_2 = 0,0036$; $k_3 = 0,0014$. На входе в реактор концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Найти максимальный выход по продукту R и скорость подачи исходного вещества A .

Ответ: $0,404$; $0,0039 \text{ м}^3/\text{с}$.

19. Реакции

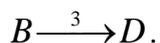
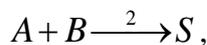
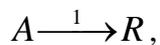


протекают в непрерывнодействующем РИВ. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1 = 0,01$; $k_2 = 0,02$; $k_3 = 0,03$. На входе в реактор $C_{A,0} = C_{B,0}$, а концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Найти максимальный выход по продукту R и степень конверсии исходного вещества A .

Ответ: $0,250$; $0,500$.

20. В РИС проводится процесс

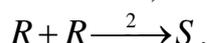
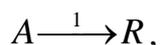


Константы скорости $k_1 = 0,0048 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,012 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_3 = 0,0069 \text{ с}^{-1}$. Начальные концентрации исходных веществ: $C_{A,0} = 0,8 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,0 \text{ кмоль/м}^3$. В начальный момент времени продукты реакции отсутствуют.

Определить максимальный выход по продукту S ; степень превращения исходного вещества A .

Ответ: $0,285$; $0,610$.

21. В реакторе идеального вытеснения объемом 4 м^3 проводятся реакции

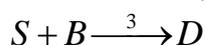
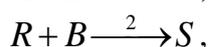
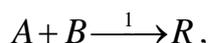


Константы скорости $k_1 = 0,012 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,0048 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Начальная концентрация вещества A $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$. В начальный момент времени продукты реакции отсутствуют.

Определить максимальный выход продукта R , степень конверсии и скорость подачи исходного вещества в реактор, при которой достигается максимальный выход продукта R .

Ответ: $0,624$; $0,813$; $0,0286 \text{ м}^3/\text{с}$.

22. Реакции

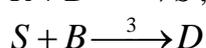
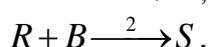
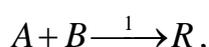


протекают в непрерывнодействующем РИВ. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1 = 0,01$; $k_2 = 0,02$; $k_3 = 0,03$. На входе в реактор $C_{B,0} = 2C_{A,0}$, а концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Найти максимальный выход по продукту S и степень конверсии исходного вещества A .

Ответ: 0,148; 0,666.

23. Реакции

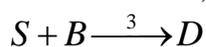
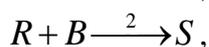
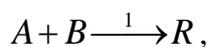


протекают в непрерывнодействующем РИС. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1 = 0,01$; $k_2 = 0,02$; $k_3 = 0,03$. На входе в реактор $C_{B,0} = 2C_{A,0}$, а концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Найти максимальный выход по продукту R и степень конверсии исходного вещества A .

Ответ: 0,172; 0,414.

24. Реакции

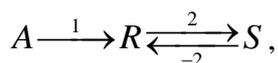


протекают в непрерывнодействующем РИС. Константы скорости [$\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$] $k_1 = 0,01$; $k_2 = 0,02$; $k_3 = 0,03$. На входе в реактор $C_{B,0} = 2C_{A,0}$, а концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Найти максимальный выход по продукту S и степень конверсии исходного вещества A .

Ответ: 0,084; 0,532.

25. Для РИС, в котором протекает реакция

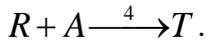
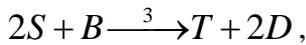
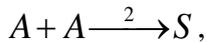
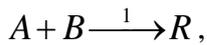


найти максимальный выход по продукту R и объем реактора при скорости подачи исходного реагента A $W_0 = 0,0045 \text{ м}^3/\text{с}$.

Константы скорости (с^{-1}) $k_1=0,0082$; $k_2=0,0036$; $k_{-2}=0,0014$. На входе в реактор концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Ответ: 0,404; $1,28 \text{ м}^3$.

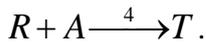
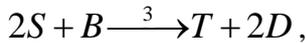
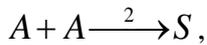
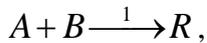
26. В реакторе идеального смешения проходят реакции:



Начальные концентрации веществ $C_{A,0} = 2,0$ кмоль/м³; $C_{B,0} = 1,7$ кмоль/м³; объемная скорость подачи исходных веществ $W_0 = 0,01$ м³/с. Считать, что плотность реакционной массы не меняется, а концентрации продуктов на входе в реактор равны нулю. Константы скорости реакций [(м³/(кмоль·с))] $k_1=0,021$, $k_2=0,018$; $k_3=0,01$; $k_4=0,005$.

Определить объем реактора, необходимый для того, чтобы обеспечить максимальную производительность реактора [кмоль/с] по веществу R .

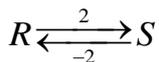
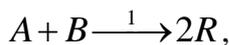
27. В реакторе идеального смешения проходят реакции:



Начальные концентрации веществ: $C_{A,0} = 2,0$ кмоль/м³; $C_{B,0} = 1,7$ кмоль/м³; объемная скорость подачи исходных веществ $W_0 = 0,01$ м³/с. Считать, что плотность реакционной массы не меняется, а концентрации продуктов на входе в реактор равны нулю. Константы скорости реакций [(м³/(кмоль·с))]: $k_1=0,021$; $k_2=0,018$; $k_3=0,01$; $k_4=0,005$.

Определить объем реактора, необходимый для того чтобы обеспечить максимальную производительность реактора [кмоль/с] по веществу S .

28. Реакции



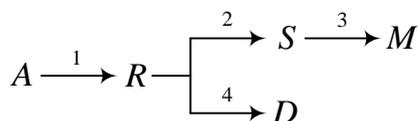
проводятся в реакторе идеального вытеснения.

Константы скорости реакций: $k_1=0,002$ м³/(кмоль·с); $k_2=0,0032$ с⁻¹; $k_{-2} = 0,0008$ с⁻¹. Считать, что плотность реакционной массы не меняется, а концентрации продуктов в исходной смеси равны нулю. Объем реактора $V_p=1,6$ м³. Начальные концентрации исходных веществ: $C_{A,0}=1,05$ кмоль/м³; $C_{B,0} = 2,40$ кмоль/м³.

Определить объемную скорость подачи исходной смеси, при которой достигается максимальный выход по продукту R , производительность реактора по целевому продукту R .

Ответ: $0,00569$ м³/с; $0,00495$ кмоль/с.

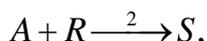
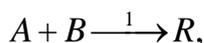
29. Определить объем непрерывного РИС, необходимый для того, чтобы при проведении в нем реакции



получить максимальную относительную концентрацию продукта S при скорости подачи $W_0 = 0,0041 \text{ м}^3/\text{с}$. Константы скорости реакций: $k_1 = 0,001 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,0014 \text{ с}^{-1}$; $k_3 = 0,002 \text{ с}^{-1}$; $k_4 = 0,0016 \text{ с}^{-1}$. Найти при этом степень превращения X_A и относительные концентрации остальных продуктов реакции. В начальный момент времени продукты реакции отсутствуют.

Ответ: $C_S = 0,0586$; $X_A = 0,532$; $V = 4,66 \text{ м}^3$; $C_R = 0,121$; $C_A = 0,468$; $C_M + C_D = 0,358$.

30. В реакторе идеального вытеснения объемом $0,9 \text{ м}^3$, работающем непрерывно, протекают 2 реакции:



где R – продукт реакции; S – побочный продукт. Константы скорости реакций $k_1 = 0,0009 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_2 = 0,0011 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Концентрации исходных веществ на входе в реактор: $C_{A,0} = 1 \text{ кмоль}/\text{м}^3$; $C_{B,0} = 1 \text{ кмоль}/\text{м}^3$.

Определить степень конверсии исходного вещества A , при которой достигается максимальный выход продукта R ; максимальный выход продукта R ; скорость подачи исходных реагентов.

Ответ: $0,857$; $0,331$; $0,000380 \text{ м}^3/\text{с}$.

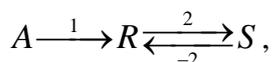
31. Реакция $A \xrightarrow{1} R \xrightarrow{2} S \xrightarrow{3} M$ протекает в каскаде из 3-х реакторов идеального смешения одинакового объема, $V = 1,8 \text{ м}^3$.

Константы скорости реакций (с^{-1}) $k_1 = 0,0016$; $k_2 = 0,0024$; $k_3 = 0,0008$. На входе в реактор концентрации веществ R , S и M равны нулю. Изменения плотности реакционной массы не происходит.

Определить максимальную относительную концентрацию продукта S ; степень превращения исходного вещества A и скорость подачи вещества A в реакционный узел при этих условиях.

Ответ: $0,347$; $0,815$; $0,0038 \text{ м}^3/\text{с}$.

32. Для РИВ, в котором протекает реакция



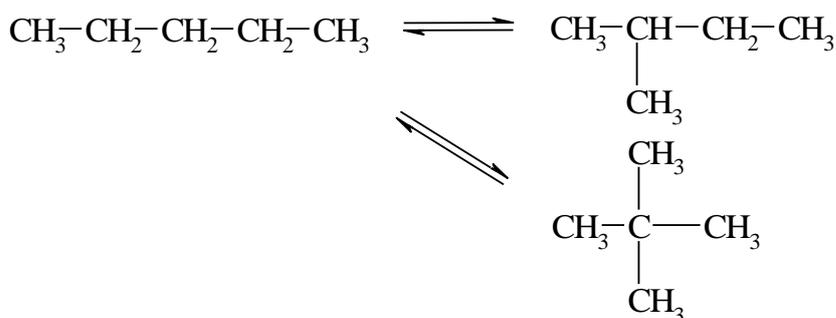
найти максимальный выход по продукту R и объем реактора при скорости подачи исходного реагента A $W_0 = 0,0045 \text{ м}^3/\text{с}$.

Константы скорости (с^{-1}) $k_1 = 0,0082$; $k_2 = 0,0036$; $k_{-2} = 0,0014$. На входе в реактор концентрации продуктов реакции равны нулю. Плотность реакционной смеси не меняется.

Ответ: $0,546$; $0,894 \text{ м}^3$; $X_A = 0,804$.

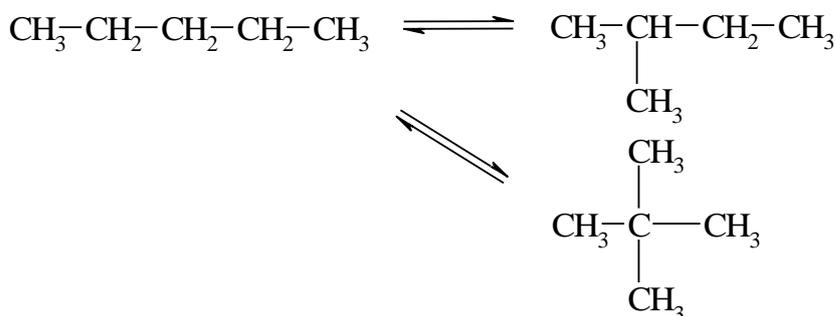
Индивидуальное задание № 3

1. Найти оптимальную температуру, при которой достигается максимальный равновесный выход 2 - метилбутана при изомеризации n -пентана.



Реакция проводится в газовой фазе с использованием алюмосиликатного катализатора в температурном интервале 400 ... 700 К, при давлении 1 ата.

2. Найти оптимальную температуру, при которой достигается максимальный равновесный выход 2-метилбутана при изомеризации *n*-пентана.

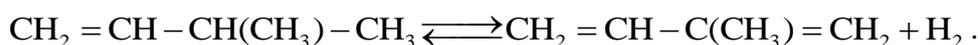


Реакция проводится в газовой фазе с использованием алюмосиликатного катализатора в температурном интервале 400...700 К, при давлении 5 ата. Учсть, что возможно протекание следующей реакции:

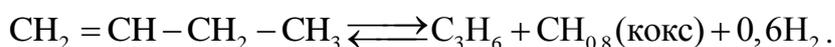


3. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов – *цис*-бутена-2 и *транс*-бутена-2, при гетерогеннокаталитической изомеризации 2-метилпропена (изобутена). В равновесной смеси находятся 4 изомерных бутена: бутен-1, *цис*-бутен-2, *транс*-бутен-2, 2-метилпропен. Температурный интервал реакции 500...1100 К.

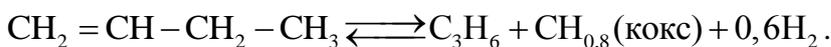
4. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов – 2-метилбутена-1 и 3-метилбутена-1, при гетерогеннокаталитической изомеризации 2-метилбутена-2. Температурный интервал реакции - 400 ... 800 К; давление – 1 атм. Побочная реакция



5. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов – *цис*-бутена-2 и *транс*-бутена-2, при гетерогеннокаталитической изомеризации 2-метилпропена (изобутена). В равновесной смеси находятся 4 изомерных бутена: бутен-1, *цис*-бутен-2, *транс*-бутен-2, 2-метилпропен. Температурный интервал реакции – 400...700 К, давление – 10 ата. Побочная реакция



6. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу *n*-бутенов, при гетерогеннокаталитической изомеризации 2 - метилпропена (изобутена). В равновесной смеси находятся 4 изомерных бутена: бутен-1, *цис*-бутен-2, *транс*-бутен-2, 2 - метилпропен. Температурный интервал реакции – 400 ... 700 К, давление – 10 ата. Побочная реакция



7. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному мольному содержанию оксида углерода в «сухом» синтез-газе при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 800°C и давлении 20 ата. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



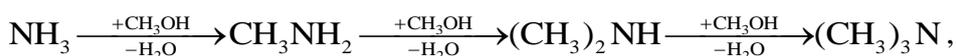
8. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному мольному содержанию водорода в равновесной смеси при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 800°C и давлении 20 ата. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



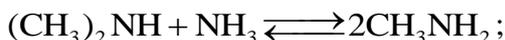
9. Процесс каталитической водяной конверсии метана проводится при 800°C и давлении 20 ата. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, при котором отношение $\text{H}_2:\text{CO}$ в конвертированном газе равно 3,5:1. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



10. При аммонолизе метанола



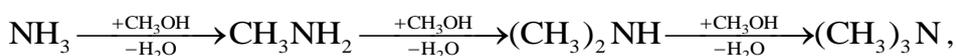
в случае необратимости записанных реакций, равновесие устанавливается за счет протекания реакций диспропорционирования:



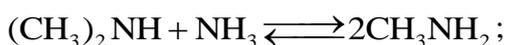
Реакцию проводят при 50 ата и 623 К.

Найти мольное соотношение метанола к аммиаку при котором достигается максимальный выход метиламина в равновесной смеси на выходе из реактора.

11. При аммонолизе метанола



в случае необратимости записанных реакций, равновесие устанавливается за счет протекания реакций диспропорционирования:



Реакцию проводят при 50 ата и 623 К.

Найти мольное соотношение метанола к аммиаку при котором достигается максимальный выход диметиламина в равновесной смеси на выходе из реактора.

12. При парофазной гидратации этилена протекают две независимые реакции



Реакцию проводят при 80 ата и 573 К.

Найти мольное соотношение водяного пара к этилену при котором достигается максимальное содержание этанола в равновесной смеси на выходе из реактора.

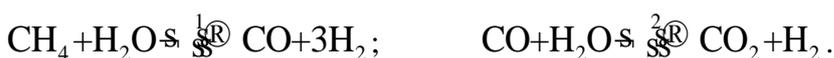
13. При синтезе метанола протекают две независимые реакции:



Реакцию проводят при 80 ата и температуре 483...543 К. Состав синтез-газа, % об.: CO – 14,474; CO₂ – 7,514; H₂ – 73,561; N₂ – 0,290; CH₄ – 3,694; H₂O – 0,467.

Найти температуру при которой достигается максимальное содержание метанола в жидком продукте (в метаноле-сырце).

14. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному мольному содержанию оксида углерода в «сухом» синтез-газе при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 860°С и давлении 25 ата. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают две независимые реакции:



15. Определить предельные температуры жидкофазного и газофазного процесса получения метил-*трет*-бутилового эфира (МТБЭ) из метанола и изобутена при которых равновесный выход МТБЭ не ниже 0,9. Мольное соотношение метанол/изобутен принять равным 1,02; фракция C₄ содержит 30% изобутена; давление для газофазного процесса – 1,6 ата; давление для жидкофазного – 10 ата.

16. Определить предельные температуры жидкофазного и газофазного процесса получения метил-*трет*-бутилового эфира (МТБЭ) из метанола и *трет*-бутилового спирта при которых равновесный выход МТБЭ не ниже 0,9. Мольное соотношение метанол/*трет*-бутиловый спирт принять равным 1,02; давление для газофазного процесса – 1,2 ата; давление для жидкофазного – 4 ата. При газофазном процессе исходная спиртовая шихта на 80% разбавлена азотом.

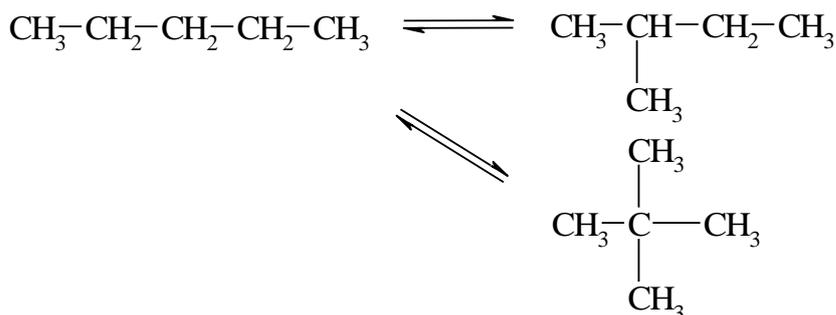
17. Процесс каталитической водяной конверсии метана проводится при 860°С и давлении 16 ата. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, при котором отношение H₂:CO в конвертированном газе равно 3,5:1. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



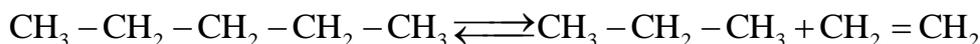
18. Определить мольное соотношение водяного пара к метану в исходной смеси, соответствующее максимальному мольному содержанию оксида углерода в «сухом» синтез-газе при каталитической конверсии метана. Реакция проводится при 860 °С и давлении 16 ата. При расчете равновесного состава контактного газа принять, что в системе протекают только две реакции:



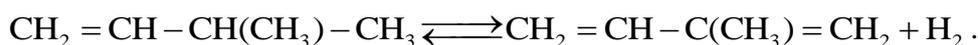
19. Найти оптимальную температуру, при которой достигается максимальный равновесный выход 2-метилбутана при изомеризации н-пентана.



Реакция проводится в газовой фазе с использованием алюмосиликатного катализатора в температурном интервале 400...700 К при давлении 10 ата. Учесть, что возможно протекание следующей реакции:



20. Определить температуру, соответствующую максимальному равновесному выходу суммы двух целевых продуктов – 2-метилбутена-1 и 3-метилбутена-1, при гетерогеннокаталитической изомеризации 2-метилбутена-2. Температурный интервал реакции – 400...800 К; давление – 10 атм. Побочная реакция



Индивидуальное задание № 4

1. Реакция

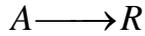


где R – продукт реакции. Константа скорости $k = 0,0078 \text{ м}^3/(\text{с}\cdot\text{кмоль})$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль}/\text{м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,0000254 \text{ кмоль}/\text{с}$; производительность реакционного узла по целевому продукту R $F_R = 0,0000129 \text{ кмоль}/\text{с}$. Цена вещества A – 14 руб/кмоль; вещества B – 68 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание проточного РИС – 0,0038 руб/(с·м³); проточного РИВ – 0,0182 руб/(с·м³).

Для обоих реакторов рассчитать объемы и определить оптимальный состав исходной смеси с тем, чтобы полные затраты на производство продукта были минимальными. Определить себестоимость и полные затраты на производство продукта.

Ответ: РИС – 287,45 руб/кмоль; 0,00371 руб/с; 0,328 м³; 1,22.
 РИВ – 415,75 руб/кмоль; 0,00536 руб/с; 0,122 м³; 1,61.

2. Жидкофазная реакция

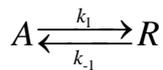


Уравнение скорости $r_A = k \cdot C_A^{1.5}$. Константа скорости реакции $k = 0,049 \text{ с}^{-1} \cdot (\text{кмоль} \cdot \text{м}^3)^{-0.5}$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,05 \text{ кмоль/м}^3$. Цена вещества A – 5,6 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора составляют 0,00185 руб/(с·м³). Затраты на выделение продукта равны 1,1 руб/(кмоль непрореагировавшего вещества A). При отделении продукта теряется 10%. Непрореагировавшее вещество A в дальнейшем не используется.

Определить минимальную себестоимость продукта при проведении процесса в непрерывнодействующих РИС и РИВ. Определить при этом степень превращения.

Ответ: РИС – 24,27 руб/кмоль; 0,49. РИВ – 18,19 руб/кмоль; 0,67.

3. Реакция



Константа скорости прямой реакции $k_1 = 0,00175 \text{ с}^{-1}$; константа равновесия $K_c = 4,8$. Начальные концентрации веществ: $C_{A,0} = 0,45 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{R,0} = 0$. Цена вещества A – 5,6 руб/кмоль. Объем реактора смешения $V_p = 1,4 \text{ м}^3$, производственные затраты на его обслуживание – 0,0062 руб/(м³·с). Объем реактора вытеснения $V_p = 1,4 \text{ м}^3$, производственные затраты на его обслуживание – 0,008 руб/(м³·с).

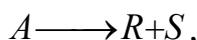
После реактора проводится разделение продукта и непрореагировавшего вещества A , причем 10% непрореагировавшего вещества A теряются, а продукт выделяется полностью. Выделенное вещество A можно снова использовать в производстве. Производственные затраты на разделение составляют 1,2 руб/(кмоль непрореагировавшего A). Оптовая цена продукта R – 28,4 руб/кмоль.

1. Определить максимальный доход при использовании РИВ и РИС. Найти себестоимость продукта.

2. Определить скорость подачи для РИС и РИВ, необходимую для того, чтобы себестоимость продукта была минимальной. Рассчитать эту себестоимость.

Ответ: 1. РИС – 0,00481 руб/с; 22,22 руб/кмоль. РИВ – 0,00542 руб/с; 22,18 руб/кмоль. 2. РИС – 0,00570 м³/с; 22,02 руб/кмоль. РИВ – 0,00507 м³/с; 22,06 руб/кмоль.

4. Реакция



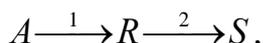
где R – продукт реакции. Константа скорости реакции $k = 0,00065 \text{ с}^{-1}$. Концентрация исходного вещества A на входе в реакционный узел равна $C_{A,0} = 0,085 \text{ кмоль/м}^3$. Реакцию предполагается проводить в четырех реакторах идеального смешения, равных по объему. Производственные затраты на обслуживание одного реактора составляют 0,00052 руб/(с·м³), двух реакторов – 0,00042 руб/(с·м³), трех реакторов –

0,00037 руб/(с·м³), четырех реакторов – 0,00035 руб/(с·м³). Цена вещества *A* за 1 кмоль – 3,5 руб/кмоль.

Определить оптимальное время контакта, необходимое для получения минимальной себестоимости продукта в случае одного, двух, трех и четырех реакторов. Для каждого из указанных случаев определить себестоимость продукта и степень превращения X_A .

Ответ: 1 – 939 с, 24,39 руб/кмоль, 0,379; 2 – 1138 с, 19,53 руб/кмоль, 0,467; 3 – 1247 с, 17,44 руб/кмоль, 0,512; 4 – 1302 с, 16,53 руб/кмоль, 0,536.

5. Целевой продукт *R* получают при последовательных реакциях первого порядка:

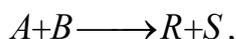


в изотермических условиях – в реакторе идеального вытеснения объемом 2,5 м³. Из экспериментальных данных известно, что $k_1 = 0,1 \text{ ч}^{-1}$ и $k_2/k_1 = 0,5$. Оптовая цена реагента равна 300 руб/кмоль, энергетические затраты на выделение и рециркуляцию непревращенного вещества *A* составляют 10 руб/кмоль, амортизационные отчисления по реакционному узлу, стадии отделения непревращенного вещества *A* и его рециркуляцию описываются уравнением $0,2 \cdot C_{об}/8000$ [руб/ч], где $C_{об} = 200000$ руб. Концентрация исходного вещества *A* на входе в реакционный узел равна $C_{A,0} = 2$ кмоль/м³.

Найти оптимальную степень конверсии, необходимую для получения минимальной себестоимости продукта в условиях рециркуляции непревращенного реагента *A*.

Ответ: 367,54 руб/кмоль; 0,274.

6. В результате необратимой реакции второго порядка



протекающей в водной среде, образуется продукт *R*. Константа скорости реакции $k = 0,002 \text{ м}^3/(\text{с} \cdot \text{кмоль})$. Концентрация исходного вещества *A* на входе в реакционный узел равна $C_{A,0} = 0,16 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,000028 \text{ кмоль/с}$. Производительность по продукту $R F_R = 0,000012 \text{ кмоль/с}$. Цена вещества *A* – 15 руб/кмоль, цена вещества *B* – 125 руб/кмоль.

Продукт экстрагируют из реакционной среды, а непрореагировавшую часть веществ *A* и *B* в дальнейшем не используют.

Производственные затраты на обслуживание РИС равны 0,004 руб/(с·м³), а на обслуживание РИВ равны 0,015 руб/(с·м³).

Для обоих реакторов определить соотношение исходных реагентов и необходимый объем реактора, при которых достигаются минимальные производственные затраты, на проведение процесса в изотермических условиях, без учета затрат на дополнительный подогрев и экстрагирование продукта.

Ответ: РИС – 1,11; 0,602 м³; 0,00671 руб/с; РИВ – 1,40; 0,265 м³; 0,00930 руб/с.

7. Реакцию



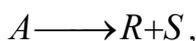
проводят в жидкой фазе в реакторе полного смешения в присутствии инициатора. Реагент *A* является растворителем, а *Y* – газом, барботирующим через жидкость, вследствие чего их концентрации постоянны, $C_{A,0} = 10 \text{ кмоль/м}^3$. Реакция имеет псевдонулевые порядки по

реагентам, и ее скорость описывается уравнением $r_A = 100C_I^{0,5}$; уравнение скорости распада инициатора $r_I = 2,0C_I$ [кмоль/(м³·ч)]. Степень конверсии инициатора – 0,95. Скорость подачи исходного реагента A в реактор – 0,5 м³/ч. Стоимость инициатора 200 руб/кмоль. Амортизационные отчисления по реакционному узлу описываются уравнением $(0,15/8000) \cdot (1500 + 400 \cdot V_p)$ [руб/ч], где V_p – объем реакционной зоны, м³.

Найти оптимальную с точки зрения себестоимости начальную концентрацию инициатора для проведения реакции $A + Y \longrightarrow B$.

Ответ: 0,000637 кмоль/м³; 0,04754 руб/кмоль.

8. Необратимую реакцию



(где R – продукт реакции) предполагается проводить в каскаде из двух реакторов. Константа скорости – 0,00065 с⁻¹; начальная концентрация вещества A на входе в реакционный узел – 0,095 кмоль/м³.

Имеется:

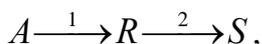
- 1) реактор идеального смешения рабочим объемом 0,5 м³ (Реактор 1);
- 2) реактор идеального смешения рабочим объемом 0,8 м³ (Реактор 2);
- 3) реактор идеального вытеснения объемом 1 м³ (Реактор 3).

Производственные затраты на обслуживание реакторов – 0,0038, 0,0031, 0,0074 руб/(м³·с), соответственно. Цена вещества A – 50 руб/кмоль.

Составить систему двух последовательно соединенных реакторов так, чтобы себестоимость продукта R была наименьшей. Определить эту себестоимость.

Ответ: Реактор 1 + Реактор 2 – 189,09 руб/кмоль при общей степени конверсии – 0,559; Реактор 1 + Реактор 3 – 242,60 руб/кмоль при общей степени конверсии – 0,554; Реактор 2 + Реактор 3 – 229,33 руб/кмоль при общей степени конверсии – 0,557.

9. Жидкофазная реакция



в которой продуктом является вещество R , протекает в реакторе идеального вытеснения без изменения плотности реакционной массы.

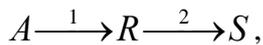
Константы скорости реакций: $k_1 = 0,01$ с⁻¹; $k_2 = 0,024$ с⁻¹. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12$ кмоль/м³; скорость подачи $F_{A,0} = 0,0254$ кмоль/с.

Цена вещества A – 14 руб/кмоль; вещества R – 68 руб/кмоль; вещества S – 10 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора – 0,0052 руб/(с·м³). Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением $Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003$ руб/с. При разделении теряется 10% вещества A , 5% вещества R и 2% вещества S . Вещество A можно использовать повторно.

Определить объем реактора и степень конверсии исходного вещества A , при которых достигается максимальная прибыль.

Ответ: 9,646 м³; 0,366; 0,1576 руб/с.

10. Жидкофазная реакция



в которой продуктом является вещество R , протекает в непрерывном реакторе идеального смешения без изменения плотности реакционной массы.

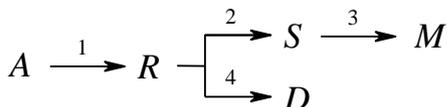
Константы скорости реакций: $k_1 = 0,01 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,024 \text{ с}^{-1}$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,0254 \text{ кмоль/с}$.

Цена вещества A – 14 руб/кмоль; вещества R – 68 руб/кмоль; вещества S – 10 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора – 0,0052 руб/(с·м³). Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением $Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ руб/с}$. При разделении теряется 10% вещества A , 5% вещества R и 2% вещества S . Вещество A можно использовать повторно.

Определить объем реактора и степень конверсии исходного вещества A , при которых достигается максимальная прибыль.

Ответ: 7,4 м³; 0,259; 0,0780 руб/с.

11. Определить объем непрерывного РИС, необходимый для того, чтобы при проведении в нем реакции



получить максимальную прибыль. Найти при этом степень превращения X_A .

Константы скорости: $k_1 = 0,001 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,0014 \text{ с}^{-1}$; $k_3 = 0,002 \text{ с}^{-1}$; $k_4 = 0,0016 \text{ с}^{-1}$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; объемная скорость подачи $W_0 = 0,0041 \text{ м}^3/\text{с}$. Цена вещества A – 3,4 руб/кмоль; вещества R – 68 руб/кмоль; вещества S – 10 руб/кмоль; вещества M – 2 руб/кмоль; вещества D – 8 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора – 0,0052 руб/(с·м³). Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением $Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S + F_M + F_D) + 0,000003 \text{ руб/с}$. При разделении теряется 10% вещества A , 5% вещества R и по 2% веществ S , M , D . Вещество A можно использовать повторно.

Ответ: 1,66 м³; 0,288; 0,0272 руб/с.

12. В РИВ объемом 0,9 м³, работающем непрерывно, протекают 2 реакции:



где R – продукт реакции; S – побочный продукт. Константы скорости:

$k_1 = 0,0009 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_2 = 0,0011 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Концентрации исходных веществ на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Цена вещества A – 25 руб/кмоль; вещества B – 10 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора – 0,0052 руб/с·м³. Затраты на разделение реакционной смеси определяются выражением $Z_{\text{разд}} = 0,8 \cdot F_A + 0,01 \cdot F_B + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ руб/с}$. При разделении теряется 5% вещества A , 10% вещества B , 2% вещества R и 2% веществ S . Вещества A и B можно использовать повторно.

Определить скорость подачи исходных реагентов, необходимую для получения минимальной себестоимости продукта R .

Ответ: 0,00357 м³/с; 66,54 руб/кмоль.

13. В непрерывном РИС объемом $0,9 \text{ м}^3$ протекают 2 реакции:



где R – продукт реакции; S – побочный продукт. Константы скорости:

$k_1 = 0,009 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_2 = 0,0011 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Концентрации исходных веществ на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Цена вещества A – 25 руб/кмоль; вещества B – 10 руб/кмоль; вещества R – 120 руб/кмоль; вещества S – 8 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора определяются выражением $Z_{\text{обсл.}} = 0,0052 \cdot V_p + 0,0012 \text{ руб/с}$; затраты на разделение реакционной смеси $Z_{\text{разд.}} = 0,8 \cdot F_A + 0,01 \cdot F_B + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ руб/с}$. При разделении теряется 5% вещества A , 10% вещества B , 2% вещества R и 2% веществ S . Вещества A и B можно использовать повторно.

Определить скорость подачи исходных реагентов и степень конверсии исходного реагента A , необходимую для получения максимальной прибыли.

Ответ: $0,0525 \text{ м}^3/\text{с}$; $0,140$; $0,5068 \text{ руб/с}$.

14. Жидкофазная реакция



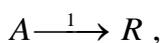
протекает в непрерывном РИВ объемом $1,8 \text{ м}^3$ без изменения плотности реакционной массы.

Константы скорости: $k_1 = 0,0016 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,0024 \text{ с}^{-1}$; $k_3 = 0,0008 \text{ с}^{-1}$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$. Цена вещества A – 25 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора – $0,0052 \text{ руб}/(\text{с}\cdot\text{м}^3)$. Затраты на разделение реакционной смеси составляют $Z_{\text{разд.}} = 0,8 \cdot F_A + 1,6 \cdot (F_R + F_S + F_M) + 0,000003 \text{ руб/с}$. При разделении теряется по 3% каждого продукта, находящегося в реакционной массе. Вещество A можно использовать повторно.

Определить скорость подачи исходного вещества A и степень конверсии исходного реагента A , необходимую для получения минимальной себестоимости продукта R .

Ответ: $0,0124 \text{ м}^3/\text{с}$; $0,207$; $43,72 \text{ руб/кмоль}$.

15. Жидкофазную реакцию



предполагается проводить в каскаде реакторов идеального смешения, равных по объему. В наличии имеются 3 типа реакторов рабочим объемом $0,5$; $0,8$ и $1,3 \text{ м}^3$.

Производственные затраты на обслуживание каскада реакторов: первого типа – $0,0038 \text{ руб}/(\text{с}\cdot\text{м}^3)$; второго – $0,0033 \text{ руб}/(\text{с}\cdot\text{м}^3)$; третьего – $0,0029 \text{ руб}/(\text{с}\cdot\text{м}^3)$. Константа скорости $k_1 = 0,00063 \text{ с}^{-1}$. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,000254 \text{ кмоль/с}$. Цена вещества A – 14 руб/кмоль.

Непрореагировавшее вещество A можно отделить от продуктов и вернуть снова в производство. При отделении теряется 2% вещества A . Затраты на разделение составляют 5 руб/кмоль непрореагировавшего реагента A .

Определить тип и число реакторов в каскаде, чтобы обеспечить минимальную себестоимость при производстве продукта R . Определить производительность системы по продукту.

Ответ: 3 тип, 1 реактор, себестоимость 80,85 руб/кмоль, производительность 0,0000709 кмоль/с, степень конверсии 0,279.

16. В непрерывном РИС объемом $0,9 \text{ м}^3$ протекают 2 реакции:



где R – продукт реакции; S – побочный продукт. Константы скорости:

$k_1 = 0,009 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; $k_2 = 0,0011 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$. Концентрации исходных веществ на входе в реактор $C_{A,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B,0} = 1,2 \text{ кмоль/м}^3$.

Цена вещества A – 25 руб/кмоль; вещества B – 10 руб/кмоль; вещества R – 120 руб/кмоль; вещества S – 8 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание реактора определяются выражением $Z_{\text{обсл.}} = 0,0052 \cdot V_p + 0,0012 \text{ руб/с}$; затраты на разделение реакционной смеси $Z_{\text{разд.}} = 0,8 \cdot F_A + 0,01 \cdot F_B + 1,6 \cdot (F_R + F_S) + 0,000003 \text{ руб/с}$.

Затраты на организацию подачи и рециркуляции исходных веществ

$Z_{\text{рец.}} = 3,5 \cdot W_0 + 1,2 \cdot (F_A + F_B) \text{ руб/с}$. При разделении теряется 5% вещества A , 10% вещества B , 2% вещества R и 2% веществ S . Вещества A и B можно использовать повторно.

Определить степень конверсии исходного реагента A ; максимальную прибыль; скорость подачи исходных реагентов, необходимую для получения максимальной прибыли.

Ответ: 0,244; 0,305 руб/с; 0,0239 $\text{м}^3/\text{с}$.

17. Реакция $A+B \longrightarrow R+S$, где R – продукт реакции, протекает в непрерывном реакторе идеального смешения. Константа скорости $k = 0,0078 \text{ м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$; концентрация исходного вещества A на входе в реактор $C_{A,0} = 0,12 \text{ кмоль/м}^3$; скорость подачи $F_{A,0} = 0,0000254 \text{ кмоль/с}$; производительность реакционного узла по целевому продукту R $F_R = 0,0000129 \text{ кмоль/с}$. Цена вещества A – 14 руб/кмоль; вещества B – 68 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание проточного РИС – $0,0038 \text{ руб}/(\text{с}\cdot\text{м}^3)$. Затраты на организацию подачи и рециркуляции исходных веществ – $3,5 \cdot F_{A,0} + 1,2 \cdot (F_A + F_B) \text{ руб/с}$.

Рассчитать необходимый реакционный объем и определить оптимальный состав исходной смеси при которых полные затраты на производство продукта были бы минимальными. Определить минимальные полные затраты на производство продукта.

Ответ: 0,003834 руб/с; 0,328 м^3 ; 1,22.

18. Жидкофазную параллельную реакцию:



проводят в реакторе идеального смешения.

Константы скорости при 298 К, $\text{м}^3/(\text{кмоль}\cdot\text{с})$: $k_1 = 0,63$; $k_2 = 0,13$. Энергии активации, Дж/моль: $E_1 = 60000$; $E_2 = 100000$. Концентрация исходных веществ на входе в реактор, кмоль/м³: $C_{A,0} = 0,12$; $C_{Y,0} = 0,15$. Мольная скорость подачи реагента A $F_{A,0} = 0,00254 \text{ кмоль/с}$. Степень конверсии реагента A – 0,95. Производственные затраты на обслуживание проточного РИС – $0,0038 \text{ руб}/(\text{с}\cdot\text{м}^3)$.

Цена вещества A – 14 руб/кмоль; вещества Y – 10 руб/кмоль; вещества R – 54 руб/кмоль; вещества S – 7 руб/кмоль. Непрореагировавшие вещества A и Y можно отделить от продуктов и вернуть снова в производство. При отделении теряется по 2% веществ A и Y ; по 1% веществ R и S .

Определить температуру процесса, при которой достигается максимальная прибыль производства. Определить производительность установки по продукту.

Ответ: 314 К; 0,02167 руб/с; 0,00164 кмоль/с.

19. Жидкофазная автокаталитическая реакция $A \longrightarrow R$, описываемая уравнением $r_A = (k + k_{\text{авт}} \cdot C_R) \cdot C_A$, проводится в реакторе идеального смешения.

Константы скорости $k = 0,0048$ 1/с; $k_{\text{авт}} = 0,0064$ м³/(кмоль·с). Концентрация исходного вещества A на входе в реактор – 0,12 кмоль/м³; скорость подачи – 0,00254 кмоль/с. Цена вещества A – 16 руб/кмоль. Производственные затраты на обслуживание: проточного РИС – 0,38 руб/(с·м³).

Определить объем реактора, обеспечивающий минимальную себестоимость продукта.

Ответ: 864,45 руб/кмоль R ; 0,7309 м³; степень конверсии вещества A – 0,145.

20. Жидкофазную параллельную реакцию



предполагается проводить в реакторах идеального смешения. В наличии имеются 3 типа реакторов рабочим объемом 0,5; 0,8 и 1,3 м³.

Производственные затраты на обслуживание реакторов: первого типа – 0,0038 руб/(с м³); второго – 0,0033 руб/(с м³); третьего – 0,0029 руб/(с м³). Константы скорости: $k_1 = 0,00252$ м³/(кмоль с); $k_2 = 0,00063$ 1/с. Концентрация исходного вещества A на входе в реактор – 1,2 кмоль/м куб.

Цена вещества A – 14 руб/кмоль. Непрореагировавшее вещество A можно отделить от продуктов и вернуть снова в производство. При отделении теряется 2% вещества A .

Определить: тип реактора который обеспечил бы производство продукта R по минимальной себестоимости; минимальную себестоимость продукта R в каждом типе реактора; оптимальные условия проведения процесса: степень конверсии и мольную скорость подачи исходного вещества A , производительность реакционного узла по продукту R .

Ответ: 1 – 0,198; 41,39 руб/кмоль; 0,0074252 кмоль/с; 0,0005835 кмоль/с;

2 – 0,203; 40,96 руб/кмоль; 0,0114584 кмоль/с; 0,0009220 кмоль/с;

3 – 0,208; 40,61 руб/кмоль; 0,0179685 кмоль/с; 0,0014795 кмоль/с.

5. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Цели освоения дисциплины «Современные проблемы химии и химической технологии» изложены в разд. 1. Получаемые студентами в результате освоения этой дисциплины знания, умения и навыки являются базисными в инженерной химии и необходимы при работе в области промышленного органического синтеза. Они будут востребованы в последующей научно-исследовательской деятельности – при разработке новых высокоэффективных химико-технологических процессов органического синтеза; производственно-технологической деятельности – при управлении химико-технологическими процессами на высокотехнологичных установках производств промышленности органического синтеза; проектно-конструкторской работе – при проектировании современных установок, производств и предприятий промышленности органического синтеза.

Умения и навыки, прививаемые студентам в ходе освоения этой дисциплины, необходимы для исследования, разработки, проектирования и управления химико-

технологическими процессами органического синтеза; приобретаемые ими при этом компетенции – основа их успешной профессиональной деятельности в будущем.

В дисциплине рассматриваются основные понятия и практические методы оптимизации ХТП применительно к процессам промышленного органического синтеза. Данная учебная дисциплина фактически завершает профессиональный цикл подготовки по инженерной химии и таким образом базируется на и венчает всю предыдущую подготовку в бакалавриате и магистратуре по дисциплинам математического, естественнонаучного и профессионального цикла. Она является важнейшей дисциплиной технической (инженерной) химии, рассматривающей основные принципы и методы изучения, разработки, проектирования и осуществления высокоселективных, ресурсосберегающих (оптимизированных по времени протекания, энергопотреблению и материалоемкости) и экологически безопасных процессов химической технологии органического синтеза.

При преподавании дисциплины «Современные проблемы химии и химической технологии» следует учитывать специализацию кафедры в области тонкого органического синтеза, а именно – синтеза биологически активных веществ, органических красителей и полупродуктов, а также фотохимии.

При преподавании данной дисциплины следует: подчеркивать отмеченную связь с ранее изучавшимися фундаментальными и прикладными дисциплинами и приводить ссылки на соответствующие разделы этих дисциплин; добиваться осознания студентами важности, необходимости и полезности усвоения данной дисциплины для их дальнейшего обучения по специальным дисциплинам магистерской программы; подчеркивать востребованность полученных в результате освоения данной дисциплины знаний, умений, навыков и компетенций в последующей работе в качестве инженеров-технологов, проектировщиков, инженеров-исследователей, научных сотрудников, при участии в разработке и организации наукоемкого инновационного производства высококачественной, конкурентоспособной продукции тонкого органического синтеза.

Методическая модель преподавания дисциплины основана на применении активных и интерактивных методов обучения. Принципами организации учебного процесса являются:

выбор методов преподавания в зависимости от различных факторов, влияющих на организацию учебного процесса;

объединение нескольких методов в единый преподавательский модуль в целях повышения эффективности процесса обучения;

активное участие студентов в учебном процессе;

проведение практических занятий для приобретения навыков решения практических задач;

обучение на примерах использования теоретического материала изучаемой дисциплины для решения реальных проектных и технологических задач.

Используемые методы преподавания:

– лекционные занятия с использованием мультимедийных презентаций и раздаточных материалов;

– индивидуальные и групповые задания при проведении практических занятий в интерактивном режиме;

– самостоятельное изучение студентами определенных разделов дисциплины и подготовка ими индивидуальных творческих домашних заданий на заданные темы.

Все виды занятий по дисциплине «Современные проблемы химии и химической технологии» должны проводиться в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТП СПбГТИ 018-2014. КС УКВД. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

С целью более эффективного усвоения студентами материала данной дисциплины рекомендуется при проведении лекционных и практических занятий использовать интерактивные методы обучения, мультимедийные презентации, наглядные пособия и раздаточные материалы, работу на компьютерных терминалах в режиме *online* с использованием сетевых технологий теледоступа, а также в режиме *offline*. На практических занятиях в качестве наглядных пособий можно использовать рекомендованные учебники, учебные и методические пособия, справочную литературу, а в качестве раздаточного материала – примеры решения типовых задач. Кроме того, на практических занятиях в интерактивном режиме могут использоваться специализированные электронные учебные пособия, а также программные модули по химической инженерии и соответствующее программное обеспечение (см. п. 10.2, Приложение 2). На лекционных занятиях в качестве мультимедийной презентации и раздаточного материала могут быть использованы план-конспекты лекций.

Содержание практических занятий определяется календарным тематическим планом, который составляется преподавателем, проводящим занятия на основе рабочей программы дисциплины «Современные проблемы химии и химической технологии», и утверждается заведующим кафедрой и руководителем ООП.

При наличии академических задолженностей по практическим занятиям, связанных с их пропуском по неуважительной причине, преподаватель выдает задание студенту в виде реферата по пропущенной теме занятия.

Для контроля знаний студентов по данной дисциплине проводится *оперативный контроль успеваемости, текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация* (см. также разд. 6).

Оперативный контроль успеваемости. Оперативный контроль проводится с целью мониторинга качества усвоения студентами лекционного и самостоятельно изучаемого материала. Проводится на практических занятиях выборочно в устной (собеседование) и письменной (решение тестовой задачи «у доски») форме в ходе изучения очередного раздела учебной дисциплины. При этом используются контрольные вопросы (см. разд. 6; разд. 3, п. 4.1 Приложения 1) и тестовые задачи (см. п. 4.2 Приложения 2).

Текущий контроль успеваемости. Текущий контроль проводится в письменной форме с целью оценки приобретенных студентами на лекционных и практических занятиях, в процессе самостоятельного изучения материала знаний, умений и навыков по данной учебной дисциплине. В течение семестра студенты, руководствуясь РПД, прорабатывают вопросы для самостоятельного изучения (см. п. 4.4.1), находят ответы на контрольные вопросы (см. разд. 6; разд. 3, п. 4.1 Приложения 1) и решают тестовые задачи (см. п. 4.2 Приложения 1) по каждому разделу учебной дисциплины. Предусмотрено проведение 4 контрольных работ (Кр) (см. п. 4.1 Приложения 1; п. 4.4.2). Каждая контрольная работа содержит по 1 контрольному вопросу. Каждый студент выполняет также 4 индивидуальные домашние задания (ИДЗ) (см. п. 4.2 Приложения 1; п. 4.4.3).

Промежуточная аттестация. Промежуточная аттестация проводится в форме экзамена. По результатам экзамена оценивается качество усвоения студентом данной дисциплины, т. е. качество приобретенных знаний, умений, навыков и компетенций. Оценка по экзамену является итоговой по данной дисциплине и проставляется в приложение к диплому.

Экзамен проводится в соответствии с требованиями СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов. Шкала оценивания ответа на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно»,

«неудовлетворительно») и соответствует СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015.

На экзамене студенту предлагается ответить на 5 практических вопросов по конкретному процессу (реакции) органического синтеза, охватывающих все разделы дисциплины.

К экзамену допускаются студенты, получившие положительные оценки за выполнение контрольных работ Кр-1÷Кр-4 и индивидуальных домашних заданий ИДЗ-1÷ИДЗ-4.

Приложение № 2.
Пакет программ по курсу
«Современные проблемы химии и химической технологии»

Пакет программ используется на практических занятиях по курсу «Современные проблемы химии и химической технологии», читаемого в СПбГТИ (ТУ) для магистрантов направления 18.04.01 «Химическая технология», и является составной частью методического обеспечения курса.

Пакет состоит из 3-х частей:

Программы, подпрограммы и процедуры, реализующие основные численные методы математики, корреляционного и регрессионного анализа;

Программы, подпрограммы и процедуры, реализующие основные численные методы оптимизации технологических процессов;

Моделирующие учебные программы курса «Оптимизация химико-технологических процессов».

Все представленные программы апробированы на большом количестве примеров.

Часть 1

| № п/п | Наименование программы | Язык программирования | Назначение программы |
|-------|------------------------|-----------------------|---|
| 1 | MNKM | QBasic | Метод наименьших квадратов для функций N переменных (в программе заложен набор для 32 функций) |
| 2 | Eigenval | QBasic | Собственные значения и собственные вектора симметричной матрицы порядка N*N |
| 3 | Integral | QBasic | Вычисление определенного интеграла по методу Симпсона |
| 4 | Matr-1 | QBasic | Обращение матрицы N*N |
| 5 | Matrico | QBasic | Обращение матрицы, вычисление определителя и решение системы линейных уравнений с вектором B(i) модифицированным методом Гаусса-Жордана |
| 6 | NoLin | QBasic | Решение системы нелинейных уравнений методом простых итераций |
| 7 | Rang | QBasic | Ранг матрицы порядка N*M |
| 8 | SNoLin | QBasic | Решение системы нелинейных уравнений модифицированным методом Ньютона-Рафсона |
| 9 | Urawnen | QBasic | Решение уравнения вида $x = F(x)$ |
| 10 | Integral | QBasic | Подпрограмма вычисления определенного интеграла по методу Симпсона |
| 11 | Rafson | QBasic | Подпрограмма решения системы нелинейных уравнений модифицированным методом Ньютона-Рафсона |

| № п/п | Наименование программы | Язык программирования | Назначение программы |
|-------|------------------------|-----------------------|---|
| 12 | Rmatr | QBasic | Подпрограмма обращения квадратной матрицы A(I,J) методом Жордана |
| 13 | Urawnenie | QBasic | Подпрограмма решения уравнения $x = F(x)$ |
| 14 | Integr | Turbo Pascal | Вычисление определенного интеграла по методу Симпсона |
| 15 | LineMНК | Turbo Pascal | Метод наименьших квадратов для функций 1 переменной (в программе заложен набор для 12 функций) с графической иллюстрацией |
| 16 | LinMНК | Turbo Pascal | Линейный метод наименьших квадратов с графической иллюстрацией |
| 17 | Nolineur | Turbo Pascal | Решение системы нелинейных уравнений модифицированным методом Ньютона-Рафсона |
| 18 | Snoline | Turbo Pascal | Модифицированная программа решения системы нелинейных уравнений модифицированным методом Ньютона-Рафсона |
| 19 | Spline | Turbo Pascal | Аппроксимация экспериментальных данных сплайнами (интерполяция экспериментальных данных) |
| 20 | Urawnen | Turbo Pascal | Решение уравнения вида $x = F(x)$ |
| 21 | DataInput | Turbo Pascal | Процедуры используемые в программах LinMНК и LineMНК |
| 22 | Integral | Turbo Pascal | Процедура вычисления определенного интеграла по методу Симпсона |
| 23 | Interpol | Turbo Pascal | Процедура интерполяции |
| 24 | graphicLine | Turbo Pascal | Графические процедуры, могут использоваться самостоятельно |
| 25 | graphic | Turbo Pascal | - " - |
| 26 | GraphicPlay | Turbo Pascal | - " - |
| 27 | LineUrawnenie | Turbo Pascal | Процедура МНК нахождения параметров линейного уравнения |
| 28 | tKriterij | Turbo Pascal | Процедура нахождения критерия Стьюдента |
| 29 | MatMultMat | Turbo Pascal | Процедура умножения матриц |
| 30 | Realst | Turbo Pascal | Функция преобразование вещественного значения в строку. |
| 31 | noLineUraw | Turbo Pascal | Процедура решения системы нелинейных уравнений модифицированным методом Ньютона-Рафсона |
| 32 | Urawnenie | Turbo Pascal | Процедура решения уравнения $x = F(x)$ |
| 33 | InputStrMas | Turbo Pascal | Процедура преобразования строковой переменной в целочисленный массив |
| 34 | OneCurve | Turbo Pascal | Процедура построения кривой на графике |

Часть 2

| № п/п | Наименование программы | Язык программирования | Назначение программы |
|-------|------------------------|-----------------------|---|
| 1 | Gold0 | QBasic | Решение уравнения $F(x)=0$ методом «золотого сечения» |
| 2 | GoldZero | QBasic | Подпрограмма решения уравнения $F(x)=0$ методом «золотого сечения» |
| 3 | GoldMax | QBasic | Поиск максимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 4 | Goldmaximum | QBasic | Подпрограмма поиска максимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 5 | GoldMin | QBasic | Поиск минимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 6 | GoldMinimum | QBasic | Подпрограмма поиска минимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 7 | Opt-DFP | Qbasic | Минимизация методом Давидона-Флетчера-Пауэла |
| 8 | Opt-HD | Qbasic | Минимизация методом Хука-Дживса |
| 9 | Simplex | QBasic | Нахождение минимума функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ симплексным методом Нелдера-Мида |
| 10 | Simplex! | QBasic | Нахождение минимума функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ комплексным методом (вариант симплексного метода) при наличии как явных (пределы изменения переменных x_n), так и неявных ограничений, заданных в виде функций $G_m = f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0$ |
| 11 | Gold0 | Turbo Pascal | Решение уравнения $F(x)=0$ методом «золотого сечения» |
| 12 | GoldZero | Turbo Pascal | Процедура решения уравнения $F(x)=0$ методом «золотого сечения» |
| 13 | GoldMax | Turbo Pascal | Поиск максимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 14 | Goldmaximum | Turbo Pascal | Процедура поиска максимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 15 | GoldMin | Turbo Pascal | Поиск минимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 16 | GoldMinimum | Turbo Pascal | Процедура поиска минимума функции $F(x)$ методом «золотого сечения» |
| 17 | Simplex | Turbo Pascal | Нахождение минимума функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ комплексным методом (вариант симплексного метода-метод Бокса-Нелдера-Мида) при наличии как явных (пределы изменения переменных x_n), так и неявных ограничений, заданных в виде функций $G_m = f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0$. Графическая иллюстрация результатов поиска. |

Часть 3

| № п/п | Наименование программы | Язык программирования | Назначение программы |
|-------|------------------------|-----------------------|--|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | Reak1 | QBasic | Моделирование параллельной реакции $A \rightarrow R$ $A \rightarrow S$ в непрерывных реакторах идеального смешения и вытеснения |
| 2 | Reak2 | QBasic | Моделирование последовательной реакции $A \rightarrow R \rightarrow S$ в непрерывных реакторах идеального смешения и вытеснения |
| 3 | R-Oksana | Turbo Pascal | Моделирование последовательно-параллельных реакций в каскаде реакторов смешения |
| 4 | R-Elena | Turbo Pascal | Моделирование обратимой параллельной реакции $A \rightleftharpoons B$ $A \rightleftharpoons C$ в непрерывных реакторах идеального смешения и вытеснения |
| 5 | R-Marina | Turbo Pascal | Моделирование обратимой последовательной реакции $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons C$ |
| 6 | R-Angela | Turbo Pascal | Моделирование последовательно-параллельной реакции с обратимой стадией $A \rightleftharpoons B \rightarrow C$ $A \rightarrow D$ в непрерывных реакторах идеального смешения и вытеснения |
| 7 | R-Tanja | Turbo Pascal | Моделирование последовательно-параллельной реакции $A \rightarrow B \rightarrow C$ $A \rightarrow D$ в непрерывных реакторах идеального смешения и вытеснения |
| 8 | R-Sweta | Turbo Pascal | Моделирование последовательно-параллельной реакции с обратимой стадией $A \rightarrow B \rightleftharpoons C$ $A \rightleftharpoons D$ в непрерывных реакторах идеального смешения и вытеснения |
| 9 | DemoGold | Turbo Pascal | Демонстрация работы метода «золотого сечения» |
| 10 | OptimTask1 | Delphi 4 | Иллюстрация решения домашних заданий по курсу, с возможностью изменения исходных данных |

| | | | |
|----|------------|----------|---|
| 11 | Kaskad | Delphi 5 | Моделирование сложных последовательно-параллельных реакций в каскаде реакторов идеального смешения (12 схем сложных реакций) |
| 12 | Reaktor | Delphi 5 | Моделирование сложных последовательно-параллельных реакций в реакторах идеального смешения и вытеснения (12 схем сложных реакций) |
| 13 | SynthesGas | Delphi 5 | Моделирование термодинамически контролируемой реакции получения синтез-газа паровой конверсией природного газа |