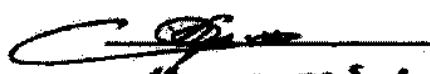


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Кузбасский государственный технический университет
им. Т.Ф. Горбачева»

Кафедра процессов машин и аппаратов химических производств

УТВЕРЖДАЮ

Начальник учебного управления

 **Е. Ю. Брель**
«16» октября 2012 г.

Рабочая программа дисциплины
Моделирование технологических и природных систем

Направление 241000.68 «Энерго- и ресурсосберегающие технологии в химической
технологии, нефтехимии и биотехнологии»
Профиль 241004.68 «Машины и аппараты химических производств»

М2.ДВ.2

Трудоемкость дисциплины 53Е

Форма обучения	Очная, очно- заочная
Курс/ Семестр	1/1
Всего	144
Лабораторные занятия	51
Самостоятельная работа, ч	93
Форма промежуточной аттестации/сем	экзамен/1

Кемерово, 2012

Рабочая программа составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и с учетом рекомендаций примерной основной образовательной программы по направлению подготовки **241000 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии**, профиль **241004 «Машины и аппараты химических производств»**.

Рабочую программу составили:
ст. преподаватель кафедры ПМиАХП
доцент кафедры ПМиАХП



Козлова Г.С.,
Козлов А.П.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры ПМиАХП
27.11.2012 г., протокол № 6

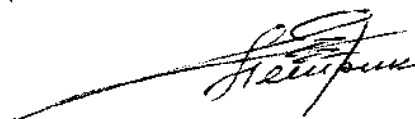
Заведующий кафедрой ПМиАХП



Петрик П.Т.

Согласовано с учебно-методической комиссией направления подготовки **241000 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии** (степень «магистр»)

протокол №6, от 27.11.2012 г.
Председатель УМК направления
241000 Энерго- и ресурсосберегающие
процессы в химической технологии,
нефтехимии и биотехнологии



Петрик П.Т.

1. Цели освоения дисциплины.

Целями освоения дисциплины «Моделирование технологических и природных систем» являются:

- формирование общекультурных компетенций выпускников (самоорганизации и самоуправления, системно-деятельностного характера);
- реализация компетентностного подхода при формировании общекультурных компетенций выпускников;
- формирование общепрофессиональных и профессиональных компетенций выпускников.

Задачами дисциплины «Моделирование технологических и природных систем» являются:

- формирование у студентов системного подхода к решению задач проектирования и анализа эффективности ресурсосберегающих комплексов;
- развитие творческого мышления студентов, повышение их интеллектуального уровня.
- подготовка студентов в области системного анализа и рационального использования материальных и энергетических ресурсов химической технологии и нефтехимии.

2. Место дисциплины в структуре ООП.

Дисциплина «Моделирование технологических и природных систем» относится к профессиональному циклу дисциплин. Изучение дисциплины «Моделирование технологических и природных систем» основано на знании студентами материалов дисциплин «Математика», «Физика», «Техническая термодинамика и теплотехника», «Информатика», «Прикладные программы для решения задач энергоресурсосбережения», «Механика жидкости и газа», «Системный анализ», «Моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», «Теоретические основы теплотехники», «Процессы и аппараты химической технологии», «Энерготехнологические процессы и установки».

Задачи учебной дисциплины состоят в изучении теоретического материала по исследованию химико-технологических комплексов как единого целого, с учетом взаимосвязи между элементами систем и в приобретении умения и практических навыков разработки ресурсосберегающих технологий.

Знания, полученные студентами по дисциплине «Моделирование технологических и природных систем» пригодятся для решения задач проектирования и анализа процессов, оборудования химической технологии и организационно-технических ресурсосберегающих комплексов.

Полученные знания необходимы студентам при подготовке, выполнении и защите выпускной квалификационной работы и при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских, производственно-технологических, организационно-управленческих задач в будущей профессиональной деятельности.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Моделирование технологических и природных систем».

Освоение дисциплины направлено на формирование:

- общекультурных компетенций: ОК-1, ОК-10;
- общепрофессиональных компетенций: ПК-1, ПК-2, ПК-4, ПК-8, ПК-9, ПК-15, ПК-20, ПК-22.

В результате освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие общекультурные и общепрофессиональные компетенции:

Коды	Название компетенции	Приобретаемые навыки, знания, умения
ОК-1	обобщать, анализировать, воспринимать информацию, ставить цели и выбирать пути ее достижения	Знать: методы сбора и систематизирования разнообразной информации из многочисленных источников. Уметь: Понимать смысл, интерпретировать и комментировать получаемую информацию. На основе собранной информации выявлять тенденции, вскрывать причинно-следственные связи, определять цели, выбирать средства, выдвигать гипотезы и идеи. Владеть: системными, аналитическими подходами к пониманию проблем и их решению.
ОК-10	использовать основные положения и методы социальных, гуманитарных и экономических наук при решении социальных и профессиональных задач	Знать: основные методы и приемы научного исследования и анализа проблем. Уметь: методологически обосновать научное исследование и решение проблем и задач. Владеть: основными методами и приемами научного исследования и анализа проблем, позволяющими отличать факты от домыслов, информацию от мнений, противостоять манипулятивным технологиям.
ПК-1	Использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	Знать: основные законы естественнонаучных дисциплин применительно к энерго- и ресурсосберегающим процессам в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии. Владеть: методами математического анализа, оптимизации, моделирования. Уметь: Применять данные методы при расчётах энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.
ПК-2	Использовать основные естественнонаучные законы для понимания окружающего мира и явлений природы	Знать: основные естественнонаучные законы для понимания окружающего мира и явлений природы. Уметь: Применять знание законов математики, физики, химии при выявлении закономерностей окружающей природной среды и возможности её сохранения. Владеть: основными подходами в использовании законов математики, физики, химии при анализе, оптимизации, моделировании энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.

ПК-4	Владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, работать с компьютером как средством управления информацией	Знать: основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации Уметь: работать с компьютером как средством управления информацией Владеть: навыками работы с пакетами компьютерных программ для анализа, оптимизации, моделирования энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии.
ПК-8	Участвовать в совершенствовании технологических процессов с позиций энерго- и ресурсосбережения, минимизации воздействия на окружающую среду	Знать: основы методов энерго- и ресурсосбережения Уметь: использовать эти знания при совершенствовании технологических процессов, связанных с расходом природных ресурсов и загрязнении окружающей среды Владеть: различными способами применения методов энерго- и ресурсосбережения для решения практических задач
ПК-9	Использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчёта технологических параметров оборудования и мониторинга природных сред	Знать: о необходимых исходных данных для расчёта процессов и аппаратов энерго- и ресурсосбережения. Знать основные прикладные программы, позволяющие произвести эти расчёты. Уметь: производить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчёта технологических параметров оборудования Владеть: прикладными программами и базами данных для расчёта процессов и аппаратов энерго- и ресурсосбережения.
ПК-15	Анализировать технологический процесс как объект управления	Знать: иерархическую структуру предприятий химической промышленности. Уметь: использовать методы анализа, синтеза, декомпозиции, агрегирования при анализе работы промышленного предприятия Владеть: способами применения принципов экологического и энергетического менеджмента при анализе работы промышленного предприятия
ПК-20	Применять современные методы исследования технологических процессов и природных сред, использовать компьютерные средства в научно-исследовательской работе	Знать: методы исследования технологических процессов и природных сред. Уметь: применять эти методы, работать в составе коллектива и участвовать в экспериментально-исследовательской деятельности. Владеть: навыками работы с пакетами компьютерных программ для расчетов энергетических задач в различных областях природопользования.
ПК-22	Моделировать энерго- и ресурсосберегающие процессы для различных отраслей промышленности	Знать: методы математического и физического моделирования Уметь: ими пользоваться как потребитель Владеть: методами математического и физического моделирования энерго- и ресурсосберегающих процессов для различных отраслей промышленности.

3.1. Матрица соотнесения тем/разделов учебной дисциплины (модуля) и формируемых в них профессиональных и общекультурных компетенций

Темы, разделы дисциплины	Формируемые компетенции										Σ компетенций
	ОК-1	ОК-10	ПК-1	ПК-2	ПК-4	ПК-8	ПК-9	ПК-15	ПК-20	ПК-22	
1. Химико-технологические системы (ХТС).	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	10
2. Построение математических моделей элементов ХТС.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	10
3. Оптимизация химико-технологических процессов и систем.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	10
4. Синтез оптимальных ресурсосберегающих химико-технологических процессов и систем.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	10

4. Структура и содержание дисциплины «Моделирование технологических и природных систем»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачётных единиц (144 часа).

4.1. Лабораторные занятия

Неделя семестра	Наименование работы	Объем в часах
1-5	1. Математические модели основных элементов ХТС: Смеситель потоков. Делитель потоков. Реактор. Двухфазная модель с псевдоожиженным слоем катализатора. Ректификационная колонна. Теплообменник. Трубчатая печь. Тепловые насосы.	15
6-11	2. Использование средств программирования при моделировании ХТП: Расчет константы скорости реакции разложения диметилэфира. Определение летучести аммиака как функции давления. Расчет каскада реакторов с мешалкой для определения оптимального температурного режима. Расчет зависимости равновесной степени превращения в производстве серного ангидрида от начальной концентрации диоксида.	16
12-17	3. Основы оптимизации химико-технологических процессов и систем: Определение оптимальных параметров аэрильного аппарата. Оптимизация теплообменной системы. Оптимизация последовательности реакторов. Оптимизация последовательности экстракторов с рециклом. Оптимизация системы последовательного извлечения примесей из сточных вод.	20
	ИТОГО	51

4.2. Самостоятельная работа студента

Раздел дисциплины	№ недели	Вид СРС	Объем в часах	Трудоемкость, ЗЕ
Раздел 1-3	1-17	Лзп. Подготовка к лабораторным занятиям – оформление отчетов.	3? 16 = 48	1,33
		Дз. Домашнее задание (решение задач для самостоятельной проработки)	3? 15 = 45	1,25
		Всего:	93	2,58
	-	Подготовка к экзамену	36	1
Итого:			93+36 = 129	3,58 ЗЕ

4.3. Распределение трудоемкости изучения дисциплин по видам учебной аудиторной и самостоятельной работы студента

(Трудоемкость освоения дисциплины - 5 ЗЕ)

Недели семестра	Виды учебной работы				
	аудиторная (1,42 ЗЕ)		Самостоятельная (3,58 ЗЕ)		
	Лз		Лзп	Дз	Подготовка к экзамену
	Посещ.	ТК	Выполн.	Выполн.	Выполн.
1	0,083		0,083	-	
2	0,083		0,083	0,83	
3	0,083		0,083	0,83	
4	0,083		0,083	0,83	
Текущий контроль		От			
5	0,083		0,083	0,83	
6	0,083		0,083	0,83	
7	0,083		0,083	0,83	
8	0,083		0,083	0,83	
Текущий контроль		От			
9	0,084		0,083	0,83	
10	0,084		0,083	0,83	
11	0,084		0,083	0,83	
12	0,084		0,083	0,83	
Текущий контроль		От			
13	0,084		0,083	0,83	
14	0,084		0,083	0,83	
15	0,084		0,084	0,83	
16	0,084		0,084	0,83	
Текущий контроль		От			
17	0,084		-	-	
Промежуточный контроль					Экзамен
Итого	1,42		1,33	1,25	1

5. Образовательные технологии

Согласно ФГОС ВПО по направлению подготовки 241000 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах в целом в учебном процессе должен составлять не менее 20% аудиторных занятий. В качестве образовательных технологий, используемых при реализации различных видов учебной работы по дисциплине «Моделирование

технологических и природных систем», применяются следующие виды активных и интерактивных форм проведения занятий:

- **«Мозговой штурм» (атака)** при выборе стратегии решения задач на лабораторных занятиях (3 часа);
- **Дискуссии и обсуждения** на лабораторных занятиях (3 часа);
- **Работа в группах** подразумевает деление на подгруппы для решения тех или иных лабораторных заданий (5 часов);
- **Контрольный лист или тест** заполняется студентами во время промежуточного контроля знаний (2 часа);
- **Решение ситуационных задач** применительно к химической технологии на лабораторных занятиях (5 часов);

В целом интерактивные формы могут занять 18 часов, что составляет 60 % от общего числа аудиторных занятий и соответствует требованиям ФГОС.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Примеры заданий для самостоятельного решения по 1 разделу.

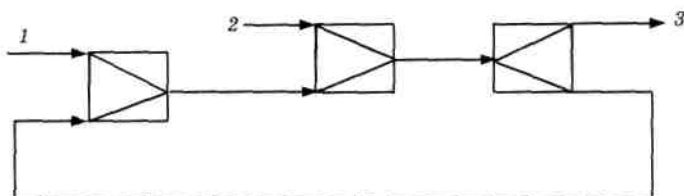
1. Для приведенных технологических схем производств основной химии, нефтехимии и нефтепереработки:

- составить ориентированный граф;
- составить матрицы смежности и список дуг;
- разработать алгоритмы для преобразования матрицы смежности в матрицу путей, матрицы смежности — в список дуг, и наоборот;
- произвести структурный анализ ориентированного графа.

2. Для системы, состоящей из смесителей потоков и делителей потоков, произвести ее расчет следующими методами:

- интегральным;
- декомпозиционным, с предварительным структурным анализом; при проведении расчетов в итерационных блоках использовать методы простой итерации и Ньютона—Рафсона;
- безытерационным с предварительным структурным анализом;
- методом инверсии.

3. Рассчитать химико-технологическую схему, состоящую из смесителей и делителей потоков:



Номер потока	Расход, кг/ч	Температура, °С	Концентрации, % масс.	
			Керосин	Дизельное топливо
1	100	90	35	65
2	160	100	10	90

Коэффициент деления в делителе 0,15.

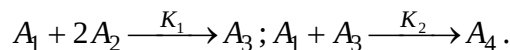
Расчет удельных теплоемкостей производится по формулам:

$$c_p^{кер} = 1,796 + 0,00473 \cdot t, \frac{\kappa Дж}{кг \cdot ^\circ C};$$

$$c_p^{диз.т.} = 1,756 + 0,00427 \cdot t, \frac{\kappa Дж}{кг \cdot ^\circ C}.$$

Ответ: Параметры 3-го потока: расход — 260 кг/ч; температура — 98,6 °С; концентрация керосина — 27,5%; концентрация дизельного топлива — 72,5 %.

4. Рассчитать концентрации компонентов на выходе из реактора, описываемого моделями идеального вытеснения, полного перемешивания и ячеечной моделью (число ячеек — 10). В реакторе протекает реакция:



Расчет произвести с исходными данными:

$C_{10} = 1,5$ моль/м³; $C_{20} = 1$ моль/м³; $C_{30} = C_{40} = 0$; $K_1 = 1,6$ м³ / с·моль; $K_2 = 0,75$ м³/с·моль; $V = 1$ м³; $w = 0,1$ м³/с.

Ответ: Модель идеального вытеснения: $C_1 = 0,553$ моль/м³; $C_2 = 0,043$ моль/м³; $C_3 = 0,010$ моль/м³; $C_4 = 0,468$ моль/м³. Модель полного перемешивания: $C_1 = 0,747$ моль/м³; $C_2 = 0,185$ моль/м³; $C_3 = 0,062$ моль/м³; $C_4 = 0,346$ моль/м³.

Ячеечная модель: $C_1 = 0,573$ моль/м³; $C_2 = 0,056$ моль/м³; $C_3 = 0,018$ моль/м³; $C_4 = 0,453$ моль/м³.

5. Рассчитать концентрации компонентов на выходе из реактора, описываемого ячеечной моделью (число ячеек равно 3). Скорость реакции конверсии метана на алюмоникелевом катализаторе описывается уравнением

$$\frac{dC_{CH_4}}{d\tau} = -k \frac{C_{CH_4}}{C_{H_2}} \left[1 - \frac{1}{K_p} \frac{C_{CO} C_{H_2}^3}{C_{CH_4} C_{H_2O}} p^2 \right],$$

где C_{CH_4} , C_{H_2O} , C_{H_2} , C_{CO} - концентрации метана, водяного пара, водорода и оксида углерода, мольн. доли;

p — давление, атм.

Константа скорости реакции определяется уравнением

$$k = 7,95 \cdot 10^5 \exp\left(-\frac{90\,300}{RT}\right).$$

Константа равновесия реакции определяется из уравнения

$$K_p = \exp\left(30,527 - \frac{27\,257}{T}\right).$$

Температура в реакторе - 750°С. Давление в реакторе - 2 атм. Расход - 5000 м³/ч. Объем реактора - 1 м³. Концентрация метана на входе в реактор (мольн. доли) — 0,35; концентрация водяного пара — 0,65. При расчете учесть изменение объема реакционной смеси.

Ответ: Концентрации компонентов (мольн. доли): $C_{CH_4} = 0,0035$; $C_{H_2O} = 0,1813$; $C_{CO} = 0,2038$; $C_{H_2} = 0,6113$.

6. Определить состав смеси на выходе из реактора окисления диоксида серы с кипящим слоем.

Концентрации компонентов на входе в реактор: $C_{SO_2}^0 = 10$ % об.; $C_{O_2}^0 = 9$ % об. Температура в реакторе — 500 °С. Скорость реакционной смеси в плотной фазе — 0,12 м/с. Высота слоя — 0,4 м. Объемная доля потока газа, проходящего через плотную фазу, — 0,34. Критерий Re — 4; критерий межфазного обмена — 4,5.

Скорость реакции описывается уравнением

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{k}{C_{\text{SO}_2}^0} \frac{\left(C_{\text{O}_2}^0 - \frac{C_{\text{SO}_2}^0 x}{2} \right) (1-x)}{\left(1 - \frac{C_{\text{SO}_2}^0 x}{2} \right) (1-0,3x)} \left[1 - \frac{x^2}{K_p^2 (1-x)^2} \frac{\left(1 - \frac{C_{\text{SO}_2}^0 x}{2} \right)}{\left(C_{\text{O}_2}^0 - \frac{C_{\text{SO}_2}^0 x}{2} \right)} \right],$$

где x — степень превращения диоксида серы. Константа скорости k при 500°C равна $5,4 \text{ с}^{-1}$; константа равновесия $K_p = 49,78 \text{ атм}^{-0,5}$.

Ответ: Степень превращения в плотной части слоя — 0,8764; в пузырьках — 0,739; в реакторе — 0,785.

7. Рассчитать концентрации компонентов на выходе из ректификационной колонны, а также флегмовое число и количество тарелок в колонне, если в колонну поступает смесь следующего состава:

Компонент	Концентрация, мольн. доли
Изобутан	0,0004
Нормальный бутан	0,004
Изопентан	0,4232
Нормальный пентан	0,5610
Гексан	0,0092
Гептан	0,0022

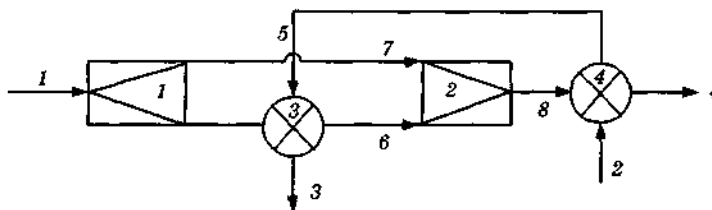
Производительность колонны по сырью равна $10\,000 \text{ кг/ч}$.

Сырье подается в колонну в виде насыщенной жидкости. Давление в емкости орошения — $0,135 \text{ МПа}$. Изопентана в дистилляте — не менее 98 % (мольн.), в остатке его содержание не должно превышать 1 % (мольн.).

Ответ: Минимальное флегмовое число — 8,6. Минимальное число теоретических тарелок — 43.

8. Определить основные размеры теплообменника кожухотрубчатого типа, в котором $1240 \text{ м}^3/\text{ч}$ азота охлаждается водой от температуры 76°C до 31°C . Охлаждающая вода имеет температуру 16°C . Принять скорость движения воды в трубах $0,02 \text{ м/с}$, а скорость газа в межтрубном пространстве — 10 м/с . Сумма термических сопротивлений — $0,0012 \text{ м}^2\cdot^\circ\text{C/кВт}$.

9. Рассчитать ХТС, состоящую из смесителя потоков 1, делителя потоков 2 и теплообменников противоточного типа 3, 4:



Номер теплообменника	Коэффициент теплопередачи, кВт/м ² ·°C	Площадь поверхности теплопередачи, м ²
3	720	50
4	680	55

Номер потока	Теплоноситель	Расход, м ³ /ч	Температура, °C
1	Нагреваемая вода	38	27
2	Охлаждаемая вода	35	68

Ответ: Температура горячего потока на выходе из третьего теплообменника составляет 44°C .

°С; температура холодного потока на выходе из четвертого теплообменника — 49 °С.

10. Выполнить расчет трубчатой печи для нагрева нефти от 180 до 350 °С при сжигании топливного газа следующего состава (% об.): CH_4 — 98; C_2H_6 — 0,3; C_3H_8 — 0,2; C_4H_{10} — 0,1; CO_2 — 0,3; N_2 — 1,1. Плотность нефти — 863 кг/м³.

Длина труб в топке и в газоходе равна 12,5 м. Диаметр труб — 0,114 м. Число труб в топке — 24; в змеевике газохода — 56. Температура дымовых газов на перевале — 600 °С. Температура окружающей среды равна 25 °С; давление — 1 атм.

Определить:

- температуру уходящих из печи газов;
- тепловой КПД печи;
- расход топливного газа;
- производительность печи по сырью;
- эксергетический КПД печи.

Ответ: Температура уходящих из печи газов составляет 196 °С. Тепловой КПД печи — 0,85. Расход топливного газа — 0,068 м³/с. Производительность печи по сырью — 0,4 кг/с. Эксергетический КПД печи — 0,315.

11. В ректификационную колонну поступает смесь изопентана и нормального пентана (70 % об. $i\text{-C}_5\text{H}_{12}$ и 30 % об. $n\text{-C}_5\text{H}_{12}$) с температурой 70 °С. Расход смеси равен 14 000 кг/ч. Температуры в кубе и в дефлегматоре колонны равны соответственно 95 и 63 °С. Давление в колонне — 4,5 атм. В куб колонны подводится теплота в количестве 36 ГДж/ч. Рассмотреть возможность утилизации теплоты с помощью теплового насоса.

Примеры заданий для самостоятельного решения по 2 разделу.

1. Найти коэффициенты уравнения регрессии, используя ПФЭ, для матрицы планирования вида:

Номер опыта	Факторы в кодированных переменных				Функция отклика
	X_1	X_2	X_3	X_4	
1	-1	-1	-1	-1	504
2	+1	-1	-1	-1	476
3	-1	+1	-1	-1	510
4	+1	+1	-1	-1	485
5	-1	-1	+1	-1	508
6	+1	-1	+1	-1	482
7	-1	+1	+1	-1	514
8	+1	+1	+1	-1	490
9	-1	-1	-1	+1	572
10	+1	-1	-1	+1	539
11	-1	+1	-1	+1	580
12	+1	+1	-1	+1	549

Ответ: $b_0 = 529,15$; $b_1 = 14,25$; $b_2 = 4,0$; $b_3 = 2,25$; $b_4 = 33,0$; $b_{12} = 0,625$; $b_{13} = 0,375$; $b_{14} = -1,375$; $b_{23} = -0,125$; $b_{24} = 0,375$; $b_{34} = -0,125$.

2. Разработать математическую модель определения цетанового числа в дизельном топливе. При разработке модели использовать метод ОЦКП. Влияющие факторы: ρ — плотность, т/м³; ν — кинематическая вязкость, мм²/с; $T_{50\%}$ — 50%-ная точка кривой фракционной разгонки, °С.

Экспериментальные данные:

Номер опыта	ρ , т/м ³	ν , мм ² /с	$T_{50\%}$	Цетановое число
1	0,840	5,000	260	42,2
2	0,820	5,000	260	49,7
3	0,840	2,000	260	43,7
4	0,820	2,000	260	51,2
5	0,840	5,000	240	39,8

6	0,820	5,000	240	47,1
7	0,840	2,000	240	41,3
8	0,820	2,000	240	48,6
9	0,842	3,500	250	41,0
10	0,818	3,500	250	49,9
11	0,830	5,322	250	44,5
12	0,830	1,677	250	46,3
13	0,830	3,500	262	46,9
14	0,830	3,500	238	43,9
15	0,830	3,500	250	45,4

В центре плана было проведено три параллельных опыта, при этом получены значения целевой функции, равные 45,2; 45,4 и 45,6.

3. Разработать математическую модель процесса омыления диацетата полифурита. При разработке модели использовать метод Брандона. Влияющие факторы: X_1 — содержание влаги в метаноле, %; X_2 — время омыления, ч. Функция отклика: y — число омыления, мг КОН/г продукта.

Экспериментальные данные:

Номер опыта	X_1	X_2	y
1	8,2	9,0	1,79
2	12,1	17,5	4,07
3	14,4	16,5	4,89
4	14,2	14,0	4,43
5	6,3	10,2	1,12
6	11,9	15,3	3,75
7	10,1	15,0	2,96
8	9,7	16,2	2,87
9	6,5	15,3	1,54
10	4,2	18,1	0,58
11	5,5	13,4	0,98
12	17,1	11,5	5,26
13	7,4	12,5	1,65
14	3,9	23,3	0,57
15	4,3	21,5	1,02

Ответ:

$$y = 2,4987 \left[1,1953 - 1,0827 \exp \left(\frac{-x_2}{9,514} \right) \right] \left[\frac{1}{(0,2606 + 57,547 / x_1^2)} \right].$$

Примеры заданий для самостоятельного решения по 3 разделу.

1. Найти $\max Z = x_1 + 3x_2$ с ограничениями: $-x_1 + x_2 \leq 1$; $x_1 + x_2 \leq 2$; $x_1 \geq 0$; $x_2 \geq 0$. Задачу решить двумя способами: симплексным методом и графически.

Ответ: $x_1 = 0,5$; $x_2 = 1,5$.

2. Найти $\min Z = 5x_1 - 8x_2$ с ограничениями $2x_1 + x_2 \leq 5$; $x_1 - x_2 \geq 1$; $x_1 + 3x_2 \leq 10$. Задачу решить симплексным методом.

Ответ: $x_1 = 2$; $x_2 = 1$.

3. Пусть имеется три вида сырья в количестве 45, 19 и 10 т. Из этого сырья требуется изготовить два вида продукции. Заданы расход каждого вида сырья на производство единицы каждой продукции и прибыль от единицы продукции.

Сырье	Продукт		Запасы сырья
	А	Б	
1	5	9	45
2	3	3	19
3	2	1	10
Прибыль	5	6	

Найти такой план выпуска продукции из имеющегося сырья, при котором суммарная при-

быль будет наибольшей.

Ответ: Продукт А = 3; продукт Б = 3,333. Прибыль составит 35 усл. ден. ед.

4. На рисунке представлена технологическая схема компаундирования двух марок дизельного топлива (с содержанием серы 0,2 и 0,05 % масс).

Базовый компонент (гидроочищенное дизельное топливо) делится на два потока, которые поступают на узлы смешения А и Б. Расход базового компонента — 290 т/ч. Содержание серы в базовом компоненте — 0,046 % масс. Необходимо получить 275 т/ч дизельного топлива с содержанием серы 0,05 % и 185 т/ч с содержанием серы 0,2 % масс.

Определить расходы компонентов, поступающих из резервуаров и гидроочищенной фракции 200—320 °С, при которых затраты на приготовление товарных продуктов минимальны. Расход гидроочищенной фракции 200-320 °С — не более 12 т/ч.

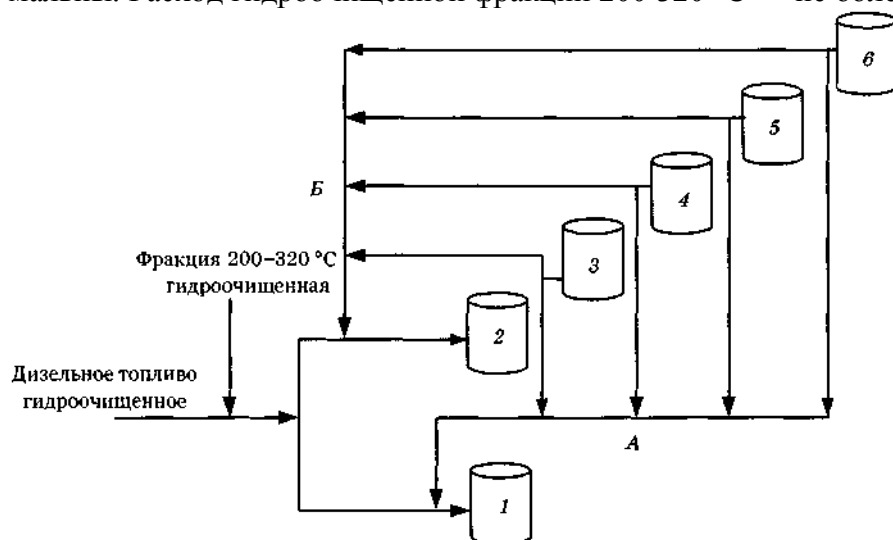


Рисунок. Технологическая схема компаундирования дизельного топлива:

1,2 — товарные резервуары; 3-6 — резервуары с керосином, дизельным топливом прямогонным, бензином-отгоном, денормализатом; А, Б — узлы смешения.

Исходные данные:

Компонент	Содержа- ние серы, %	Себестои- мость 1 т компонента, усл. ден. ед.	Дизельное топливо (S = 0,05%)		Дизельное топливо (S = 0,2%)	
			Содержание компонента в продукте, %			
			не менее	не более	не менее	не более
Керосин	0,105	7800	2	7	2	5
Бензин-отгон	0,070	5000	0	1	0	4
Дизельное топливо прямогонное	0,823	6000	0	17	0	4
Денормализат	0,06	8500	10	30	10	20
Фракция 200-320°С гидроочищенная	0,823	8300	0	4	0	4

Ответ: Состав дизельного топлива с содержанием серы 0,05 %: керосин — 19,25 т; бензин-отгон — 2,75 т; дизельное топливо прямогонное — 4,8 т; денормализат — 82,5 т; фракция 200-320 °С гидроочищенная — 12 т; гидроочищенное дизельное топливо — 153,7 т.

Состав дизельного топлива с содержанием серы 0,2%: керосин - 9,25 т; бензин-отгон — 7,4 т; дизельное топливо прямогонное — 31,45 т; денормализат — 0,6 т; гидроочищенное дизельное топливо — 136,3 т.

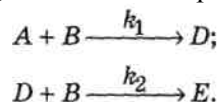
Примеры заданий для самостоятельного решения по 4 разделу.

1. Используя метод деления отрезка пополам и метод «золотого сечения», найти максимум

функции $f(x) = -3,6 + 10,65 \exp\left(-0,5\left(\frac{x-3,41}{1,86}\right)^2\right)$ в интервале $[1, 6]$.

Ответ: $x = 3,41$.

2. В реакторе идеального смешения непрерывного действия при изотермических условиях в стационарном режиме проводят процесс, механизм которого:



Начальные концентрации веществ: $A_0 = 0,4$ кмоль/м³; $B_0 = 0,6$ кмоль/м³; $D_0 = 0$; $E_0 = 0$. Константы скорости реакции: $k_1 = 0,2$ м³/с·кмоль; $k_2 = 0,5$ м³/с·кмоль. Максимальное время пребывания в реакторе — 25 с.

Определить время пребывания, при котором выход продукта D максимальный.

Ответ. Оптимальное время пребывания в реакторе — 5,87 с.

3. С помощью метода Гаусса—Зейделя минимизировать следующие функции двух переменных:

а) $f(x, y) = 0,5 \cdot \left(1 - \cos 360^\circ \sqrt{(2x-1)^2 + (2y-1)^2}\right) \cdot \left(1 - \frac{(y-3x)^2}{8}\right).$

Ответ: $x = 0,5$; $y = 0,5$.

б) $f(x, y) = y^2 + \sin x.$

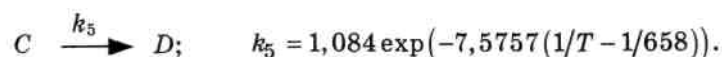
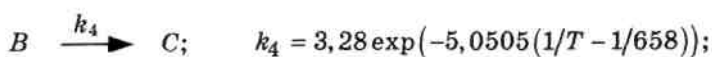
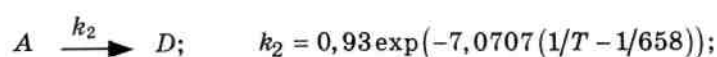
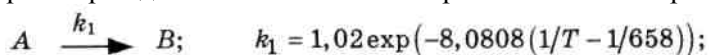
в) $f(x, y) = -x^2 + x + y - y^2 + 4.$

г) $f(x, y) = \exp\left(-\left(x-1^2\right)\right) \cdot \frac{(y^2-0,5)^2}{0,132}$

4. Функция $f(x) = x_1^2 \cdot \exp\left(-x_1^2 - 20,25 \cdot (x_1 - x_2)^2\right)$ представляет собой длинный овраг с максимумом в точке $x = [1, 1]^T$.

Найти максимум $f(x)$, начиная с векторов $x^0 = [0,1; 0,1]^T$ и $x^0 = [1,9; 0,1]^T$. Изобразить эту функцию и траекторию оптимизации на плоскости (x_1, x_2) .

5. В изотермическом реакторе идеального вытеснения протекает сложная реакция:



Модель реактора может быть записана следующим образом:

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2 + k_3) \cdot C_A; \quad \frac{dC_B}{d\tau} = k_1 C_A - k_4 C_B; \quad \frac{dC_C}{d\tau} = k_4 C_B - k_5 C_C.$$

Найти температуру и время пребывания в реакторе τ , при которых выход продукта C максимальный. Построить контурную диаграмму и траекторию движения к максимуму. Задачу решить методом Гаусса—Зейделя.

Ответ. Оптимальное время пребывания в реакторе — 0,84 с; температура — 778 °С.

6. Идентификация параметров процесса выщелачивания стекла.

Изучался процесс выщелачивания стекла (состав в мольных процентах: 25,3 % – Na₂O, 3,5 % – Al₂SO₄, 71,2 % – SiO₂) при взаимодействии с 0,1-ми нормальными водными растворами хлоридов водорода и щелочных металлов. Были использованы экспериментальные данные о выходе Na⁺ из стекла в раствор, полученные непосредственным измерением концентрации Na⁺ в вымачивающем растворе. Результаты измерений приведены в таблице:

Таблица. Экспериментальные данные о выходе Na⁺ из стекла в раствор

Раствор	Температура, °C	Время диффузии, сут													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
HCl	20	1,6	2,4	3,2	3,6	4,4	4,8	5,0	5,2	56,0	60,0	6,4	6,8	7,0	7,2
	40	2,8	4,8	6,4	7,6	8,4	9,6	11,2	12,4	13,2	14,0	14,4	15,2	16,0	16,4
	60	9,6	14,0	18,0	22	24,8	27,6	30,4	32,0	-	-	-	-	-	-
KCl	20	0,2	0,4	0,55	0,65	0,75	0,9	1,0	1,2	1,25	1,35	1,45	1,5	1,6	1,7
	40	1,1	2,0	2,3	3,4	4,1	4,65	5,1	5,7	6,0	6,5	7,1	7,5	7,8	8,1
	60	3,0	5,2	7,1	9,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
LiCl	20	0,4	0,85	1,2	1,35	1,55	1,7	1,85	2,1	2,25	2,45	2,55	2,8	2,9	3,1
	40	2,0	3,45	4,6	5,4	6,1	6,75	7,6	8,1	-	-	-	-	-	-
	60	3,6	6,55	9,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CsCl	20	0,3	0,55	0,65	0,85	0,95	1,1	1,5	1,3	1,4	1,45	1,55	1,65	1,7	1,85

Определить на основе данных эксперимента значения времени релаксации τ , сут, и коэффициента диффузии D , см²/с.

Для нахождения τ и D нужно решить следующую задачу оптимизации:

Найти $\min_{\tau, D} \Phi(\tau, D)$:

$$\Phi(\tau, D) = \sum_{i=1}^N (h^T(t_i) - h^3(t_i))^2,$$

где $h^3(t) = Q^3(t)/(C_0 - C_{гр})$, $Q^3(t)$ – количество Na⁺, вышедшее через единицу площади поверхности образца стекла за время t в раствор; N – число экспериментальных точек. Задача о диффузионном извлечении Na⁺ из поверхностных слоев стекла имеет следующий вид:

$$\tau \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2},$$

$$C(x, 0) = C_0; \left. \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0 \quad (x \geq 0); \quad C(0, t) = C_{гр} \quad (t > 0),$$

где $C(x, t)$, C_0 , $C_{гр}$, г-ион/см³ – объемная концентрация Na⁺: текущая, в толще образца и на границе с раствором соответственно ($C_0 > C_{гр}$). Для случая раствора CsCl: $C_{гр}/C_0 = 0,2$, в остальных случаях $C_{гр} = 0$.

Для исследования кинетики моделируемого процесса используют эффективную глубину диффузионной зоны в виде

$$h(t) = \int_0^\infty \frac{(C_0 - C(x, t))}{(C_0 - C_{гр})} dx.$$

Значение $h^T(t)$, полученное в результате решения задачи, имеет следующий вид:

$$h^T(t) = \sqrt{D} A(t);$$

$$A(t) = \frac{t}{\tau} e^{-\frac{t}{2\tau}} \left(I_0 \left(\frac{t}{2\tau} \right) + I_1 \left(\frac{t}{2\tau} \right) \right),$$

где I_0 , I_1 – модифицированные функции Бесселя, которые вычисляются по формулам:

$$I_0(t) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left[\frac{t}{2}\right]^{2k}}{(k!)^2}; \quad I_1(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left[\frac{t}{2}\right]^{2k-1}}{(k!)^2}.$$

Рассчитать значения коэффициентов τ и D , используя данные, приведенные в таблице. При оптимизации использовать метод Хука—Дживса.

Ответ: При взаимодействии с водным раствором хлорида водорода при температуре 20 °С $\tau = 0,668$ сут; $D = 1,998$ см²/с.

7. На экспериментальной установке необходимо найти максимальный выход продукта при варьировании давления, температуры и числа оборотов мешалки в аппарате.

Базовый уровень оптимизируемых переменных: $T = 250$ °С; $p = 15$ атм; $N = 1000$ об/мин.

Найти координаты исходного симплекса.

8. Трехмерный оптимальный симплексный поиск минимума дал следующие промежуточные результаты:

x_1	x_2	x_3	$f(x_1, x_2, x_3)$
0	0	0	4
-0,333	-0,333	-0,333	7
-0,333	-1,333	-0,333	10
-0,333	-0,333	-1,333	5

Какая следующая точка подлежит вычислению в процессе поиска? Какая точка опущена? Что будет с центром тяжести нового симплекса?

9. Рассмотрите функцию

$$f(x) = (x_1^2 + x_2^2) + \frac{0,9x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \left[1,5(x_1^2 - x_2^2) - x_1x_2 + \sqrt{x_1^2 + x_2^2} + 0,25x_1 - \frac{x_1x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \right].$$

Построить линии уровня этой функции. Найти минимум функции с помощью симплексного метода и метода Гаусса—Зейделя. Сравнить количество вычислений функций в обоих методах.

10. Решить систему уравнений:

$$x + y + z = 6; \quad x^2 + y^2 + z^2 = 14; \quad x^3 + y^3 + z^3 = 36.$$

Корни уравнения могут быть найдены в результате минимизации евклидовой нормы. Для оптимизации использовать симплексный метод.

Ответ: $x = 3$; $y = 2$; $z = 1$.

11. Для функции $f(x) = 4x_1^2 + x_2^2 - 40x_1 - 12x_2 + 136$, начиная из точки $x^0 = [4, 8]$, провести n этапов поиска Нелдера—Мида, включая отражение, расширение или сжатие и т.д., пока не будут исключены три исходные вершины многогранника.

12. Путем подбора значений β и γ в алгоритме Нелдера – Мида найти их оптимальные значения для следующих задач:

$$а) \min_x f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4;$$

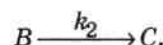
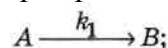
в качестве начальной точки выбирается точка $x^0 = [3; -1; 0; 1]$;

$$б) \min_x f(x) = (x_1 x_2)^2 (1 - x_1)^2 (1 - x_1 - x_2 (1 - x_1)^5)^2;$$

в качестве начальной точки выбирается точка $x^0 = [-1; 21]$;

$$в) \min_x f(x) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2.$$

13. В изотермическом трубчатом реакторе протекают реакции:



Здесь B – целевой продукт; C – побочный продукт.

Процесс в реакторе описывается системой уравнений:

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -2k_1 p \frac{C_A}{2C_A + C_{B_0} + C_B};$$

$$\frac{dC_B}{d\tau} = 4k_1 p \frac{C_A}{2C_{A_0} + C_{B_0} + C_B} - 4k_2 p^2 \frac{C_B^2}{2C_{A_0} + C_{B_0} + C_B};$$

$$k_i = k_{0i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad i = 1, 2,$$

где C_{A_0} , C_{B_0} и C_A , C_B – начальные и текущие концентрации компонентов A и B соответственно; k_i – константа скорости i -й стадии; p – давление; τ – условное время пребывания в реакторе, л·мин/г;

$$k_{01} = 2 \cdot 10^8 \frac{\text{моль}}{\text{л} \cdot \text{мин} \cdot \text{атм}}; \quad k_{02} = 6,3 \cdot 10^{15} \frac{\text{моль}}{\text{л} \cdot \text{мин} \cdot \text{атм}};$$

$$E_1 = 18\,000 \text{ кал/моль}; \quad E_2 = 30\,000 \text{ кал/моль}.$$

Реактор разбит на n зон. В каждой зоне необходимо определить давления, при которых выход целевого продукта максимален.

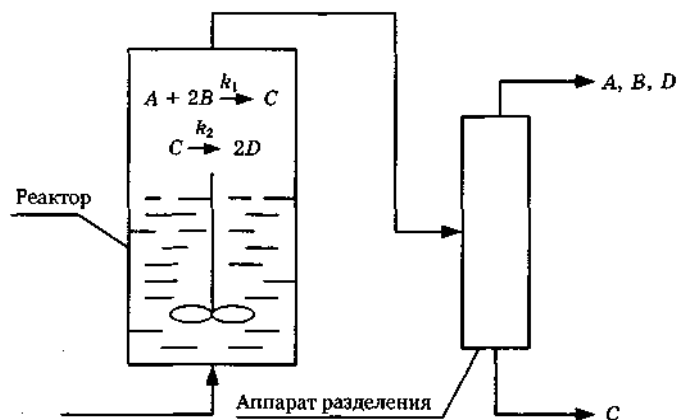
Решить задачу с помощью методов Нелдера—Мида и Гаусса—Зейделя по вариантам. Сравнить количество вычислений целевой функции. Варианты приведены с ледующей таблице:

Таблица. Варианты заданий

Время пребывания в реакторе, мин	Число зон в реакторе	Температура в реакторе, К	Начальная концентрация компонента, моль/г	
			A	B
5	5	380	0,0100	0,0085
8	6	380	0,0105	0,0085
8	7	380	0,0105	0,0085
6	6	400	0,0105	0,0085
6	5	400	0,0100	0,0085

Ответ: Вариант 1: $p_1 = 1,1$ атм; $p_2 = 0,8$ атм; $p_3 = 0,75$ атм; $p_4 = 0,65$ атм; $p_5 = 0,6$ атм.

14. Определить максимальную прибыль при эксплуатации химико-технологической системы (см. рис. ниже), состоящей из изотермического реактора полного перемешивания и аппарата разделения.



Прибыль определяют по формуле

$$\Pi = - \left(Z_c + Z_p + \frac{Z_{\text{реак}}}{t} \right) + G_{\text{ц.п.}} \Pi_{\text{ц.п.}} \tau,$$

где Z_c — затраты на сырье, усл. ден. ед./год; Z_p — затраты, связанные с выделением продукта C в аппарате разделения, усл. ден. ед./год; $Z_{\text{реак}}$ — стоимость реактора, усл. ден. ед.; t — срок службы установки, год; $G_{\text{ц.п.}}$, $\Pi_{\text{ц.п.}}$ — расход и цена целевого продукта C соответственно; τ — время работы установки в год (8400 ч/год).

Цена целевого продукта зависит от содержания примесей $C_{\text{пр}}$ (суммарное содержание компонентов A , B и D в целевом продукте) и рассчитывается по формуле

$$\Pi_{\text{ц.п.}} = \frac{1}{0,00058 + 0,017\sqrt{C_{\text{пр}}}}.$$

Затраты на разделение определяются по формуле

$$Z_p = \frac{5,5265 \cdot 10^4}{\frac{1,013}{\alpha} - 1},$$

где α — степень выделения целевого продукта.

Концентрации компонентов A и B на входе составляют 2,0 и 2,3 кмоль/м³ соответственно; расход смеси $G = 3600$ м³/ч.

Модель изотермического реактора полного перемешивания:

$$\begin{cases} \frac{C_A - C_{0A}}{\tau_{\text{усл}}} + k_1 C_A C_B^2 = 0; \\ \frac{C_D - C_{0D}}{\tau_{\text{усл}}} - 2k_2 C_C = 0; \\ C_B = C_{0B} + (C_A - C_{0A}); \\ C_C = C_{0C} - (C_A - C_{0A}) - 0,5(C_D - C_{0D}); \end{cases}$$

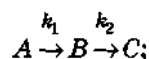
$$\tau_{\text{усл}} = \frac{V_p 3600}{G},$$

где G — расход смеси, м³/ч; V_p — объем реактора, м³.

Константы скорости равны: $k_1 = 0,3$ (кмоль/м³)⁻² с⁻¹; $k_2 = 0,2$ (кмоль/м³)⁻² с⁻¹. Для решения системы нелинейных уравнений можно воспользоваться методом Ньютона. При оптимизации необходимо использовать ограничения на независимые переменные:

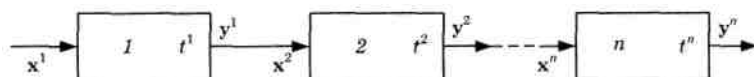
$$\begin{cases} 0,9 \leq \alpha \leq 0,99; \\ 0,5 \leq V_p \leq 2,0. \end{cases}$$

15. В каскад реакторов поступает реакционная смесь с расходом G , объем каждого реактора равен V_k . Реакторы работают в изотермическом режиме;



$$k_1 = 0,535 \cdot 10^{11} \exp\left(-\frac{9000}{T}\right);$$

$$k_2 = 0,461 \cdot 10^{18} \exp\left(-\frac{15000}{T}\right).$$



Уравнения материального баланса k -го реактора имеют вид

$$y_i^k - x_i^k = \tau^k r(y^k, T^k),$$

где y_i^k, x_i^k — концентрации i -й компоненты реакционной смеси; r — скорость реакции; T^k — температура в реакторе; $\tau^k = V^k / G$ — время пребывания.

Подставив формулы для скоростей реакции 1-го порядка в уравнение материального баланса и выражая выходные переменные y_i^k через входные x_i^k , получим математическую модель k -го реактора:

$$\begin{cases} y_1^k = \frac{y_1^{k-1}}{1 + \tau_k k_1}; \\ y_2^k = \frac{\tau_k k_1 y_1^{k-1}}{(1 + \tau_k k_1)(1 + \tau_k k_2)} + \frac{y_2^{k-1}}{1 + \tau_k k_2}. \end{cases}$$

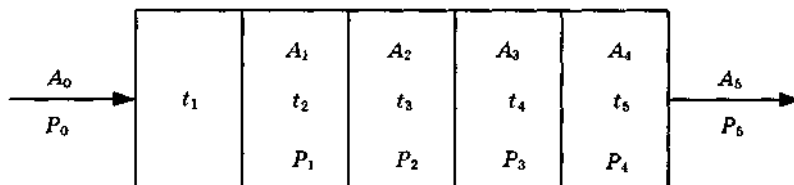
Определить максимальное значение концентрации вещества B на выходе из n -го реактора, т. е. найти $\max y_2^n(T)$, $T = (t_1, t_2, \dots, t_n)$ при наличии ограничений $t_{H_i} \leq t_i \leq t_{B_i}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Концентрации веществ на входе в каскад реакторов равны: $y_1^0 = 0,95$; $y_2^0 = 0,05$.

Время пребывания в каждом реакторе одинаковое и равно 6 с. Температура на входе в реакторы $320^\circ\text{C} \leq t_i \leq 340^\circ\text{C}$.

Ответ: $n = 5$; $\max y_2^n = 0,7124$; $t_1 = 331,595^\circ\text{C}$; $t_2 = 330,296^\circ\text{C}$; $t_3 = 329,596^\circ\text{C}$; $t_4 = 329,164^\circ\text{C}$; $t_5 = 328,882^\circ\text{C}$.

16. Спроектировать оптимальный пятисекционный химический реактор. Реактор идеального вытеснения разделен на пять равных секций (см. рис.):



В реакторе протекает химическая реакция $\begin{cases} A \xrightarrow{k_1} P \\ A \xrightarrow{k_2} W \end{cases}$. Предполагается, что в сек-

циях с помощью соответствующих систем регулирования может поддерживаться постоянная температура. Длина реактора $L=1\text{м}$, линейная скорость — 1 м/с . Доли исходного вещества A и продукта реакции P на входе в реактор равны $A_0 = 1$, $P_0 = 0$. Константы скоростей полезной и побочной реакции зависят от температуры следующим образом:

$$k_1 = 0,82 \cdot 10^3 \exp\left(-\frac{2500}{T}\right);$$

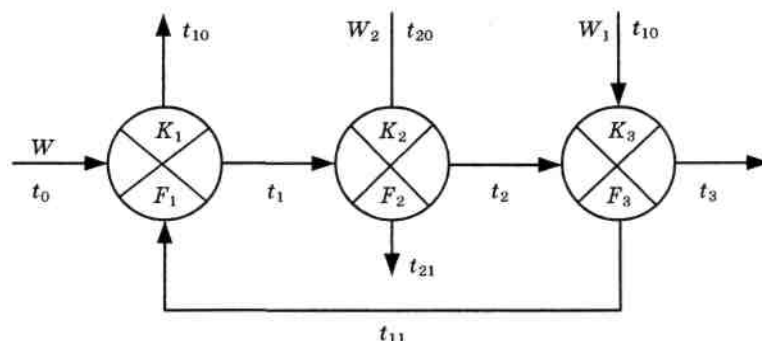
$$k_2 = 0,672 \cdot 10^6 \exp\left(-\frac{5000}{T}\right).$$

Спроектировать реактор так, чтобы доля продукта P на выходе из реактора была бы мак-

симальна, т. е. найти $\max P_5(T), t = \{t_1, \dots, t_5\}$ при наличии ограничений $353 < t_i < 417, i = 1, \dots, 5$.

Ответ: $\max P_5 = 0,441$; $t_1 = 353,1$ °C; $t_2 = 358,8$ °C; $t_3 = 364,8$ °C; $t_4 = 370,8$ °C; $t_5 = 376,0$ °C.

17. Спроектировать оптимальный узел теплообмена.



Холодный поток с водяным эквивалентом W нагревается от температуры t_0 до температуры t_3 двумя горячими потоками с водяными эквивалентами W_1 и W_2 и начальными температурами t_{10} и t_{20} . Известны коэффициенты теплопередачи во всех теплообменниках K_i ($i = 1, 2, 3$); F_i — поверхность теплопередачи в i -м теплообменнике; $z = 240(F_1^{0,8} + F_2^{0,8} + F_3^{0,8})$.

Спроектировать узел таким образом, чтобы капитальные затраты z были минимальны. Ниже приведены варианты задания:

Номер задания	W	W_1	W_2	T_0	T_3	T_{10}	T_{20}	K_1	K_2	K_3
	кВт/°C			°C				кВт/°C		
1	20	20	40	100	500	520	400	0,9	0,2	0,4
2	20	20	40	100	500	520	500	0,7	0,2	1,0
3	20	20	40	100	500	520	500	1,0	0,15	0,4

Ответ. $t_1 = 308,5$ °C; $t_2 = 356,0$ °C; $t_{11} = 376,0$ °C; $t_{12} = 167,6$ °C; $t_{21} = 376,2$ °C; $F_1 = 68,65$ м²; $F_2 = 85,1$ м²; $F_3 = 359,9$ м²; $z = 42\,084,37$ усл. ден. ед.

18. Найти максимум степени превращения для всей системы (см. рис.), используя в качестве оптимизируемых переменных коэффициенты байпасирования в теплообменниках. Температуры на выходе из реакторов не должны превышать 600 °C. Температура на входе в первую ступень абсорбции должна находиться в диапазоне 160 °C $< t_{A1} < 210$ °C. Для учета ограничений использовать метод штрафных функций.

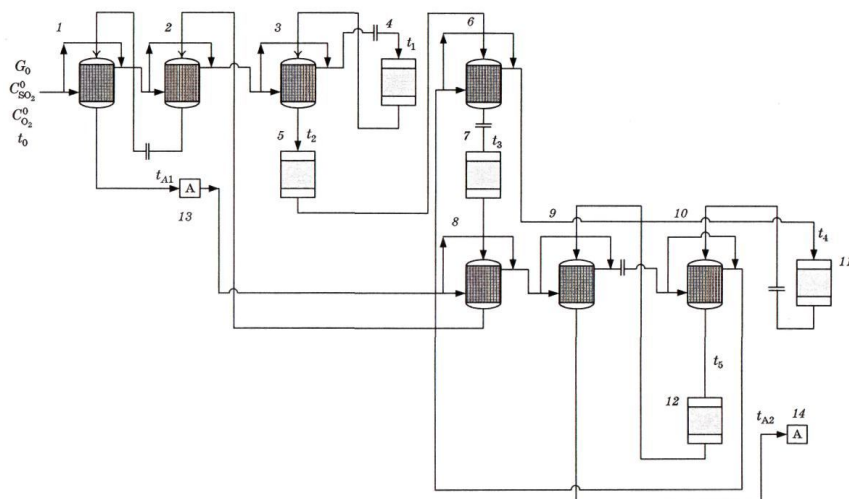


Рис. 4.26. Контактное отделение сернокислотного производства, работающего по схеме: «двойное контактирование—двойная абсорбция»: 1, 2, 3, 6, 8, 9, 10 — теплообменники; 4, 5, 7, 11, 12 — реакторы окисления диоксида серы; 13, 14 — абсорбционные отделения

19. На рис. представлен модельный химико-технологический процесс Вильямса—Отто. Схема состоит из реактора идеального перемешивания 2, теплообменника 2, фильтра 3 и ректификационной колонны 4.

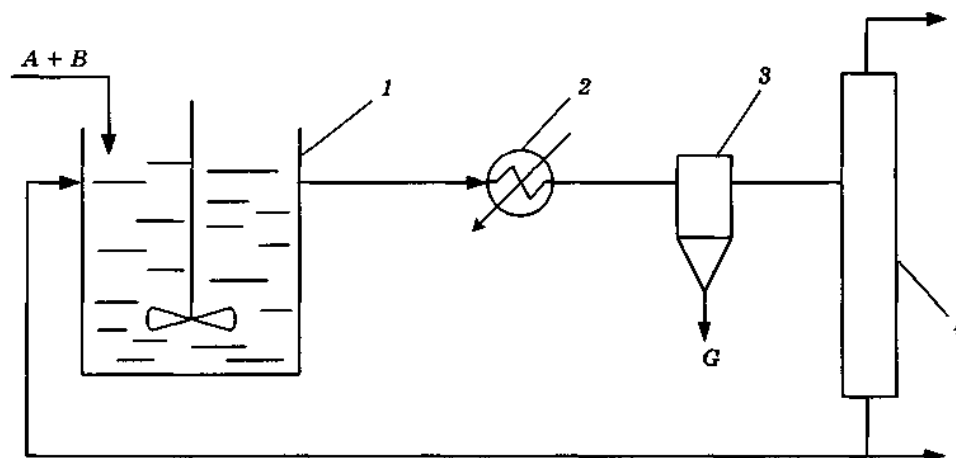
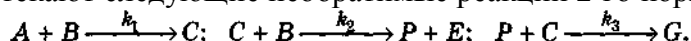


Рис. Схема процесса Вильямса—Отто: 1 — реактор; 2 — теплообменник; 3 — фильтр; 4 — ректификационная колонна

В реакторе протекают следующие необратимые реакции 2-го порядка:



Поток из реактора 1 подается в теплообменник 2, где охлаждается до температуры, достаточной для полного отделения побочного продукта G в фильтре 3. Далее поток с остальными компонентами подается в ректификационную колонну 4, из верхней части которой отбирается целевой продукт P . Известно, что компоненты P и E образуют азеотропную смесь, в которой относительная доля P составляет 10 % (масс). Это определяет режим работы колонны и учитывается при ее моделировании. Поток, выходящий из нижней части колонны 4, разделяется на две части: одна выводится из схемы и утилизируется, вторая возвращается в цикл, на вход реактора 1.

Константы скоростей реакций:

$$k_1 = 5,9755 \cdot 10^9 \exp(-12\,000/T);$$

$$k_2 = 2,5962 \cdot 10^{12} \exp(-15\,000/T);$$

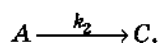
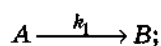
$$k_3 = 9,6283 \cdot 10^{15} \exp(-20\,000/T).$$

Составить модель химико-технологической схемы и найти максимальное количество продукта P , получаемое на установке: $\max_{\alpha, T}(P)$, где α — коэффициент рециркуляции; T — температура в реакторе, при следующих ограничениях: $55 \leq \alpha \leq 0,9$; $610 \leq T \leq 660$.

Ниже приведены варианты заданий:

Номер варианта	Расход A , кг/ч	Расход B , кг/ч	Объем реактора, м ³
1	10 000	40 000	2500
2	11540	31200	2450
3	13 546	31 523	2500
4	11 540	31230	2600
5	10 000	38 000	2500

20. В неизотермическом каскаде реакторов полного перемешивания протекает сложная реакция:



где B — целевой продукт; C — побочный продукт.

Константы скорости вычисляются по уравнению Аррениуса:

$$k_i = k_{0i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad i = 1, 2.$$

Начальные концентрации компонентов: где, $C_{A_0} = 1$; $C_{B_0} = 0$.

При заданной концентрации компонента B на выходе из каскада требуется определить температуры в реакторах и время пребывания реакционной смеси в каждом реакторе, при которых суммарное время пребывания минимально.

Задачу решить методом динамического программирования в соответствии с указанным в таблице вариантом задания:

Номер варианта	Число реакторов в каскаде	C_{B_n}	k_{01}	E_{01}/R	k_{02}	E_{02}/R
1	3	0,40	820	2500	$0,672 \cdot 10^6$	5000
2	3	0,53	1000	2500	$0,6 \cdot 10^6$	5000
3	4	0,535	1000	2500	$0,6 \cdot 10^6$	5000
4	4	0,658	1100	2500	$0,7 \cdot 10^6$	5000

Ответ. Вариант 1: $\min(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3) = 0,9526$; $\tau_1 = 0,4$; $\tau_2 = 0,2963$; $\tau_3 = 0,2563$; $t_1 = 358,2$ °C; $t_2 = 379,4$ °C; $t_3 = 396,6$ °C.

21. Определить оптимальные конструктивные параметры теплообменников (число труб, их длину и диаметр) в теплообменном узле, изображенном на рисунке, при которых суммарная поверхность теплообмена будет минимальной. Перепад давления в каждом теплообменнике не должен превышать $\Delta p_{\max}$ (Н/м²). Задачу решить с использованием метода закрепления. В таблице представлены варианты заданий:

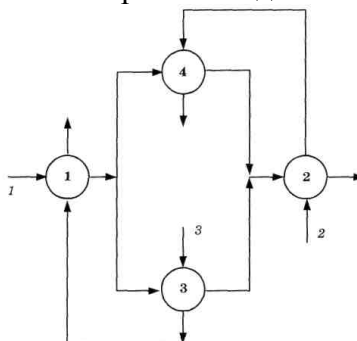


Рисунок. Схема теплообменного узла: 1-4 — теплообменники; 1-3 — потоки

Таблица. Варианты заданий

Номер по- тока	Расход, м³/ч	Температура, °C		Физико-химические свойства			
		начальная	конечная	ρ, кг/м³	η·10 ⁻⁶ , Н·с/м²	c _p , кДж/кг·град	λ, Вт/м·град
Вариант № 1							
1	100 000	50	200	1,29	19,0	1,05	0,028
2	65 000	340	190	1,29	19,0	1,05	0,028
3	40 000	260		1,96	15,0	0,868	0,023
Коэффициент разделения 1-го потока — 0,56; Δp _{max} = 550 Н/м²							
Вариант № 2							
1	45 000	100	250	2,02	7,95	1,87	0,0127
2	78 000	350	200	0,72	10,3	2,23	0,0258
3	40 000	200		1,36	8,5	1,73	0,0155
Коэффициент разделения 1-го потока — 0,57; Δp _{max} = 750 Н/м²							
Вариант № 3							
1	85 000	40	200	0,72	10,3	2,23	0,028
2	80 000	300	200	1,29	19,0	1,05	0,028
3	40 000	250		1,96	15,0	0,868	0,023
Коэффициент разделения 1-го потока — 0,614; Δp _{max} = 550 Н/м²							
Вариант № 4							
1	85 000	50	200	1,96	15,0	0,868	0,028
2	80 000	350	200	1,29	19,0	1,05	0,028
3	40 000	250		1,96	15,0	0,868	0,023
Коэффициент разделения 1-го потока — 0,614; Δp _{max} = 600 Н/м²							
Вариант № 5							
1	45 000	70	200	2,02	7,95	1,87	0,0127
2	95 000	250	150	0,72	10,3	2,23	0,0258
3	40 000	160		1,36	8,5	1,73	0,0155
Коэффициент разделения 1-го потока — 0,625; Δp _{max} = 650 Н/м²							

Ответ: Вариант 1 (см. табл. ниже):

Номер теплообменника	d , м	Количество труб	Длина труб, м	Площадь поверхности, m^2
1	0,025	950	1,33	99,18
2	0,03	1325	3,05	380,69
3	0,025	1315	2,35	242,58
4	0,03	1310	3,00	370,21

21. Определить минимальные капитальные затраты технологической схемы, состоящей из теплообменника 1 и адиабатического реактора 2 идеального вытеснения (см рис.).

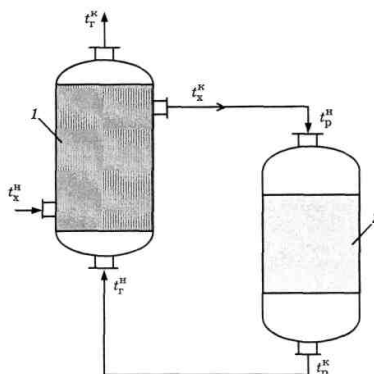


Рис. Схема «теплообменник—реактор»

В реакторе протекает обратимая реакция: $A + B \rightleftharpoons 2C + q$ (q — тепловой эффект реакции). Температура на входе в реактор должна удовлетворять ограничениям:

$$t_{p\min}^H \leq t_p^H \leq t_{p\max}^H.$$

Концентрация компонента A на выходе из схемы должна быть не меньше C_A^* . Скорость по компоненту A описывается уравнением:

$$\frac{dC_A}{d\tau} = k \left(C_A C_B - \frac{C_C^2}{k_p} \right),$$

$$\tau = \frac{V \cdot 3600}{g},$$

где g — расход смеси на входе в систему, $m^3/ч$.

Константа скорости прямой реакции и константа равновесия определяются по формулам:

$$k_p = 10^{(4900/T - 4,645)},$$

$$k = 2,146 \exp \left(-\frac{6,076 \cdot 10^4}{RT} \right).$$

Концентрации компонентов A и B равны 0,5 долей об. Коэффициент адиабатического разогрева $\lambda_{ad} = \frac{q}{C_p} = 300^\circ C$. Коэффициент теплопередачи в теплообменнике $k_t = 20 \cdot 10^{-3}$

кВт/м·град. Капитальные затраты определяются по формуле: $K = aF^{0,6} + bV^{0,92}$, где a , b — эмпирические коэффициенты. Задачу решить методом цен. Сравнить полученные результаты с решением, найденным интегральным методом. Варианты заданий приведены в таблице:

Номер варианта	G , $m^3/ч$	C_p , кДж/кг·град	t_x^H , $^\circ C$	a	b	$t_{p\min}^H$, $^\circ C$	$t_{p\max}^H$, $^\circ C$	C_A^*
1	144 000	1,395	573	420	300	670	730	0,69
2	120 000	2,310	570	420	300	670	730	0,69
3	130 000	1,500	580	300	300	650	750	0,65
4	144 000	1,395	573	300	300	673	723	0,67

5	130 000	1,395	580	350	310	663	733	0,70
---	---------	-------	-----	-----	-----	-----	-----	------

22. Система, состоящая из n последовательно соединенных теплообменников, реализует поэтапный процесс теплообмена без повторных циклов (см. рис.).

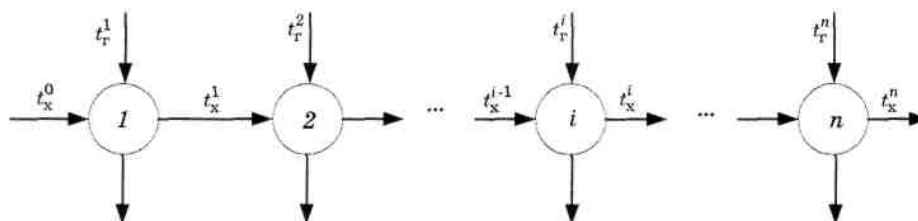


Рис. Схема из последовательно соединенных теплообменников

Каждый из теплообменников описывается следующей моделью:

$$Vc_p(t_x^i - t_x^{i-1}) = k_i F_i (t_r^i - t_x^i).$$

Расходы всех потоков одинаковы и равны V . Теплоемкость всех потоков постоянна и равна c_p . При заданных значениях коэффициентов теплопередачи k_i необходимо определить площадь поверхности теплопередачи для каждого из теплообменников так, чтобы суммарная площадь, обеспечивающая теплообмен, была минимальной.

Сравнить решения, полученные интегральным методом оптимизации, методом динамического программирования и методом цен. Варианты заданий приведены в таблице.

Параметр	Номер варианта				
	1	2	3	4	5
t_x^0	100	120	70	160	90
t_x^n	500	520	460	600	480
n	3	4	4	5	5
t_r^1	300	200	180	250	250
t_r^2	400	300	275	350	320
t_r^3	600	400	410	420	420
t_r^4	-	600	620	550	490
t_r^5	-	-	-	700	600
k_1	120	100	100	100	100
k_2	80	90	90	90	90
k_3	40	60	60	60	60
k_4	-	40	40	40	40
k_5	-	-	-	35	35
$\omega \cdot c_p$	100 000	110 000	95 000	130 000	105 000

Ответ. Вариант 1: $T_x = 182$ °C; $T_2 = 296$ °C; $T_3 = 500$ °C; $F_1 = 579$ м²; $F_2 = 1370$ м²; $F_3 = 5100$ м².

Примеры заданий для самостоятельного решения по 5 разделу.

Перечень возможных контрольных вопросов к лабораторным работам и зачету

1. Иерархическая структура химического предприятия.
2. Цели функционирования и основные показатели эффективности каждой ступени иерархии химического предприятия.
3. Дайте определение понятиям: химическое производство, химико-технологический процесс, химико-технологическая система и объясните их (см. также гл. 2).
4. В чем заключается метод системного анализа для исследования химико-технологического процесса?
5. Что может служить производственным эквивалентом химико-технологической систе-

мы?

6. Из каких частей состоит химико-технологическая система?
7. Какие подсистемы можно выделить в химико-технологической системе?
8. Какие элементы химико-технологической системы Вы можете указать? Их назначение и примеры в производстве.
9. Что такое связь в химико-технологической системе? Какие типы связей и их назначение Вы знаете?
10. Как отображается химико-технологическая система (виды ее модели)?
11. Приведите пример химической, операционной и функциональной схем какого-либо производства.
12. Чем отличаются технологическая и структурная схемы химического производства? Покажите это на примере производства аммиака.
13. Приведите примеры уравнений физико-химических связей, используемых при составлении систем уравнений МТБ химических реакторов, колонн ректификации и теплообменников ХТС.
14. В чем отличие физических и фиктивных потоков ХТС?
15. Какими способами могут быть разработаны операторно-символические математические модели элементов ХТС?
16. Какие виды математических операторов могут использоваться при составлении операторно-символических моделей ХТС?
17. Что такое технологическая структура, или технологическая топология, ХТС?
18. Что такое состояние ХТС?
19. Какой вид имеет общее формальное выражение математической модели ХТС?
20. От чего зависят значения критериев эффективности ХТС?
21. Какие можно выделить иерархические уровни управления сложной ХТС?
22. Чем различаются основные и вспомогательные технологические операторы ХТС?
23. Покажите, что познавательная и преобразовательная деятельности субъекта невозможны без моделирования.
24. Опишите алгоритм анализа и перечислите, какие модели он порождает.
25. Опишите алгоритм синтеза и укажите, какие модели он порождает. Какая из них непосредственно описывает исследуемый объект (явление)?
26. Что такое «абстрактная модель»? Кроме языковых, какие еще примеры абстрактных моделей вы можете привести?
27. Чем вызвано многообразие языков?
28. Какова простейшая абстрактная модель разнообразия окружающей нас реальности?
29. Чем отличаются искусственная и естественная классификации?
30. Что называется «реальной моделью»? Приведите три типа реальных моделей (классификацию по происхождению подобия модели оригиналу).
31. Чем отличается использование познавательных и прагматических моделей?
32. Почему в любой модели есть, кроме истинного, и (обязательно и неизбежно) неистинное содержание?
33. Какое качество модели называется адекватностью?
34. Что является окружающей средой для модели?
35. Дайте определения следующих терминов:
 - модель;
 - анализ;
 - синтез;
 - модель абстрактная;
 - модель языковая;
 - модель реальная;
 - классификация (искусственная и естественная);
 - модели познавательные;

—модели прагматические;

—адекватность модели.

36. В чем различие операций анализа и оптимизации ХТС?

37. Запишите математическую формулировку задач проектного и поверочного анализа ХТС.

38. В чем различие блочного и информационного принципов решения задач анализа ХТС?

39. В чем различие задач проектирования и эксплуатации ХТС?

40. Какова роль математического моделирования ХТС при разработке АСУТП?

41. Почему для проектирования улучшающего вмешательства необходимо выявить цели?

42. Перечислите основные причины расхождения между целями объявленными и истинными.

43. Что такое «дерево целей» и как его можно построить?

44. В каком отношении находятся цели и критерии?

45. Чем определяется набор (число и характер) необходимых критериев?

46. Обсудите сходства и различия между критериями и ограничениями

47. В чем состоит отличие технологической от операторной схем ХТС?

48. Каким технологическим блокам производства соответствуют однородные ХТС?

49. Чем различаются однонаправленные и встречнонаправленные, или контурные, ХТС?

50. Чем различаются упорядоченные и взаимосвязанные многоконтурные ХТС?

51. В чем различие безотходных и ресурсосберегающих ХТС?

52. Какие типы технологических процессов и технологических связей между элементами характерны для ХТС?

53. Назовите основные задачи проектирования и реконструкции ХТС.

54. Какие основные задачи решают химики-технологи при проектировании и эксплуатации ХТС?

55. В чем состоит отличие операций оптимизации от анализа ХТС?

56. Назовите основные неформализуемые, или интеллектуальные творческие, операции при синтезе оптимальных ресурсосберегающих ХТС.

57. Чем характеризуют состояние химико-технологической системы? Как его определяют и на чем основан этот расчет?

58. Что такое материальный баланс элемента химико-технологической системы и химико-технологической системы в целом?

59. Какие положения стехиометрии химических превращений используются для расчета материального баланса элемента химико-технологической системы?

60. Получите уравнения для расчета количества и состава потока, выходящего из реактора дегидрирования бутилена. Задано:

а) количество бутилена на входе V_0 [м³/ч], объемное соотношение λ на входе пар (разбавитель): газ(бутилен), степень превращения бутилена x ;

б) те же начальные условия, но в реакторе достигается равновесное превращение бутилена x_p .

61. Приведите уравнения для расчета материального баланса смесителя и делителя.

62. Напишите общее уравнение теплового баланса, поясните его составляющие и их расчет.

63. Объясните, почему при расчете теплового баланса используют среднеинтегральную теплоемкость?

64. Как рассчитывается баланс химико-технологической системы (последовательность расчета)?

65. Приведите основную форму представления материального и теплового балансов химико-технологической системы.

66. Запишите в общем виде уравнения теплового, энергетического и эксергетического балансов одного элемента ХТС.

67. Чем обусловлена многовариантность составления систем уравнений балансов ХТС?
68. Как математически проверить независимость уравнений, входящих в систему уравнений МТБ?
69. Назовите основные рекомендации по рациональному выбору вычислительного базиса при составлении и расчете систем уравнений МТБ.
70. Каким образом при составлении систем уравнений МТБ выбирают сквозное, или связующее вещество?
71. Что такое степень свободы ХТС? Как определяют число степеней свободы ХТС?
72. Какие основные инженерно-технологические рекомендации используют для рационального выбора набора свободных информационных переменных ХТС?
73. Что такое алгоритм оптимальной стратегии решения системы уравнений математической модели ХТС?
74. В чем сущность задач расчета материально-тепловых балансов ХТС?
75. Дайте общую характеристику прямых и итерационных численных методов решения задач анализа ХТС.
76. В чем сущность операций модификации метода простой итерации для решения систем нелинейных алгебраических уравнений и систем линейных алгебраических уравнений?
77. Назовите преимущества и недостатки метода простой итерации.
78. Что такое число обусловленности систем линейных алгебраических уравнений?
79. Какая взаимосвязь между числом обусловленности и погрешностью приближенного решения систем линейных алгебраических уравнений?
80. Какие основные трудности возникают при численном решении систем нелинейных алгебраических уравнений?
81. Назовите основные преимущества квазиньютоновских методов численного решения систем нелинейных алгебраических уравнений.
82. Нарисуйте общую блок-схему методики численного решения алгебраическо-дифференциальных систем уравнений математического описания ХТС.
83. Назовите два основных этапа процедуры решения систем нелинейных алгебраических уравнений с использованием метода Ньютона.
84. Сформулируйте основные этапы решения задач оптимизации ХТС с использованием двухуровневых методов: метода цен и метода закрепления промежуточных переменных.
85. Назовите основные преимущества и недостатки двухуровневых методов оптимизации ХТС.
86. Составьте блок-схемы алгоритмов решения систем нелинейных алгебраических уравнений по методу простой итерации и обобщенному методу доминирующих собственных значений.
87. Составьте блок-схемы алгоритмов решения систем нелинейных алгебраических уравнений по методу Ньютона и по методу Бroyдена.
88. Проверьте сходимость вычислений при решении уравнения: $x - 10 = 0$ методом простой итерации, с шагом $h = 0,5$ и $h = 4$, задавшись начальным приближением $x_0 = 0$.
89. Изменения значений каких переменных и параметров ХТС влияют на величину коэффициентов эффективности оптимизации ХТС на стадии проектирования?
90. Изменения значений каких переменных и параметров ХТС влияют на величину коэффициентов эффективности при оптимизации действующих ХТС?
91. Что такое «активный» и «пассивный» эксперименты?
92. Чем отличаются прямые и косвенные измерения? Как следует учитывать разницу между ними при обработке данных эксперимента?
93. Усвоили ли вы характерные особенности базовых измерительных шкал? Например, заметили ли вы, что количественные шкалы различаются способами задания начал отсчета и единиц измерения?
94. Почему не следует всегда одинаково обрабатывать данные, относящиеся к разным

измерительным шкалам?

95. Какова разница между качественными и количественными моделями?

96. Что значит «превратить черный ящик в прозрачный»?

97. Что такое «идентификация модели»?

98. В чем сущность прямого метода идентификации ХТС?

99. Какие методы статистической обработки информации используются при параметрической идентификации ХТС?

100. Чему равно общее число необходимых опытов при полном и дробном факторных экспериментах при идентификации ХТС?

101. Дайте общую характеристику ортогонального и рототабельного центрального комплексного планирования экспериментов при идентификации ХТС.

102. Чем отличается система стехиометрических уравнений и схема превращения?

103. Как связаны скорость превращения вещества и скорость химической реакции при протекании простой и сложной реакций?

104. Какую размерность может иметь скорость превращения вещества?

105. Что такое кинетическая модель реакции (кинетическое уравнение)?

106. Представьте в общем виде кинетическую модель обратимой реакции.

107. Отрадите зависимость константы скорости реакции от температуры. Сопоставьте влияние температуры на скорость реакций с разными значениями энергий активации (например, $E_1 > E_2$).

108. Какие существуют практические приемы для увеличения скорости химического превращения?

109. Как рассчитать скорость тепловыделения в химическом превращении?

110. Что такое химический реактор и для чего он предназначен?

111. Что такое моделирование и модель процесса? Их назначение.

112. Чем различаются физическое и математическое моделирование? Почему для исследования химических процессов и реакторов надо использовать математическое моделирование?

113. Представьте последовательность исследования методом математического моделирования.

114. Чем отличается модель «сжимающая сфера» от модели «сжимающееся ядро» для гетерогенного процесса «газ – твердое»? Приведите примеры.

115. Нарисуйте схему и объясните структуру процесса «газ – твердое (полностью реагирующее)». Какие этапы процесса можно выделить? Почему у процессов «газ – твердое» и «жидкость – твердое» одинаковая структура?

116. Постройте математическую модель «сжимающая сфера» процесса «газ – твердое» и получите выражение для наблюдаемой скорости превращения и времени полного превращения.

117. Постройте математическую модель «сжимающееся ядро» процесса «газ – твердое» и получите выражения для наблюдаемой скорости превращения и времени полного превращения для разных режимов процесса.

118. Как меняется скорость превращения, размер и степень превращения твердой частицы по мере протекания процесса «газ-твердое (не полностью реагирующее)» в кинетическом, внутридиффузионном и внешне-диффузионном режимах? Почему во внутридиффузионном режиме в самом начале процесса $W_H \rightarrow \infty$?

119. Как интенсифицировать процесс «газ – твердое (не полностью реагирующее)» в разных режимах его протекания? Какое из условий процесса наиболее сильно влияет на наблюдаемую скорость превращения в каждом режиме?

120. Постройте математическую модель процесса «газ – жидкость» и получите выражение для наблюдаемой скорости превращения.

121. От каких условий и как зависит наблюдаемая скорость превращения процесса «газ – жидкость», в том числе в разных режимах?

122. С чем связано возможное уменьшение скорости превращения в процессе «газ – жидкость» при повышении температуры?
123. Как можно увеличить скорость превращения в процесс «газ – жидкость» в разных режимах его протекания?
124. Что такое катализ и катализатор? В чем состоит механизм действия катализатора?
125. Как влияет катализатор на равновесие в химической реакции? Объясните.
126. Обоснуйте и постройте математическую модель процесса в пористом плоском зерне катализатора. Объясните граничные условия полученного уравнения модели процесса.
127. Из полученной математической модели процесса в пористом плоском зерне катализатора получите распределение относительной концентрации в зерне и наблюдаемую скорость превращения.
128. Что такое степень использования внутренней поверхности катализатора, от какого параметра и как она зависит?
129. Как влияют на скорость гетерогенно-каталитического процесса концентрация, температура, размер зерен катализатора и скорость потока? Приведите ответы для процессов в пористом зерне и на непористом катализаторах и сопоставьте их.
130. Постройте математическую модель процесса на поверхности раздела фаз («газ – твердое», каталитический процесс) с учетом теплового эффекта реакции и покажите связь концентрации (степени превращения) и температуры поверхности.
131. Как можно графически определить температуру поверхности в гетерогенном процессе?
132. Что такое неоднозначность стационарного режима?
133. Проявляется ли неоднозначность стационарного режима в эндотермическом процессе?
134. Каков общий подход к построению математической модели процесса в химическом реакторе? Напишите в общем виде балансовые уравнения процесса в реакторе.
135. Как выбирается элементарный объем, для которого составляются балансовые уравнения процесса в реакторе? Почему для емкостного реактора с мешалкой элементарный объем может совпадать с объемом всего реактора?
136. По схеме одного из реакторов и постройте математическую модель процесса в нем (не забудьте начальные условия!).
137. Что такое реактор идеального смешения и в чем проявляется его «идеальность»? Ответьте на эти же вопросы о реакторе идеального вытеснения.
138. Как Вы понимаете подобие математических моделей разных процессов («газ – твердое» и на непористом зерне катализатора, в трубчатом реакторе и непроточном емкостном, в реакторе барботажном и с псевдоожиженным слоем, в газожидкостном насадочном реакторе и во вращающемся с твердым реагентом). Что дает такое подобие?
139. Какие признаки классификации химического процесса и химического реактора могут быть использованы при анализе процесса в химическом реакторе?
140. В чем заключается подобие и различие процесса в реакторах идеального смешения периодическом и идеального вытеснения?
141. Что такое условное время реакции и чем оно отличается от времени пребывания в реакторе?
142. Как меняются концентрации исходного компонента и продукта по длине реактора идеального вытеснения? Каковы их предельные значения (при увеличении длины реактора)?
143. При увеличении температуры на 10 градусов константа скорости реакции возросла в два раза. На сколько надо изменить длину реактора идеального вытеснения, чтобы получить то же превращение. Подтвердите это с помощью математической модели и изобразите графически.
144. Как изменится степень превращения в реакторе при протекании реакции первого порядка при увеличении начальной концентрации в 1,5 раза? Объясните.

145. Какое предельное превращение можно получить в реакторе идеального смешения периодическом при протекании обратимой реакции. Подтвердите это с помощью математической модели и изобразите графически.
146. В реакторе идеального смешения периодическом протекает обратимая реакция. Как изменится скорость превращения в начале процесса в результате увеличения температуры процесса? Изменится ли предельное превращение, как и почему?
147. Получите математическую модель процесса в реакторе идеального вытеснения при протекании сложной реакции: а) с параллельной схемой превращения; б) с последовательной схемой превращения? Покажите график изменения концентраций компонентов по длине реактора и объясните его вид (почему концентрации увеличиваются, уменьшаются, не меняются и т.д.).
148. В реакторе идеального вытеснения протекает последовательная реакция. Какие рекомендации можно сделать, чтобы добиться: а) максимального выхода промежуточного продукта; б) максимальной селективности по промежуточному продукту; в) максимального выхода конечного продукта?
149. Как меняется концентрация вещества по объему проточного реактора идеального смешения?
150. Почему производительность реактора в режиме идеального вытеснения больше, чем в режиме идеального смешения, при протекании простых реакций?
151. Может ли режим реактора (идеального смешения, идеального вытеснения) оказывать влияние на селективность процесса при протекании сложной реакции? Обоснуйте Ваш ответ.
152. Назовите причины отклонения режимов в промышленных реакторах от режимов идеального смешения и вытеснения.
153. Попробуйте сформулировать, для какого типа процессов целесообразны реакторы в режимах: а) идеального смешения периодическом; б) идеального смешения проточном; в) идеального вытеснения?
154. Расскажите о различных способах организации теплообмена в химическом реакторе.
155. Какие температурные режимы протекания реакции и тепловые режимы процесса могут существовать в реакторе? Покажите схемы реакторов, в которых осуществляются такие режимы.
156. Постройте модель процесса идеального вытеснения с теплоотводом из зоны реакции. От каких параметров зависят показатели процесса?
157. Что такое величина адиабатического разогрева? Почему этот параметр лучше характеризует влияние реакции на температурный режим технологического процесса, чем теплота реакции?
158. Как будет меняться степень превращения и температура в реакторе идеального вытеснения при протекании адиабатического процесса. Сопоставьте эти изменения с изотермическим процессом.
159. В каком режиме адиабатического реактора (идеального вытеснения или идеального смешения) температура на выходе будет больше? Обоснуйте ответ.
160. Производительность какого из реакторов будет больше: идеального вытеснения или идеального смешения при протекании адиабатического процесса? Обоснуйте ответ.
161. Как меняется температура в трубчатом реакторе с теплообменом, осуществляемом через стенку при протекании: а) экзотермической реакции; б) эндотермической реакции?
162. В чем особенность температурного режима в проточном реакторе идеального смешения при протекании адиабатического процесса?
163. Что такое стационарный режим, устойчивый стационарный режим? В каком типе реактора может проявиться явление неустойчивости стационарного режима?
164. Как организован процесс в автотермическом реакторе? В чем особенность его режима?
165. Что такое оптимизация? Сформулируйте постановку задачи оптимизации технологи-

ческого процесса и поясните.

166. Почему задача оптимизации многократно встречается при разработке химико-технологического процесса? Приведите примеры.

167. Что такое теоретический оптимальный режим? Для чего нужно его определение?

168. Какова оптимальная теоретическая температура для необратимой и обратимой (экзо- и эндотермических) химических реакций.

169. Сформулируй задачу оптимизации последовательности жидкофазных реакторов с мешалками и решите ее (реакция первого порядка, температуры в реакторах одинаковые).

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Моделирование технологических и природных систем»

7.1. Основная литература

1. Тарасенко, Ф. П. Прикладной системный анализ: учебное пособие. – М.: КНОРУС, 2010. – 224 с.
2. Антонов, А. В. Системный анализ: учебник для вузов. 2-е изд., стер. М.: Высш. шк. 2006. – 454 с.
3. Черников, Ю. Г. Системный анализ и исследование операций: учеб. пособие для вузов. М.: МГГУ. 2006. – 370 с.
4. Бесков, В. С. Общая химическая технология: учебник для вузов. М.: Академкнига. 2005. – 452 с.
5. Закгейм, А. Ю. Общая химическая технология: Введение в моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учеб. пособие по курсам "Общая хим. технология" и "Моделирование химико-технолог. процессов" для студентов вузов, обучающихся по направлениям "Хим. технология и биотехнология" и "Материаловедение". 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Логос, 2012. – 304с. – Режим доступа: <http://www.biblioclub.ru/book/84988/>
6. Островский, Г. М. Методы оптимизации химико-технологических процессов: учеб. пособие / Г. М. Островский, Ю. М. Волин, Н. Н. Зиятдинов. М.: КДУ. 2008. 424 с.
7. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. - М.: Академкнига. 2006. – 416 с.
8. Лисицын, Н. В. Химико-технологические системы: оптимизация и ресурсосбережение: учеб. пособие для студентов втузов / Н. В. Лисицын, В. К. Викторов, Н. В. Кузичкин. - СПб.: Менделеев, 2007. – 312 с.

7.2. Дополнительная литература

9. Кафаров, В. В. Анализ и синтез химико-технологических систем / В. В. Кафаров, В. П. Мешалкин. М.: Химия, 1991. – 432 с.
10. Перегудов, Ф. И. Основы системного анализа: учеб. 3-е изд. / Ф. И. Перегудов, Ф. П. Тарасенко. Томск.: Изд-во НТЛ. 2001. – 396 с.
11. Перегудов, Ф. И. Введение в системный анализ : учеб. пособие для вузов / Ф. И. Перегудов, Ф. П. Тарасенко. - М. : Высшая школа, 1989. – 367 с.
12. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов : практ. руководство: учеб. пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки бакалавров 553000 "Системный анализ и управление", дисциплине "Системный анализ химических технологий" / В. А. Холоднов [и др.]. - СПб.: Проффессионал, 2003. - 480 с.
13. Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: Введение в моделирование химико-технологических процессов. 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Логос . 2009. – 304 с.

14. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учеб. пособие для студентов химико-технол. специальностей вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. - М. : Высшая школа, 1991. - 399 с.
15. Шнейдер, В. Е. Краткий курс высшей математики: учеб. пособие в 2 т./ В. Е. Шнейдер, А. И. Слуцкий, А. С. Шумов. – М.: Высш. шк., 1978.
16. Павлов, К. Ф. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии : учеб. пособие для вузов / К. Ф. Павлов, П. Г. Романков, А. А. Носков. - М. : Альянс, 2005. - 576 с.
17. Кафаров, В. В. Системный анализ процессов химической технологии / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов. М.: Наука, 1976. – 500 с.

7.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. Электронный каталог НТБ ГУ КузГТУ.
 2. Информационные системы ГУ КузГТУ и кафедры по обеспечению учебного процесса.
- ГУ КузГТУ обеспечен необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Системный анализ»

- аудитории, оснащенные соответствующим мультимедийными средствами, включающими персональный компьютер, проекционный аппарат и экран;
- компьютерные классы (ауд. 5106а, 5203), обеспеченные необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения;
- электронные ресурсы.