

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Нижекамский химико-технологический институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»
(НХТИ ФГБОУ ВО «КНИТУ»)



УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора по УР

Н.И. Никифорова

« 3 » мая 2023 г.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
по дисциплине (модулю)

Б1.В.08 «Основы моделирования процессов и аппаратов нефтегазопереработки

(код и наименование дисциплины (модуля))

15.03.02 «Технологические машины и оборудование»

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Оборудование нефтегазопереработки

(наименование профиля/направленности/специализации)

Бакалавр

квалификация

очная, очно-заочная, заочная

(форма обучения)

Нижекамск, 2023

Составитель ФОС:
доцент каф. МАХП
(должность)


(подпись)

И.А. Сабанаев
(И.О. Фамилия)

ФОС рассмотрен и одобрена на заседании кафедры МАХП
протокол № 8 от «19» апреля 2023 г.

Заведующий кафедрой


(подпись)

И.Н. Мадышев
(И.О. Фамилия)

Эксперт:

Руководитель ООП, Мадышев И.Н. доцент каф. МАХП НХТИ



Перечень компетенций с указанием этапов их формирования

Индекс Компетенции	Содержание компетенции	Этапы формирования компетенции (указать все темы из РПД)		Наименование оценочного средства
		Лекции	Лабораторные занятия	
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	-	Контрольная работа
УК-1.1	Знает методики поиска, сбора и обработки информации; актуальные российские и зарубежные источники информации в сфере профессиональной деятельности; метод системного анализа	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	Отчет по лабораторной работе
УК-1.2	Умеет применять методики поиска, сбора и обработки информации; осуществлять критический анализ и синтез информации, полученной из разных источников; применять системный подход для решения поставленных задач	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	Отчет по лабораторной работе
УК-1.3	Владеет навыками поиска, сбора и обработки, критического анализа и синтеза информации; использования системного подхода для решения поставленных задач	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	Тема 1, Тема 2, Тема 3, Тема 4	Отчет по лабораторной работе

Перечень оценочных средств по дисциплине (модулю)

Очная форма

Название	Диапазон оценок мин - макс	Кол-во	Всего
Выполнение и отчет по лабораторным работам	6 - 10	6	36 - 60
Решение контрольной работы	24 – 40	1	24 – 40

Итого (мин – макс): 60 – 100

Очно-заочная форма

Название	Диапазон оценок мин - макс	Кол-во	Всего
Выполнение и отчет по лабораторным работам	12 - 20	3	36 - 60
Решение контрольной работы	24 – 40	1	24 – 40

Итого (мин – макс): 60 – 100

Заочная форма

Название	Диапазон оценок мин - макс	Кол-во	Всего
Выполнение и отчет по лабораторным работам	18 - 30	2	36 - 60
Решение контрольной работы	24 – 40	1	24 – 40

Итого (мин – макс): 60 – 100

Шкала оценивания

Цифровое выражение	Выражение в баллах:	Словесное выражение	Критерии оценки индикаторов достижения при форме контроля:
			зачет
-	60 - 100	зачтено	Оценка «зачтено» выставляется студенту, если ответы на вопросы по темам дисциплины последовательны, логически изложены, допускаются незначительные недочеты в ответе студента, такие как отсутствие самостоятельного вывода, речевые ошибки и пр.
-	Ниже 60	Не зачтено	Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если студент не знает основных понятий темы дисциплины, не отвечает на дополнительные и наводящие вопросы преподавателя.

Перечень и краткая характеристика оценочных средств

№п/п	Наименование оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в фонде
1	2	3	4
1	Контрольная работа	Средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу.	Комплект контрольных заданий по вариантам
2	Отчет по лабораторной работе	Задokumentированный результат самостоятельного исследования, выполненного на лабораторном оборудовании или с помощью средств компьютерного моделирования, включающий в себя выбор теоретического обоснования метода исследования, описание хода работы, ее результаты и выводы.	Комплект заданий для выполнения лабораторных работ

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Нижекамский химико-технологический институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»

Факультет Механический

Кафедра Машин и аппаратов химических производств

Направление подготовки 15.03.02 «Технологические машины и оборудование»
(код и наименование)

Профиль/программа: «Оборудование нефтегазопереработки»
(наименование)

Комплект заданий для контрольной работы
по дисциплине (модулю) «Основы моделирования процессов и аппаратов
нефтегазопереработки»
(наименование дисциплины)

Контрольная работа

Контрольная работа предназначена для определения степени усвоения студентами методов решения математических моделей процессов химической и нефтехимической технологии.

Задание

Средствами VBA MS Excel разработайте алгоритм решения математической модели для исследования процесса охлаждения пластины из заданного материала при симметричном конвективном теплообмене с боковых поверхностей.

Требования:

1. Используя средства VBA MS Excel, разработайте экранную форму для ввода заданных параметров.
 2. Разместите на этой же форме командную кнопку и создайте процедуру – обработчик нажатия на эту кнопку.
 3. Используя математическую модель теплообменного процесса с граничными условиями конвективного теплообмена пластины со средой, разработайте численный или асимптотический способ ее решения.
 4. На основе полученного решения разработайте алгоритм программы для моделирования заданного процесса.
 5. Запустите программу на выполнение. Если она работает без ошибок, вы получите на листе MS Excel таблицу для построения эпюры температур на половине толщины пластины с интервалом 100 секунд.
 6. По данным полученной таблицы, с помощью мастера диаграмм MS Excel постройте 6 эпюр для различных интервалов времени на ОДНОЙ диаграмме. Тип графика – точечный.
- Вы должны получить диаграмму, похожую на ту, что изображена на рисунке

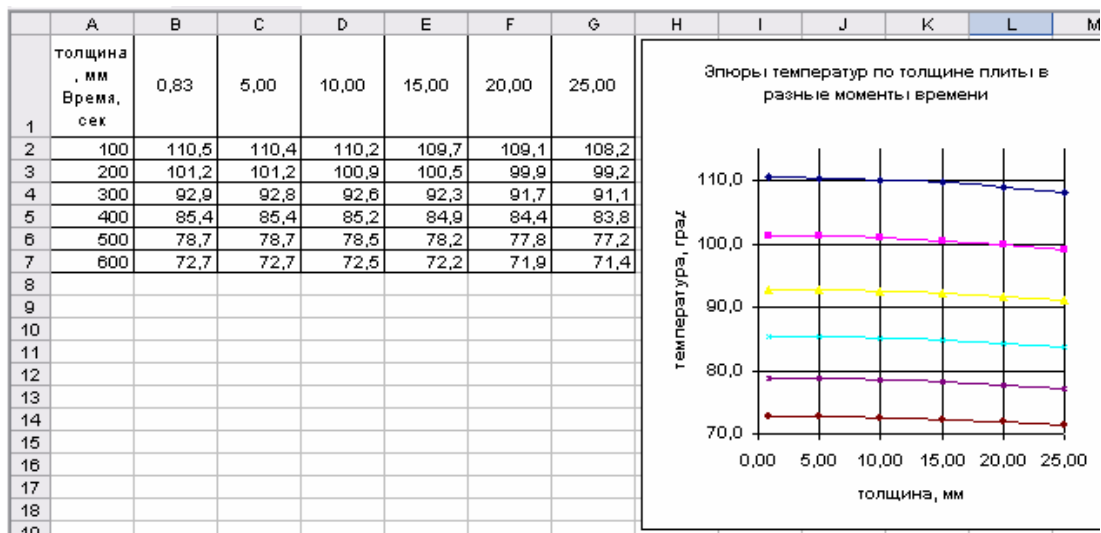


Рисунок. Возможный вариант представления результата моделирования

Вариант 1

Материал пластины – Кварцевое стекло

Толщина – 0,05 м.

Плотность материала – 2200 кг/м³.

Коэффициент теплопроводности – 1,36

Теплоемкость материала – 729

Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20

Начальная температура пластины – 120 град

Температура среды – 20 град

Вариант 2

Материал пластины – Латунь

Толщина – 0,05

Плотность материала – 8600

Коэффициент теплопроводности – 111

Теплоемкость материала – 385

Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20

Начальная температура пластины – 120 град

Температура среды – 20 град

Вариант 3

Материал пластины – Медь

Толщина – 0,05

Плотность материала – 8960

Коэффициент теплопроводности – 384

Теплоемкость материала – 385

Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20

Начальная температура пластины – 120 град

Температура среды – 20 град

Вариант 4

Материал пластины – Пробка

Толщина – 0,05

Плотность материала – 150
Коэффициент теплопроводности – 0,05
Теплоемкость материала – 1380
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 5

Материал пластины – Молибден
Толщина – 0,05
Плотность материала – 10200
Коэффициент теплопроводности – 150
Теплоемкость материала – 251
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 6

Материал пластины – Никель
Толщина – 0,05
Плотность материала – 8900
Коэффициент теплопроводности – 75,5
Теплоемкость материала – 448
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град

Вариант 7

Материал пластины – Стекло
Толщина – 0,05
Плотность материала – 2500
Коэффициент теплопроводности – 0,97
Теплоемкость материала – 779
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град

Вариант 8

Материал пластины – Алюминий
Толщина – 0,05
Плотность материала – 2700
Коэффициент теплопроводности – 209
Теплоемкость материала – 896
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 9

Материал пластины – Цинк
Толщина – 0,05
Плотность материала – 7133
Коэффициент теплопроводности – 110

Теплоемкость материала – 389
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 10

Материал пластины – Бетон
Толщина – 0,05
Плотность материала – 2200
Коэффициент теплопроводности – 1,5
Теплоемкость материала – 920
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 11

Материал пластины – Кварцевое стекло
Толщина – 0,05 м.
Плотность материала – 2200 кг/м³.
Коэффициент теплопроводности – 1,36
Теплоемкость материала – 729
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 12

Материал пластины – Латунь
Толщина – 0,05
Плотность материала – 8600
Коэффициент теплопроводности – 111
Теплоемкость материала – 385
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 13

Материал пластины – Медь
Толщина – 0,05
Плотность материала – 8960
Коэффициент теплопроводности – 384
Теплоемкость материала – 385
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 14

Материал пластины – Пробка
Толщина – 0,05
Плотность материала – 150
Коэффициент теплопроводности – 0,05

Теплоемкость материала – 1380
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 15

Материал пластины – Молибден
Толщина – 0,05
Плотность материала – 10200
Коэффициент теплопроводности – 150
Теплоемкость материала – 251
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 16

Материал пластины – Никель
Толщина – 0,05
Плотность материала – 8900
Коэффициент теплопроводности – 75,5
Теплоемкость материала – 448
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град

Вариант 17

Материал пластины – Стекло
Толщина – 0,05
Плотность материала – 2500
Коэффициент теплопроводности – 0,97
Теплоемкость материала – 779
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град

Вариант 18

Материал пластины – Алюминий
Толщина – 0,05
Плотность материала – 2700
Коэффициент теплопроводности – 209
Теплоемкость материала – 896
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20
Начальная температура пластины – 120 град
Температура среды – 20 град

Вариант 19

Материал пластины – Цинк
Толщина – 0,05
Плотность материала – 7133
Коэффициент теплопроводности – 110
Теплоемкость материала – 389
Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20

Начальная температура пластины – 120 град

Температура среды – 20 град

Вариант 20

Материал пластины – Бетон

Толщина – 0,05

Плотность материала – 2200

Коэффициент теплопроводности – 1,5

Теплоемкость материала – 920

Коэффициент теплообмена между пластиной и воздухом – 20

Начальная температура пластины – 120 град

Температура среды – 20 град

Критерии оценки:

Критерий максимальной оценки на 40 балла:

Выполнены все требования задания к работе. Выбрана соответствующая задаче математическая модель. Правильно сформулированы краевые (начальные, граничные) условия модели процесса. Грамотно выполнен подбор метода решения. Без ошибок разработан алгоритм решения задачи. Текст разработанной программы в полной мере соответствует разработанному алгоритму. Выполнена верификация модели и тестирование программы. С помощью модели произведен вычислительный эксперимент. Полученные результаты представлены в наглядной форме. Сделаны правильные выводы по результатам моделирования.

Критерий оценки на 32 балла:

Выполнены все требования задания к работе. Выбрана соответствующая задаче математическая модель. Правильно сформулированы краевые (начальные, граничные) условия модели процесса. Выполнен подбор не самого эффективного метода решения. В алгоритме решения задачи имеются несущественные ошибки. Текст разработанной программы несколько не соответствует разработанному алгоритму. Не совсем корректно выполнена верификация модели и тестирование программы. С помощью модели произведен вычислительный эксперимент. Полученные результаты представлены в наглядной форме, но не совсем удобны для последующего анализа. В большей части сделаны правильные выводы по результатам моделирования.

Критерий минимальной оценки на 24 балла:

Выполнены не все требования задания к работе. Выбрана не вполне соответствующую задаче математическая модель. В формулировке краевых (начальных, граничных) условий модели процесса имеются ошибки. Некорректно выполнен подбор метода решения. В алгоритме решения задачи имеются недочеты. Текст разработанной программы в некоторой степени не соответствует разработанному алгоритму. Не выполнена верификация модели или тестирование программы. С помощью модели произведен вычислительный эксперимент. Полученные результаты представлены в графической форме, однако их наглядность невысока. Сделаны выводы по результатам моделирования, но в их формулировке имеются ошибки.

Критерий оценки «неудовлетворительно»:

Если хотя бы один из перечисленных критериев для минимальной оценки не соблюдается, выставляется оценка «неудовлетворительно», работа возвращается на доработку.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Нижекамский химико-технологический институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»

Факультет Механический

Кафедра Машин и аппаратов химических производств

Направление подготовки 15.03.02 «Технологические машины и оборудование»

(код и наименование)

Профиль/программа: «Оборудование нефтегазопереработки»

(наименование)

Комплект заданий для лабораторных работ
по дисциплине (модулю) «Основы моделирования процессов и аппаратов
нефтегазопереработки»
(наименование дисциплины)

Лабораторная работа 1

**Разработка компьютерной модели решения задачи стационарных
процессов асимптотическими методами**

Цель работы: изучение асимптотических методов реализации компьютерных моделей стационарных процессов на примере плоского изгиба плиты, оценка различных параметров на точность решения.

Техническое и программное обеспечение работы: персональный компьютер, среда программирования Visual BASIC for Application Excel.

Математическая модель процесса

Математической моделью, описывающей этот процесс, является дифференциальное уравнение четвертого порядка – уравнение Софи-Жермен:

$$D\left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^4}\right) = q \quad (4.1)$$

Или в операторной форме:

$$D\nabla^4 w - q = 0 \quad (4.2)$$

где w – прогиб, D – цилиндрическая жесткость пластины.

$$D = \frac{E \cdot h^3}{12 \cdot (1 - \mu^2)} \quad (4.3)$$

Здесь E – модуль упругости материала пластины; h – толщина плиты; μ – коэффициент поперечной деформации (Пуассона) материала; для стали $\mu = 0,3$.

Выбор метода и разработка алгоритма решения

Решить задачу аналитически не получится. Решение задачи численным методом тоже проблематично. Наиболее подходящим здесь является асимптотический метод, который

заключается в том, что задача решается путем разложения исходной формулы в бесконечный ряд. Для получения практического результата следует взять ограниченное число членов ряда.

Выбираемое число членов ряда определяется требованием точности результата. При увеличении числа членов, решение асимптотически приближается к точному. Поэтому такие способы решения называют асимптотическими.

Известно решение уравнения 4.1 в форме разложения в двойной тригонометрический ряд Фурье, предложенное Навье:

$$w = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} K \cdot \sin \frac{px_i}{a} \cdot \sin \frac{py_j}{b} \quad (4.4)$$

$$\text{где} \quad K = \frac{16q}{Dp^{6ij} \left(\frac{i^2}{a^2} + \frac{j^2}{b^2} \right)} \quad (4.5)$$

a и b – соответственно, длина и ширина пластины.

Граничные условия (опоры по периметру пластины):

$$w|_{x=0} = 0 \quad w|_{x=b} = 0 \quad w|_{y=0} = 0 \quad w|_{y=a} = 0 \quad (4.6)$$

Для практического применения формулу 4.4 записывают так:

$$w = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n K \cdot \sin \frac{px_i}{a} \cdot \sin \frac{py_j}{b} \quad (4.7)$$

m и n задают такими, чтобы решение задачи было бы получено с требуемой точностью.

Чтобы построить эпюры прогибов, нужно произвести многократно вычисления во многих точках плиты. Для этого удобно использовать координатную сетку, которая накладывается на плиту.

Задание

Для каждой точки, находящейся в узле сетки, нужно выполнить расчет с использованием описанного выше алгоритма. Т.к. точек достаточно много, правильно будет задать цикл по обеим координатам – x и y . Таким образом, 2 предыдущих цикла, реализующих суммирование по формуле 4.7, должны быть размещены в циклах изменения координат. Пусть шаг по координатам будет всегда равен 1 м. При желании этот шаг можно изменить. Тогда весь алгоритм расчетов можно изобразить блок-схемой, показанной на рис. 4.4.

Проведите тестирование программы используя значения исходных данных. При отсутствии ошибок в программе результаты расчетов будут выводиться на рабочий лист табличного процессора в виде матрицы.

По результатам расчетов постройте диаграмму типа «поверхность».

Лабораторная работа 2

Разработка компьютерной модели нестационарного процесса.

Решение задачи разложением в ряд

Цель работы. Исследуя процесс на его компьютерной модели, рассчитать нестационарные поля температуры внутри пластины в различные моменты времени на основе математической модели.

Математическая модель процесса

уравнение нестационарной теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (5.2)$$

где a – м²/с – коэффициент температуропроводности материала стенки, характеризующий материал с точки зрения скорости изменения в нем нестационарного температурного поля.

$$a = \frac{l}{cr} \quad (5.3)$$

Начальным условием здесь служит известное (в данном случае - постоянное) распределение температуры в стенке в начальный момент времени ее охлаждения:

$$T|_{t=0} = T_0 \quad (5.4)$$

Граничные условия:

$$-l \frac{\partial T}{\partial x}|_{x=\pm R} = a(T|_{x=\pm R} - T_f) \quad (5.5)$$

Второе граничное условие - это симметричность искомого температурного профиля:

$$\frac{\partial T}{\partial x}|_{x=0} = 0 \quad (5.6)$$

Выбор метода решения

Эти соотношения математической модели нестационарного процесса охлаждения пластины можно представить в виде тригонометрического ряда Фурье, который является исходным для компьютерного моделирования процесса:

$$q(t, x) = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin m_k}{m_k + \sin m_k \cos m_k} \cos\left(m_k \frac{x}{R}\right) \exp\left(-m_k^2 \frac{at}{R^2}\right) \quad (5.10)$$

где μ_k – константы интегрирования. Т.к. число членов ряда бесконечно, то констант также бесконечное количество. В практических решениях число членов ряда ограничивается определенным количеством, исходя из требуемой точности решения.

Константы интегрирования можно вычислить графически (рис. 5.2):

Разработка компьютерной модели

Решение задачи выполняется с помощью компьютерной модели на основе приведенного выше решения дифференциального уравнения 5.10 с начальным и граничными условиями 5.9.

Решение заключается в большом количестве итераций, в ходе выполнения которых:

§ с определенным шагом меняется время;

§ для каждого фиксированного момента времени рассчитывается профиль (эпюра) температур по ширине пластины с определенным шагом по координате, начиная с центра пластины.

Расчет каждого значения безразмерной температуры в рассматриваемый текущий момент времени в текущей точке по координате включает 2 этапа:

§ расчет текущего значения константы интегрирования;

§ вычисление очередного члена тригонометрического ряда.

Сложив все вычисленные члены ряда, получаем безразмерную температуру. По рассчитанной безразмерной температуре, вычисляют температуру в данной точке.

Вычисления начинают с точки, расположенной в центре пластины. Далее последовательно расчет повторяют для следующей и следующей точки, пока не будет достигнут правый край пластины. Потом, возвращаются в центр пластины, время увеличивается на величину шага, расчет по точкам координаты повторяется до правого края пластины, и снова расчет повторяется для нового значения времени. Время изменяют до тех пор, пока пластина не остынет до температуры окружающей среды или не будет достигнут

Задание. Исходные данные.

Материал пластины – сталь.

Коэффициент теплопроводности стали – 47,

теплоемкость – 465, плотность – 7800.

Толщина пластины – 50 мм.

Коэффициент теплообмена – 100.

Температура среды – 20 градусов.

Температура начальная пластины – 120 градусов.

С помощью разработанной компьютерной модели рассчитать поля температур в пластине, толщиной 50 мм. По расчетным данным построить эпюры температур по толщине пластины в различные промежутки времени. Построить график, показывающий динамику снижения температуры в центре и на поверхности пластины.

Лабораторная работа 3

Разработка компьютерной модели нестационарного процесса.

Решение задачи численным способом

Цель работы. Путем исследования процесса на его компьютерной модели, рассчитать нестационарные поля температуры внутри пластины в различные моменты времени на основе математической модели.

Математическая модель

Требуется решить задачу, условие которой изложено в лабораторной работе № 3. Компьютерная модель исследования нестационарного процесса будет основана на применении численных методов решения задачи.

Математическая модель описывается уравнением теплопроводности с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = a \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \quad (6.1)$$

$$q|_{t=0} = I; \quad -l \frac{\partial q}{\partial x}|_{x=R} = a q|_{x=R}; \quad \frac{\partial q}{\partial x}|_{x=0} = 0 \quad (6.2)$$

Может быть реализована в виде компьютерной программы, если использовать какой либо метод разложения уравнения в ряд, как это было сделано в лабораторной работе № 3, или один из подходящих численных методов.

Выбор метода и разработка алгоритма решения.

Наибольшее распространение получили маршевые методы. Свое название эта группа численных методов получила от способа решения – решение представляет собой последовательное продвижение по пространственной координате и по времени.

Для реализации компьютерной модели воспользуемся методом, предложенным Де Суза. Он использовал конечно-разностную аппроксимацию дифференциального уравнения теплопроводности. Производная по времени заменялась левой разностью, а вторая производная по координате – центральной разностью.

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{q_i - q_{i-1}}{D t} \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = \frac{q_{j-1} - 2q_j + q_{j+1}}{D x^2} \quad (6.4)$$

Разработка компьютерной модели

Задание. Работа с моделью

Используя эту программу, выполнить моделирование охлаждения пластины из стали, толщиной 50 мм, при заданных условиях. Условия задать по данным лабораторной работы №4. Результаты представить графически в виде эпюр температуры по толщине пластины, изображенных с временными промежутками 100 секунд. Сравнить результаты расчетов с результатами, полученными в лабораторной работе №2.

Лабораторная работа 4

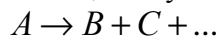
Подбор константы скорости химической реакции (решение обратной задачи при моделировании)

Цель работы: Освоить технологию подбора численных значений константы скорости химической реакции методом компьютерного моделирования.

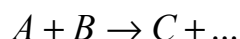
Описание

Для математического моделирование любого химического процесса и реактора необходимо знать численное значение константы скорости реакции. Все виды реакций можно распределить по трем классам:

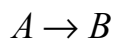
1) реакции разложения, когда из одного моля вещества образуется несколько молей других веществ с молекулярной массой меньшей, чем у сырья:



2) реакция синтеза, когда из двух разных компонентов сырья образуется один или более новых компонентов:



3) реакция изомеризации:



Для расчета констант скоростей реакций используются данные исследования кинетики химической реакции, то есть опытные значения изменяющихся во времени концентраций компонентов в реакционной среде. Эта данные позволяют установить предполагаемый механизм реакции, составить уравнения кинетики реакции в форме системы дифференциальных уравнений, и в ходе решения этой системы уравнений с различными подставляемыми значениями констант скоростей реакции подбирают такие значения констант скоростей реакции K , при которых расчетные значения кинетических кривых наиболее хорошо совмещаются с опытными в сходственных (реперных) точках.

Исходные данные для моделирования

Начальная концентрация в сырье компонента А: $C_{A0} = 500$ г/кг. Время реакции составляет 40 сек.

Концентрация компонентов А, В и С на выходе из аппарата должны быть равны, соответственно, 100, 300 и 100 г/кг. Начальные концентрации компонентов В и С, естественно, равны нулю. Диаметр аппарата $D = 1$ м, длина аппарата $L = 2,4$ м. Общее количество подачи сырья на вход аппарата равно 3600 кг/час.

Математическая модель и алгоритм решения

Для описания работы аппарата лучше всего подходит модель идеального вытеснения. Скорость потока v внутри аппарата постоянна по сечению и его длине. В соответствии с материальным балансом, количество входящего в аппарат сырья равно количеству выходящей реакционной смеси, которая состоит из целевого продукта В, непрореагировавшего компонента А, побочного продукта С, а также инертного содержимого, поступившего вместе с сырьем.

Математическая модель химических процессов, протекающих в аппарате, описывается дифференциальными уравнениями:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A \quad (7.1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B^2 - k_3 \cdot C_C^2 \quad (7.2)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 \cdot C_B^2 - k_3 \cdot C_C^2 \quad (7.3)$$

Для решения уравнений математической модели следует производные концентраций компонентов разложить в левую разность. Далее выразить концентрацию в произвольный момент времени i через концентрацию в предыдущий момент времени $i-1$.

Если константы скорости химических реакций известны, задача решается в прямой постановке, начиная с момента времени $i = 0$. Шаг по времени dt следует принять небольшим, не более 1 сек. Задачу в прямой постановке легко решить без разработки программы в среде VBA, разработав простую табличную модель MS Excel. По результатам расчетов можно построить кинетические кривые.

Обратная задача решается путем подбора значений констант скоростей в ячейках B4, C4 и D4. Значения нужно выбрать такими, чтобы концентрация компонентов на выходе, т.е. в последней строке (B45, C45 и D45) табличной модели, была требуемой. Подбирать наугад 3 константы можно очень долго. Поэтому, здесь лучше разработать небольшую программу в среде VBA MS Excel, которая автоматизирует этот процесс.

Подбор констант можно выполнить, например, методом **половинного деления**.

Итерации продолжаются до тех пор, пока разница между полученным C и необходимым $C = 100$ по абсолютному значению не станет меньше 0,001 (или другой).

Задание 1.

Дополните программу так, чтобы в ячейке A1 отображалось бы не число 0, а число выполненных итераций.

Задание 2.

Дополните табличную модель и программу так, чтобы она рассчитывала еще константы k_2 и k_3 .

Критерии оценки

Критерий максимальной оценки 10 баллов:

Выбрана наиболее подходящая математическая модель. Предложен наиболее оптимальный алгоритм ее решения. Разработана и реализована схема решения. Разработана компьютерная реализация построенного решения. Проведена отладка и тестирование. Проведены исследования с использованием модели. Получены результаты. Расчеты выполнены без ошибок с минимальной погрешностью. Сделаны правильные выводы.

Критерий минимальной оценки 4 баллов:

Выбрана не самая подходящая математическая модель. Предложен не совсем оптимальный алгоритм ее решения. Разработана и реализована схема решения с помощью преподавателя. Разработана компьютерная реализация построенного решения. Не проведена отладка и тестирование. Проведен не весь комплекс исследований с использованием модели. Получены результаты. Расчеты выполнены без ошибок с некоторой погрешностью. Сделаны, в целом, правильные выводы.

Критерий неудовлетворительной оценки.

Если хотя бы одно из требований критерия минимальной оценки не удовлетворяется, работа не засчитывается и требуется исправление ошибок.