

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 29.09.2023 18:08:48
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В. Пекаревский
« 21 » июня 2022 г.

Рабочая программа дисциплины
Компьютерное моделирование в каталитическом эксперименте

Направление подготовки

18.04.01 Химическая технология

Направленность программы магистратуры

Катализаторы и каталитические процессы

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **общей химической технологии и катализа**

Санкт-Петербург

2022

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент		доцент Черемисина О.А.

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование в каталитическом эксперименте» обсуждена на заседании кафедры общей химической технологии и катализа

протокол от «15» 06 2022 № 7

Заведующий кафедрой

А.Ю. Постнов

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов
протокол от «16» 06 2022 № 9

Председатель

С.Г. Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химическая технология»		М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З. Трухалевич
Начальник учебно-методического управления		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины	05
4. Содержание дисциплины	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа	06
4.3.1. Семинары, практические занятия	06
4.3.2. Лабораторные занятия	07
4.4. Самостоятельная работа	07
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	07
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	07
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	08
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	08
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	09
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	09
10.1. Информационные технологии	09
10.2. Программное обеспечение	09
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	09
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	10
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	11
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-5 Способен разрабатывать и применять на практике каталитические системы для решения прикладных задач	ПК-5.2 Каталитическое сжигание топлива	Знать: принципы математического описания каталитического эксперимента; Уметь: адекватно описывать физико-химические явления; Владеть: навыками проецирования результатов моделирования на перспективы функционирования катализатора.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к факультативным дисциплинам (ФТД.01) и изучается на 1 курсе в 1 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин основной образовательной программы бакалавриата, а также дисциплин «Теоретические основы катализа», «Высокотехнологичные методы исследований свойств носителей и катализаторов», «Научные основы приготовления катализаторов», «Кинетика гетерогенно-каталитических процессов». Полученные в процессе изучения дисциплины «Компьютерное моделирование в каталитическом эксперименте», знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин: «Технологии носителей и катализаторов», «Промышленный катализ в нефтепереработке и нефтехимии», «Безопасность промышленных каталитических процессов», «Каталитические процессы защиты окружающей среды», «Каталитические процессы специального назначения», при прохождении всех видов практик, в научно-исследовательской работе магистранта, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/академических часов)	1/36
Контактная работа с преподавателем:	27
занятия лекционного типа	9
занятия семинарского типа, в т.ч.:	18
семинары, практические занятия (в т.ч. на практическую подготовку)	18 (4)
лабораторные работы (в т.ч. на практическую подготовку)	–
курсовое проектирование (КР или КП)	–
КСР	–
другие виды контактной работы	–
Самостоятельная работа	9
Форма текущего контроля (К/р, реферат, РГР, эссе)	–
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Зачёт

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Математические методы в моделировании кинетики каталитических реакций	5	–	–	–	ПК-5	ПК-5.2
2.	Пакеты современных прикладных программ	4	18	–	9	ПК-5	ПК-5.2

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Математические методы в моделировании кинетики каталитических реакций.</u> Моделирование процессов в реакторах, работающих в режимах полного смешения и идеального вытеснения.	5	ЛВ
2	<u>Пакеты современных прикладных программ.</u> Использование программного пакета MathCAD компании Mathsoft, Использование программного пакета HYSYS.Process фирмы ASPENTECH для решения аналитических задач.	4	ЛВ

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
2	Использование программного пакета MathCAD компании Mathsoft для моделирования каталитических процессов в реакторах, работающих в режимах полного смешения и идеального вытеснения	9	2	Групповая дискуссия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
2	Использование программного пакета HYSYS.Process фирмы ASPENTECH для расчетов технологических схем нефтепереработки и нефтехимии	9	2	Групповая дискуссия

4.3.2. Лабораторные занятия.

Не предусмотрены.

4.4. Самостоятельная работа.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Химико-технологические схемы. Материальный баланс ХТС	5	Устный или письменный опрос
2	Химико-технологические схемы основных промышленных производств	4	Устный или письменный опрос

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

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

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета (1 семестр).

При сдаче зачета обучающийся получает два вопроса из перечня вопросов (время подготовки к устному ответу – 45 минут).

Пример варианта вопросов на зачете:

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Математические модели зерна катализатора. 2. Моделирование процесса в каталитическом реакторе. |
|--|

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «зачет».

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Общая химическая технология: учебник для химико-технологических специальностей вузов: В 2-х частях. Часть 1. Теоретические основы химической технологии / Под редакцией И.П. Мухленова. – 5-е изд., стер. – Москва: Альянс, 2009. – 256 с. – ISBN 978-5-903034-78-9

2. Общая химическая технология: учебник для химико-технологических специальностей вузов: В 2-х частях. Часть 2. Важнейшие химические производства / Под редакцией И.П. Мухленова. – 5-е изд., стер. – Москва: Альянс, 2009. – 263 с. – ISBN 978-5-903034-79-6

3. Материальные и тепловые расчеты в химической технологии: учебное пособие / А.Ю. Постнов, О.А. Черемисина, Ю.В. Александрова, С.А. Лаврищева; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра общей химической технологии и катализа. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2020. – 30 с.

4. Компьютерное моделирование химико-технологических систем в среде Aspen Hysys 8.6: учебное пособие / В.И. Федоров, Н.С. Гурко, У.Ю. Осипенко [и др.]; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра ресурсосберегающих технологий. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2019. – 77 с.

5. Пахомов, Н.А. Курс лекций по кинетике процессов технологии неорганических веществ: учебное пособие / Н.А. Пахомов, А.С. Григорьев, И.И. Торлопов; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет). Кафедра общей химической технологии и катализа. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2020. – 93 с.

б) электронные учебные издания:

6. Общая химическая технология. Основные концепции проектирования химико-технологических систем: учебник для вузов по химико-технологическим направлениям подготовки и специальностям / И.М. Кузнецова [и др.]; под редакцией Х.Э. Харлампиди. – 2-е изд., перераб. – Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2021. – 384 с. – ISBN 978-5-8114-1479-6 // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 04.05.2022). – Режим доступа: по подписке.

7. Общая химическая технология. Методология проектирования химико-технологических процессов: учебник для вузов по химико-технологическим направлениям подготовки и специальностям / И.М. Кузнецова [и др.]; под редакцией Х.Э. Харлампиди. – 2-е изд., перераб. – Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2021. – 448 с. – ISBN 978-5-8114-1478-9 // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 04.05.2022). – Режим доступа: по подписке.

8. Материальные и тепловые расчеты в химической технологии: учебное пособие / А.Ю. Постнов, О.А. Черемисина, Ю.В. Александрова, С.А. Лаврищева; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра общей химической технологии и катализа. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2020. – 30 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 04.05.2022). – Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

9. Компьютерное моделирование химико-технологических систем в среде Aspen Hysys 8.6: учебное пособие / В.И. Федоров, Н.С. Гурко, У.Ю. Осипенко [и др.]; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра ресурсосберегающих технологий. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2019. – 77 с. //

СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 04.05.2022). – Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

10. Пахомов, Н.А. Курс лекций по кинетике процессов технологии неорганических веществ: учебное пособие / Н.А. Пахомов, А.С. Григорьев, И.И. Торлопов; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет). Кафедра общей химической технологии и катализа. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2020. – 93 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 04.05.2022). – Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

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

Электронно-библиотечные системы:

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

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

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Компьютерное моделирование в каталитическом эксперименте» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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

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

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

СТП СПбГТИ 016–2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов являются:

– плановость в организации учебной работы;

– серьезное отношение к изучению материала;

– постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

– чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

– взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты.

10.2. Программное обеспечение.

Пакеты прикладных программ стандартного набора (LibreOffice, MathCAD).

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

– справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»;

– база данных Reaxys <https://www.reaxys.com>

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

Кафедра Общей химической технологии и катализа оснащена необходимым научно-исследовательским оборудованием, измерительными и вычислительными комплексами и другим материально-техническим обеспечением, необходимым для полноценного лабораторных работ, существует возможность использования оборудования Центров коллективного пользования СПбГТИ(ТУ) и Лаборатории каталитических технологий. Компьютеры кафедры и аудиторий № 205, 209, 210 соединены в локальную вычислительную сеть с выходом в Интернет через сервер, подключенный к сети института.

Реализация программы учебной дисциплины предполагает наличие учебной лаборатории, оснащенной следующим лабораторным оборудованием:

- спектрофотометр СФ-26;
- торсионные весы PRLT ТЗ;
- прибор измерения механической прочности МП-2С;
- хроматографы ЦВЕТ-100, ЦВЕТ-500, ЦВЕТ-800 и 3700;
- вакуумный насос VP18R;
- вискозиметр Reotest-2;
- рН-метры рН-150МИ;
- редукторы газовые;
- анализатор влажности порошковых материалов МОС-120Н;
- влагомеры Байкал-3 и Волна-2;
- рентгеновский дифрактометр ДРОН-3М;
- дериватограф Q-1500 D;
- дифференциальный термогравиметрический анализатор Shimadzu DTG-60H;
- газовый хроматограф GC 2010 Plus;
- энергодисперсионные рентгенофлуоресцентные спектрометры EDX-7000 и EDX-8000;
- ИК-Фурье спектрометр IRTracer-100;
- рентгеновский дифрактометр XRD-6100;
- Autosorb 6iSA;
- лазерный дифракционный анализатор размеров частиц SALD-2300;
- газовый хроматомасс-спектрометр GCMS-QP2010 Ultra;

Оборудование Инжинирингового центра СПбГТИ(ТУ):

- сканирующий зондовый атомно-силовой микроскоп Shimadzu SPM-9700;
- лазерный дифракционный анализатор размеров частиц Shimadzu SALD-7500;
- термомеханический анализатор изменения линейных размеров образца Shimadzu TMA-60;
- трибометр Anton Paar ТНТ;
- реометр Anton PaarPhysica MCR 302;
- ИК-Фурье спектрометр Shimadzu IRTracer-100;
- дифференциальный сканирующий калориметр Shimadzu DSC-60 Plus;
- дериватограф Shimadzu DTG-60;
- универсальная испытательная машина Shimadzu AG-XD plus, 20kN-50kN;
- спектрофотометр Shimadzu UV-1800;
- многофункциональная лабораторная машина для перемешивания MagicLab-XP;
- спектрометр ЯМР Bruker AVANCE III HD 400 NanoBay;
- растровый электронный микроскоп TescanVega 3 SBH;
- рентгеновский дифрактометр Rigaku SmartLab 3;
- прибор для проведения измерений температуро- и теплопроводности Netzsch LFA 457 MicroFlash;
- прибор синхронного термического анализа Netzsch STA 449 F3 Jupiter.

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

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

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
«Компьютерное моделирование в каталитическом эксперименте»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-5	Способен разрабатывать и применять на практике каталитические системы для решения прикладных задач	промежуточный

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачтено» (пороговый)
ПК-5.2 Каталитическое сжигание топлива	Знает принципы математического описания каталитического эксперимента	Вопросы к зачету № 1-12	Рассказывает о принципах математического описания каталитического эксперимента
	Умеет составлять программу проведения исследований свойств носителей и катализаторов с использованием современного оборудования	Вопросы к зачету № 1-12	С консультацией преподавателя составляет программу проведения исследований свойств носителей и катализаторов с использованием современного оборудования
	Владеет системным подходом при оценке результатов исследований свойств носителей и катализаторов	Вопросы к зачету № 1-12	Может на основе системного подхода оценить результаты исследований свойств носителей и катализаторов

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ).

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, шкала оценивания – «зачтено» (если достигнут «пороговый» уровень освоения всех элементов компетенции), «не зачтено».

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

3.1 Типовые контрольные вопросы к зачету

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-5:

1. Моделирование процесса в зерне катализатора.
2. Математические модели зерна катализатора.
3. Моделирование процесса в каталитическом реакторе.
4. Анализ процесса получения синтез-газа из природного газа.
5. Описание технологий промышленных процессов производства синтез-газа
6. Конструкции каталитических реакторов получения синтез-газа.
7. Кинетические модели и катализаторы реакции получения синтез-газа.
8. Кинетические модели и катализаторы реакции получения синтез-газа.
9. Анализ процесса получения метанола из синтез-газа.
10. Описание технологий промышленных процессов производства метанола.
11. Конструкции каталитических реакторов получения метанола.
12. Кинетические модели и катализаторы реакции получения метанола

При сдаче зачета студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше.
Время подготовки студента к устному ответу на вопросы – до 45 мин.

4. Темы курсовых работ.

Не предусмотрены.

5. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП СПбГТИ 016–2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.