

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.2.2 Диффузионная химическая кинетика

По направлению подготовки: 18.06.01 «Химическая технология»

По направленности: «Процессы и аппараты химических технологий»

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Кафедра-разработчик ОПОП: ПАХТ

Кафедра-разработчик рабочей программы: ПАХТ

1. Цель освоения дисциплины:

Целями освоения дисциплины Диффузионно-химическая кинетика являются

- а) формирование знаний о процессах диффузионной кинетики, сопровождаемых химическими реакциями и понимания физической сути данных процессов,
- б) формирование у аспирантов знаний по термодинамике, химической кинетике и диффузионно-контролируемым химическим процессам,
- в) ознакомление аспирантов с основами нелинейной динамики систем с конечным числом степеней свободы, понятиями динамической системы, устойчивости и бифуркаций,
- г) формирование у аспирантов навыков и приемов применения фундаментального знания для формирования математических моделей и получения инженерных решений для широкого круга процессов химической технологий

2. Содержание дисциплины «Диффузионная химическая кинетика»:

Цель и содержание дисциплины. Законы сохранения массы, энергии и импульса; Второй закон термодинамики. Термодинамическое равновесие многокомпонентных многофазных систем. Химический потенциал. Фазовое равновесие пар-жидкость многокомпонентных систем. Расчет условий фазового равновесия пар-жидкость. Химическое равновесие. Законы переноса. Молекулярный, конвективный и турбулентный механизмы переноса субстанций. Формальная кинетика. Скорость химической реакции для гомогенной и гетерогенной реакции. Константа скорости химической реакции, уравнение Аррениуса. Основные положения кинетики диффузионно-контролируемых реакций. Кинетическое уравнение для диффузионно-контролируемых реакций в жидкости. Кинетическое описание простых систем.

Теория скоростей химических реакций. Потенциальная энергия реагирующей системы. Переходное состояние. Критическая энергия. Координата реакции. Особенности переходного состояния. Теория столкновений. Теория активированного комплекса. Статистическая формулировка теории. Термодинамическая формулировка теории. Применение теории активированного комплекса. Бимолекулярные реакции. Тримолекулярные реакции. Мономолекулярные реакции. Особенности кинетики реакций в конденсированных средах: влияние диффузии на реакцию. Клеточный эффект. Методы построения математических моделей химико-технологических процессов.. Моделирование. Математическая модель. Классификация математических моделей.

Основные методы построения математических моделей. Эмпирический метод построения математического описания. Формулирование цели, выбор факторов и переменных состояния объекта исследования, виды уравнений регрессии. Планирование и проведение экспериментов. Пассивный эксперимент. Активный эксперимент. Определение реакции объекта на стандартные возмущения. Статистическая обработка результатов и поиск наилучшей формы аппроксимации полученных данных. Теоретический метод построения математического описания. Исчерпывающее описание процессов химической технологии и типовые модели структуры потоков. Импульсный ввод индикатора для определения параметров типовых и комбинированных моделей структуры потоков. Моделирование теплообменных процессов. Моделирование массообменных процессов. Математические модели химических реакторов. Влияние структуры потоков на протекание химических реакций. Влияние переноса массы на протекание химической реакции и селективность. Диффузия к движущейся частице при протекании на ее поверхности химической реакции с произвольной кинетикой. Конвективный массоперенос к капле или твердой частице при протекании в жидкости объемной химической реакции с произвольной кинетикой.

Основные понятия нелинейной динамики. Динамическая система и ее математическая модель. Кинематическая интерпретация системы дифференциальных уравнений. Классификацию динамических систем. Колебательные системы и их свойства. Понятие устойчивости, бифуркации. Линейный анализ устойчивости. Бифуркация динамических систем. Понятия детерминированности, хаоса. Неустойчивость и нелинейное ограничение. Вероятностные свойства детерминированных систем.

3. В результате изучения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

- а) основные положения кинетики диффузионно-контролируемых реакций; кинетическое уравнение для диффузионно-контролируемые реакции в жидкости;
- б) особенности кинетики реакций в конденсированных средах: влияние диффузии на реакцию.

2) Уметь:

- а) применять знания о основах диффузионно-контролируемых химических процессов при составление математических моделей процессов;
- б) определять основные характеристики диффузионно-контролируемых химических процессов.

3) Владеть:

- а) навыками расчета условий термодинамического и химического равновесия системы;
- б) навыками построения математических моделей диффузионно-контролируемых химических процессов;
- в) навыками моделирования технологических процессов, кинетика которых хотя бы на одной из стадий определяется транспортом реагентов.