

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки**  
**Институт катализа им. Г.К. Борескова**  
**Сибирского отделения Российской академии наук**

УТВЕРЖДАЮ



В.И. Бухтияров директор ИК СО РАН

чл.-корр. РАН

В.И. Бухтияров

2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Инженерная химия каталитических процессов**

Направление подготовки: 18.06.01 – Химическая технология

Направленность подготовки: 05.17.08 - Процессы и аппараты химических технологий

Уровень образования: подготовка кадров высшей квалификации

Квалификация выпускника: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

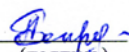
Новосибирск 2015

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по направлению подготовки 18.06.01 – Химическая технология (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденный Приказом Минобрнауки РФ от 30.07.2014 № 883.
2. Паспорт научной специальности 05.17.08 - Процессы и аппараты химических технологий (разработанный экспертами ВАК Минобрнауки России в соответствии с Номенклатурой специальностей работников, утверждённой приказом Минобрнауки России от 25.02.2009 г. № 59).
3. Программа-минимум кандидатского экзамена по специальности 05.17.08 - Процессы и аппараты химических технологий.

Составители рабочей программы

Научный сотрудник, к.х.н.  
(должность, ученое звание, ученая степень)

  
(подпись)

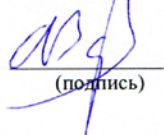
С.А. Покровская  
(Ф.И.О.)

Научный сотрудник, к.т.н.  
(должность, ученое звание, ученая степень)

  
(подпись)

Н.В. Верниковская  
(Ф.И.О.)

Ведущий научный сотрудник, д.т.н.  
(должность, ученое звание, ученая степень)

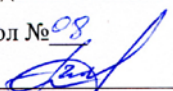
  
(подпись)

А.Н. Загоруйко  
(Ф.И.О.)

Рабочая программа утверждена на заседании Ученого совета ИК СО РАН

«14» 05 2015 г., протокол № 08

Ученый секретарь, к.х.н.

  
(подпись)

А.А. Ведягин  
(Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Зам. директора по научной работе

  
(подпись)

д.х.н Мартьянов О.Н.  
(Ф.И.О.)

## 1. Цели дисциплины

**Целевая установка курса** - овладение аспирантами знаниями по научным основам инженерного катализа, методам масштабного перехода от лабораторных исследований каталитических процессов до их промышленной реализации, а также представлениями о современных промышленных процессах и способах разработки новых каталитических энергоэффективных и ресурсосберегающих технологий.

### Основные задачи дисциплины:

- познакомить с основными особенностями современных каталитических реакторов и методами решения проблем масштабного перехода на основе фундаментальных знаний о химических превращениях и физических процессах тепло- и массопереноса;
- привить творческое отношение к организации и выполнению экспериментальных и теоретических исследований при разработке перспективных каталитических систем;
- научить правильно проводить исследования каталитических процессов и реакторов методами математического моделирования;
- научить правильно проводить расчеты основных химических и физических процессов каталитического реактора, а также определять рабочие характеристики промышленного аппарата с использованием специализированного программного обеспечения;
- познакомить с информационным обеспечением научных исследований и разработок в области каталитических технологий;
- способствовать развитию инжиниринговой составляющей в подготовке аспирантов естественно-научного профиля.

## 2. Место дисциплины в структуре программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 18.06.01 – Химическая технология, направленность (специальность) - 05.17.08 процессы и аппараты химических технологий

Дисциплина относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы. Преподается на первом/втором курсах аспирантуры.

Требования к первоначальному уровню подготовки обучающихся для успешного освоения дисциплины:

- подготовка по общей химии, физической химии, химической термодинамике, химической кинетике;
- знания по основам катализа;
- знания в области математического анализа, гидродинамики газовых и жидкостных потоков, тепло- и массопереноса в газовых потоках и зернистых слоях.

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Универсальные компетенции:

УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач

Общепрофессиональные компетенции:

ОПК-1	способность и готовность к организации и проведению фундаментальных и прикладных научных исследований в области химических технологий
ОПК-2	владение культурой научного исследования в области химических технологий, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий
ОПК-3	способность и готовность к анализу, обобщению и публичному представлению результатов выполненных научных исследований
ОПК-6	готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования

Профессиональные компетенции:

ПК- 1	способность к использованию профильно-специализированных знаний в области физической химии, катализа, тепло- и массопереноса, теории каталитических реакторов для решения научных и практических задач, возникающих при изучении и создании ресурсо- и энергосберегающих процессов и аппаратов в химической и смежных отраслях промышленности
ПК- 2	способность определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения
ПК- 3	владение профильно-специализированными информационными технологиями и пакетами программного обеспечения для решения научных и практических задач
ПК- 4	способность анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

**Знать:**

- экспериментальные методы и теоретические основы исследований кинетики каталитических процессов и процессов переноса с точки зрения химика-технолога;
- методы расчета каталитических процессов и реакторов;
- проблемы и достижения в области инженерного катализа;
- современные тенденции развития каталитических технологий: новые виды сырья (в т.ч. вторичные сырьевые ресурсы и отходы производства), альтернативные безотходные технологии, основные направления развития научных основ инженерного катализа.

**Уметь:**

- сформулировать вопросы для решения проблемы масштабного перехода от молекулярного уровня до промышленной реализации каталитического процесса;
- составить программу работ, позволяющую получить экспериментальные и теоретические данные для определения оптимальных рабочих условий и конструкции реактора с позиций энерго- и ресурсосбережения;
- выполнить намеченные работы и руководить ими;
- предложить исходные данные для разработки нового реактора или модернизации существующего производства.

**Аспиранты должны иметь опыт:**

- использования полученных знаний для анализа современного состояния каталитического производства;
- использования специализированного программного обеспечения для исследования

- химических и физических процессов каталитического реактора, определения оптимальных технологических режимов, создания макетов при разработке современного дизайна аппарата;
- обработки полученной информации и составления отчетных материалов;
  - использования учебной и научной литературы для проведения исследований.

#### 4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 6 зачетных единицы, 216 часов

	Объём часов / зачетных единиц
<b>Всего</b>	<b>216/6</b>
<b>Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)</b>	
в том числе:	
лекции	36
семинары	8
практические занятия*	
<b>Самостоятельная работа аспиранта (всего)</b>	<b>172</b>
<b>Вид контроля по дисциплине:</b> Текущий контроль Зачет зачет (Итоговый контроль)	

\*Практические занятия предусмотрены при выполнении научных исследований.

#### 5. Разделы дисциплины и виды занятий

	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семинар	СРА	Всего
1	Введение. Структурный анализ процессов в каталитических системах	2				2	4
2	Кинетика каталитических реакций с точки зрения химика-технолога	2				2	4
3	Каталитический процесс в зерне катализатора	4				2	6
4	Типы каталитических реакторов	4				2	6
5	Гидродинамика неподвижного зернистого слоя	2				2	4
6	Реакторы с неподвижным слоем	4				2	6
7	Реакторы с движущимися слоями катализатора	4				2	6
8	Каталитические процессы для охраны окружающей среды.	4				2	6
9	Примеры промышленных каталитических процессов	4				2	6
10	Химико-технологические схемы (ХТС)	2				2	4
11	Информационное и программное обеспечение	2				2	4
12	Современные тенденции развития перспективных технологий	2				2	4
13	Поиск информации в базах данных веществ и химических реакций, в патентных и библиографических базах данных					21	21
14	Определение основных характеристик					20	20

	процесса в каталитическом реакторе						
15	Оценка влияния внутренней диффузии на примере процессов окисления метана и получения формальдегида.				2		2
16	Расчет каталитического процесса в режимах идеального вытеснения и идеального смешения при протекании сложной реакции					21	21
17	Определение рабочих режимов в адиабатическом и полочном реакторе					20	20
18	Оптимизация процессов в трубчатом и комбинированном реакторе				2		2
19	Освоение процесса создания алгоритма и макета реактора очистки от нитрозных газов из библиотеки моделей COMSOL					21	21
20	Расчет процесса на блочных катализаторах с использованием пакета программ FLUENT				2		2
21	Определение оптимальных условий реализации процесса в реакторе с псевдоожиженным слоем COMSOL				2		2
22	Расчет реверса-процесса для обезвреживания отходящих газов от сернистых соединений химических и металлургических производств					25	25
23	Расчет химико-технологической схемы для процесса получения азотной кислоты HYSYS					20	20
		36			8	172	216

## 6. Содержание дисциплины:

### *Лекции.*

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1	Введение. Структурный анализ процессов в каталитических системах	Предмет дисциплины. Роль и масштабы использования каталитических процессов в химической и нефтехимической промышленности. Ресурсо- и энергосбережение, экологическая безопасность. Структурная иерархия гетерогенных каталитических систем при решении проблем масштабного перехода.
2	Кинетика каталитических реакций с точки зрения химика-технолога	Взаимосвязь кинетики и термодинамики. Кинетика как атомно-молекулярный структурный уровень процесса. Построение кинетических моделей. Феноменологический подход. Теория стационарных реакций. Нестационарность. Кинетические модели для промышленных процессов.
3	Каталитический процесс в зерне катализатора	Физико-химические основы процессов переноса массы и тепла в капиллярной модели пористого зерна. Внутренняя диффузия в пористых средах, ее влияние при промышленной реализации процесса. Оптимальная структура гранул. Моно- и бидисперсная структуры.
4	Типы каталитических	Конструкции каталитических реакторов в современных

	реакторов	химических производствах, их классификация по состоянию катализатора, конструкции, способу теплоотвода. Факторы, определяющие выбор реактора. Оптимальные температурные режимы и схемы реакторов для простых и сложных реакций.
5	Гидродинамика неподвижного зернистого слоя	Динамика газовых потоков в зернистом слое, гидравлические режимы движения реагентов. Критерии Рейнольдса, Нуссельта, Шервуда, Шмидта, Прандтля. Оптимальные размеры и форма зерен. Процессы переноса вещества и тепла между наружной поверхностью зерен катализатора и реакционным потоком. Внешний массо- и теплообмен.
6	Реакторы с неподвижным слоем	Адиабатический, многослойный, трубчатый и комбинированный реакторы, методы их расчета. Реакторы для процессов с высокоактивными катализаторами в виде сеток. Процессы тепло- и массопереноса в системах. Примеры промышленных процессов. Сравнение нагрузки и производительности реакторов различного типа.
7	Реакторы с движущимися слоями катализатора	Гидродинамика режима псевдооживления, движущегося слоя катализатора и лифт-реактора, основные преимущества и недостатки. Особенности теплоотдачи в движущихся слоях. Связь массообмена между пузырями и плотной фазой с нагрузкой и производительностью систем. Методология расчета реакторов с движущимися слоями.
8	Каталитические процессы для охраны окружающей среды.	Реакторы для обезвреживания отходов и их переработки в ценные химические продукты. Монолитные системы. Очистка выбросов промышленных производств от окислов азота и углерода, сернистых соединений и т. д. Дожигатели для автотранспорта. Фотокатализ.
9	Примеры промышленных каталитических процессов	Производство серы, аммиака, метанола, окиси этилена, акрилонитрила, азотной и серной кислот. Процессы нефтепереработки: каталитический крекинг, риформинг и гидроочистка, нефтехимический синтез.
10.	Химико-технологические схемы (ХТС)	Технологические схемы производства химических продуктов, основы их математического моделирования и оптимизации. Аппаратурное оформление каталитических реакторов в ХТС. Механические и теплообменные процессы, процессы абсорбции, дистилляции, экстракции и ректификации.
11	Информационное и программное обеспечение	Поиск и обработка специализированной информации с использованием современных баз данных и информационно-поисковых систем (SciFinder, Reaxys, Web of Knowledge, Web of Science, Scopus, STN International и др.). Специализированные пакеты программ для расчета каталитических реакторов и ХТС (COMSOL, FLUENT, ANSYS, HYSYS и др.)
12	Современные тенденции развития перспективных технологий	Проблемы и тенденции развития. Новые виды сырья и способы их переработки. Разработка компактных систем. Нанотехнологии в катализе. Сокращение потребления топливно-энергетических ресурсов и использование альтернативных источников энергии. Использование возобновляемых ресурсов.

## Компьютерный курс

Поиск информации в базах данных веществ и химических реакций, в патентных и библиографических базах данных

Информационное обеспечение научных исследований и разработок в области каталитических технологий – базы данных и справочные системы.

Поиск в библиографических базах данных: Chemical Abstracts (CAPlus) на платформе SciFinder; Science Citation Index Expanded (Web of Science), Scopus (SciVerse). Поиск по автору, организации, использование других специализированных индексов (год, тип, язык оригинальной публикации).

Поиск информации в базах данных веществ: Registry (SciFinder), Beilstein и Gmelin (Reaxys), химические каталоги, нормативные перечни. Нахождение свойств веществ. Спектральная информация. Расчетные и экспериментальные свойства.

Поиск информации в базах данных химических реакций: CASReact (Scifinder), Reaxys. Различия в индексировании катализаторов между БД CAplus и CASReact.

Индексирование катализаторов в Chemical Abstracts Service (CAS). Особенности индексирования веществ, используемых в качестве промышленных катализаторов (металлы, соли и оксиды металлов, смешанные оксиды, гетерополикислоты, алюмооксаны, цеолиты, энзимы). Каталитическая информация в патентах.

*Определение основных характеристик процесса в каталитическом реакторе.*

Определение оптимального типа реактора для конкретного процесса исходя из величины адиабатического разогрева процесса и предела входной концентрации реагента, при которой возможно использовать заданный технологический режим в реакторе. Расчет объема катализатора для получения заданной производительности процесса. Выполнение – на основе пакета Mathcad.

*Оценка влияния внутренней диффузии на примере процессов окисления метана и получения формальдегида.*

Поиск оптимального размера зерна катализатора для конкретного процесса при заданной активности и степени использования. Определение области протекания процесса на отдельном зерне катализатора (кинетическая, внутренняя диффузия, внешняя диффузия) по зависимости логарифма константы скорости реакции от обратной температуры. Определение лимитирующей стадии процесса (внутренняя или внешняя диффузия) исходя из величины числа Био. Выполнение – на основе пакета COMSOL.

*Расчет каталитического процесса в режимах идеального вытеснения и идеального смешения при протекании сложной реакции*

Определение условий достижения максимальной селективности по промежуточному продукту и максимального выхода целевого продукта в реакторе идеального вытеснения (смешения) для последовательной реакции при высокой степени превращения. Выполнение – на основе пакета Mathcad и Matlab.

*Определение рабочих режимов в адиабатическом и полочном реакторе*

Моделирование адиабатического реактора. Определение предела входной концентрации реагента для экзотермического процесса. Нахождение числа слоев, необходимых для осуществления обратимой экзотермической реакции в полочном реакторе с адиабатическим режимом в слоях катализатора и охлаждением реагирующего потока между ними. Выполнение – на основе пакета COMSOL.

*Оптимизация процессов в трубчатом и комбинированном реакторе*

Оптимизация режима в трубчатом реакторе для конкретного экзотермического процесса. Определение температуры хладагента. Поиск оптимальных размеров реактора при заданной производительности процесса. Определение оптимальных длин трубчатой и



адиабатической части реактора в комбинированном реакторе, необходимых для полного превращения реагента. Выполнение – на основе пакета COMSOL.

## **7. Самостоятельная работа аспирантов**

Самостоятельная работа аспиранта включает:

- работу с литературой и знакомством с научными статьями в отечественных и зарубежных журналах, электронных изданиях;
- поиск информации в базах данных;
- более широкое освоение программного обеспечения – пакетов HYSYS, COMSOL, FLUENT, ANSYS;
- дополнительной проработки разделов дисциплины, связанных с выполнением научной работы и выполнения заданий;
- написания аннотационных отчетов по темам, связанным с диссертационной работы;
- участия в научных конференциях, проблемных семинарах и конкурсах Института;

Самостоятельная работа проводится в читальном зале библиотеки, в Информационно-аналитическом центре ИК СО РАН, в учебных кабинетах Научно-образовательного центра «Катализ», на рабочем месте с доступом к ресурсам Интернет.

В самостоятельную работу аспирантов включается также подготовка к практическим работам, текущему и промежуточному контролю, сдаче зачета.

### ***Примеры заданий для самостоятельной работы:***

1. *Освоение процесса создания алгоритма и макета реактора очистки от нитрозных газов из библиотеки моделей COMSOL.*

Создать модель реактора для процесса очистки от нитрозных газов в пакете COMSOL.

2. *Расчет процесса на блочных катализаторах с использованием пакета программ FLUENT.*

Рассчитать характеристики процесса получения синтез-газа из природного газа на блоках с прямыми каналами. Найти режимы, минимизирующие влияние массо- и теплообмена на скорость превращения реагентов. Оценить характеристики компактного реактора.

3. *Определение оптимальных условий реализации процесса в реакторе с псевдооживленным слоем катализатора.*

Обосновать выбор реактора с псевдооживленным слоем катализатора для осуществления конкретного экзотермического процесса. Определить оптимальные условия реализации процесса. Для выполнения задания использовать пакет COMSOL.

4. *Расчет Реверс-процесса для обезвреживания отходящих газов от сернистых соединений в химических и металлургических производствах.*

Провести расчет Реверс-процесса для обезвреживания отходящих газов химических и металлургических производств от сернистых соединений с использованием пакета COMSOL.

5. *Расчет химико-технологической схемы для процесса получения азотной кислоты с использованием пакета HYSYS.*

Рассчитать материальный баланс химико-технологической схемы процесса получения азотной кислоты.

## **8. Оценочные средства для контроля успеваемости и аттестации по итогам освоения дисциплины.**

### **8.1. Примеры заданий к текущему контролю**

1. Провести поиск по теме “Способы очистки отходящих газов в производстве азотной кислоты”.

2. Найти патенты по технологиям очистки дымовых газов от серы.
3. Найти компании- лидеры в промышленном производстве акрилонитрила.
4. Провести патентный поиск по теме “Получение синтез-газа из природного газа”
5. Определить оптимальный тип реактора для конкретного процесса, исходя из величины адиабатического разогрева процесса.
6. Рассчитать объем катализатора, необходимый для получения заданной производительности процесса.
7. Найти оптимальный размер зерна катализатора для процесса глубокого окисления метана при заданной активности и степени использования.
8. Определить лимитирующую стадию процесса (внутренняя или внешняя диффузия) исходя из величины числа Био для процесса окисления диоксида серы до  $SO_3$ .
9. Определить предел входной концентрации метанола, позволяющей проводить процесс окисления метанола в формальдегид в адиабатических условиях.
10. Определить количество слоев, необходимых для осуществления реакции окисления  $SO_2$  в  $SO_3$  в многослойном реакторе с адиабатическим режимом в слоях катализатора и охлаждением реагирующего потока между ними при заданном ограничении на величину минимальной степени превращения реагента.
11. Определить оптимальное соотношение между длиной трубчатой и адиабатической части реактора в комбинированном реакторе, необходимое для полного превращения метанола в процессе окисления метанола в формальдегид при ограничении на температуру горячей точки  $430^\circ C$  и с учетом себестоимости единицы длины трубчатой и адиабатической части реактора.
12. Рассчитать материальный баланс химико-технологической схемы с рециклом при заданных ограничениях на долю рецикла и производительности единицы объема катализатора.

## 8.2. Примеры вопросов к промежуточному контролю

1. Какой эффект достигается от последовательного соединения реакторов идеального смешения?
2. Как влияет увеличение входной концентрации реагента на степень превращения в реакторе идеального вытеснения при порядке реакции: а) меньше 1, б) равном 1, в) больше 1?
3. Что такое величина адиабатического разогрева реакции? Почему этот параметр лучше характеризует влияние реакции на температурный режим, чем теплота реакции?
4. Привести зависимости для расчета эффективного коэффициента диффузии в пористом зерне катализатора.
5. Как можно увеличить степень использования пористого зерна катализатора?
6. Может ли быть степень использования пористого зерна катализатора больше единицы?
7. От каких параметров зависит коэффициент массообмена между поверхностью зерна катализатора и потоком?
8. Чем ограничено использование в промышленности адиабатического реактора?
9. Какова оптимальная теоретическая температура для обратимой экзотермической химической реакции?
10. Нарисовать оптимальные температурные профили по длине адиабатического и трубчатого реактора.
11. От каких параметров зависит максимальная температура в адиабатическом и трубчатом реакторе?
12. С чем связаны проблемы контроля и управления процессом в трубчатом реакторе?
13. Способы организации процесса в псевдоожиженном слое катализатора.
14. Какая технология наиболее подходит для очистки отходящих газов от вредных органических примесей при низком и переменном содержании этих примесей?

15. Из каких частей состоит химико-технологическая система?
16. Что такое материальный баланс химико-технологической системы в целом?
17. Какие методы химической технологии используются для обезвреживания газовых выбросов?
18. Оценка возможностей специализированных пакетов COMSOL, FLUENT, ANSYS, HYSYS.

### **8.3. Примерный перечень вопросов на зачете (итоговом контроле знаний)**

1. Использование каталитических процессов в химической и нефтехимической промышленности. Ресурсо- и энергосбережение, экологическая безопасность.
2. Проблемы масштабного перехода и их решение. Иерархическая схема. Принцип инвариантности.
3. Кинетика как атомно-молекулярный структурный уровень процесса. Взаимосвязь кинетики и термодинамики.
4. Программа работ при построения кинетических моделей. Основные типы лабораторных реакторов.
5. Феноменологический подход и теория стационарных реакций. Нестационарность. Требования к кинетическим моделям.
6. Кинетические модели для промышленных процессов.
7. Влияние внутренней диффузии в пористом зерне катализатора на скорость реакции и селективность процесса. Критерий Тиле и наблюдаемая скорость реакции. Степень использования гранулы катализатора.
8. Неизотермичность зерна катализатора. Оценка влияния внутренней диффузии при промышленной реализации процесса.
9. Внешний массо- и теплообмен реагентов и продуктов между поверхностью гранулы и газовым реакционным потоком в неподвижном слое катализатора, его влияние на скорость превращения реагентов.
10. Области протекания процесса на отдельном зерне катализатора (кинетическая, внутренняя диффузия, внешняя диффузия).
11. Определение лимитирующей стадии процесса (внутренняя или внешняя диффузия) исходя из величины числа Био.
12. Оптимальная структура гранул. Моно- и бидисперсная структуры.
13. Каталитические реакторы в современных производствах, их классификация. Факторы, определяющие конструкцию реактора. Адиабатический разогрев.
14. Оптимальные температурные режимы и схемы реакторов для простых и сложных реакций.
15. Динамика газовых потоков в зернистом неподвижном слое катализатора, гидравлические режимы движения реагентов. Критерии подобия. Оптимальные размеры и форма гранул.
16. Процессы тепло- и массопереноса в каталитических системах. Идеализированные модели для расчета каталитических процессов в реакторе.
17. Реакторы с неподвижным слоем катализатора, способы отвода тепла. Адиабатический и полочный реакторы, методы их расчета. Процессы с высокоактивными катализаторами.
18. Процессы в трубчатых реакторах, методы их расчета. Параметрическая чувствительность. Типы каталитических реакций, осуществляемых в трубчатых реакторах.
19. Примеры промышленных процессов в неподвижном слое, их характеристики. Сравнение нагрузки и производительности реакторов различного типа. Комбинированные системы.
20. Реакторы с движущимися слоями катализатора. Гидродинамика режима псевдооживления, движущегося слоя катализатора и лифт-реактора, преимущества и недостатки. Теплоотдача в движущихся слоях.

21. Влияние массообмена между пузырями и плотной фазой на активность катализатора и селективность.
22. Методология расчета реакторов с движущимися слоями. Двухфазная модель реактора с псевдооживленным слоем. Турбулентный режим псевдооживления.
23. Нагрузка и производительность каталитических реакторов с движущимися слоями, примеры промышленных процессов.
24. Реакторы для обезвреживания отходов и их переработки в ценные продукты. Очистка вредных выбросов промышленных производств от окислов азота и углерода, сернистых соединений и т. д.
25. Каталитические дожигатели для автотранспорта. Фотокатализ.
26. Структурированные системы – блоки, стекловолокна, микрореакторы. Каталитические дожигатели для автотранспорта.
27. Процессы на монолитных катализаторах при малых временах контакта.
28. Процессы нефтепереработки: каталитический крекинг, риформинг и гидроочистка, нефтехимический синтез.
29. Современные каталитические процессы, разрабатываемые для водородной энергетики. Переработка природного и попутного нефтяного газа.
30. Химико-технологические схемы (ХТС), основы их математического моделирования и оптимизации.
31. Аппаратурное оформление каталитических реакторов в ХТС. Процессы абсорбции, дистилляции, экстракции и ректификации.
32. Проблемы и тенденции развития инженерного катализа. Топливо-энергетические ресурсы, альтернативные источники энергии. Экологически чистые технологии. Нанотехнологии.
33. Новые виды сырья и способы их переработки. Разработка компактных систем. Использование возобновляемых ресурсов.
34. Основные направления развития научных основ инженерного катализа.

## **9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **9.1 Рекомендуемая литература**

#### **Основная**

1. Аэров М.Э., Тодес О.М., Наринский Д.А. Аппараты со стационарным зернистым слоем. Гидравлические и тепловые основы работы. Л, Химия, 1979.
2. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. - Новосибирск, Наука, 1986.
3. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. - М., Наука, 1987.
4. Катализ в промышленности/под ред. Б. Рич./ - М., Мир, 1986.
5. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах. - Л., Химия, 1989.
6. Бесков В.С., Сафронов В.С. Общая химическая технология и основы промышленной экологии. - М., Химия, 1999.
7. Бесков В.С., Общая химическая технология. - М., Академкнига, 2006.
8. В.И. Игнатенков, В.С. Бесков, Примеры и задачи по общей химической технологии, М.:ИКЦ «Академкнига», 2005, 198 с.
9. Hayes R. E. Introduction to Chemical Reactor Analysis, Amsterdam, Gordon and Breach Science Publishers, 2001 (University of Alberta, Canada).
10. Слинко М.Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. – Новосибирск, 2004.
11. Промышленный катализ в лекциях, выпуск 4, 2006 (лекция А.С. Носкова “Промышленные каталитические реакторы и их особенности” ), “Калвис”, Москва, 2006.
12. Слинко М.Г. Общие вопросы теории химических процессов и реакторов, том 1 и 2. – Новосибирск, БИК, 2008.
13. А.С. Носков “Промышленные каталитические реакторы и их особенности”, в кн. “Промышленный катализ в лекциях”, выпуск 4, 2006 . - Москва, “Калвис”, 2006.
14. D. Murzin, T.Salmi. Catalytic Kinetics, Elsevier, 2005.
15. L. Lloyd, Handbook of Industrial Catalysts, Fundamental and Applied Catalysis, Springer, 2011.

16. Верниковская Н.В., Малоземов Ю.В., Покровская С.А. Каталитические процессы в реакторах с неподвижным слоем, Учебно-методическое пособие, НГУ, Новосибирск, 2008.
17. Верниковская Н.В., Покровская С.А., Чумакова Н.А., Яушева Л.В. Расчет трубчатых реакторов с учетом диффузии в зерне катализатора, Учебно-методическое пособие, НГУ, Новосибирск, 2015.
18. Зибарева И.В. Химические базы данных международной сети научно-технической информации STN International // Известия АН. Сер. химическая. 2012. № 3. С. 679-716.
19. Хуторецкий В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе. М: РХТУ, 2000. 42 с.
20. Ridley D.D. Information Retrieval: SciFinder / 2nd Ed. John Wiley & Sons, 2009. 214 pp.

#### **Дополнительная**

1. Михаил Гаврилович Слинько – служение науке и отчеству. – Изд-во СО РАН, Новосибирск, 2014.
2. Levenspiel O. The Chemical Reactor Omnibook. Oregon State University, Corvallis, Oregon, (USA), 1993.
3. R.Aris. Ends and beginnings in the mathematical modeling of chemical engineering systems, Chemical Engineering Science, Vol.48, No.14, 1993.
4. Handbook of Heterogeneous Catalysis, Vol.3, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim (Germany), 1997.
5. Handbook of Heterogeneous Catalysis, Vol.4, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim (Germany), 2008.
6. J.-C. Charpentier. Four main objectives for the future of chemical and process engineering”, Chemical Engineering Journal, Vol. 103, N. 1-3, 2005.
7. Salmi, T.O., Mikkola, J.-P., Warna, J.P. Chemical Reaction Engineering and Reactor Technology. CRC Press, 2008.
8. G. Marin, G.S. Yablonsky. Kinetics of Chemical Reactions, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2011.
9. Handbook of Advanced Methods and Processes in Oxidation Catalysis. From Laboratory to Industry. Imperial College Press, London, 2014. (hardcover and ebook).

#### **9.2. Специализированное программное обеспечение компьютерного курса**

Система Mathcad содержит множество встроенных функций, которые можно использовать при решении различных научно-технических задач. Среди возможностей Mathcad можно выделить решение нелинейных уравнений и дифференциальных уравнений, в том числе и численными методами. Mathcad позволяет легко представлять получающиеся результаты в графическом виде. В компьютерном курсе Mathcad используется для моделирования каталитических процессов в реакторах, работающих в режимах идеального смешения и вытеснения, а также при решении аналитических задач и вычислении коэффициентов, используемых далее в пакетах программ.

Пакет COMSOL Multiphysics - мощная интерактивная среда, позволяющая проводить комплексное моделирование методом конечных элементов физических процессов, которые описываются системой различных взаимосвязанных дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП). В COMSOL можно задавать ДУЧП с различными граничными условиями практически на любой геометрии. Геометрию моделируемого объекта можно строить как с помощью собственных средств COMSOL, так и импортировать ее из различных систем автоматизированного проектирования. Дополнительный модуль Chemical Engineering позволяет реализовать моделирование процессов переноса массы и энергии с учетом кинетики химических реакций. В компьютерном курсе пакет используется для изучения процессов на пористом зерне катализатора и в реакторах основных типов.

Пакет программ HYSYS.Process применяется для проведения расчетов технологических схем газопереработки, нефтепереработки, нефтехимии и химии, позволяет проводить расчеты различных типов реакторов, таких, как реактор идеального смешения и идеального вытеснения, равновесный и стехиометрический реактор, а также различных теплообменных аппаратов. Пакет снабжен большим банком данных физико-химических свойств веществ и различных методов расчета термодинамических и физических свойств. В компьютерном курсе данный пакет используется для изучения процессов в системе каталитических реакторов и для расчета химико-технологических схем.

Пакет FLUENT относится к числу «тяжелых» CFD пакетов и является одним из самых мощных пакетов программ в области моделирования течений реагирующих потоков, теплообмена, многофазных течений и т. д. FLUENT надежно и эффективно выполняет расчеты для всех физических моделей, включая стационарное или переходное течение, несжимаемые или сжимаемые течения, ламинарные или турбулентные потоки, идеальный или реальный газ. В рамках компьютерного курса FLUENT предполагается использовать для моделирования процессов массо- и теплопереноса в монолитных блочных катализаторах с каналами произвольной формы.

### 9.3. Интернет ресурсы

1. [Google ScholarSFX](#) - полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах, online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН.
2. SCIRUS -бесплатная поисковая система издательства Elsevier, ориентированная на поиск только научной информации, online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН.
3. SciTopics - новый бесплатный интернет-ресурс для ученых и исследователей при; представлены самая свежая и самая точная взб-информация и информация из периодики; online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН.
4. Библиографические базы данных, к которым существует прямой доступ из внутренней сети Института: "ВИНИТИ", "Current Contents", "Chemical Abstracts", и т.д.
5. Электронный доступ к периодическим и продолжающимся изданиям (более 100 наименований, включая Applied Catalysis, Catalysis Letters, Catalysis Today, Surface Science, etc.).
6. Интернет-представительство кафедры общей химии ФЕН НГУ: [www.fen.nsu.ru/genchem](http://www.fen.nsu.ru/genchem).
7. Интернет-портал фундаментального химического образования России: [www.chem.msu.ru](http://www.chem.msu.ru).
8. Покровская С.А. Электронно-лекционный курс по моделированию каталитических процессов, Интернет-представительство НГУ, 2013 г., <http://lib/nsu.ru/8080/jspui/handle/nsu/766>.
9. Покровская С.А., Верниковская Н.В. Электронная версия УМК по инженерной химии каталитических процессов, Интернет-представительство НГУ. <http://lib.nsu.ru:8080/xmlui/handle/nsu/727>.
10. Верниковская Н.В., Трухан С.Н., Зажигалов С.В., Покровская С.А., Вычислительный практикум по инженерной химии каталитических процессов, Интернет-представительство факультета естественных наук НГУ, 2013 г. <http://fen.nsu.ru/fen.phtml?topic=meth>.
11. Зибарева И.В. Поиск химической информации в научно-технических базах данных: Учебно-методический комплекс. 2012. URL: <http://lib.nsu.ru:8080/xmlui/handle/nsu/673>.
12. Зибарева И.В. Поиск химической информации в научно-технических базах данных: Электронно-лекционный курс. 2013. URL: <http://lib.nsu.ru:8080/xmlui/handle/nsu/672>.

### 10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- аудиторный фонд ИК СО РАН, ноутбук,
- мультимедийный проектор (в настоящее время Epson EB-1860),
- настенный проекционный экран.
- компьютерный терминальный класс – 10 рабочих мест,
- сервер (в настоящее время (н/в) Dell Power Edoe R-420),
- персональные компьютеры (в н/в ПЭВМ P4-2800 Celeron II, в 2015 г. планируется замена на более мощные) с необходимым для курса стандартным и специализированным программным обеспечением.
- компьютерный класс,
- библиотечный фонд Института катализа СО РАН и НГУ.

### 11. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

В процессе изучения дисциплины выполняются текущий, промежуточный и итоговый контроль знаний.

Текущий контроль проводится в форме вопросов аспирантам в ходе лекций и консультаций. Цель текущего контроля – выработать у студента необходимость самостоятельной работы по освоению материала дисциплины.

Промежуточный контроль проводится один раз в конце семестра посредством опроса по пройденным темам компьютерного курса и выполненным заданиям.

Итоговый контроль выполняется в форме зачета. Цель итогового контроля – проверка знаний и умений, предусмотренных целями и задачами изучения дисциплины, понимания взаимосвязей различных ее разделов и связей со знаниями некоторых разделов естественнонаучных, общепрофессиональных и специальных дисциплин. Итоговый контроль проводится после освоения дисциплины в форме устных ответов на вопросы по лекционной и практической части курса.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ  
ЗА \_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_ УЧЕБНЫЙ ГОД

В рабочую программу курса «Инженерная химия каталитических процессов» образовательной программы по направленности подготовки «Процессы и аппараты химических технологий» вносятся следующие дополнения и изменения: