**Nazwa przedmiotu:**

Modelowanie wieloskalowe

**Koordynator przedmiotu:**

dr inż. Piotr Kuran

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Inzynieria Chemiczna i Procesowa

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

IC.MIP204

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2016/2017

**Liczba punktów ECTS:**

2

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

1. Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim wynikające z planu studiów 30
2. Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim w ramach konsultacji 3
3. Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim w ramach zaliczeń i egzaminów 3
4. Przygotowanie do zajęć (studiowanie literatury, odrabianie prac domowych itp.) 3
5. Zbieranie informacji, opracowanie wyników 5
6. Przygotowanie sprawozdania, prezentacji, raportu, dyskusji 5
7. Nauka samodzielna – przygotowanie do zaliczenia/kolokwium/egzaminu 8
Sumaryczne obciążenie studenta pracą 57 godz.

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

1,2 ECTS

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

0,8 ECTS

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład:  | 15h |
| Ćwiczenia:  | 0h |
| Laboratorium:  | 0h |
| Projekt:  | 15h |
| Lekcje komputerowe:  | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Wymagane jest wcześniejsze zaliczenie przedmiotu Symulacja komputerowa procesów przemysłowych (IC.MIP103).

**Limit liczby studentów:**

**Cel przedmiotu:**

1. Przedstawienie nowej koncepcji wieloaspektowego i wielkoskalowego podejścia do modelowania procesów inżynierii chemicznej.
2. Przedstawienie podejścia do modelowania wielkoskalowego na kilku poziomach projektowania procesu wytwarzania produktu chemicznego (poziomy: molekularny, katalizatora i reakcji chemicznej, transportowy, reaktora, i całej instalacji).
3. Nabycie umiejętności prowadzenia obliczeń projektowych z wykorzystaniem nowego podejścia wielkoskalowego w oparciu o reaktor fluidalny i o kolumnę rektyfikacyjną z reakcją chemiczną.

**Treści kształcenia:**

Wykład
1. Ogólne zasady podejścia wielkoskalowego. Omówienie zasad nowego podejścia do projektowania w odniesieniu do skali wielkości i skali czasu trwania procesów, porównanie z klasycznymi paradygmatami obowiązujących w inżynierii chemicznej.
2. Omówienie podejścia do modelowania wielkoskalowego na poziomie całej instalacji.
3. Omówienie podejścia do modelowania wielkoskalowego na poziomie reaktora. Omówienie poszczególnych przykładów podejścia do modelowania reaktora mającego na celu: obniżenie kosztów inwestycyjnych instalacji, obniżenie stopnia obciążenia procesowego reaktora, intensyfikację procesu reakcji, zwiększenie bezpieczeństwa pracy reaktora, poprawienie efektywności prowadzonego procesu.
4. Przedstawienie podejścia do modelowania wielkoskalowego na poziomie transportowym. Omówienie znaczenia wpływu procesów transportu i mieszania (w tym mikromieszania) na całość procesu, omówienie roli modelowania CFD w projektowaniu procesu.
5. Przedstawienie podejścia do modelowania wielkoskalowego na poziomie reakcji i działania katalizatora. 2
6. Omówienie podejścia do modelowania wielkoskalowego na poziomie molekularnym. Wykorzystanie podejścia DFT (teoria funkcjonału gęstości) do modelowania struktury cząstek chemicznych. Wykorzystanie metod opartych na DFT do projektowania procesów katalitycznych.
7. Przedstawienie możliwości wykorzystania metod, którymi posługuje się inżynieria chemiczna, do modelowania wielkoskalowego materiałów stałych.

Zajęcia projektowe
1. Modelowanie kolumny rektyfikacyjnej z reakcją chemiczną do produkcji octanu metylu, jako przykład podejścia redukującego koszty inwestycyjne instalacji (z wykorzystaniem programu ChemCAD).
2. Modelowanie pracy katalitycznego reaktora fluidalnego służącego do dopalania mieszaniny lotnych związków organicznych w oparciu o podejście wie

**Metody oceny:**

Wykład: egzamin pisemny
Zaliczenie projektu odbywa się indywidualnie ustnie u prowadzącego.

**Egzamin:**

tak

**Literatura:**

Podstawowa:
1. J. Bałdyga, M. Henczka, W. Podgórska, Obliczenia w inżynierii bioreaktorów, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, 2012.
2. E. Molga, Procesy adsorpcji reaktywnej: reaktory adsorpcyjne i chromatograficzne, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, 2008.
3. S. Sieniutycz, Optymalizacja w inżynierii procesowej, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, 1991.
Uzupełniająca:
1. A. Burghardt, G. Bartelmus, Inżynieria reaktorów chemicznych, T.1 i T.2, Wydaw. Nauk. PWN, 2001.
2. Z. Jaworski, Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej i procesowej, Akademicka Oficyna Wydawnicza Exit, 2005.
3. R. Lech, Modelowanie matematyczne w technologii ceramiki: przykłady, AGH Uczelniane Wydawnictwa NaukowoDydaktyczne, 2007.

**Witryna www przedmiotu:**

**Uwagi:**

## Efekty przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Efekt W1:**

Ma wiedzę na temat wielkoskalowego podejścia do zagadnienia projektowania procesów
wytwarzania produktu chemicznego, uwzględniającego bilansowanie masowe i energetyczne
poszczególnych elementów procesu na kilku poziomach, począwszy od skali mikro do poziomu
całej instalacji.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_W07

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_W03, T2A\_W04, T2A\_W07

**Efekt W2:**

Ma wiedzę o wieloaspektowym i wielkoskalowym podejściu do modelowania procesów
stanowiącym obecnie najnowszy trend rozwojowy inżynierii chemicznej i procesowej.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_W12

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_W05

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Efekt U1:**

Potrafi wykorzystywać dane literaturowe do opisu matematycznego modelowanego procesu w
kilku skalach projektowania

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_U01

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_U01

**Efekt U2:**

Potrafi wykonać projekt procesu polegający na jego modelowaniu matematycznym
(uwzględniając zasady intensyfikacji i właściwego doboru parametrów poszczególnych
elementów procesowych na poziomie mniejszej skali) oraz poprawy efektywności działania całej
instalacji poprzez właściwe zintegrowanie poszczególnych jej elementów w skali największej.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_U06

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_U09, T2A\_U12

**Efekt U3:**

Potrafi modelować przebieg procesów chemicznych w reaktorach pod kątem uzyskania różnego
typu efektów pracy reaktora.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_U07

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_U09

**Efekt U4:**

Potrafi posługiwać się zaawansowanym narzędziem do komputerowego wspomagania
projektowania instalacji w przemyśle chemicznym.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_U11

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_U09

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Efekt KS1:**

Rozumie potrzebę dokształcania się i podnoszenia swoich kompetencji zawodowych.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_K01

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_K01

**Efekt KS2:**

Potrafi współpracować w zespole w celu wspólnego wykonania i prezentacji zadania
projektowego.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_K02

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_K03

**Efekt KS3:**

Potrafi myśleć i działać w sposób kreatywny i przedsiębiorczy.

Weryfikacja:

egzamin pisemny, zaliczenie projektu

**Powiązane efekty kierunkowe:** K\_K04

**Powiązane efekty obszarowe:** T2A\_K06