**Nazwa przedmiotu:**

Modelowanie wieloskalowe

**Koordynator przedmiotu:**

prof. dr hab. inż. Eugeniusz Molga

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Inzynieria Chemiczna i Procesowa

**Grupa przedmiotów:**

obieralne

**Kod przedmiotu:**

1070-ICIPP-MSP-OB201

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2022/2023

**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, egzaminów, sprawdzianów etc. 6
3. Godziny pracy samodzielnej studenta w ramach przygotowania do zajęć oraz opracowania sprawozdań, projektów, prezentacji, raportów, prac domowych etc. 13
4. Godziny pracy samodzielnej studenta w ramach przygotowania do egzaminu, sprawdzianu, zaliczenia etc. 8
Sumaryczny nakład pracy studenta 57

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

-

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

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

-

**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.

**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.
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.

Ćwiczenia 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 wielkoskalowe.

**Metody oceny:**

1.sprawdzian pisemny
2. referat
3. sprawozdanie
4. dyskusja
5. seminarium

**Egzamin:**

nie

**Literatura:**

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.
4. A. Burghardt, G. Bartelmus, Inżynieria reaktorów chemicznych, T.1 i T.2, Wydaw. Nauk. PWN, 2001.
5. Z. Jaworski, Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej i procesowej, Akademicka Oficyna Wydawnicza Exit, 2005.
6. R. Lech, Modelowanie matematyczne w technologii ceramiki: przykłady, AGH Uczelniane Wydawnictwa Naukowo-Dydaktyczne, 2007.

**Witryna www przedmiotu:**

-

**Uwagi:**

Wykład:
Wykład jest jednym z elementów przedmiotu.
Zajęcia wykładowe odbywają się w formie: 15 wykładów po 1 godz. w tygodniu. W uzasadnionych przypadkach wykład może być prowadzony zdalnie, wg zmienionego harmonogramu. Obecność na wykładzie nie jest obowiązkowa.
Weryfikacja osiągnięcia efektów uczenia dla tej części przedmiotu jest dokonywana na podstawie wyniku sprawdzianu pisemnego.
Wyznacza się trzy terminy: dwa bezpośrednio po zakończeniu wykładów w sesji zimowej oraz trzeci w sesji jesiennej.
Warunkiem zaliczenia sprawdzianu jest przygotowanie odpowiedzi (eseju) na temat zadany przez prowadzącego. Odpowiedź ta przygotowana jest przez studentów „w domu” i składana w wyznaczonym terminie.
Wymagania dotyczące zakresu materiału obowiązującego na sprawdzianie są przekazywane studentom w formie ustnej podczas wykładu oraz w formie pisemnej po ostatnim wykładzie.
Warunkiem zaliczenia części wykładowej przedmiotu jest uzyskanie oceny pozytywnej ze sprawdzianu zgodnie ze skalą ocen; od 2,0 do 5,0.

Ćwiczenia projektowe:
Drugim elementem przedmiotu jest wykonanie i zaliczenie jednego projektu.
Termin wydawania zadania projektowego, składania wykonanego projektu oraz jego ustnego zaliczenia wyznaczane podczas trwania semestru i podawane z wyprzedzeniem przez prowadzącego. Przed wydaniem zadania projektowego przewidziane jest spotkanie informacyjnie, w postaci krótkiego wykładu objaśniającego istotę, cel i zakres projektu. W uzasadnionych przypadkach ustne zaliczenie projektu może odbywać się zdalnie przy zastosowaniu platformy MS Teams.
Warunkiem zaliczenia projektu jest: złożenie projektu w terminie, poprawne wykonanie projektu oraz zaliczenie ustnego sprawdzianu (tzw. obrona projektu). Sprawdzian może być prowadzony kontaktowo lub zdalnie. Podczas zaliczania projektu studenci nie mogą korzystać z żadnych materiałów.
Projekt może być zaliczony, jeżeli student uzyska ocenę pozytywną za wykonanie projektu i jego ustne zaliczenie zgodnie ze skalą ocen; od 2,0 do 5,0.
W przypadku nieuzyskania zaliczenia z projektu istnieje możliwość jego jednokrotnej poprawy. Poprawa polega na ponownym zaliczeniu wszystkich elementów projektu w terminie uzgodnionym z prowadzącym, jednak nie później niż 2 tygodnie po terminie podstawowym dla danego projektu.

 Warunkiem zaliczenia przedmiotu jest uzyskanie oceny pozytywnej z części wykładowej i zaliczenie projektu.
Oceny te są wpisywane jako odrębne zaliczenia oraz wystawiana jest łączna ocena końcowa będąca średnią z ocen składowych.
W przypadku nieuzyskania zaliczenia przedmiotu konieczne jest jego powtórzenie w kolejnym cyklu realizacji zajęć, przy czym powtórzeniu podlega jedynie ta część przedmiotu (wykład i/lub ćwiczenia projektowe), z której student nie uzyskał oceny pozytywnej.

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka 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:

sprawdzian pisemny

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_W04

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** P7U\_W, I.P7S\_WG.o, III.P7S\_WG

**Charakterystyka W2:**

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

Weryfikacja:

sprawdzian pisemny

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_W09

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** P7U\_W, I.P7S\_WG.o, III.P7S\_WG

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U1:**

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

Weryfikacja:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_U01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** P7U\_U, I.P7S\_UW.o, III.P7S\_UW.o

**Charakterystyka 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:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_U04, K2\_U05, K2\_U06

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** P7U\_U, I.P7S\_UW.o, III.P6S\_UW.o, III.P7S\_UW.o

**Charakterystyka U3:**

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

Weryfikacja:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_U07

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** P7U\_U, I.P7S\_UW.o, III.P7S\_UW.o

**Charakterystyka U4:**

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

Weryfikacja:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_U04

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** P7U\_U, I.P7S\_UW.o, III.P6S\_UW.o

**Charakterystyka U5:**

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

Weryfikacja:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_U08

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** I.P7S\_UO, P7U\_U

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka KS1:**

Rozumie potrzebę dokształcania się i podnoszenia swoich kompetencji zawodowych.

Weryfikacja:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_K01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** I.P7S\_KK, P7U\_K

**Charakterystyka KS2:**

Potrafi myśleć i działać w sposób kreatywny i przedsiębiorczy.

Weryfikacja:

referat, sprawozdanie, dyskusja, seminarium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K2\_K03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:** I.P6S\_KO, P6U\_K