

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Факультет екологічної безпеки, інженерії та технологій**

КАФЕДРА ХІМІЇ І ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

РОЗШИРЕНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

**з дисципліни «Моделювання фізико-хімічних властивостей
вуглеводневих систем»
за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія»**

Укладач: Кравчук Т.В.

Модуль №1

«Моделювання. Поняття фізико-хімічних властивостей речовин. Моделювання середньої температури кипіння та густини нафти»

ЛЕКЦІЯ № 1.1.

Тема лекції: Вступ. Поняття моделювання і моделі.

План лекції

1. Основи теорії подібності. Поняття моделі.
2. Класифікація моделей.
3. Види моделювання.
4. Значення моделювання та інженерних розрахунків фізико-хімічних властивостей речовин

Зміст лекції

Подібність реального об'єкту і моделі. Основне правило моделювання (Третя теорема подібності). Умови подібності моделі реальному об'єкту. Основні поняття теорії подібності (симплекс, комплекс, критерій подібності).

Матеріальні моделі. Ідеальні моделі. Групи матеріальних моделей та їх характеристика.

Види моделювання. Фізичне моделювання: переваги й недоліки. Математичне моделювання: переваги й недоліки. Комп'ютерне моделювання: переваги й недоліки.

Значення моделювання та інженерних розрахунків фізико-хімічних властивостей речовин. Використання фізико-хімічних властивостей речовин у розрахунках матеріальних і теплових балансів. Інтерполяція та екстраполяція даних. QSPR – Quantitative Structure – Property Relationship.

Література:

1. Стеценко І.В. Моделювання систем: навч. посіб. / І.В. Стеценко. – Черкаси: ЧДТУ, 2010. – 399 с.
2. Винник О.Ф., Федченко В.М., Федченко С.В. Комп'ютерне моделювання хімічних структур із застосуванням “CS Chem3D”. -Харків: ХГПУ, 2006. – 150 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.2.

Тема лекції: Основні методи розрахунку фізико-хімічних властивостей речовин.

План лекції

1. Види моделей ФХВ за кількістю параметрів.
2. Емпіричні та напівемпіричні методи розрахунку ФХВ.
3. Критерії хімічної подібності Дамкелера.
4. Детерміновані та стохастичні моделі.

Зміст лекції

Одно-, два-, трипараметричні моделі ФХВ.

Емпіричні методи. Принцип «чорного ящика». Рівняння рівняння Воїнова і Воїнова-Ейгенсона. Напівемпіричні методи.

Перший критерій хімічної подібності Дамкелера. Відношення швидкості реакції і конвективного перенесення речовини. Другий критерій Дамкелера – відношення швидкості реакції й інтенсивності турбулентного перенесення речовини. Третій критерій Дамкелера – відношення теплової потужності реакції і конвективного перенесення тепла. Четвертий критерій Дамкелера – відношення теплової потужності реакції і турбулентного перенесення тепла.

Детерміновані методи. Стохастичні методи. Порівняння детермінованих і стохастичних методів. Принцип конститутивності. Принцип адитивності. Метод групових складових.

Література:

1. Стеценко І.В. Моделювання систем: навч. посіб. / І.В. Стеценко. – Черкаси: ЧДТУ, 2010. – 399 с.

2. Винник О.Ф., Федченко В.М., Федченко С.В. Комп'ютерне моделювання хімічних структур із застосуванням “CS Chem3D”. -Харків: ХГПУ, 2006. – 150 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.3.

Тема лекції: Теоретичні основи вчення про фізико-хімічні властивості речовин.

План лекції

1. Види математичних моделей за ознакою універсальності.
2. Види математичних моделей за ознакою точності опису властивостей.
3. Параметри системи.
4. Властивості системи.
5. Похибка і вимоги до математичної моделі

Зміст лекції

Характеристика індивідуальних, універсальних, унікальних та феноменальних математичних моделей ФХВ вуглеводневих систем. Поняття адекватності моделі. Високоадекватні та адекватні моделі ФХВ вуглеводневих систем.

Характеристика параметрів системи. Термодинамічні та кінетичні параметри. Молекулярний (генетичний) параметр.

Хактеристика властивостей системи. Конститутивні, стандартні, статичні та динамічні властивості хімічних речовин. Зв'язок «властивість - параметр».

Фактори, що впливають на похибку моделі. Вимоги, що висуваються до математичної моделі.

Література:

1. Стеценко І.В. Моделювання систем: навч. посіб. / І.В. Стеценко. – Черкаси: ЧДТУ, 2010. – 399 с.

2. Винник О.Ф., Федченко В.М., Федченко С.В. Комп'ютерне моделювання хімічних структур із застосуванням “CS Chem3D”. -Харків: ХГПУ, 2006. – 150 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.4.

Тема лекції: Фізико-хімічні властивості нафти як об'єкт моделювання.

План лекції

1. Основні фізико-хімічні властивості нафти.
2. Характеристика і типи міжмолекулярних взаємодій.
3. Дипольні моменти молекул.
4. Колоїдно-дисперсні властивості нафти.
5. Особливості моделювання ФХВ вуглеводневих систем

Зміст лекції

Коротка характеристика фізико-хімічних властивостей нафти. Середня температура кипіння. Густина нафти. В'язкість вуглеводневих систем. Теплові властивості.

Міжмолекулярні взаємодії. Орієнтаційна взаємодія. Індукційна взаємодія. Дисперсійна взаємодія. Водневий зв'язок. Принцип відповідних станів. Фазові перетворення речовин. Дипольні моменти молекул.

Типи міжмолекулярних взаємодій в газах і рідинах. Колоїдно-дисперсні властивості нафти.

Основні напрямки моделювання властивостей нафти. Використання значень показників фізико-хімічних властивостей нафти і її фракцій. Використання сучасних ПК для чисельного розв'язання складних систем рівнянь матеріального і теплового балансу хіміко-технологічних процесів. Особливості використання правила адитивності при визначенні різних характеристик нафтових сумішей.

Література:

1. Стеценко І.В. Моделювання систем: навч. посіб. / І.В. Стеценко. – Черкаси: ЧДТУ, 2010. – 399 с.
2. Винник О.Ф., Федченко В.М., Федченко С.В. Комп'ютерне моделювання хімічних структур із застосуванням "CS Chem3D". -Харків: ХГПУ, 2006. – 150 с.

ЛЕКЦІЯ № 1.5.

Тема лекції: Моделювання середньої температури кипіння вуглеводневих систем.

План лекції

1. Характеристичні константи вуглеводнів.
2. Поняття середньої температури кипіння нафти.
3. Основні математичні моделі середньої температури кипіння вуглеводневих систем.

Зміст лекції

Короткі визначення характеристичних констант вуглеводнів і нафтових систем, що моделюються.

Середня температура кипіння. Вираз складу нафти через криву ІТК. Середньооб'ємна, середньомасова, середньомолекулярна, середньокубічна, середньоусереднена температура кипіння. Основні математичні моделі для середньої температури кипіння. Моделювання середньої температури

кипіння для сумішей вуглеводнів.

Література:

1. Стеценко, І.В. Моделювання систем: навч. посіб. / І.В. Стеценко. – Черкаси: ЧДТУ, 2010. – 399 с.
2. Kovaleva L. Numerical Modeling of Heavy Hydrocarbon Liquid Heating / L. Kovaleva, A. Mushin // Brazilian Journal of Chemical Engineering. – Vol. 33. - № 1. – 2016. – P.169-175.
3. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.

ЛЕКЦІЯ № 1.6.

Тема лекції: Густина нафти. Найпростіші математичні моделі густини сумішей вуглеводнів.

План лекції

1. Поняття густини вуглеводневих систем.
2. Основні методи експериментального визначення густини.
3. Порівняння експериментальних та розрахункових методів визначення густини вуглеводневих систем.
4. Найпростіші математичні моделі густини сумішей вуглеводнів.

Зміст лекції

Абсолютна та відносна густини. Густина нафтових фракцій. Ареометричний, пікнометричний методи визначення густини вуглеводневих систем. Сучасні інструментальні методи визначення густини.

Основні моделі для температурної залежності густини вуглеводневих систем. Температурний коефіцієнт. Області використання моделей. Визначення густини сумішей вуглеводнів за допомогою номограм.

Література:

1. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.
2. Kovaleva L. Numerical Modeling of Heavy Hydrocarbon Liquid Heating / L. Kovaleva, A. Mushin // Brazilian Journal of Chemical Engineering. – Vol. 33. - № 1. – 2016. – P.169-175.

ЛЕКЦІЯ № 1.7.

Тема лекції: Поліпараметричні математичні моделі густини вуглеводневих систем.

План лекції

1. Застосування моделі Мановяна.
2. Застосування ентропійно-інформаційної моделі для визначення густини вуглеводневих систем.
3. Моделі ГрозНДІ і БашНДІ для визначення густини нафти.

4. Використання дво- та трипараметричних моделей для визначення густини вуглеводневих систем.

Зміст лекції

Модель Мановяна. Ентропійно-інформаційна модель. Експериментальні методи визначення густини нафтопродуктів. Модель Ставцева і Виричек.

Двопараметрична залежність відносної густини від молекулярної маси і коефіцієнта рефракції.

Трипараметрична залежність відносної густини від молекулярної маси, коефіцієнта рефракції і середньої об'ємної температури кипіння. Моделювання густини рідких вуглеводневих сумішей. Фактор парафіністості нафтопродукту.

Література:

1. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.

2. Kovaleva L. Numerical Modeling of Heavy Hydrocarbon Liquid Heating / L. Kovaleva, A. Mushin // Brazilian Journal of Chemical Engineering. – Vol. 33. - № 1. – 2016. – P.169-175.

Модуль №2

«Математичне моделювання властивостей вуглеводневих сумішей»

ЛЕКЦІЯ № 2.1.

Тема лекції: Моделювання в'язкості вуглеводневих систем

План лекції

1. Поняття в'язкості. Види в'язкості.
2. В'язкісно-температурна характеристика.
3. Математичні моделі для в'язкості суміші нафтопродуктів.

Зміст лекції

Поняття в'язкості нафти. Види в'язкості. Коефіцієнт кінематичної в'язкості. Умовна в'язкість. Способи вимірювання в'язкості нафти. Залежність в'язкості від температури. Модель Вальтера для в'язкості.

Модель Манстона для в'язкості. Моделі Кендалла і Монро. Математичні моделі для в'язкості суміші нафтопродуктів. Проведення моделювання в'язкості вуглеводневих систем.

Література:

1. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.

2. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічних технологій: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2021. – 80 с.

3. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем:

лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук.
– К. : НАУ, 2022. – 60 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.2.

Тема лекції: Моделювання молярної маси нафтових фракцій.

План лекції

1. Поняття молярної маси нафтових фракцій.
2. Методи експериментального визначення молярної маси нафтових фракцій.
3. Визначення молярної маси нафтових фракцій за допомогою математичних моделей.

Зміст лекції

Молярна маса. Застосування поняття молярна маса до нафтових фракцій. Особливості використання криоскопічного методу, методу визначення молярної маси з використання термометра Бекмана і установки КРІОН.

Основні математичні моделі для молярної маси вуглеводневих сумішей. Застосування моделі Воїнова залежно від класу вуглеводнів. Вибір необхідної математичної моделі молярної маси. Проведення моделювання молярної маси вуглеводневих систем за допомогою уточненої моделі Воїнова-Ейгенсона. Модель Херша для визначення молярної маси нафтових фракцій. Використання кореляції Лі-Кеслера для моделювання молярної маси нафтових фракцій.

Література:

1. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.
2. Чумак В.Л. Фізична хімія: підруч. / В.Л. Чумак, С.В. Іванов. – К.: Книжкове вид-во НАУ, 2007. – 648 с.
3. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2022. – 60 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.3.

Тема лекції: Моделювання тиску насиченої пари вуглеводневих систем.

План лекції

1. Поняття тиску насиченої пари вуглеводневих систем.
2. Обґрунтування необхідності визначення тиску насиченої пари вуглеводнів.
3. Характеристика експериментальних методів визначення тиску насиченої пари.
4. Основні математичні моделі тиску насиченої пари вуглеводневих систем.

Зміст лекції

Тиск насиченої пари. Вплив тиску насиченої пари на експлуатаційні властивості нафтопродуктів. Абсолютні методи з тензіметром та бомбою для визначення тиску насиченої пари нафтопродуктів. Стандартний метод з бомбою Рейда для визначення тиску насиченої пари.

Основні математичні моделі для тиску насиченої пари вуглеводневих сумішей. Моделі Антуана та Ашворта для тиску насиченої пари. Методи Кокса та Максвела для визначення тиску насиченої пари. Термічна залежність тиску насичених парів вуглеводнів і вузьких нафтових фракцій.

Література:

1. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.
2. Чумак В.Л. Фізична хімія: підруч. / В.Л. Чумак, С.В. Іванов. – К.: Книжкове вид-во НАУ, 2007. – 648 с.
3. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2022. – 60 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.4.

Тема лекції: Моделювання теплових властивостей вуглеводневих сумішей на прикладі теплоємності та теплоти пароутворення.

План лекції

1. Теплові властивості вуглеводневих систем.
2. Математичне моделювання теплоємності.
3. Математичні моделі теплоти пароутворення.

Зміст лекції

Теплові властивості нафти. Теплоємність сумішей вуглеводнів. Види теплоємності. Основні математичні моделі для теплоємності. Модель Крега. Номограми для визначення теплоємності вуглеводневих систем. Модель Фортча і Уйтмена. Модель Ватсона – Нільсона.

Теплота випаровування (пароутворення). Зміна теплоти випаровування залежно від температури кипіння нафтових фракцій. Математичні моделі теплоти пароутворення. Модель Кистяківського, область застосування. Модель Уейра і Ітона. Модель Трутона для нафтопродуктів.

Література:

1. Kovaleva L. Numerical Modeling of Heavy Hydrocarbon Liquid Heating / L. Kovaleva, A. Mushin // Brazilian Journal of Chemical Engineering. – Vol. 33. - № 1. – 2016. – P.169-175.
2. Чумак В.Л. Фізична хімія: підруч. / В.Л. Чумак, С.В. Іванов. – К.: Книжкове вид-во НАУ, 2007. – 648 с.
3. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних

нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.

4. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2022. – 60 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.5.

Тема лекції: Моделювання теплових властивостей вуглеводневих сумішей на прикладі ентальпії та теплопровідності.

План лекції

1. Загальні підходи до моделювання ентальпії сумішей вуглеводнів.
2. Основні математичні моделі теплопровідності вуглеводневих систем.
3. Характеристики фазових переходів нафтопродуктів. Теплоти плавлення і згорання.

Зміст лекції

Ентальпія нафтопродуктів. Використання номограми Нельсона для визначення ентальпії рідких та газоподібних вуглеводневих систем. Модель Воїнова для визначення ентальпії нафтових парів. Моделювання ентальпії рідких і пароподібних нафтопродуктів за атмосферного тиску.

Поняття теплопровідності. Закон Фур'є. Коефіцієнт теплопровідності. Моделі Крега та Расторгуєва для визначення теплопровідності. Области застосування. Моделювання теплопровідності газоподібних вуглеводнів за допомогою моделі Мізіка і Годоса.

Теплота плавлення. Технологічні розрахунки теплоти плавлення нафтового палива. Теплота згорання палива. Експериментальні та розрахункові методи визначення теплоти згорання палива.

Література:

1. Kovaleva L. Numerical Modeling of Heavy Hydrocarbon Liquid Heating / L. Kovaleva, A. Mushin // Brazilian Journal of Chemical Engineering. – Vol. 33. - № 1. – 2016. – P.169-175.

2. Чумак В.Л. Фізична хімія: підруч. / В.Л. Чумак, С.В. Іванов. – К.: Книжкове вид-во НАУ, 2007. – 648 с.

3. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.

4. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2022. – 60 с.

ЛЕКЦІЯ № 2.6.

Тема лекції: Математичні моделі для критичних параметрів сумішей вуглеводнів.

План лекції

1. Критичний стан.
2. Критичні параметри.
3. Математичні моделі для критичних параметрів вуглеводневих систем.

Зміст лекції

Критичний стан. Критична температура. Модель Ітона і Портера для критичної температури. Критичний тиск. Математична модель Льюїса. Модель Фроста. Критичний об'єм.

Узагальнена кореляція Лі та Кеслера для визначення критичної температури, критичного тиску та фактору ацентричності Пітцера.

Приведені параметри. Псевдокритичні параметри. Визначення псевдокритичних параметрів.

Література:

1. Babatunde A Bamgbade Measurements and Modeling of Hydrocarbon Mixture Fluid Properties under Extreme Temperature and Pressure Conditions: PhD Thesis. - Richmond, Virginia, 2015. – 172 p.

2. Фізико-хімічні та експлуатаційні властивості товарних нафтопродуктів / П. І. Топільницький [та ін.]. - Львів : Вид-во Львів. політехніки, 2015. - 243.

3. Моделювання фізико-хімічних властивостей вуглеводневих систем: лабораторний практикум / уклад. : В. Л. Чумак, М. П. Кравчук, Т. В. Кравчук. – К. : НАУ, 2022. – 60 с.