

# FIȘA DISCIPLINEI<sup>1)</sup>

## 1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Petrol-Gaze din Ploiești
1.2. Facultatea	Tehnologia Petrolului și Petrochimie
1.3. Departamentul	Ingineria Prelucrării Petrolului și Protecția Mediului
1.4. Domeniul de studii universitare	Inginerie chimică
1.5. Ciclul de studii universitare	Master (1,5 ani)
1.6. Programul de studii universitare	Inginerie chimică asistată de calculator pentru rafinării și petrochimie (MICAZ)

## 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	MODELAREA ȘI SIMULAREA REACȚIILOR ȘI REACTOARELOR CHIMICE
2.2. Titularul activităților de curs	Șef lucrări, Dr. Ing. Liviu FILOTTI
2.3. Titularul activităților seminar/laborator	Șef lucrări, Dr. Ing. Liviu FILOTTI
2.4. Titularul activității proiect	- - -
2.5. Anul de studiu	1 (Master)
2.6. Semestrul *	1 (Master)
2.7. Tipul de evaluare	Examen (E1)
2.8. Categoria formativă** / regimul*** disciplinei	DD / O

\* numărul semestrului este conform planului de învățământ ;

\*\* DF – Discipline fundamentale; DD – discipline de domeniu; DS - discipline de specialitate; DC - discipline complementare, DA – disciplina de aprofundare, DSI – disciplina de sinteza.

\*\*\* obligatorie = O; opțională = A; facultativă = L

## 3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1. Număr de ore pe săptămână	6	din care: 3.2. Curs	3	3.3. Seminar/laborator	3	3.4. Proiect	- - -
3.5. Total ore din planul de învățământ	84	din care: 3.6. Curs	42	3.7. Seminar/laborator	42	3.8. Proiect	- - -
3.9. Distribuția fondului de timp							ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și notițe							10
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren							6
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri							5
Tutoriat							1
Examinări							2
Alte activități							- - -
3.10. Total ore studiu individual	24						
3.11. Total ore pe semestru	108						
3.12. Numărul de credite	6						

## 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Diplomă de licență</li> <li>➤ Chimie fizică</li> <li>➤ Matematică ; Metode numerice</li> <li>➤ Reactoare chimice</li> </ul>
--------------------	--

<sup>1)</sup> Adaptare după Ordinul Ministrului educației, cercetării, tineretului și sportului nr. 5703/2011 privind implementarea Codului național al calificărilor din învățământul superior, publicat în Monitorul Oficial al României, partea I, nr. 880 bis / 13.XII.2011

4.2. de competențe	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ cunoașterea principiilor fundamentale ale disciplinelor de inginerie chimică</li> <li>➤ cunoașterea generală a noțiunilor de bază de chimie fizică (cinetică chimică, termodinamică) ; cunoștințe generale în domeniul metodelor numerice</li> <li>➤ cunoștințe generale de operare PC și a programelor de tip Office</li> </ul>
--------------------	---

## 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	- Sală de curs, echipată cu tablă și videoproiector și ecran
5.2. de desfășurare a seminarului/laboratorului	- Sală înzestrată cu tablă, videoproiector și calculatoare cu software specifice (Mathcad, Excel, Pro-II)

## 6. Competențe specifice acumulate

<b>Competențe profesionale</b>	<p>CP1. Descrierea, analiza și utilizarea avansată a conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul proiectării conceptuale a proceselor chimice</p> <p>CP2. Exploatarea avansată a proceselor și instalațiilor cu aplicarea cunoștințelor din domeniul ingineriei chimice</p> <p>CP3. Consilierea, formarea și instruirea în domeniul proiectării și conducerii automate a instalațiilor din industria prelucrării petrolului</p> <p>CP4. Planificarea, organizarea și conducerea grupurilor profesionale sau a unor instituții</p>
<b>Competențe transversale</b>	<p>CT1. Capacitatea de a realiza sarcini profesionale în calitate de conducător al unei echipe</p> <p>CT2. Capacitatea de informare și documentare permanentă în domeniul său de activitate, dar și în domenii conexe, atât în limba română cât și într-o limbă de circulație internațională</p> <p>CT3. Cunoașterea, la nivel avansat, a unor programe software specifice ingineriei chimice și a utilizării calculatorului și a internetului</p>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor specifice acumulate)

7.1. Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Identificarea proceselor chimice și fizice ce au loc într-un reactor chimic, caracterizarea cantitativă a acestora prin ecuații și relații matematice</li> <li>➤ Cunoașterea relațiilor de bilanț de masă, de energie și de impuls utile pentru elaborarea modelelor matematice ale reactoarelor chimice din industria de prelucrare a petrolului sau petrochimică</li> <li>➤ Însușirea capacității de a aprecia relațiile relevante dintre diversele fenomene și mărimi și de a formula în consecință ipoteze simplificatoare</li> </ul>
7.2. Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Cunoașterea metodelor de elaborare a modelelor matematice ale reactoarelor chimice reprezentative pentru industria de profil</li> <li>➤ Însușirea principiilor metodelor matematice și numerice relevante pentru soluționarea ecuațiilor modelelor matematice</li> <li>➤ Analiza și evaluarea reacțiilor chimice, a reactoarelor chimice, ale parametrilor de operare și soluțiilor constructive necesare respective, funcție de condițiile de reacție, produsele obținute și de performanțele dorite ale reactorului modelat</li> <li>➤ Dobândirea capacității de a alege parametri de operare optimi pe baza soluțiilor rezultate din modelele formulate, de a analiza critic modelul unui reactor chimic și de a propune soluții pentru ameliorarea modelului</li> <li>➤ Cunoașterea metodelor de prelucrare a datelor experimentale, industriale sau de laborator, pentru determinarea parametrilor cinetici, esențiali pentru formularea modelului matematic al unui reactor chimic</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1. Curs	Nr. ore	Metode de predare	Observații
1-. Introducere, obiectivele disciplinei. Mărimi termodinamice de reacție și elemente de cinetică chimică utile în modelarea reactoarelor chimice	2	Expunere interactivă / Problematizarea / Exemplificarea și comparația cu rezultatele și experiența personală în domeniul de specialitate, cu rezultate din industrie sau resurse on-line de pe web  Predarea și exemplificarea asistată de calculator  Conversația euristică/  Analiza comparativă	
2-. Identificarea sistemului unitar reactor chimic. Clasificarea reactoarelor chimice. Identificarea proceselor relevante dintr-un reactor chimic	2		
3-. Algoritmul de elaborare a modelului matematic al unui reactor chimic. Relații generale de bilanț și de transfer	3		
4-. Modele cu parametri distribuiți în timp	6		
5-. Modele cu parametri distribuiți în spațiu	6		
6-. Soluționarea modelelor matematice formate din ecuații algebrice și simularea folosind aceste modele. Prezentare generală a metodelor numerice specifice	8		
7-. Soluționarea modelelor matematice formate din ecuații diferențiale ordinare și simularea utilizând astfel de modele. Prezentare generală a metodelor numerice relevante	8		
8-. Soluționarea modelelor matematice formate din ecuații diferențiale cu derivate parțiale și simularea utilizând acest tip de modele. Prezentare generală a metodelor numerice specifice	8		
9-. Modelarea și simularea reacțiilor și reactoarelor chimice cu ajutorul pachetelor software dedicate	2		
10-. Determinarea parametrilor cinetici din date experimentale - tehnici de regresie și de programarea experiențelor pentru obținerea datelor de cinetică – prezentare generală	2		
11-. Recapitulare, discuții, criterii pentru selectarea unei anumite aplicații de modelare	1		
<b>Bibliografie</b>  a. Cărți, monografii <ol style="list-style-type: none"> <li>G. Bozga, O. Muntean, <i>Reactoare chimice</i>, vol. 1 – <i>Reactoare omogene</i>, vol. 2 – <i>Reactoare eterogene</i>, Ed. Tehnică, București, 2000, 2001.</li> <li>L. M. Ferrareso-Lona, <i>A step by step approach to the modeling chemical engineering processes. Using Excel for simulation</i>, Springer, Cham, 2018.</li> <li>H. S. Fogler, <i>Elements of chemical reaction engineering</i>, 4th ed., Prentice Hall - Pearson, Upper Saddle River, 2005.</li> <li>H. S. Fogler, <i>Essential of chemical reaction engineering</i>, Prentice Hall - Pearson, Upper Saddle River, 2010.</li> <li>G. F. Froment, K. B. Bischoff, J. De-Wilde, <i>Chemical reactor analysis and design</i>, 3rd ed., Wiley, Hoboken, 2010.</li> <li>O. Levenspiel, <i>Chemical reaction engineering</i>, 3rd ed., Wiley, Hoboken, 1999 (prima ediție și în lb. română : O. Levenspiel, <i>Tehnica reacțiilor în ingineria chimică</i>, Ed. Tehnică, București, 1967).</li> <li>V. Marinoiu, C. Strățulă, A. Petcu, C. Pătrășcioiu, C. Marinescu, <i>Metode numerice aplicate în industria chimică</i>, Ed. Tehnică, București, 1986.</li> <li>J. Villiermaux, <i>Génie de la réaction chimique. Conception et fonctionnement des réacteurs</i>, 2ème ed., Tec &amp; Doc – Lavoisier, Paris, 1993.</li> <li>R. Mihail, <i>Modelarea reactoarelor chimice</i>, Ed. Tehnică, București, 1976.</li> <li>L. K. Doraiswamy, D. Uner, <i>Chemical reaction engineering. Beyond the fundamentals</i>, CRC, Boca Raton, 2014.</li> </ol>			

b. Periodice

- *Advances in Chemical Engineering ; Studies in Surface Science and Catalysis ; ACS Symposium Series*
- *Chemical Engineering Journal ; Chemical Engineering Research and Design ; Industrial & Engineering Chemistry Research ; Chemical Engineering & Process : Process Intensification*

8.2. Seminar / laborator	Nr. ore	Metode de predare	Observații
1-. Norme și reguli de SSM generale și specifice sălii de calculatoare ; norme specifice anti-Sars-Covid 9	1	Exemplificarea Argumentația  Discuția colocvială și interactivă Expunere interactivă Exemplificare /  Colocvială, cu participarea studenților la rezolvarea problemelor și discuția rezultatelor obținute / Lucrul în echipă	
2-. Descrierea platformei de calcul Mathcad și programului Origin de analiză statistică a datelor	10		
3-. Modelarea și simularea unui reactor discontinuu folosind platforma Mathcad.	6		
4-. Modelarea și simularea unui reactor continuu cu amestecare perfectă (Mathcad)	8		
5-. Modelarea și simularea unui reactor tubular (Mathcad)	8		
6-. Determinarea ecuației cinetice și a parametrilor cinetici respectivi pentru o reacție catalitică eterogenă din date experimentale – studiu de caz	3		
7-. Modelarea și simularea reacțiilor și reactoarelor chimice cu programul Pro-II	12		

#### Bibliografie

1. *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (D. W. Green, R. H. Perry, Eds.), 8th ed., McGraw-Hill, New York, 2008.
2. O. Muntean, A. Woinaroschy & G. Bozga, *Aplicații la calculul reactoarelor chimice*, Ed. Tehnică, București, 1984.
3. M. Schmal, *Chemical reaction engineering. Essentials, exercises and examples*, CRC-Balkema, Leiden, 2014.
4. H. S. Fogler, B. Vicente, M. Nori, *Elements of chemical reaction engineering*, 4th ed., Solutions manual, - Pearson, Upper Saddle River, 2005.
5. R. J. Kee, M. E. Coltrin, P. Glarborg, *Chemically reacting flow - Theory and practice*, Wiley-Interscience, Hoboken (NJ), 2003.
6. U. M. Ascher, L. R. Petzold, *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*, SIAM, Philadelphia, 1998.
7. S. C. Chapra, R. P. Canale, *Numerical methods for engineers*, 7th ed., McGraw-Hill, New York, 2015.
8. J. M. Cooper, *Introduction to partial differential equations with Matlab*, Birkhauser, Boston, 1998.

8.3. Proiect	Nr. ore	Metode de predare	Observații
---	---	---	

#### Bibliografie

### 9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor avansate pentru cunoașterea și operarea instalațiilor industriale
- însușirea elementelor de bază despre procesele tehnologice și reactoarelor chimice respective, a parametrilor de exploatare a acestora, în corelație cu tipul reacției chimice, produselor dorite și cu varianta constructivă a

reactorului

- estimarea comparativă, calitativă, a performanțelor în condițiile de exploatare de laborator, la nivel de pilot sau industrial
- aprecierea soluțiilor tehnice de mentenanță, durabilitate sau de ameliorare a performanțelor procedurii sau tehnologiei de prelucrare folosind tehnicile de modelare matematică

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1. Criterii de evaluare	10.2. Metode de evaluare	10.3. Pondere din nota finală
10.4. Curs	<ul style="list-style-type: none"><li>- dobândirea cunoștințelor teoretice predate la curs</li><li>- considerarea proceselor fizico-chimice din reactoarele chimice cu noțiunile teoretice de termodinamică, cinetică și inginerie chimică și transpunerea corectă a acestora într-un model matematic coerent</li><li>- corectitudinea soluționării aplicației ; utilizarea modelului la simulări pentru diferite scenarii</li><li>- rigurozitatea științifică a prezentării, ce trebuie să cuprindă și discuția rezultatelor</li></ul>	Verificare orală /  Prezentare orală, on site sau on-line, a aplicației de elaborare și soluționare a modelului unui reactor chimic (pe echipe)	70 %
10.5. Seminar / laborator	<ul style="list-style-type: none"><li>- participarea proactivă, fizică sau on-line, la activitățile didactice desfășurate</li><li>- întocmirea temelor de studiu</li></ul>	Control vizual / oral (discuție)	30%
10.6. Proiect	---	---	---
10.7. Standard minim de performanță			
➤ Nota 5 : <ul style="list-style-type: none"><li>- cunoașterea ecuațiilor de bază din modelul folosit, justificarea principiilor care au stat la baza alegerii acestora ;</li><li>- modelul prezentat este corect din punct de vedere științific</li></ul>			

Data  
completării  
25/09/2020

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de  
seminar/laborator

Semnătura titularului de proiect  
---

Data avizării în  
departament  
28.09.2020

Director de departament  
Șef lucr. dr. ing. Dușescu Vasile Cristina  
(Semnătură)

Decan  
Conf. dr. ing. Popovici Daniela  
(Semnătură)