

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР
А.В. Бурмистров

« 24 » _____ 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине: Б1.Б.21 «Моделирование химико-технологических процессов»

Направление подготовки: 18.03.01 «Химическая технология»

Профили подготовки: Технология и переработка полимеров: Авторская программа
«Технология природных и искусственных полимеров»

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр

Форма обучения: очная

Институт, факультет: Инженерный химико-технологический институт, Факультет
энергонасыщенных материалов и изделий

Кафедра-разработчик рабочей программы: Процессы и аппараты химической
технологии

Курс, семестр 4, 7

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	0.5
Лабораторные занятия	27	0.75
Самостоятельная работа	54	1.5
Экзамен	45	1.25
Всего	144	4

Казань, 2018 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования №1005 от 11 августа 2016 г. по направлению 18.03.01 «Химическая технология» для профиля подготовки «Технология и переработка полимеров»: Авторская программа «Технология природных и искусственных полимеров», на основании учебного учебного плана набора обучающихся 2016-2018 годов.

Разработчик программы:

доцент каф. ПАХТ



Анашкин И.П.

профессор каф. ПАХТ



Клинов А.В.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры процессов аппаратов химической технологии

протокол от 31.08 2018 г. № _____

Зав. кафедрой



Клинов А.В.

СОГЛАСОВАНО

Протокол заседания методической комиссии инженерного химико-технологического института

от 12.08 2018 г. № _____

Председатель комиссии, профессор



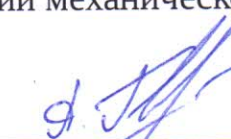
Базотов В.Я.

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии механического факультета

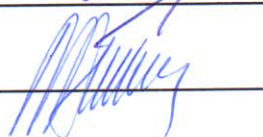
от 17.03 2018 г. № _____

Председатель комиссии, доцент



Гаврилов А.В.

Нач. УМЦ, доцент



Китаева Л.А.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» являются:

- а) освоение методов построения математических моделей основных тепло- и массообменных процессов, а также сопряженных и совмещенных процессов;
- б) изучение алгоритмов идентификации параметров математических моделей и способов проверки их адекватности;
- в) освоение специализированных программно-вычислительных комплексов, позволяющих решать задачи моделирования химико-технологических процессов.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов» относится к базовой части ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» набор знаний, умений, навыков и компетенций, необходимых для выполнения научно-исследовательской и производственно-технологической деятельности.

Для успешного освоения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» студент должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) математика
- б) физика
- в) физическая химия
- г) техническая термодинамика и теплотехника
- д) вычислительная математика

Дисциплина «Моделирование химико-технологических процессов» необходима для успешного прохождения преддипломной практики и выполнении выпускных квалификационных работ по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

В результате освоения дисциплины обучающийся должен обладать:

ПК-2 – готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования.

ПК-4 – способностью принимать конкретные технические решения при разработке

технологических процессов, выбирать технические средства и технологии с учетом экологических последствий их применения.

ПК-8 – готовностью к освоению и эксплуатации вновь вводимого оборудования.

ПК-11 – способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать: а) методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии;

б) основные математические модели описания гидродинамической структуры потоков в аппаратах и физико-химических свойств рабочих агентов;

в) методы идентификации параметров моделей и проверки их адекватности.

2) Уметь: а) составлять математические модели процессов тепломассопереноса, осложненных химической реакцией;

б) проводить идентификацию параметров модели и оценивать ее адекватность;

в) разрабатывать эффективные алгоритмы и программы для решения уравнений математической модели.

3) Владеть: а) навыками работы в программных продуктах, позволяющих решать задачи моделирования химико-технологических процессов.

4. Структура и содержание дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов»

Общая трудоемкость составляет 4 зачетные единицы, 144 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Вид учебной работы (в часах)				Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекции	Семинары (практические занятия, лабораторные практикумы)	Лабораторные работы	СРС	
1	Введение	7	2	-	2	4	Защита лабораторной работы
2	Эмпирический метод построения математического описания	7	2	-	4	6	Защита лабораторной работы

3	Методы и модели определения физико-химических свойств	7	2	-	5	9	Защита лабораторных работ
4	Теоретический метод построения математического описания	7	8	-	12	22	Защита лабораторных работ
5	Специализированные комплексы для моделирования химико-технологических процессов	7	4	-	4	13	Защита лабораторных работ
Форма аттестации							экзамен

5. Содержание лекционных занятий по темам с указанием формируемых компетенций

Использование изданных учебных пособий и электронных версий курса лекций, а также демонстрационного материала в виде слайдов для мультимедийного проектора позволяет существенно ускорить темп чтения лекций и изложить курс за 18 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Введение	2	№ 1 Введение	Предмет, цели и задачи дисциплины, ее роль в подготовке специалистов по направлению (специальности) 18.03.01 «Химическая технология». Понятия модели, моделирования, химико-технологических процессов. Классификация математических моделей. Основные методы построения математических моделей. Программные средства, используемые для решения задач химической	ПК – 2

				технологии.	
2	Эмпирический метод построения математического описания	2	№ 2 Эмпирический метод построения математического описания	Этапы эмпирического метода. Формулирование цели, выбор факторов и переменных состояния объекта исследования, виды уравнений регрессии. Планирование и проведение экспериментов. Статическая обработка результатов и поиск наилучшей формы аппроксимации полученных данных. Достоинства и недостатки эмпирического метода.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
3	Методы и модели определения физико-химических свойств газовых и жидких смесей	2	№ 3 Методы и модели определения физико-химических свойств газовых и жидких смесей	Законы термодинамики и термодинамического равновесия. Расчет условий фазового равновесия в многокомпонентных многофазных системах. Уравнения состояния. Расчет термодинамических свойств на основе избыточных функций.	ПК – 2
4	Теоретический метод построения математического описания	2	№ 4 Исчерпывающее описание процессов химической технологии и типовые модели структуры потоков	Законы сохранения и переноса массы, импульса и энергии. Импульсный ввод индикатора для определения параметров типовых и комбинированных моделей структуры потоков. Идеальные модели: смешения и вытеснения. Реальные модели: диффузионная и ячеечная. Комбинированные модели.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
5		2	№ 5 Моделирование массообменных процессов	Моделирование массообменных процессов с использованием типовых моделей структуры потоков. Моделирование процесса хемосорбции и неизотермической абсорбции. Моделирование процесса ректификации в	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8

				тарельчатой колонне.	
6		2	№ 6 Моделирование теплообменных процессов	Моделирование теплообменных процессов с использованием типовых моделей структуры потоков.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
7		2	№ 7 Моделирование химических реакторов	Законы химической кинетики. Математические модели химических реакторов. Влияние структуры потоков на протекание химических реакций. Влияние переноса массы на протекание химической реакции и селективность.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
8	Специализированные программно-вычислительные комплексы для моделирования	2	№ 8 Моделирование ХТП с использованием программы Aspen Hysys	Основные этапы моделирования. Достоинства и недостатки программы	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8 ПК – 11
9	химико-технологических процессов	2	№ 9 Расчет гидродинамики в аппаратах различной геометрии с использованием комплексов вычислительной гидродинамики	Основные этапы моделирования с использованием комплексов вычислительной гидродинамики на примере Ansys Fluent. Препроцессинг в программе Gambit, решение и постпроцессинг в Ansys Fluent: основы работы. Достоинства и недостатки программы.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8 ПК – 11

6. Содержание семинарских, практических занятий (лабораторного практикума)

Учебным планом практические/семинарские занятия не предусмотрены.

7. Содержание лабораторных занятий

Цели лабораторного практикума заключаются в следующем:

1. Закрепление и углубление знаний, полученных на лекциях.

2. Приобретение и совершенствование навыков составления математических моделей.

Освоение методов обработки опытных данных. Освоение методов идентификации параметров математических моделей.

3. Овладение навыками работы в программных продуктах, позволяющих решать задачи моделирования химико-технологических процессов.

Лабораторные работы проводятся в помещении учебных лабораторий кафедры ПАХТ на компьютерах с использованием специализированных программных продуктов, имеющихся в ФГБОУ ВО «КНИТУ».

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Наименование лабораторной работы	Формируемые компетенции
1	Введение	2	№ 1 Основы математического пакета Mathcad.	ПК – 2
2	Эмпирический метод построения математического описания	2	№ 2 Функции регрессии. Численное решение систем алгебраических уравнений	ПК – 2
3		2	№ 3 Численное решение дифференциальных уравнений	ПК – 2
4	Методы и модели определения физико-химических свойств газовых и жидких смесей	2	№ 4 Определение условий фазовых равновесий пар-жидкость идеальных растворов	ПК – 2
5		3	№ 5 Определение коэффициентов активности по экспериментальным данным фазового равновесия пар-жидкость	ПК – 2
6	Теоретический метод построения математического описания	6	№ 6 Моделирование реакций в аппаратах с различной структурой потока	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
7		6	№ 7 Проектный и поверочный расчет абсорбера	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
8	Специализированные программно-вычислительные комплексы для моделирования химико-технологических процессов	4	№ 8 Моделирование гидродинамики в аппаратах простой конструкции в двумерной постановке задачи в вычислительном комплексе Ansys Fluent	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8 ПК – 11

8. Самостоятельная работа студента

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
-------	---	------	-----------	-------------------------

1	Основы математического пакета Mathcad. Функции регрессии. Численное решение систем алгебраических уравнений	4	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2
2	Численное решение дифференциальных уравнений	6	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2
3	Определение условий фазовых равновесий пар-жидкость идеальных растворов	4	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2
4	Определение коэффициентов активности по экспериментальным данным фазового равновесия пар-жидкость	5	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2
5	Моделирование реакций в аппаратах с различной структурой потока	11	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2
6	Проектный и поверочный расчет абсорбера	11	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8
7	Моделирование гидродинамики в аппаратах простой конструкции в двумерной постановке задачи в вычислительном комплексе Ansys Fluent	13	Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней.	ПК – 2 ПК – 4 ПК – 8 ПК – 11

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний

При оценке результатов деятельности студентов в рамках дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» используется рейтинговая система. Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в положении о рейтинговой системе.

При расчете рейтинга R за семестр каждая лабораторная работа студента оценивается по пятибалльной шкале (возможны дробные оценки, например, 3.8 или 4.5), работа считается зачтенной, если изначальный балл ≥ 3 . В случае несвоевременной сдачи работы может вводиться понижающий коэффициент 0.8. Для допуска к экзамену текущий рейтинг студента должен составить от 36 до 60 баллов. Экзамен также оценивается по пятибалльной шкале.

Текущий рейтинг студента рассчитывается следующим образом:

$$R_{\text{тек}} = \frac{12}{n} \sum_{i=1}^n B_i$$

где B_i – средний балл студента по i -ой лабораторной работе; n – количество лабораторных

работ.

Определение промежуточного рейтинга и оценки по дисциплине

При положительной сдаче экзамена студент может набрать $R_э$ от 24 до 40 баллов. При этом каждый вопрос экзамена также оценивается пятибалльной шкале. Балл вопроса учитывается при расчете $R_э$, если он ≥ 3 .

$$R_э = \frac{8}{B} \sum_{i=1}^B B_{эi}$$

где $B_э$ – балл за соответствующий экзаменационный вопрос, B – количество вопросов в билете.

Рейтинг по дисциплине $R_{дис}$ находится суммированием баллов текущего $R_{тек}$ и экзаменационного $R_э$ рейтингов. Перевод итогового рейтинга в традиционную шкалу оценок осуществляется следующим образом:

$0 \leq R_{дис} \leq 60$ – неудовлетворительно;

$60 \leq R_{дис} \leq 73$ – удовлетворительно;

$73 \leq R_{дис} \leq 87$ – хорошо;

$87 \leq R_{дис} \leq 100$ – отлично.

Пример расчета рейтинга студента

Допустим студент получил следующие оценки за лабораторные работы и на каждый из вопросов экзаменационного билета:

	Лабораторные работы								Экзамен		
Номер лабораторной работы (экзаменационного вопроса)	1	2	3	4	5	6	7	8	1	2	3
оценка	4	5	4	4.1	3	3.5	3.7	4	4.2	4	4.6

Текущий рейтинг:

$$R_{тек} = \frac{12}{8} (4+5+4+4.1+3+3.5+3.7+4) = 46.95$$

Рейтинг за экзамен:

$$R_э = \frac{8}{3} (4.2+4+4.6) = 34.13$$

$R_{дис} = 46.95 + 34.13 = 81.08$, что соответствует оценке «хорошо»

Шкала оценивания:

Вид деятельности	Пороговый	Продвинутый	Превосходный
Лабораторные работы	36 – 44	44 – 52	52 – 60
Экзамен	24 – 29	29 – 35	35 – 40
Итого	60 – 73	73 – 87	87 – 100

10. Оценочные средства для определения результатов освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной итоговой) аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

11. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

11.1 Основная литература

При изучении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу.

№ п/п	Основные источники информации	Кол-во экз.
1	Клинов, А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. – Казань: Изд-во КГТУ, 2009. – 136 с.	ЭБС «Лань» http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=13289 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

11.2 Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников рекомендуется использовать следующую литературу:

№ п/п	Дополнительные источники информации	Кол-во экз.
1	Разинов, А.И. Теоретические основы процессов химической технологии: учебное пособие / А.И.Разинов, О.В.Маминов, Г.С.Дьяконов. – Казань: Изд-во КГТУ, 2005. – 362с.	236 экз. в УНИЦ КНИТУ
2	Разинов, А.И. Гидромеханические и теплообменные процессы и аппараты химической технологии: учебное пособие / А.И. Разинов, О.В. Маминаев, Г.С. Дьяконов. – Казань: Изд-во КГТУ, 2007. – 212 с.	416 экз. в УНИЦ КНИТУ
3	Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учебное пособие для ВУЗов / Т.Н.	200 экз. в УНИЦ КНИТУ

	Гартман, Д.В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.	
4	Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / А.Ю. Закгейм. – М.: Логос, 2012. – 304 с.	1 экз. в УНИЦ КНИТУ
5	Клинов, А.В. Лабораторный практикум по математическому моделированию химико-технологических процессов: учебное пособие / А.В. Клинов, А.В. Малыгин. – Казань: Изд-во КГТУ, 2011. – 100 с.	ЭБС «Лань» http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=13285 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

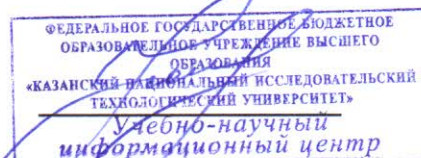
11.3 Электронные источники информации

При изучении дисциплины рекомендуется использование следующих электронных источников информации:

При изучении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» рекомендуется использование электронных источников информации:

1. Учебный портал ПАХТ КНИТУ – <http://chemen.ru>
2. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ – <http://ruslan.kstu.ru/>
3. ЭБС «Библиотех» - <https://knitu.bibliotech.ru/>
4. ЭБС «Рукопт» - <http://rucont.ru/>
5. ЭБС «Лань» - <http://e.lanbook.com/>
6. ЭБС «КнигаФонд» - <http://www.knigafund.ru/>
7. ЭБС «Консультант студента» - <http://www.studentlibrary.ru>

Согласовано:
Зав. сектором ОКУФ



12. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лекционные занятия:

- а) комплект электронных презентаций/слайдов,
- б) аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук),

Лабораторные работы:

Лабораторные работы:

а) компьютерный класс с персональными компьютерами, на которых установлено необходимое программное обеспечение.

Прочее:

а) рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет,

б) рабочие места студентов, оснащенные компьютерами с доступом в Интернет, предназначенные для работы в электронной образовательной среде.

13. Образовательные технологии

Весь лекционный курс обеспечен учебными пособиями, раздаточным материалом и комплектом слайдов, что позволяет вести активный диалог со студентами. Кроме того, курс лекций снабжен видеоматериалами с обучающими роликами работе в специализированных программно-вычислительных комплексах для моделирования химико-технологических процессов. При проведении лабораторных занятий по сложным темам дисциплины организуются дискуссии между студентами.

Лабораторный практикум изложен в учебном пособии, а также на сайте <https://chemen.ru/>, кроме того, студенты получают ссылки на видеоуроки по работе в специализированных программно-вычислительных комплексах, что позволяет студентам самостоятельно готовиться к работам, проводить обработку результатов и оформление отчетов.

В случае возникновения вопросов при подготовке к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней вне аудиторных часов студент может обратиться к преподавателю удаленно по электронной почте.

В соответствии с учебным планом занятия в интерактивной форме проводятся в объеме 27 часов аудиторных занятий.

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов»

(наименование дисциплины)

По направлению 18.03.01 «Химическая технология»

(шифр)

(название)

для профиля подготовки: Технология и переработка полимеров: Авторская программа «Технология природных и искусственных полимеров»
для набора обучающихся 2019 г.

Форма обучения очная

пересмотрена на заседании кафедры ПАХТ

(наименование кафедры)

Дата переутверждения РП	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП доц. Анашкин И.П.	Подпись заведующего кафедрой ПАХТ проф. Клинов А.В.	Подпись начальника УМЦ доц. Китаева Л.А.
Протокол заседания кафедры №7 от 03.07.2019	Есть*	Нет			

* Пункт Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Стандартная справочная база данных NIST <https://webbook.nist.gov/chemistry/> .
2. База данных CoolProp <http://www.coolprop.org/v4/index.html>.

Дополнение в пункт 12: Лицензированное и свободно распространяемое программное обеспечение, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов»:

1. MS Office
2. Mathcad Education-University Edition
3. Аскон Компас 3Dv14