

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.В.ОД.8 Моделирование химико-технологических процессов

Направление подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»
(шифр) (наименование)

Профиль подготовки Конструирование и производство изделий из композиционных материалов

Квалификация (степень) выпускника БАКАЛАВР

Форма обучения ЗАОЧНАЯ

Институт, факультет ИХТИ, ФЭМИ

Кафедра-разработчик рабочей программы «Процессы и аппараты химической технологии»

Курс 4

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	6	0,17
Практические занятия		
Семинарские занятия		
Лабораторные занятия	8	0,22
Самостоятельная работа	121	3,36
Форма аттестации	экзамен, 9 часов	0,25
Всего	144	4

Казань, 2018 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования №1331 от 12.11.2015
(номер, дата утверждения)

по направлению 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»
(шифр) (наименование)
по профилю Конструирование и производство изделий из композиционных материалов
на основании учебного плана для начала подготовки 2016-2018 гг.

Примерная программа по дисциплине отсутствует.

Разработчик программы:

доцент каф. ПАХТ
(должность)


(подпись)

Минибаева Л.Р.
(Ф.И.О.)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ПАХТ, протокол от «31» августа 2018 г. № 11.

Зав. кафедрой ПАХТ


(подпись)

Клинов А.В.
(Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО

Протокол заседания методической комиссии Инженерного химико-технологического института от «12» 09 2018 г. № 8.

Председатель комиссии, профессор


(подпись)

Базотов В.Я.
(Ф.И.О.)

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии механического факультета от «17» 09 2018 г. № 8.

Председатель комиссии, доцент


(подпись)

Гаврилов А.В.
(Ф.И.О.)

Нач. УМЦ, доцент


(подпись)

Китаева Л.А.
(Ф.И.О.)

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 вариативной части ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов» набор знаний, умений, навыков и компетенций, необходимых для выполнения научно-исследовательской и расчетно-аналитической видов деятельности.

Для успешного освоения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» бакалавр по направлению подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- 1) Б1.Б.4 Математика,*
- 2) Б1.Б.9 Информатика и информационно-коммуникационные технологии,*
- 3) Б1.Б.5 Физика,*
- 4) Б1.В.ОД.1 Вычислительная математика,*
- 5) Б1.В.ОД.4 Техническая термодинамика и теплотехника,*
- 6) Б1.В.ОД.3 Физическая химия.*

Знания, полученные при изучении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» могут быть использованы при прохождении практик (*производственной, преддипломной*) и выполнении выпускных квалификационных работ по направлению подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

ПК-1 – Способностью использовать современные информационно-коммуникационные технологии, глобальные информационные ресурсы в научно-

исследовательской и расчетно-аналитической деятельности в области материаловедения и технологии материалов

ПК-3 – Готовностью использовать методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов

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 дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Курс	Виды учебной работы (в часах)				Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекции	Семинар (Практические занятия)	Лабораторные работы	СРС	
1	Методы моделирования	4	1	—	2	12	Собеседование при защите лабораторной работы 1 и контрольной работы
2	Принципы построения математических моделей	4	1	—	2	16	Собеседование при защите лабораторной ра-

							<i>боты 2 и контрольной работы</i>
3	<i>Эмпирический метод построения математического описания</i>	4	1	–	2	28	<i>Собеседование при защите лабораторной работы 3 и контрольной работы</i>
4	<i>Теоретический метод построения математического описания</i>	4	3	–	2	65	<i>Собеседование при защите лабораторной работы 4 и контрольной работы</i>
	<i>Итого:</i>		6		8	121	
Форма аттестации							Экзамен

5. Содержание лекционных занятий по темам с указанием формируемых компетенций и используемых инновационных образовательных технологий.

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 6 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	<i>Методы моделирования</i>	1	<i>Методы моделирования</i>	<i>Понятия модели, моделирования, химико-технологических процессов. Классификация моделей. Физическое и математическое моделирование.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
2	<i>Принципы построения математических моделей</i>	1	<i>Принципы построения математических моделей</i>	<i>Физическое описание природы объекта. Составление математического описания объекта. Блочный принцип построения математических моделей. Выбор метода решения и реализация его в виде алгоритма решения и моделирующей программы. Программные средства, используемые для решения задач химической технологии.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
3	<i>Эмпирический метод построения математического описания</i>	1	<i>Эмпирический метод построения математического описания</i>	<i>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.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
4	<i>Теоретический метод</i>	3	<i>Методы и модели оп-</i>	<i>Законы термодинамики и термодинамического равновесия. Расчет условий фазового</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>

	построения математического описания		ределения физико-химических свойств газовых и жидких смесей. Исчерпывающее описание процессов химической технологии и типовые модели структуры потоков. Моделирование тепло- и массообменных процессов. Моделирование химических реакторов.	равновесия в многокомпонентных многофазных системах. Уравнения состояния. Расчет термодинамических свойств на основе избыточных функций. 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. Моделирование тепло- и массообменных процессов с использованием типовых моделей структуры потоков. Моделирование процесса хемосорбции и неизотермической абсорбции. Моделирование процесса ректификации в тарельчатой колонне. Законы химической кинетики. Математические модели химических реакторов. Влияние структуры потоков на протекание химических реакций. Влияние переноса массы на протекание химической реакции и селективность.	
--	-------------------------------------	--	---	--	--

6. Содержание практических/семинарских занятий

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

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Наименование лабораторной работы	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Методы моделирования	2	Основы математического пакета	Знакомство с пользовательским интерфейсом математического пакета Mathcad. Изучение способов задания различного типа	ПК-1 ПК-3

			<i>Mathcad</i>	<i>переменных и функций. Освоение приемов работы с графическим и текстовым редакторами.</i>	
2	<i>Принципы построения математических моделей</i>	2	<i>Численное решение алгебраических и дифференциальных уравнений</i>	<i>Знакомство с процедурами численного решения алгебраических уравнений и систем уравнений, реализованных в математическом пакете Mathcad. Знакомство с возможностями математического пакета Mathcad при решении дифференциальных уравнений в различных вариантах постановки задачи (задача Коши, краевая задача). Символьные вычисления.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
3	<i>Эмпирический метод построения математического описания</i>	2	<i>Регрессионный анализ, методы аппроксимации</i>	<i>Знакомство с возможностями математического пакета Mathcad при решении задач регрессионного анализа. Линейная, полиномиальная, нелинейные, обобщенная линейная и обобщенная нелинейная регрессии.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
4	<i>Теоретический метод построения математического описания</i>	2	<i>Моделирование реакций в аппаратах с различной структурой потока</i>	<i>Составление математических моделей протекающих в аппарате химических реакций для различных моделей структуры потока. Проведение моделирования работы реактора на основе полученных моделей. Графическое представление результатов оценки эффективности для различных вариантов аппарата (в виде зависимости селективности и степени превращения от времени пребывания в аппарате).</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>

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

8. Самостоятельная работа бакалавра

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
1	<i>Основы математического пакета Mathcad. Численное решение систем алгебраических и дифференциальных уравнений</i>	28	<i>Подготовка к выполнению лабораторных работ и сдаче отчета по ней. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
2	<i>Регрессионный анализ, методы аппроксимации</i>	28	<i>Подготовка к выполнению лабораторной работы и сдаче отчета по ней. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
3	<i>Методы и модели определения физико-химических</i>	10	<i>Изучение законов термодинамики и термодинамического равновесия. Определение условий</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>

	<i>свойств газовых и жидких смесей</i>		<i>фазовых равновесий пар – жидкость бинарной идеальной смеси при различных термодинамических условия ($P=\text{const}$; $T=\text{const}$) на основе экспериментальных данных по давлению насыщенных паров чистых компонентов. Определение на основе данных по фазовому равновесию пар – жидкость бинарных смесей коэффициентов активности, используя уравнение Маргулеса. На основе полученных параметров уравнения Маргулеса и закона Рауля проведение моделирования фазового равновесия бинарной смеси. Уравнения состояния. Расчет термодинамических свойств на основе избыточных функций. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	
4	<i>Исчерпывающее описание процессов химической технологии и типовые модели структуры потоков</i>	8	<i>Импульсный ввод индикатора для определения параметров комбинированных моделей структуры потоков. Комбинированные модели. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
5	<i>Моделирование химических реакторов</i>	11	<i>Влияние структуры потоков на протекание химических реакций. Влияние переноса массы на протекание химической реакции и селективность. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
6	<i>Моделирование реакций в аппаратах с различной структурой потока</i>	12	<i>Подготовка к выполнению лабораторной работы и сдаче отчета по ней. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
7	<i>Моделирование теплообменных процессов</i>	10	<i>Моделирование теплообменных процессов с использованием моделей идеального смешения, диффузионной и ячеечной моделей. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>
8	<i>Моделирование массообменных процессов</i>	14	<i>Моделирование массообменных процессов с использованием моделей идеального смешения, диффузионной и ячеечной моделей. Моделирование процесса хемосорбции и неизотермической абсорбции. Моделирование процесса ректификации в тарельчатой колонне. Выполнение контрольной работы и подготовка к ее сдаче.</i>	<i>ПК-1 ПК-3</i>

9. **Использование рейтинговой системы оценки знаний.**

При оценке результатов деятельности студентов в рамках дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» используется рейтинговая система, соответствующая «Положению о балльно-рейтинговой системе оценки знаний

студентов и обеспечения качества учебного процесса». Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля.

При изучении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» предусматривается экзамен и выполнение семи лабораторных работ. За эти контрольные точки студент может получить следующее минимальное и максимальное количество баллов:

Оценочные средства	Количество	Min, баллов	Max, баллов
Лабораторная работа	4	24	40
Контрольная работа	1	12	20
Экзамен	1	24	40
Итого:		60	100

10. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

10.1 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. Мухометзянова. – Казань: Изд-во КГТУ, 2009. – 144 с.	ЭБС «Лань» http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=13289 Доступ из любой точки Интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

10.2 Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников информации 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. Маминов, 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	200 экз. в УНИЦ КНИТУ

	пособие для ВУЗов / Т.Н. 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 КИТУ, 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

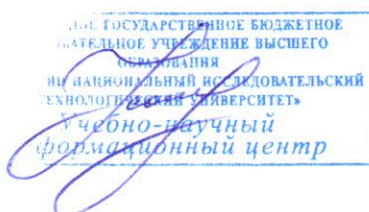
10.3 Электронные источники информации

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



Усольцева И. И.

11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Перечень компетенций с указанием уровней их формирования в процессе освоения дисциплины, описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания, материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков приведены в Фонде оценочных средств по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов», который является составной частью рабочей программы.

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Лекционные занятия:

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

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 наглядными примерами моделирования химико-технологических процессов. Перед выполнением лабораторных работ проводится дискуссия по обсуждению методов решения поставленных задач, где роль преподавателя заключается в корректировке или уточнении методов, предлагаемых студентами. Лабораторные работы, проводимые в интерактивных формах, при изучении дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов» составляют 4 часа аудиторных занятий, а лекции – 2 часа, требуемых учебным планом.

Лабораторный практикум изложен в учебном пособии, а также на сайте <http://chemen.ru>.

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

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов»

(наименование дисциплины)

По направлению 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»
(шифр) (название)

для профиля подготовки: Конструирование и производство изделий из композиционных материалов

для набора обучающихся 2019 г.

Форма обучения заочная

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