

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Цифровизация химико-технологических аппаратов (МКЭ)

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки :

Цифровая химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А. С. Князев

Председатель УМК

Л. Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

ПК-2. Способен к реализации и управлению химическими и биомедицинскими процессами на базе математического прогнозирования и моделирования.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.3. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК-1.4. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

ИОПК 2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.

ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.

ИПК 2.1. Применяет методы математического прогнозирования и управления отдельными стадиями химико-технологических процессов.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить углубленное понимание принципов использования современных CAE-систем применительно к механике жидкости и газа;

– Освоить эффективные приемы работы с программным комплексом ANSYS CFX.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам:

- Химическая технология;
- Органическая химия;
- Неорганическая химия;
- Физическая химия;

- Актуальные задачи современной химии;
- Основы анализа методом конечных элементов

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Механики жидкости и газа (МЖГ):

Основные уравнения движения жидкости и газа, граничные условия применительно к турбулентным течениям и теплообмену.

Тема 2. Моделирования турбулентных течений применительно к различным типам задач.

Математические уравнения, описывающие эффекты турбулентности. Модели турбулентности, применяемые в расчетах различных задач.

Тема 3. Построение расчетных сеток для задач МЖГ с учетом турбулентности и теплообмена с использованием оболочки ANSYS Workbench

Тема 4. Моделирование сопряженного теплообмена жидкость/твердое тело в рамках турбулентной постановки движения жидкости/ газа.

Построение домена для твердого тела. Задание параметров передачи тепла в твердотельной области. Организация расчета с учетом поверхности раздела жидкость/твердое тело.

Тема 5. Механика жидкости и газа (МЖГ):

Основные уравнения движения жидкости и газа, граничные условия применительно многофазным многокомпонентным средам. Лагранжев и эйлеров подход моделирования многофазных сред

Тема 6. Учет химических реакций при разработке модели

Моделирование движения жидкости и газа в случае наличия химических реакций между компонентами. Многофазные реакции.

Тема 7. Практическая работа – решение практических задач, сравнение решения с аналитическим или полученным иным способом:

– моделирование химических реакций/ массообменных процессов различными способами в рамках однофазной среды

– моделирование химических реакций/ массообменных процессов в рамках многофазного подхода к описанию движения среды

Тема 8. Использование подвижных сеток для решения задач

Решение задач с учетом деформации сетки. Основные предположения, приводящие к деформации расчетной области. Задание параметров движения узлов расчетной сетки

Тема 9. Практическая работа – решение практических задач, связанных с применением подвижных и деформируемых сеток

- моделирование работы запирающего устройства шарового типа или «бабочка»
- моделирование расчета устройств с перестроением сетки для получения более качественного решения

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и практических занятий, проведения занятий с презентациями студентов по индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в третьем семестре проводится в устной форме в виде ответа на билет.

Билет состоит из двух теоретических вопросов, проверяющих ИОПК 1.3., ИОПК 1.4., ИОПК 2.2., ИОПК 3.1., ИОПК 3.2., ИПК 2.1. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Объяснить различия ламинарного и турбулентного течения жидкости. Методы определения режима течения жидкости.
2. Каковы основные механизмы возникновения турбулентности в потоке?
3. Какие значения для числа Рейнольдса соответствуют переходу к турбулентному режиму течения в сжимаемой и несжимаемой жидкости? Расчетные формулы.
4. Какие основные модели турбулентности вы знаете? Различия и примеры применения.
5. В чем заключаются принципы расчета турбулентных потоков без привлечения моделей турбулентности?
6. Ограничения по использованию моделей турбулентности в различных задачах.
7. В чем заключается принцип задания граничных условий в условиях сопряженного теплообмена?
8. В чем заключаются особенности построения деформируемых расчетных сеток для решения задач МЖГ?
9. Как бы вы описали принцип решения задач с учетом сильных деформаций сеток.

Результаты ответа определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы билета, содержание ответа изложено логично и последовательно; существенные фактические ошибки отсутствуют; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов. Не допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если даны не полные, но правильные по сути составляющей ответы на все вопросы; содержание ответа изложено логично и последовательно; присутствуют несущественные фактические ошибки; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать правильные ответы на все уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если на большинство вопросов даны не полные, но правильные по сути составляющей ответы; содержание ответа

изложено логично и последовательно; присутствуют несущественные фактические ошибки; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать правильные ответы на большую часть уточняющих и дополнительных вопросов экзаменатора по теме вопросов. Имеются ошибки и погрешности, имеющие принципиальный характер.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя. «Неудовлетворительно» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкости Т.1. – М.МИР, 1991. - 502с.

- Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкости Т.2. – М.МИР, 1991. - 552с.

- Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М., 1950. – 640 с.

- Зенкевич О. Fluid dynamics Theory, Computation, and Numerical Simulation. / Пер. с англ. – М.: Мир, 1975. – 536 с.

- Mac Cormack R.W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. AIAA Paper, 1969, No 69-354

- Толстых А.И. Компактные разностные схемы и их применение в задачах аэрогидродинамики. М.: Наука, 1990. 230с

- Brown V.P., Argrow B.M. Two-dimensional shock tube flow for dense gases // J. Fluid Mech., 1997, vol. 349, pp. 95-115

- Ландау Л.Д., Лифшиц, Е.М., Гидродинамика. М. Физматлит, 2001, 731с.

- Н.К., Malalasekera W. An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method. Longman Scientific & Technical. Essex, England. 1995. 257pp.

- ANSYS Advantage. №11 Энергетическое машиностроение. Изд-во: ЗАО «ЕМТ Р» 2009, 47с

- ANSYS Advantage. № 8 Аэрокосмическая отрасль. Изд-во: ЗАО «ЕМТ Р» 2008, 47с

б) дополнительная литература:

- Красновский Е.Е. Решение прикладных задач термомеханики с применением программного комплекса ANSYS МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008, 88с.

в) ресурсы сети Интернет:

– <http://elibrary.ru>

– <https://login.webofknowledge.com/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

- программный комплекс вычислительной гидродинамики ANSYS CFX;

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ –
<http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для выполнения практических занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации, а также персональными компьютерами с установленным пакетом MS Office (MS Word, MS Excel, MS Visio), программным комплексом вычислительной гидродинамики ANSYS CFX и доступом в интернет для выполнения практических заданий.

15. Информация о разработчиках

1. Бутов Владимир Григорьевич, д-р. физ-мат. наук, ст. научн. сотр, зав. отделом НИИПММ ТГУ

2. Солоненко Виктор Александрович, канд. физ-мат. наук, зав лаб. НИИПММ ТГУ

3. Ящук Алексей Александрович, канд. физ-мат. наук, ст. научн. сотр. НИИПММ ТГУ