

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

Цифровые методы расчета производств полимерных и композиционных материалов

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 знания и получить навыки моделирования процессов получения полимерных материалов с использованием современных вычислительных комплексов;

– Освоить знания и навыки, необходимые для успешного математического моделирования сложных непрерывных и периодических процессов синтеза полимерных материалов;

– Освоить навыки подбора необходимого технологического оборудования.

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:

– Органическая химия

- Физическая химия
- Актуальные задачи современной химии;
- Технология получения полимеров и композиционных материалов
- Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;
- Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen

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. Теоретические основы

Общие подходы к моделированию процессов получения полимерных и композиционных материалов. Используемые программные продукты. Моделирование кинетики реакций. Методы прогнозирования свойств и подбора состава композиционных материалов.

Тема 2. Aspen Physical Property System – Ресурс термодинамической информации NIST TDE, Система регрессии данных (Data Regression System DRS)

Использование ресурса термодинамической информации NIST ThermoData Engine (TDE) и системы регрессии данных (DRS) для определения параметров моделирования чистых компонентов и смесей исходя из опытных данных, таких как: коэффициенты бинарного взаимодействия для расчета равновесия пар / жидкость, жидкость / жидкость, плотность, теплоемкость, вязкость и. т. д. применительно к Aspen Plus

Тема 3. Модуль Aspen Polymers

Обзор модуля. Используемые термодинамические пакеты и базы данных. Аппаратурное оформление процессов. Характеризация полимеров. Подходы к моделированию твердых веществ.

Тема 4. Стандартные процессы

Обзор и практический расчет основных промышленных полимеризационных процессов с использованием модуля Aspen Polymers.

Тема 5. Подходы к моделированию композиционных материалов

Понятие композитов и сферы применения. Прогнозирование свойств в зависимости от состава композита. Программные продукты моделирования свойств композитных материалов. Процессы получения и используемое оборудование. Специфика подбора технологического оборудования и параметров процессов получения композитов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и практических занятий 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 защиты индивидуального задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории.

Индивидуальное задание выполняется по теме научной работы студента и проверяет ИОПК 1.3., ИОПК 1.4., ИОПК2.2., ИОПК 3.1., ИОПК 3.2., ИПК 2.1.

Презентация должна включать расчетную модель процесса получения полимерного материала или модель расчета свойств и подбора состава композитного материала. Доклад должен включать обоснование использованного термодинамического пакета, результаты регрессионного анализа (если проводился) и алгоритм расчета процесса.

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

Оценка «отлично» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы; 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. Допускаются ошибки и погрешности, имеющие принципиального характера.

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

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:

а) основная литература:

- Основы проектирования химических производств: Учебник для вузов /Под ред. А. И. Михайличенко. – М.: ИКЦ «Академкнига» 2010. – 371 с.

- ФЗ 116 «О промышленной безопасности опасных производственных объектов»;

- Постановление правительства Российской Федерации «О составе разделов проектной документации и требованиям к их содержанию» № 87 от 16.02.2008 г.

б) дополнительная литература:
- Сопутствующие нормативно-технические документы (актуальные на год реализации)

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);
- Компас 3d/Autocad;
- Старт-Проф Семейство программ для проектирования и расчета прочности и жесткости трубопроводов различного назначения;
- ПАССАТ Программа «ПАССАТ» предназначена для расчета прочности и устойчивости сосудов, аппаратов и их элементов с целью оценки несущей способности в рабочих условиях, а также в условиях испытаний и монтажа;
- Гидросистема Программа для теплогидравлического расчёта трубопроводных систем и выбора диаметров;
- СТАРС Программа расчёта теплофизических свойств веществ и фазовых равновесий;
- ПВ-БЕЗОПАСНОСТЬ Программ расчетов в соответствии с ФНП в области промышленной безопасности;
– 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), доступом в интернет для выполнения практических заданий, установленным программным обеспечением AspenONE Engineering.

15. Информация о разработчиках

1. Норин Владислав Вадимович, ассистент кафедры неорганической химии НИ ТГУ, ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»

2. Решетников Дмитрий Михайлович, начальник отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»