

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
И.о. декана
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

Инженер-исследователь

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А. С. Князев

Председатель УМК
В.В. Шелковников

Томск – 2024

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-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:

РООПК-1.3 Умеет применять существующие и разрабатывать новые методики получения и характеристики веществ и материалов

РООПК-1.4 Умеет использовать современное научное оборудование, расчетно-теоретические методы и профессиональное программное обеспечение для решения задач в избранной области химии или смежных наук

РООПК-3.1 Знает стандартные и оригинальные программные продукты, современные вычислительные методы

РООПК-3.2 Умеет работать с различными программными продуктами, используемыми в профессиональной области, эффективно использовать их функциональность для обработки данных, моделирования, анализа и визуализации информации при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

РОПК-2.1 Знает современные технологии производства химической продукции

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 «Дисциплины (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.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в третьем семестре проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух вопросов. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в среде электронного обучения iDO - <https://lms.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 B.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/>
 - Общероссийская Сеть КонсультантПлюс Справочная правовая система.
<http://www.consultant.ru>

13. Перечень информационных технологий

- 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 On-eNote, 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

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

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.

Аудитории для проведения индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

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

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

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