

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

Цифровые методы расчета производств полимерных и композиционных материалов

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 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 «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:

– 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.

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 в виде защиты индивидуального задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории. 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:

– 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>

– 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 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

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), доступом в интернет для выполнения практических заданий, установленным программным обеспечением AspenONE Engineering (ауд. 405 или 402 корпуса № 6 НИ ТГУ).

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

Норин Владислав Вадимович, директор НОЦ «ГПН-ТГУ», ассистент кафедры неорганической химии НИ ТГУ, ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»;

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