

| Наименование модулей и тем программы | Содержание учебного материала, практические занятия, самостоятельная учебная работа обучающихся | Объем, а.ч |
|--|--|------------|
| 1 | 2 | 3 |
| Модуль 1. Основные понятия математического моделирования химических процессов | | |
| Тема 1.1. Введение | Содержание Особенности компьютерного моделирования химических процессов в области CFD (вычислительной гидродинамики). Виды моделей в программном комплексе Ansys Fluent | 4 |
| Тема 1.2. Законы термодинамики | Содержание Три закона термодинамики, понятие теплопроводности, теплоемкости, энтальпии образования соединений. Понятие идеального газа. | 4 |
| Тема 1.3. Уравнение теплопереноса | Содержание Математическое моделирование теплопереноса. Конвекция и диффузия в ламинарных течениях в Ansys Fluent | 4 |
| Тема 1.4. Уравнение массопереноса | Содержание Моделирование смеси химических веществ. Понятие подготовленных и неподготовленных смесей | 4 |
| | Практическая работа Использование ПК Ansys Fluent для моделирования смеси, задание состава смеси, использование базы данных Ansys Fluent, добавление новых веществ, задание физических свойств смеси и отдельных компонентов | 4 |
| Промежуточная аттестация | | - |
| Итого по модулю | | 20 |
| Модуль 2. Химическая кинетика | | |
| Тема 2.1. Уравнения химических реакций | Содержание Законы скорости и порядок реакции. Понятие скоростей прямой и обратной реакции. Закон действующих масс. Концепция элементарных реакций. | 4 |
| | Практическая работа Получение математической модели для заданной химической кинетики в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений | 4 |
| Тема 2.2. Механизмы химических реакций | Содержание Характеристика механизмов реакции. Константы скорости реакции, жесткие системы уравнений и подходы к их решению в Ansys Fluent. | 4 |
| | Практическая работа Расчет реакции дегидрирования этана в проточном трубчатом реакторе в осесимметричной постановке | 4 |
| Промежуточная аттестация | | - |
| Итого по модулю | | 16 |
| Модуль 3. Кинетическая теория газов | | |

| | | |
|---|---|-----------|
| Тема 3.1. Моделирование процесса диффузии в газах | Содержание Определение диффузии. Диффузионные члены в уравнениях массо- теплопереноса. Диффузия под действием давления. Выбор модели в ПК Ansys Fluent. | 4 |
| | Практическая работа Проведение расчета диффузии водорода в метане, сравнение различных моделей. | 4 |
| | Самостоятельная работа Рассчитать диффузию водорода, изучить влияние различных параметров задачи на процесс | 2 |
| Тема 3.2. Потенциал Леннарда-Джонса | Содержание Потенциал межмолекулярного взаимодействия, интеграл столкновений, задание параметров в ПК Ansys Fluent | 4 |
| Промежуточная аттестация | | - |
| Итого по модулю | | 14 |
| Модуль 4. Моделирование химической кинетики в ПК Ansys Fluent | | |
| Тема 4.1. Постановка задачи моделирования химических процессов в ПК Ansys Fluent. Нестационарные решения | Содержание Основные требования к расчетной области и сетки, понятие времени контакта, масштаба процессов, устойчивости и числа Куранта. Граничные и начальные условия. | 4 |
| | Практическая работа Создание проекта для задачи моделирования пиролиза этана. | 4 |
| | Самостоятельная работа Загрузить расчетную сетку в проект Ansys Fluent, создать смесь, задать свойства компонентов, химические реакции, произвести расчет, построить графики. | 2 |
| Тема 4.2. Методы упрощения моделирования химической кинетики. | Содержание Основные сложности изученного подхода, пути их решения. Обзор моделей горения. Использование пакета Chemkin | 4 |
| | Практическая работа Моделирование процесса газовой горелки | 4 |
| | Самостоятельная работа Рассчитать процесс горения в Ansys Fluent | 2 |
| Промежуточная аттестация | | - |
| Итого по модулю | | 20 |
| Итоговая аттестация | | 2 |
| Итого | | 72 |