

İ.T.Ü.
DERS KATALOG FORMU
(COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı		Course Name				
Kimya Mühendisliğinde Matematiksel Modelleme		Mathematical Modeling in Chemical Engineering				
Kodu (Code)	Yarıyılı (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Uygulaması, Saat/Hafta (Course Implementation, Hours/Week)		
				Ders (Theoretical)	Uygulama (Tutorial)	Laboratuvar (Laboratory)
KMM342E	6	3	6.5	3	1	0
Bölüm / Program (Department/Program)	Kimya Mühendisliği Chemical Engineering					
Dersin Türü (Course Type)	Zorunlu (Compulsory)		Zorunlu (Compulsory)		Zorunlu (Compulsory)	
Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)	MAT201 veya MAT201E, veya MAT210 veya MAT210E (MAT201 or MAT201E), (MAT210 or MAT210E)					
Dersin mesleki bileşene katkısı, % (Course Category by Content, %)	Temel Bilim (Basic Sciences)	Temel Mühendislik (Engineering Science)	Mühendislik Tasarım (Engineering Design)	İnsan ve Toplum Bilim (General Education)		
	0	100	0	0		
Dersin İçeriği (Course Description)	<p>Modellemenin temel kavramları ve temel kanunlar. Matematiksel model eşitliklerin türetimi ve sınır şartlar. Model hiyerarşisi. Kimya mühendisliğinde matematiksel modelleme örnekleri. Adi diferansiyel denklem içeren modellerin çözüm teknikleri. Adi diferansiyel denklemlerin sayısal çözümleri. Kısmi diferansiyel denklem içeren modellerin çözüm teknikleri.</p> <p>Basics of modeling and conservation laws. Derivation of the mathematical models and boundary/initial conditions. Model hierarchy. Examples of mathematical modeling in Chemical Engineering. Solution techniques to solve ODEs. Numerical solutions for ODEs. Solution techniques to solve PDEs.</p>					
Dersin Amacı (Course Objectives)	<ol style="list-style-type: none">1. Kimya Mühendisliğinde modelleme problemlerinin saptanması ve analiz edilmesinde öğrencilerin eğitilmesi.2. Kimya Mühendisliğinde bir sistemin ya da prosesin davranışının matematiksel olarak tasvir edilmesi ve problemdeki önemli değişkenlerin saptanmasında öğrencilerin eğitilmesi.3. Kimya Mühendisliğinde karşılaşılan problemlerin türüne özgü denklemlerin çözülmesi için matematiksel yöntemlerin hakkında bilgi sahibi olunması.4. Öğrencilerin hesaplama yeteneklerinin model denklemlerin çözümünde kullanılacak bilgisayarda kodlama ve yazılım ile geliştirilmesi.5. Öğrencilere mühendislik bilgilerinin bir modeli değerlendirmek, doğrulamak ve tutarlılığını test etmekte nasıl kullanılacağını gösterilmesi.6. Takım çalışması deneyimi kazandırmak.					

	<ol style="list-style-type: none"> 1. To train students to identify and analyze modeling problems encountered in chemical engineering. 2. To train students to develop a mathematical representation of the behavior of a system or process in chemical engineering and identify important parameters of the problem. 3. To train students to acquire knowledge of the mathematical techniques required to solve the equations specific to the type of problems encountered in chemical engineering. 4. To develop the computing skills of students by providing practice with computer programming and the use of computer software that can be used in the solution of model equations. 5. To show students how to use their engineering background to evaluate, verify, and check the consistency of a model. 6. To provide experience to work in teams.
<p>Dersin Öğrenme Çıktıları</p> <p>(Course Learning Outcomes)</p>	<p>Bu dersin sonunda, öğrencilerin aşağıdaki becerilere sahip olması beklenir:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Modellenen bir sistem veya prosesi analiz etmek, geometrik, fiziksel ve kimyasal niceliği tanımlamak. 2. Sistemin önemli değişkenlerinin ve parametrelerini seçmek. 3. Kimya Mühendisliğindeki bir sistem veya prosesin model denklemlerinin türetilmesi için korunum yasalarını uygulamak. 4. Türetilmiş diferansiyel denklemleri çözmek için gerekli ilk ve sınır şartları yazmak. 5. Probleme bağımlı değişkenlerin beklenen davranışlarının bir taslağını çizebilmek. 6. Çözüm yöntemlerini araştırmak ve elde edilen denklem ve makul bir nihai çözüm elde etmek için kabaca tahminleri gözden geçirmek. 7. Kimyasal sistemlerin veya proseslerin modellenmesinde elde edilen ADD ve KDDlerin çözülmesi için uygun analitik ve/veya sayısal yöntemleri kullanmak 8. ADD ve KDDlerin çözümü için üniversite tarafından sağlanan bilgisayar programları ve yazılımları kullanmak. 9. Matematiksel modelleme problemlerini çözmek için aynı disiplinden takım arkadaşları ile birlikte çalışmak. <p>Upon completion of this course, a student should be able to:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Analyze the system or process to be modeled and define geometrical, physical, and chemical quantities. 2. Select important variables and parameters of the system. 3. Apply conservation laws to produce model equations for a system or process in chemical engineering. 4. Write appropriate initial and boundary conditions for the differential model equations developed. 5. Draw a sketch of the expected behavior of the dependent variables of the problem. 6. Search out solution methods, and consider possible approximations for the defining equation and an acceptable final solution. 7. Solve the ODEs and PDEs encountered in modeling of chemical systems or processes by using appropriate analytical and/or numerical methods. 8. Use computer programming and mathematical software available in the university computer center to solve ordinary and partial differential equations. 9. Work as a team member in the same discipline to solve mathematical modeling problems in chemical engineering.
<p>Ders Kitabı (Textbook)</p>	<p>Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers, R. C. Rice and D. D. Do, John Wiley, 1995.</p>
<p>Diğer Kaynaklar</p>	<p>1. Conservation Equations and Modeling of Chemical and</p>

(Other References)	<p>Biochemical Processes, S.S.E.H. Elnashaie, P. Garhyan, CRC, NY, 2003.</p> <p>2. Transport Phenomena, B.R. Bird, W.E. Stewart and E.N. Lightfoot, 2nd Ed., John Wiley, NY, 2002.</p> <p>3. Process Modeling and Model Analysis, K. Hangos and I. Cameron, Academic Press, London, 2001.</p> <p>4. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, W.L. Luyben, 2nd Ed., McGraw Hill, NY, 1990.</p> <p>5. Advanced Engineering Mathematics, E. Kreyszig, 8th Ed., John Wiley, NY, 1999.</p> <p>6. Numerical Methods Using MATLAB, G. Lindfield and J. Penny Ellishorwood, Prentice Hall, NY, 1995.</p> <p>7. Mathematical Methods in Chemical Engineering, V.G. Jenson and G.V. Jeffreys, 2nd Ed., Academic Press, NY, 1977.</p>		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	<p>Dönem boyunca toplam 8 adet ödev verilecektir. Bu ödevlerin bir kısmı bilgisayar ödevi olacaktır.</p> <p>A total of 8 homework assignments will be given during the semester. Some of the homework will include computer assignments.</p>		
Laboratuar Uygulamaları (Laboratory Work)	<p>YOK NO</p>		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)	<p>Bilgisayar kullanımı zorunludur.</p> <p>Computer use in this course is compulsory.</p>		
Diğer Uygulamalar (Other Activities)	<p>Sınıf içi problem çözme saati (dört kişilik takımlar halinde problem çözme, ders saati sonunda çözümler toplanıp değerlendirilmektedir)</p> <p>In-class problem solving session (solving problems in teams of two, team solutions are collected at the end of the session and graded)</p>		
Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria)	Faaliyetler (Activities)	Adedi (Quantity)	Değerlendirmedeki Katkısı, % (Effects on Grading, %)
	Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)	2	40
	Kısa Sınavlar (Quizzes)	0	0
	Ödevler (Homework)	8	10
	Projeler (Projects)	0	0
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)	0	0
	Laboratuar Uygulaması (Laboratory Work)	0	0
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)	8	10
	Final Sınavı (Final Exam)	1	40

DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Modellemenin temel ilkeleri	1-9
2	Kütlenin korunumu kanunu ile model denklemlerin türetilmesi. Makroskopik kütle denkliği. Mikroskopik kütle denkliği. Kütlenin taşınımında ilk ve sınır şartları. Örnekler.	1-7, 9
3	Enerjinin korunumu kanunu ile model denklemlerin türetilmesi. Makroskopik enerji denkliği. Mikroskopik enerji denkliği. Isının taşınımında ilk ve sınır şartları. Örnekler.	1-7, 9
4	Momentumun korunumu kanunu ile model denklemlerin türetilmesi. Makroskopik momentum denkliği. Mikroskopik momentum denkliği. Momentumun taşınımında ilk ve sınır şartları. Örnekler.	1-7, 9
5	Hiyerarşik modelleme	1-7, 9
6	ADD türeten modeller için çözüm teknikleri: Birinci mertebe denklemler; tam diferansiyel denklemler, integrasyon faktörü yöntemi, Bernoulli denklemi. Örnekler.	1-7, 9
7	ADD türeten modeller için çözüm teknikleri: İkinci mertebe denklemler; genel çözüm, özel çözüm	1-7, 9
8	Belirsiz katsayılar yöntemi. Parametrelerin değişimi yöntemi. Örnekler.	1-7, 9
9	Kimya Mühendisliği problemlerinin modellenmesinde eşzamanlı korunum kanunlarının kullanılması. ADDlerin sayısal yöntemleri: Birinci mertebe denklemler; Euler yöntemi, Runge-Kutta yöntemi, çok-adımlı yöntem. Örnekler.	1-9
10	ADDlerin sayısal çözümleri: Yüksek mertebeli denklemler; başlangıç değer problemleri, sınır şartları problemleri. Shooting/tahmin yöntemi. Örnekler.	1-9
11	Yüksek mertebeli ADDlerin sayısal çözümleri: Sonlu farklar yöntemi. Örnekler.	1-9
12	KDD türeten modeller için çözüm teknikleri: Değişkenlerin birleşimi yöntemi. Örnekler.	1-7, 9
13	KDD türeten modeller için çözüm teknikleri: Değişkenlerin ayrılması yöntemi. Örnekler.	1-7, 9
14	KKDDlerin sayısal çözümleri: Sonlu farklar yöntemi	1-9

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Basics of modeling	1-9
2	Derivation of model equations by using mass conservation law. Macroscopic mass balance. Microscopic mass balance. Initial and boundary conditions in mass transfer. Related examples.	1-7, 9
3	Derivation of model equations by using energy conservation law. Macroscopic energy balance. Related examples. Microscopic energy balance. Initial and boundary conditions in heat transfer. Related examples	1-7, 9
4	Derivation of model equations by using momentum conservation law. Macroscopic momentum balance. Related examples. Microscopic momentum balance. Initial and boundary conditions in momentum transfer. Related examples	1-7, 9
5	Model hierarchy.	1-7, 9
6	Solution techniques for models yielding ODEs: First order equations; exact equations, integration factor method, Bernoulli equation. Related examples.	1-7, 9

7	Solution techniques for models yielding ODEs: Second order equations; general solution, particular solution	1-7, 9
8	Method of undetermined coefficients. Method of variation of parameters. Related examples.	1-7, 9
9	Modeling of chemical engineering problems by using simultaneous conservation laws. Numerical solution of ODEs: First order equations; Euler method, Runge-Kutta method, multi-step method. Related examples	1-9
10	Numerical solution of ODEs: Higher order equations; initial value problems, boundary value problems. Numerical solution of higher order ODEs: Shooting method. Related examples.	1-9
11	Numerical solution of higher order ODEs: Finite difference method. Related examples	1-9
12	Solution techniques for models yielding PDEs: Combination of variables method (COV). Related examples	1-7, 9
13	Solution techniques for models yielding PDEs: Separation of variables method (SOV): Related examples	1-7, 9
14	Numerical solution of PDEs: Finite difference method	1-9

Dersin Kimya Mühendisliği Programıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi ve beceriler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
1	Matematik, fen bilimleri, sosyal bilimler ve mühendislik bilgilerini kimya mühendisliği problemlerine uygulayabilme becerisi			X
2	Kimya Mühendisliği ve ilgili alanlardaki mühendislik problemlerini saptama, tanımlama ve çözme becerisi			X
3	Bir sistemi, sistem bileşenini ya da süreci analiz etme ve belirli gereksinimleri karşılayacak şekilde tasarlama becerisi			
4	Mühendislik çözümlerinin sağlık, güvenlik ve çevre üzerinde yaratacağı ulusal ve uluslararası etkilere duyarlılık			
5	Deney tasarlama, veri toplama, analiz etme ve yorumlama becerisi			
6	Modern mühendislik teknik ve araçları ile bilişim teknolojilerini etkin bir şekilde kullanma becerisi			X
7	Tek ve çok disiplinli takım çalışması yürütme becerisi			X
8	Bireysel çalışma becerisi			
9	Yaşam boyu öğrenmenin önemini benimsemiş olarak, bilim ve teknolojideki gelişmeleri izleyerek kendini sürekli yenileme becerisi			
10	Türkçe sözlü ve yazılı etkin iletişim kurma becerisi			
11	İngilizce sözlü ve yazılı etkin iletişim kurma becerisi			
12	Mesleki ve etik sorumluluk bilinci			
13	Çağdaş konular hakkında bilgi sahibi olma			
14	Kalite bilinci			

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

Relationship between the Course and the Chemical Engineering Curriculum

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
1	an ability to apply knowledge of mathematics, science, and engineering to chemical engineering problems			X
2	an ability to identify, formulate, and solve engineering problems in chemical engineering and related fields			X
3	an ability to design a system, component, or process to meet desired needs			
4	the broad education necessary to understand the impact of engineering solutions, especially related to the health, safety and environmental issues, in a global and societal context			
5	an ability to design and conduct experiments, as well as to analyze and interpret data			
6	an ability to use the techniques, skills, and modern engineering and computing tools necessary for engineering practice			X
7	an ability to function on same- and multi-disciplinary teams			X
8	an ability to function independently			
9	a recognition of the need for, and an ability to engage in life-long learning			
10	an ability to communicate effectively orally and in writing in Turkish			
11	an ability to communicate effectively orally and in writing in English			
12	an understanding of professional and ethical responsibility			
13	a knowledge of contemporary issues			
14	a knowledge and awareness of quality issues			

1: Little, 2. Partial, 3. Full

<u><i>Düzenleyen (Prepared by)</i></u>	<u><i>Tarih (Date)</i></u>	<u><i>İmza (Signature)</i></u>
Doç. Dr. Özge Kürkçüođlu Levitas Doç. Dr. Devrim Barış Kaymak	07.03.2021	