

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

Расширенное использование компьютерных моделирующих систем

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-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-1.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК 3.1 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.

ИОПК 3.3 Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ИПК 2.1 Применяет методы математического прогнозирования и управления отдельными стадиями химико-технологических процессов.

ИПК 2.4 Демонстрирует знание современных технологий производства химической и биомедицинской продукции.

2. Задачи освоения дисциплины

- Освоить математический аппарат статистической обработки данных.
- Освоить обработку массивов данных применительно к химико-технологическим процессам.
- Освоить регрессионный анализ применительно к химико-технологическим процессам.
- Освоить базовую последовательность статистической оптимизации химико-технологических процессов.

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:

- Неорганическая химия
- Органическая химия
- Физическая химия
- Актуальные задачи современной химии
- Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;

– Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen.

Также для успешного освоения дисциплины необходимо параллельно изучать следующие дисциплины:

– Цифровизация 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

Раздел 1. Оптимизация и возможности FORTRAN

Тема 1. Оптимизация: общие сведения

Введение, оформление проблем оптимизации. Понятие целевой функции, ограничений, пределы поиска, классификация проблем оптимизации, доступные алгоритмы для их решения.

Тема 2. FORTRAN: общие сведения

Введение к FORTRAN, общая организация работы с FORTRAN, доступные структуры работы с FORTRAN в среде Aspen Plus: заявления и динамические библиотеки.

Тема 3. Оптимизации в среде Aspen Plus

Составление и решение стандартных задач оптимизации в среде Aspen Plus с применением интегрированных возможностей FORTRAN.

Тема 4. Анализ чувствительности в среде Aspen Plus

Составление и решение стандартных задач анализа чувствительности в среде Aspen Plus с применением интегрированных возможностей FORTRAN.

Тема 5. Калькуляторы и In-Line FORTRAN

Использование пользовательских блоков FORTRAN-калькуляторов при расчете и анализе технологических схем.

Раздел 2. Aspen Plus: User Models

Тема 1. Введение

Введение к пользовательским модулям в среде Aspen Plus, организация работы по составлению пользовательских модулей с компиляцией и линковкой динамических библиотек, общая структура исходного кода FORTRAN при создании пользовательских модулей.

Тема 2. Пользовательские модули химические кинетики

Работа с пользовательскими модулями для расчета химической кинетики реакторов и реакционно-ректификационных колон – USER и REAC-DIST модули.

Тема 3. Пользовательские модули контактирующих устройств

Работа с пользовательскими модулями для расчета колонных контактирующих устройств – тарелки и насадки.

Тема 4. Пользовательские модули равновесия жидкость – жидкость

Работа с пользовательскими модулями для расчета равновесия жидкость - жидкость.

Раздел 3. Сервер автоматизации ActiveX

Тема 1. Введение

Общие сведения по возможности внешнего управления Aspen Plus при помощи сервер автоматизации ActiveX. Структура переменных математической модели в Aspen Plus (Variable Explorer), организация общения между Aspen Plus, сервером ActiveX и внешними элементами.

Тема 2. Работа с Microsoft Excel VBA

Получение доступа и управление объектами и методами Aspen Plus с использованием Microsoft Excel VBA. Пример MINLP оптимизации реакционно-ректификационной колонны синтеза ЭТБЭ.

Тема 3. Работа с другими языками программирования

Рассмотрение возможности получения доступа и управления объектами и методами Aspen Plus с использованием сторонних языков программирования. Алгоритм калибровки и оптимизации моделей установок пользовательскими кинетическими модулями USER и REAC-DIST. Алгоритм NLP оптимизации процессов.

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.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в третьем семестре проводится в письменной форме с последующей презентацией и защитой индивидуального курсового задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории и проверяет ИОПК 1.2., ИОПК 3.1., ИОПК 3.3, ИПК 2.1, ИПК 2.4.

Основные темы практической задачи:

1. Моделирование и оптимизация нестандартных технологических операций, таких как: реакционная ректификация, экстракционная ректификация, механически и энергетически интегрированные ректификационные системы;
2. Синтез, моделирование и оптимизация принципиальных технологических схем.

В письменной части (предоставляется совместно с презентацией) должно содержаться:

1. Описание практической задачи, цели и ожидаемые результаты;
2. Подбор моделей расчета фазового равновесия и кинетической модели химического превращения веществ, с соответствующим обоснованием;
3. Описание математической модели объекта работы с допущениями и обоснованием для подбора алгоритмов расчета;

4. Формулировка задачи оптимизации объекта работы: целевая функция, ограничения, пределы поиска, классификация задачи оптимизации и выбор алгоритма решения;

5. Результаты проведения моделирования и оптимизации объекта работы;

6. Выводы;

7. Приложения: исходный код разработанных кинетических библиотек, исходный код программ и подпрограмм, разработанных для решения задач оптимизации.

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:

- Belegundu, Ashok D. Chandrupatla, Tirupathi R.. (2011). *Optimization Concepts and Applications in Engineering (2nd Edition)*. Cambridge University Press. <https://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpOCAEE00K/optimization-concepts/optimization-concepts/>;

- Rao, Singiresu S.. (2009). *Engineering Optimization - Theory and Practice (4th Edition)*. John Wiley & Sons. Retrieved from <https://app.knovel.com/hotlink/toc/id:kpEOTPE014/engineering-optimization/engineering-optimization/>;

- Справочник по среде моделирования технологических процессов Aspen Plus V12: Aspen Plus 12.1 User Guide - https://esupport.aspentech.com/S_Article?id=000064707;
- Справочник по среде моделирования Aspen Plus V12: Aspen Plus V12.1 User Models Reference Manual - https://esupport.aspentech.com/S_Article?id=000098437;

б) дополнительная литература:

- W. L. Luyben and C.-C. Yu, *Reactive Distillation Design and Control*. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2008.
- K. Sundmacher and a Kienle, *Reactive distillation: status and future directions*, vol. 3. 2006.
- W. L. Luyben, *Reactive Distillation*. Elsevier Inc., 2006.
- G. J. Harmsen, "Reactive distillation: The front-runner of industrial process intensification. A full review of commercial applications, research, scale-up, design and operation," *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 46, no. 9 SPEC. ISS., pp. 774–780, 2007, doi: 10.1016/j.cep.2007.06.005.
- G. J. Harmsen and L. A. Chewter, "Industrial applications of multi-functional, multi-phase reactors," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 10, pp. 1541–1545, May 1999, doi: 10.1016/S0009-2509(99)00082-2.

в) ресурсы сети Интернет:

- Справочник по языку FORTRAN 77 - <https://docs.oracle.com/cd/E19957-01/805-4939/index.html>
- Справочник по языку Python - <https://docs.python.org/3/reference/>;
- Справочник по библиотеке SciPy - <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/>;
- Справочник по библиотеке pywin32 - <http://timgolden.me.uk/pywin32-docs/PyWin32.html>;
- Справочник по компилятору GNU Fortran - <https://gcc.gnu.org/onlinedocs/gfortran/>;
- Справочник по VBA для Office - <https://docs.microsoft.com/ru-ru/office/vba/api/overview/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Среда моделирования технологических процессов Aspen Plus V12;
- Microsoft Office 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);
- Язык программирования Python 3.6.8 - <https://www.python.org/downloads/release/python-368/>;
- Среда разработки для Spyder - <https://www.spyder-ide.org/>;
- Библиотека оптимизации NOMAD - <https://www.gerad.ca/en/software/nomad/>;
- Библиотека SciPy для Python - <https://scipy.org/install/>;
- Библиотека pywin32 (ActiveX) для Python - <https://pypi.org/project/pywin32/>;
- Компилятор GNU Fortran - <https://gcc.gnu.org/fortran/>

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 установленными средствами информационных технологий, указанными в п. 13, для выполнения практических заданий.

15. Информация о разработчиках

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

Карлос Энрике Гарсия Серпас, специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»