

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

**Цифровизация металлургических и нефтехимических производств**

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 знания и получить навыки моделирования процессов получения металлоорганических соединений и процессов нефтехимии на примерах действующих производств;

– Освоить знания и навыки, необходимые для успешного математического моделирования сложных непрерывных и периодических процессов синтеза, разделения и переработки металлоорганических соединений и нефтехимических процессов;

– Освоить навыки подбора необходимого технологического оборудования.

## **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:

– Органическая химия

– Физическая химия

– Актуальные задачи современной химии;

– Химическая технология металлорганического синтеза

– Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;

Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen

Также, для успешного освоения курса, параллельно должны изучаться следующие дисциплины:

– Технология производства ВЖС

## **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. Методы и подходы моделирования

Общие подходы к моделированию процессов синтеза и переработки металлоорганических соединений. Подходы к моделированию процессов нефтехимии (газожидкостные процессы). Схемы основных производств, технологические и термодинамические параметры системы. Моделирование кинетики. Использование баз данных и термодинамических моделей. Используемые программные продукты.

Тема 2. Моделирование процесса получения триэтилалюминия

Термодинамика процесса и исходные данные, набор компонентов. Моделирование реакторного блока. Моделирование периферийного оборудования и оборудования разделения продуктов. Сборка модели процесса с учетом энергоресурсов и рециркулирующих потоков.

Тема 3. Процесс получения и переработки алколюлятов алюминия

Моделирование реакторного блока и процессов (гидролиз/гидрирование) переработки алколюлятов алюминия, как пример металлоорганического синтеза. Базы данных, термодинамика, компоненты и свойства компонентов. Моделирование процессов разделения продуктов реакций. Сборка модели всей схемы, с учетом энергоресурсов и рециркулирующих продуктов, с учетом процесса выделения высших жирных спиртов (конечный продукт процесса).

Тема 4. Моделирование нефтехимических процессов

Моделирование процесса нефтехимического синтеза на примере промышленных процессов (оксосинтез, получение толуола, ксилолов, МТБЭ и пр.). Термодинамика, компоненты (включая псевдокомпоненты и твердые вещества (при наличии)). Методы моделирования при отсутствии компонентов в базах данных и информации в литературе по свойствам. Моделирование реакторов, выделения продуктов (включая азеотропные разгонки). Моделирование схемы с учетом энергоносителей и рецикловых потоков.

## **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.

## **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.

Индивидуальное задание выполняется по теме научной работы студента и проверяет ИОПК 1.2., ИОПК 3.1., ИОПК 3.3, ИПК 2.1, ИПК 2.4.

Презентация должна включать расчетную модель процесса согласно научной работе студента. Доклад должен включать обоснование использованного термодинамического пакета, результаты регрессионного анализа (если проводился) и алгоритм расчета процесса.

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:

1. Кузнецов, О. А. Начало работы в Aspen HYSYS V8 / О. А. Кузнецов. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 68 с.

2. Кузнецов, О. А. Моделирование установки переработки нефти в Aspen HYSYS V8 / О. А. Кузнецов. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 133 с.

3. Кузнецов, О. А. Моделирование схемы переработки природного газа в Aspen HYSYS V8 / О. А. Кузнецов. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 116 с.

4. Смит Р., Клемеш Й., Товажнянский Л.Л., Капустенко П.А., Ульев Л.М. Основы интеграции тепловых процессов. Харьков. НТУ “ХПИ”. – Библиотека журнала ИТЭ. – Харьков: НТУ “ХПИ”. 2000. – 458 с.
5. Булатов, И. С. Пинч-технология. Энергосбережение в промышленности / И. С. Булатов. – СПб: Страта, 2012. – 140 с.
6. Касаткин, А. Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А. Г. Касаткин.: Учебник для вузов. – 10-е изд., стереотипное, доработанное. Перепеч. С изд. 1973 г. - М.: ООО ТИД «Альянс», 2004. – 753 с.
7. Борисов, Г. С., Брыков, В. П., Дытнерский, Ю. И. и др. Основные процессы и аппараты химической технологии: Пособие по проектированию / Г. С. Борисов, В. П. Брыков, Ю. И. Дытнерский и др. Под ред. Ю. И. Дытнерского, 2-е изд., перераб. и дополн. - М.: Химия, 1991. – 496 с.
8. Thomas A. Adams II. Learn aspen Plus in 24 Hours / Thomas A. Adams II. – N.Y.: McGraw-Hill Education, 2017. - 208 p.
9. William L. Luyben. Distillation design and control using aspentm simulation / Wiley, 2013. – 489 p
10. Kamal I.M. Al-Malah. ASPEN PLUS® Chemical Engineering Applications / Wiley, 2017. – 615 p

б) ресурсы сети Интернет:

<http://elibrary.ru>

<https://login.webofknowledge.com/>

<https://esupport.aspentech.com/>

### 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);

- aspenONE Engineering Suite 11-12;

– 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

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 пакетами MS Office (MS Word, MS Excel) и AspenONE Engineering (V 11/12) 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;

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

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