

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

Расширенное использование компьютерных моделирующих систем

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 процессами на базе математического прогнозирования и моделирования.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК-1.2 Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ для грамотного планирования научного исследования

РООПК-3.1 Знает стандартные и оригинальные программные продукты, современные вычислительные методы

РООПК-3.3 Умеет применять современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств полимерных и композиционных веществ и материалов, а также процессов с их участием

РОПК-2.1 Знает современные технологии производства химической 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 «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:

- 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.

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.

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 с последующей презентацией и защитой индивидуального курсового 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:
 - 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/>

– 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 On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– среда моделирования технологических процессов Aspen Plus V12;

– 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/>

– 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.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, 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», ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ», ассистент кафедры неорганической химии ХФ НИ ТГУ;

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