

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



А. С. Князев

« 27 » 04 20 23 г.

Аннотация к рабочим программам дисциплин (модулей) и практик

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

Цифровая химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

Томск – 2023

Б1.О.02 Термодинамика и кинетика в химической технологии

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: ч.

Тематический план:

Тема 1. Основы технической термодинамики:

Предмет и задачи технической термодинамики, закономерности фазового перехода и параметры состояния, химическая термодинамика, термодинамические законы (в том числе для кругового процесса), понятие эксергии, термодинамический анализ ХТС.

Тема 2. Кинетика химических процессов.

Кинетика гомогенного и гетерогенного процесса, основные отличия и методы расчета кинетических параметров химических реакций. Связь термодинамических и кинетических параметров, методы математического моделирования простых химических реакторов.

Тема 3. Макрокинетика

Понятие цель и объекты макрокинетики, перенос вещества в гомогенных и гетерогенных процессах, методы математического моделирования химических процессов в зернах катализатора, методы расчета реальных реакторов гомогенных и гетерогенных процессов.

Тема 4. Термодинамические расчеты.

Основные термодинамические модели, принятые для расчета ХТС. Модели состояния и модели активности. Типы и классификация моделей состояния. Типы и классификация моделей активности. Основные расчетные формулы. Отличия и случаи применимости каждого типа моделей.

Б1.О.03 Основы проектирования химических и нефтехимических производств

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение

Введение в дисциплину. Основные стадии жизненного цикла проекта. Основные этапы и организация проектирования химических производств.

Тема 2. НИР

НИР. Цели и задачи выполнения НИР. Виды НИР. Данные, получаемые в ходе выполнения НИР, где и для чего используются. Методы оценки экономической эффективности производства. Критерии перехода на следующую стадию. Экономическая оценка производства по результатам НИР.

Тема 3. НИОКР, ОКР

НИОКР и ОКР. Цели и задачи выполнения, данные, получаемые по результатам. Инжиниринг и его место в проекте. Задачи инжиниринга. Элементы масштабирования технологии. Экологическое и технико-экономическое обоснование проекта.

Тема 3. Базовый проект и ИДП

Понятия базового проекта и исходных данных для проектирования, отличия. Необходимые исходные данные и результаты выполнения. Основные руководящие документы при выполнении.

Тема 4. Проектные работы: введение в проектирование

Основные виды проектов. Типы строительства. Отличие, наполнение, руководящие документы в зависимости от вида проектной документации и типа строительства. Выбор района размещения предприятия и площадки строительства. Оценка экологических факторов и необходимости экологической экспертизы. Оценка необходимости разработки отдельных разделов проектной документации. Задание на проектирование. Основание для проектирования.

Тема 5. Основные этапы и организация проектирования химических производств

Технологический процесс как основа промышленного проектирования. Генеральный план химических предприятий. Типы промышленных зданий (Одноэтажные промышленные здания, многоэтажные здания, вспомогательные здания и помещения химических предприятий, склады промышленных предприятий. Инженерные сооружения. Использование САПР и программные продукты.

Тема 6. Эскизный и технический проекты

Принципы и стадии разработки. Отличия. Случаи разработки. Законодательные акты и нормы. Основные положения защиты проектов. Состав проектов, наполнение.

Тема 7. Стадия П

Случаи разработки и основные руководящие документы. ПСД, определения, техническое задание. Состав проекта, основные принципы формирования разделов. Состав ПЗ по разделам. Раздел «Технологические решения» состав раздела требования к Текстовой части, требования к графической части. Синтез технологической схемы (PD, PFD, P&ID) и обоснование принятых решений. Принципы подбора основного и вспомогательного технологического оборудования. Задания на/от смежных разделов. Необходимые расчеты и принципы их выполнения в применении к технологии производства. Разработка документации и мероприятий по безопасной эксплуатации производства. Требования к оформлению проектной документации. Основные руководящие документы и законодательные акты.

Тема 8. Стадия Р

Случаи разработки и основные руководящие документы, отличия от проектной документации. Определения. Техническое задание. Основные принципы формирования разделов. Монтажные чертежи. Подготовка опросных листов/задание на разработку КД на нестандартное оборудование. Обоснование принятых решений. Задания на/от смежных разделов. Необходимые расчеты и принципы их выполнения в применении к технологии производства. Требования к оформлению рабочей документации. Основные руководящие документы и законодательные акты.

Тема 9. Специальные разделы

Случаи разработки и основные руководящие документы. Определения. Принципы разработки экологической документации и ГОЧС. Состав разделов, исходные данные для разработки. Основные расчеты, алгоритм и основные положения. Обоснование безопасности принятых решений.

Тема 10. Защита проектной документации

Виды экспертизы и их базовые принципы, алгоритм защиты проектной документации, этапы проведения экспертизы. Основная разрешительная документация.

Б1.О.05 Философские проблемы химии

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

семинар: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Наука и философия.

Тема 2. Философия химии как предмет исследования.

Тема 3. Онтология химии.

Тема 4. Методология химии. Проблема редукции.

Тема 5. Технологии и современное общество.

Б1.О.06 Актуальные задачи современной химии

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет с оценкой

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых:

лекции: 32 ч;

практические занятия: 32 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Тематический план:

Тема 1. Термодинамика химико-технологических процессов

Современные термодинамические модели, описание, условия применения и ограничения.

Тема 2. Введение в кинетику химических процессов

Введение в кинетику химических процессов. Влияние термодинамических параметров на глубину протекания химико-технологических процессов. Расчет равновесного состава смесей.

Тема 3. Интенсификация химических процессов

Гомогенные и гетерогенные процессы, общие закономерности и отличия. Лимитирующая стадия и способы ее определения. Способы интенсификации гомогенных процессов.

Гетерогенные химико-технологические процессы, классификация. Гетерогенные процессы в системе газ-твердое, газ-жидкое. Основные стадии гетерогенного процесса, области

протекания гетерогенного процесса. Способы интенсификации гетерогенных процессов в системах газ-твердое, газ-жидкое.

Тема 4. Математическое описание основных процессов химической технологии
Закономерности и расчет основных процессов химической технологии: теплообмен, массообмен, фильтрация, гидравлика, сорбционные процессы, сушка, кристаллизация и пр. Анализ факторов, влияющих на скорость протекания процессов.

Тема 5. Специфика подбора технологического оборудования
Основные методы и закономерности подбора основного и периферийного технологического оборудования. Подбор оборудования с учетом интенсификации технологических процессов. Закономерности подбора конструкционных материалов с учетом специфики процесса.

Тема 6. Введение в структуру ХТС
ISBL и OSBL. Требования к инженерным системам, требования к сырью, продукту, полупродуктам. Использование инженерных сетей (воздух, вода, азот и пр.) в промышленности. Непрерывная и периодическая организация технологического процесса. Специфика периодических и непрерывных систем. Материальные и тепловые балансы с учетом способа организации процесса. Расчет удельных норм расхода в зависимости от организации процесса. Циклограммы процессов. Время полезной работы оборудования. Процедуры пуска и остановки. Вывод оборудования на плановый и внеплановый ремонт. Резервирование оборудования.

Тема 7. Детальный анализ промышленных технологических решений в химической промышленности
Неорганические процессы - синтез аммиака, производство неорганических удобрений, производство силикагеля, производство цеолитов.
Органические процессы - оксопроцессы (оксосинтез), олефлекс (Oleflex/UOP), парекс (Parex/UOP)
Процессы полимеризации – полиэтилен высокого давления (Lupotech/Bassel).
Рассмотрение примеров технологического оформления промышленных химических процессов включает следующее: характеристика продукта, сырье для его получения, области применения, масштабы и способы производства, физико-химические закономерности процесса: стехиометрические, термодинамические и кинетические, схема процесса и ее описание, основные технологические параметры процесса, аппаратурное решение основных узлов, промышленные выбросы и способы их обезвреживания.

Тема 8. Углубленный курс физико-химических основ процессов
Промышленные реакторы, переход от идеальных моделей к моделям и расчету промышленных реакторов. Политропные, адиабатические и другие типы процессов и их расчет, связь расчета с промышленными типами реакторов.

Тема 9. Анализ ХТС
Анализ химикотехнологических систем – системный, энергетический, эксергетический, термохимический, техникоэкономический, структурный и др. Разбор методов анализа ХТС

Тема 10. Синтез ХТС
Методы синтеза ХТС – эволюционный, эвристический и иерархический. Декомпозиция системы – организационная структура процесса, технологический маршрут сырья, количество химических стадий, подготовка сырья, продуктовые потоки и их номенклатура, выделение продукта, рекуперации энергии, экологические аспекты процесса.

Синтез ХТС по индивидуальному заданию, составление детального описания технологической схемы, разработка системы управления процессом, расчет предварительного покомпонентного МБ, предварительный расчет и подбор основных аппаратов (теплообменное оборудование, колонное оборудование, емкостное оборудование, насосное/компрессорное оборудование), формирование требований к сырью и технологическим средам.

Б1.О.01.01 Лидерство и руководство командной работой

Дисциплина обязательная для изучения. Дисциплина входит в модуль Название модуля 1.

Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Лидерский и коммуникативный потенциал.

1.1. Целеполагание.

1.2. Самодиагностика лидерского потенциала.

1.3. Самодиагностика актуального коммуникативного потенциала и уровня самоорганизации деятельности.

Тема 2. МООК «Лидерство и командообразование».

Модуль 1. Введение в курс.

Модуль 2. Феномен лидерства.

Модуль 3. Миссия лидера или инициатива наказуема.

Модуль 4. Прояснение лидерского потенциала.

Модуль 5. Воплощение лидерского (личностного) потенциала.

Модуль 6. Практики лидерства.

Модуль 7. Технологии лидерства.

Модуль 8. Креативное лидерство.

Модуль 9. Командное взаимодействие.

Модуль 10. Ресурсы для лидеров.

Модуль 11. Заключение.

Тема 3. МООК «Лидерство и командообразование».

3.1. Самодиагностика развития лидерского и коммуникативного потенциала

3.2. Траектории развития лидерского потенциала и стиля командного лидерства

Б1.О.01.02 Профессиональная коммуникация на иностранном языке*Professional communication in a foreign language

Дисциплина обязательная для изучения. Дисциплина входит в модуль Название модуля 1.

Первый семестр, зачет

Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

практические занятия: 64 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 64 ч.

Тематический план:

Тема 1. Университетская научно-исследовательская среда.

Тема 2. Участие в научных мероприятиях

Б1.О.01.03 Межкультурное взаимодействие

Дисциплина обязательная для изучения. Дисциплина входит в модуль Название модуля 1. Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 4 ч;

практические занятия: 24 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 24 ч.

Тематический план:

Тема 1. Вводные занятия

Тема 2. Основы межкультурного взаимодействия

Тема 3. Межкультурная коммуникация.

Тема 4. Организационные контексты межкультурного взаимодействия

Тема 5. Проектное задание «Рекомендации в ситуации межкультурного взаимодействия (на примере конкретных культур).

Б1.В.01 Основы системного анализа и моделирование технологических процессов

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Основные понятия и определения

Основные понятия и определения. Определения системного анализа, цели, методы и принципы. Понятие система и элемент в привязке к ХТП. Иерархическая структура ХТП. Разбор решения задачи методом системного анализа.

Тема 2. Модели производства

Химические, графические, математические модели. Принципы построения, разбор примеров. Дерево переделов, принципы и цели разработки.

Тема 3. Виды моделей. Этапы разработки

Методы представления, обработки и анализа информации. Интеллектуальные системы, этапы разработки, используемые модели. Логические, Фреймвые, Семантические и пр. основные понятия и принципы разработки, обработки и представления информации.

Тема 4. Концептуальные подходы системного анализа

Концепции и основные подходы в системном анализе при их реализации. Концепция глубины переработки, минимизации и/или максимизации параметров. Примеры реализации концепций.

Тема 5. Синтез математического описания ХТП

Этапы математического описания, иерархическая принцип, моделирование химических превращений. Описание взаимосвязанных явлений и процессов при моделировании ХТС, уравнение Умова. Разработка алгоритмов, определение параметров регуляризации.

Тема 6. Оптимизация ХТП

Задача оптимизации, основные этапы системного анализа при оптимизации. Определение и классификация критериев. Одно и многокритериальный анализ. Методы решения многокритериального анализа. Примеры реализации многокритериального анализа на примере каталитических процессов.

Б1.В.02 Системы управления химико-технологическими процессами

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Общие сведения об автоматическом управлении производственными процессами, классификация систем автоматического регулирования (САР)

Основные понятия контроля и регулирования, принципы и алгоритмы регулирования, основные требования к системе управления и средствам контроля ХТП, передаточные функции, уровни автоматизации производства и иерархия системы управления, основные руководящие документы и правовые акты.

Тема 2. Методы и средства измерения технологических параметров

Методы электрических измерений. Методы и средства измерения температуры, уровня давления (прямые, косвенные), расхода (по перепаду давления, электромагнитные и ультразвуковые, по уровню, тепловые, вихревые и пр.). Принцип работы и устройство средств измерений. Средства и методы поверки. Связь с системой управления.

Тема 3. Средства измерения физико-химических характеристик

Концентрация, рН, электропроводность и пр. Типы приборов и принципы работы. Прямые и косвенные измерения. Связь с системой управления процессом. Требования к приборам. Средства и методы поверки.

Тема 4. Автоматические системы регулирования и управления

Структура автоматической системы регулирования, классификации регуляторов и систем автоматического регулирования, математическое описание типовых звеньев, понятия статической и динамической характеристик, типы соединения элементов системы, законы регулирования, принципы регулирования, понятие устойчивости систем, критерии качества переходных процессов, оценка параметров настройки систем автоматического регулирования, технические средства автоматического регулирования. SCADA, функции и разновидности.

Тема 5. Базы данных и их применение

Функция регистрации с накоплением данных. Выгрузка данных: цели, задачи, работа с данными системы АСУ ТП. Принципы выбор временного периода выгружаемых значений.

Тема 6. Проектирование систем АСУ ТП

Принципы и закономерности проектирование систем регулирования и управления процессом. Параметры выбора приборов, мест их установки, регуляторов и звеньев. Оценка устойчивости проектируемой системы. Типовые системы регулирования и управления. Индивидуальные системы. Функции приборов и их графическое изображение согласно нормативным актам. Принципы и алгоритмы синтеза P&ID схем.

Б1.В.03 Базы данных и программные продукты в химической технологии

Дисциплина обязательная для изучения.

Второй семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Раздел 1. Неспециализированные программные пакеты

Тема 1. Математические пакеты программ

Excel. Mathcat. Matlab. Wolfram mathematica. Mapple. Statistica. Minitab.

Разбор основных возможностей программ, целей и задач, решаемых при использовании инструментов.

Тема 2. Базы данных

Excel. Access. SQL

Понятие базы данных, системы управления базами данных. Релиционные/нереляционные СУБД, понятие, отличия, примеры использования.

Тема 3. Программирование

Basic. Fortran. Python. Элементы ActiveX.

Введение, отличия, сферы применения. Основные положения и алгоритмы. Примеры решаемых задач.

Раздел 2. Специализированные программные пакеты

Тема 4. Трубопроводы

Olga. PipeSIM. Fronex.

Обзор интерфейсов, преимуществ и недостатков программных продуктов. Примеры задач, решаемых с помощью данных инструментов.

Тема 5. Моделирование ХТС

AspenONE Engineering. ChemCAD. AVEVA PRO II.

Основные отличия, достоинства и недостатки программы. Сферы применения в промышленности, обзор примеров применения.

Тема 6. Электронные кульманы

AutoCAD

Обзор основных возможностей, достоинства и недостатки.

Тема 7. Задачи конструирования и 3D моделирования

Пассат. AutoCAD Inventor. Solidworks. КОМПАС-3D.

Основные возможности, отличия, достоинства и недостатки.

Тема 8. МКЭ

ANSYS. COMSOL.

Возможности, отличия, достоинства и недостатки. Разбор задач, решаемых с помощью данных программных продуктов.

Тема 9. BIM

AVEVA. AutoPlant. Revit.

Возможности, отличия, достоинства и недостатки. Разбор задач, решаемых с помощью данных программных продуктов.

Б1.В.04 Основы анализа методом конечных элементов

Дисциплина обязательная для изучения.

Второй семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Основы механики жидкости и газа (МЖГ):

Основные уравнения движения жидкости и газа, граничные условия. Формулирование основных уравнений движения жидкости и газа в общем виде в случае ламинарного и турбулентного течения. Типы граничных условий и их математическая реализация

Тема 2. Метод конечных объемов применительно к МЖГ.

Основные положения, необходимые для дискретизации исходных уравнений. Преобразование уравнений.

Тема 3. Основы построения расчетных сеток для задач МЖГ с использованием оболочки ANSYS Workbench.

Особенности построения расчетных сеток применительно к задачам МЖГ. Описание интерфейса программного модуля Mesh в программном комплексе ANSYS Workbench.

Тема 4. Описание программного комплекса ANSYS CFX.

Описание интерактивного режима работы. Основные стадии решения задачи. Подготовка модели к решению задачи. Создание расчетного домена. Приложение граничных условий. Постпроцессорная обработка. Решение учебных задач.

Тема 5. Моделирование несжимаемых вязких течений в ламинарной постановке.

Особенности построения модели для несжимаемых течений. Граничные условия. Учет дополнительных эффектов, возникающих в несжимаемой жидкости. Решение учебных задач.

Тема 6. Моделирование сжимаемых вязких течений в ламинарной постановке

Особенности построения модели для сжимаемых течений. Дозвуковые и сверхзвуковые течения. Образование ударных волн. Решение учебных задач.

Тема 7. Практическая работа – решение практических задач, сравнение решения с аналитическим или полученным иным способом:

- Обтекание пластины потоком несжимаемой жидкости
- Течение в трубе
- Течение с внезапным расширением/ сжатием

Моделирование процесса движения жидкости в заявленных условиях, проверка сходимости и точности решения, сравнение результатов расчета с инженерными и экспериментальными результатами

Тема 8. Основы механики жидкости и газа (МЖГ):

Основные уравнения движения жидкости и газа, граничные условия применительно к турбулентным течениям и теплообмену.

Тема 9. Основы моделирование теплообмена в жидкости и газе.

Виды теплообмена. Построение модели. Задание граничных условий. Радиационный теплообмен. Конвективный теплообмен. Решение учебной задачи.

Тема 10. Основы моделирования турбулентных течений.

Физические причины возникновения турбулентности. Математические уравнения, описывающие эффекты турбулентности. Модели турбулентности, применяемые в расчетах движения жидкости и газа.

Тема 11. Практическая работа – решение практических задач, сравнение решения с аналитическим или полученным иным способом:

- Решение задач теплообмена в движущейся жидкости/ газе
- Решение задач естественной конвекции
- Моделирование турбулентных течений в каналах различной формы, сравнение решения с инженерными методиками

Б1.В.05 Основы цифровизации технологических процессов с использованием математического пакета Aspen

Дисциплина обязательная для изучения.

Второй семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение в Aspen HYSYS

Введение, обзор интерфейса программного комплекса, возможности и базовые основы работы в программном комплексе.

Тема 2. Начало работы

Обзор диспетчера базиса, термодинамических пакетов комплекса и их теоретических основ и применимости к системам различного рода, создание псевдокомпонентов, логические операторы.

Тема 3. Вспомогательное технологическое оборудование

Работа с насосами, теплообменниками, сепараторами в программном комплексе, расчет и моделирование вспомогательного технологического оборудования, работа с реальными сепараторами.

Тема 4. Ректификация, продукты разгонки

Предварительный расчет колонны фракционирования, расчет колонны фракционирования и её оптимизация, сходимость при расчете процесса ректификации, работа с рециклами.

Тема 5. Реакторное оборудование

Обзор типов реакторов, принципы работы с реакторами, создание набора реакций и задание их термодинамических констант, расчет моделей реакторного оборудования, анализ на чувствительность системы.

Тема 6. Сопротивление трубопроводов

Теоретические основы прикладной гидравлики, расчет потерь напора в трубопроводах с учетом фасонных изделий и пр.

Тема 7. Модуль «BlowDown»

Работа с модулем в Aspen Hysys, практическое применение модуля.

Тема 8. Отчеты в Aspen Hysys

Вывод отчетов математической модели процессов, аналитика и работа с отчетами. Работа с процессом через отчет.

Тема 9. Введение в Aspen Plus

Введение, обзор интерфейса, основные отличия Aspen Plus от Aspen HYSYS, возможности и базовые основы работы, вывод и просмотр результатов расчета, базы данных.

Тема 10. Начало работы

Обзор диспетчера базиса, термодинамических пакетов комплекса и их теоретических основ и применимости к системам различного рода, создание псевдокомпонентов, логические операторы.

Тема 11. Вспомогательное технологическое оборудование

Работа с насосами, теплообменниками, сепараторами, расчет и моделирование вспомогательного технологического оборудования.

Тема 12. Реакторное оборудование

Расчет и моделирование реакторного оборудования.

Тема 13. Фракционирующее оборудование

Обзор фракционирующего оборудования, расчет и моделирование колонны фракционирования.

Тема 14. Введение в Aspen EDR

Введение, обзор интерфейса, возможности и базовые основы работы, задание физических свойств моделируемых сред.

Тема 15. Расчет кожухотрубчатых теплообменников

Расчет кожухотрубчатых теплообменников, изменение геометрии кожухотрубчатых теплообменников, импорт теплообменников из Aspen HYSYS и Aspen Plus, дополнительные возможности расчета теплообменного оборудования (оптимизация конструкции и анализ загрязнений).

Тема 16. Другие типы теплообменного оборудования
Обзор других типов теплообменного оборудования и принципов его работы, расчет пластинчатых теплообменников, печей и змеевиков.

Б1.В.06 Избранные главы процессов и аппаратов химической технологии

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Теплообменное оборудование химического производства:

Типы и виды теплообменного оборудования, алгоритмы расчета в зависимости от типа теплообменного оборудования, подбор теплообменного оборудования, основные виды и типы теплоносителей, теплоносители высокотемпературных процессов. НТД на теплообменное оборудование.

Тема 2. Массообменное оборудование в химической технологии.

Сепараторы. Типы, методы расчета и подбора аппаратов. Аппараты сорбционных процессов, конструкция и методы расчета. Дистилляция и ректификация. Расчет многокомпонентной ректификационной колонны. Типы и виды контактных устройств, методы организации потоков внутри аппаратов и их влияние на процесс. Сложная ректификация. Действующие нормативные документы.

Тема 3. Оборудование с перемешивающими устройствами

Типы и виды перемешивающих устройств, алгоритмы их расчета, оценка необходимости установки

Тема 4. Динамическое оборудование

Типы и виды насосного и компрессорного оборудования. Подбор насосов и компрессоров исходя из специфики процесса. Анализ устойчивости оборудования к кавитационному, гидродинамическому и абразивному воздействию.

Тема 5. Оборудование ОЗХ.

Градирни, чиллеры, парогенераторы, установки подготовки воздуха и азота. Конструкционное исполнение, типы и виды оборудования. Алгоритм расчета и подбора аппаратов.

Б1.В.ДВ.01.01 Химическая технология нефте-/газоперерабатывающей отрасли

Элективная дисциплина.

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:
лекции: 16 ч;
практические занятия: 16 ч;
Язык реализации – русский.
в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Сырьевая база

Сырьевая база нефте-/газоперерабатывающей промышленности. Основные виды и классификация сырья. Источники газового сырья для газохимии. Классификация процессов переработки. Подготовка природного сырья. Требования к товарным продуктам. Процессы подготовки сырья. Сушка/очистка газа. Дегазация, обезвоживание нефти. Меры защиты оборудования при транспортировке природного сырья. Схемы подготовки нефтяного и газового сырья, конструкция аппаратов, параметры процессов.

Тема 2. Процессы переработки

Перегонка нефтяного сырья. Классификация процессов вторичное переработки. Процессы крекинга, риформинга, алкилирования, пиролиза, замедленного коксования, гидрогенизационные процессы. Схемы, параметры, аппаратурное оформление процессов. Методы регулирования и контроля процессов.

Тема 3. Процессы газопереработки

ГФУ, схемы, описание, параметры и аппаратурное оформление. Ожижение газов. Параметры. Турбодетандоры и контуры пропанового охлаждения. Компрессорные станции.

Тема 4. Математическое моделирование процессов

Методы, подходы и программное обеспечение модели процессов переработки нефти и газа. Результаты моделирования. Моделирование как метод оптимизации технологического процесса.

Тема 5. Тенденции развития нефте- и газоперерабатывающих производств

Современные технологические разработки. Тенденция увеличения глубины переработки. Новые катализаторы и тенденции развития каталитических процессов

Б1.В.ДВ.01.02 Химическая технология неорганического синтеза

Элективная дисциплина.

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:
лекции: 16 ч;
практические занятия: 16 ч;
Язык реализации – русский.
в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Минеральные соли;

Наиболее важные минеральные соли, способы их получения. Рудные способы. Химизм, кинетика процессов. Схемы, параметры наиболее важных процессов и аппаратурное оформление.

Тема 2. Получение кислот

Химизм и кинетика получения наиболее важных кислот в промышленности (плавиковая, соляная, серная, азотная, фосфорная). Схемы и аппаратное оформление процессов, технологические параметры. Коррозионное воздействие и принципы выбора материального исполнения аппаратов.

Тема 3. Получение щелочей

Типы щелочей и их классификация по маркам. Качественные показатели. Процессы получения основных марок, технологические параметры, схемы и аппаратное оформление.

Тема 4. Соли металлов

Хром, никель, железо, медь, цинк, кальция, марганец, свинец. Технологии получения. Параметры процессов, схемы основных процессов и аппаратное оформление. Методы и процессы применения солей.

Тема 5. Соли аммония

Свойства и применения. Основные технологии производства солей. Схемы и параметры процессов. Аппаратное оформление. Методы защиты от коррозии и принципы подбора материального оформления.

Тема 6. Производство удобрений

Типы удобрений. Современные тенденции развития и экологическая безопасность. Процессы получения, схемы, параметры и применяемое оборудование.

Тема 7. Углеродсодержащие соединения

Цианистые соединения и соединения с группой СО. Наиболее важные соединения для промышленности. Схемы производства, аппаратное оформление. Наиболее опасные факторы на производстве.

Б1.В.ДВ.01.03 Процессы и аппараты биотехнологии

Элективная дисциплина.

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение в курс «Процессы и аппараты биотехнологии»

Закономерности протекания процессов биотехнологии. Предмет и задачи дисциплины. Классификация основных процессов биотехнологии. Понятие о движущей силе процесса. Требования, предъявляемые к машинам и аппаратам. Требования, предъявляемые к материалам. Научные основы протекания процессов. Принцип оптимизации процессов.

Тема 2. Механические процессы

Измельчение. Теоретические основы измельчения. Конструкции и работа основных типов измельчающих машин. Процессы сортирования. Классификация способов сортирования. Аппараты для сортирования. Процессы обработки материалов давлением (прессование). Классификация процессов прессования. Отжатие жидкости из твердого материала. Формование пластического материала. Уплотнение сыпучего материала

брикетирование, гранулирование.

Тема 3. Гидромеханические процессы

Виды неоднородных систем. Классификация процессов разделения. Осаждение (отстаивание) под действием силы тяжести. Осаждение под действием центробежной силы. Аппараты для отстаивания и осаждения. Процессы фильтрования. Общие сведения. Типы фильтрования. Виды фильтрующих перегородок. Оборудование для фильтрования. Фильтры. Центрифуги. Мембранные процессы. Теоретические основы процесса разделения на полупроницаемых мембранах. Характеристика мембран. Мембранные аппараты.

Тема 4. Теплообменные процессы

Теория теплообмена. Классификация тепловых процессов и виды теплоносителей. Нагревание и охлаждение. Основы теплопередачи. Теплопроводность. Конвекция и конвективный обмен. Теплообменные аппараты. Классификация теплообменных аппаратов, типы конструкций и методики расчёта теплообменных аппаратов. Выпаривание и выпарные аппараты. Способы выпаривания. Выпарные аппараты.

Тема 5. Массообменные процессы

Классификация процессов массопередачи. Основное уравнение массопередачи. Механизм процесса массопередачи. Расчёты массообменных аппаратов. Массообменные аппараты. Сорбционные процессы. Классификация сорбционных процессов. Перегонка и ректификация. Теоретические основы процессов. Простая и сложная перегонка. Ректификационные аппараты. Экстракция. Методы экстракции. Экстрагирование в системе «Твёрдое тело–жидкость». Экстракция в системе «жидкость–жидкость». Экстракторы. Сушка. Формы связи влаги с материалом. Процесс сушки. Способы сушки, реализуемы в сушилках. Классификация сушилок. Основные типы сушилок. Кристаллизация и растворение. Общие сведения. Способы кристаллизации. Кристаллизаторы. Растворение – общие понятия.

Тема 6. Ферментационные процессы

Основные понятия. Роль микроорганизмов в промышленных производствах. Отличительные особенности биотехнологических производств и их продуктов. Ферментативные реакции и свойства ферментов. Стадии микробиологического производства: предферментационная, ферментационная и постферментационная и основные технологические процессы. Понятие об асептике. Пастеризация и стерилизация. Теоретические основы процессов. Способы стерилизации сред, воды, воздуха. Оборудование для стерилизации. Основные процессы при приготовлении питательных субстратов. Способы культивирования микроорганизмов – поверхностное и глубинное, периодическое, непрерывное, полупериодическое, их технологические особенности. Оборудование для культивирования микроорганизмов: основные типы ферментеров, их классификация, конструкции и характеристики. Процессы мойки и стерилизации ферментеров, сохранение асептики. Термостатирование и пеногашение. Процессы постферментационной стадии. Оборудование для выделения, очистки, концентрирования конечных продуктов. Особенности сушки биологически активных веществ и клеток и оборудование для сушки. Процессы утилизации и обезвреживания отходов производства.

Б1.В.ДВ.01.04 Химическая технология металлоорганического синтеза

Элективная дисциплина.

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;
практические занятия: 16 ч;
Язык реализации – русский.
в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Теоретические основы получения алюминийорганических соединений, области их применения;

Типы алюминийорганических соединений, их применений в промышленности. Химизм и кинетика процессов получения алюминийорганических основных соединений. Промышленное аппаратное оформление процессов, технологические параметры основных процессов получения алюминийорганических соединений.

Тема 2. Теоретические основы превращения алюминийорганических веществ (гидрирование, метанирование, гидролиз, окисление и др.)

Гидрирование и гидролиз алюминийорганических соединений, химизм и кинетика процессов переработки, аппаратное оформление процессов и технологические параметры. Влияние технологических параметров на процессы. Процессы метанирования, химизм и кинетика. Роль процессов метанирования в переработке углеводородного сырья (в том числе и алюминийорганических). Аппаратное оформление и технологические параметры.

Тема 3. Способы разделения алюминийорганических веществ

Промышленные способы выделения этилалюминия, алколюлятов алюминия. Методы моделирования и подбора оборудования для процессов разделения и очистки. Моделирование процесса разделения и очистки алюминийорганических веществ с использованием пакета Aspen

Тема 4. Органические соединения переходных металлов

Механизмы и кинетика реакций. Типы лигандов. Строение комплексов и их применение в катализе. Процессы синтеза, параметры схемы и аппаратное оформление. Специфика выбора материального исполнения оборудования. Характеристика и утилизация отходов производств. Методы и программные продукты математического моделирования

Тема 5. Органические соединения металлов других групп

Классификация металлорганических соединений, основные соединения, их роль в промышленности, катализе. Другие способы применения металлорганических соединений. Процессы получения наиболее важных металлорганических соединений, химизм, схемы, описание, параметры процессов и аппаратное оформление. Методы аналитического контроля производства.

Б1.В.ДВ.01.05 Технология получения полимеров и композиционных материалов

Элективная дисциплина.

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Сырьевая база полимерных материалов

Сырьевая база и технологии получения мономеров для производства полимерных материалов, в том числе и биоразлагаемых. Технологии получения мономеров (молочная кислота, изоцианаты, мономеры для синтетических каучуков по типу пропилена, бутилена, бутадиена и пр). Схемы, технологические параметры и аппаратное оформление процессов. Материалы исполнения аппаратов. Катализаторы процессов получения мономеров. Методы и программные продукты математического моделирования. Основные методы аналитического контроля производства. Характеристика и утилизация отходов производств

Тема 2. Синтетические каучуки и полиакрилаты

Основные виды синтетических каучуков. Схемы, технологические параметры и аппаратное оформление процессов. Кинетика и термодинамика полимеризационных процессов. Основные принципы создания и разработки производства полимеров. Катализаторы. Кинетика и термодинамика процессов. Основные методы аналитического контроля производства. Изготовление готовых изделий. Методы и программные продукты математического моделирования. Характеристика и утилизация отходов производств

Тема 3. Биоразлагаемые полимеры и полимеры медико-биологического назначения

Технологии получения биоразлагаемых полимеров. Полностью разлагаемые полимеры и биоразлагающие добавки. Специфика синтеза, катализаторы, кинетика и термодинамика. Схемы, параметры процессов и аппаратное оформление (включая материалы изготовления аппаратов). Основные методы аналитического контроля производства. Изделия из полимеров и аппаратура их изготовления. Методы и программные продукты математического моделирования. Характеристика и утилизация отходов производств

Тема 4. Полиизоцианаты и полиуретаны

Процессы, параметры схемы и аппаратное оформление. Специфика выбора материального исполнения оборудования. Катализаторы процесса полимеризации. Кинетика процессов. Характеристика и утилизация отходов производств. Технологии изготовления изделий и материалов. Методы и программные продукты математического моделирования

Тема 5. Композиционные материалы

Технологии изготовления композитов. Металлокомпозиты. Схемы, оборудование и технологические параметры процессов.

Б1.В.ДВ.01.06 Технология основного органического и нефтехимического синтеза

Элективная дисциплина.

Второй семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Классификация процессов органического и нефтехимического синтеза

Классификация процессов, основные примеры, основные положения. Методы получения и выделения продуктов, основные типы реакторов.

Тема 2. Основной органический синтез

Наиболее значимые процессы основного органического синтеза на примере НПЗ и химических производств, детальное изучение схем процессов, технологических параметров, аппаратурного оформления процессов (включая периферийное оборудование и оборудование ОЗХ). Алгоритмы и инструменты моделирования процессов основного органического и нефтехимического синтеза.

Тема 3. Тонкий органический синтез

Наиболее распространенные типовые процессы. Схемы, аппаратурное оформление типовых процессов. Особенности подбора оборудования. Нормативная база (касательно лекарственных препаратов). Особенности и принципиальные моменты тонкого органического синтеза. Понятие о сверхчеткой ректификации. Алгоритмы и инструменты моделирования процессов тонкого органического и нефтехимического синтеза.

Тема 4. Получение галогенорганических соединений

Процессы, параметры схемы и аппаратурное оформление. Специфика выбора материального исполнения оборудования.

Тема 5. Тенденции развития органического и нефтехимического синтеза.

Б1.В.ДВ.02.01 Цифровые методы проектирования химических, нефтехимических и биотехнологических производств

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Принципы расстановки оборудования

Принципы и нормативные документы, регламентирующие расстановку оборудования на открытых площадках, в помещениях. Компонировка и генеральный план. Противоаварийная защита. Предварительная и окончательная трассировка. Задания смежным отделам.

Тема 2. Прокладка трасс трубопроводов

Принципы прокладки трасс трубопроводов. Гидравлические расчеты. Надземная, подземная прокладка. Нормативные документы. Обустройство узлов учета, узлов регулирования. Расчет групп и категорий трубопроводов. Виды опор и нормативные документы. Расчет нагрузок. Компенсирующие устройства. Правила и нормативные документы обустройства проездов. Правила выбора материального исполнения трубопроводов.

Тема 3. Нагрузки

Исходные данные и программные продукты для расчета фундаментов под технологическое оборудование. Формирование заданий. Виды креплений оборудования (статического и динамического). Виды фундаментов. Защита от разливов и проливов.

Тема 4. Площадки обслуживания

Хром, никель, железо, медь, цинк, кальция, марганец, свинец. Технологии получения. Параметры процессов, схемы основных процессов и аппаратурное оформление. Методы и процессы применения солей.

Тема 5. Теплоизоляция

Типы теплоизоляции. Нормативные документы. Методы и программные продукты расчета теплоизоляции.

Тема 6. Вентиляция и экологическая безопасность

Расчет кратности циркуляции воздуха. Расчет газовых сбросов. Расчет фона при штатной работе объекта. Методы и технологии утилизации и обезвреживания сдувок, вентиляционных выбросов. Программные продукты расчета. Формирование заданий смежным разделам.

Тема 7. Пожарная безопасность

Расчет категорий и блоков. Требования к оборудованию в зависимости от категории помещений и блоков. Программные продукты расчета. Формирование заданий смежным отделам. Противоаварийная защита.

Тема 8. Специальные разделы проектной документации

ГОЧС. Принципы разработки. Расчет последствий аварийных ситуаций. Программные продукты. Правила ликвидации ЧС и нормативные документы.

Б1.В.ДВ.02.02 Цифровизация химико-технологических аппаратов (МКЭ)

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Механики жидкости и газа (МЖГ):

Основные уравнения движения жидкости и газа, граничные условия применительно к турбулентным течениям и теплообмену.

Тема 2. Моделирования турбулентных течений применительно к различным типам задач.

Математические уравнения, описывающие эффекты турбулентности. Модели турбулентности, применяемые в расчетах различных задач.

Тема 3. Построение расчетных сеток для задач МЖГ с учетом турбулентности и теплообмена с использованием оболочки ANSYS Workbench

Тема 4. Моделирование сопряженного теплообмена жидкость/твердое тело в рамках турбулентной постановки движения жидкости/ газа.

Построение домена для твердого тела. Задание параметров передачи тепла в твердотельной области. Организация расчета с учетом поверхности раздела жидкость/твердое тело.

Тема 5. Механика жидкости и газа (МЖГ):

Основные уравнения движения жидкости и газа, граничные условия применительно многофазным многокомпонентным средам. Лагранжев и эйлеров подход моделирования многофазных сред

Тема 6. Учет химических реакций при разработке модели

Моделирование движения жидкости и газа в случае наличия химических реакций между компонентами. Многофазные реакции.

Тема 7. Практическая работа – решение практических задач, сравнение решения с аналитическим или полученным иным способом:

– моделирование химических реакций/ массообменных процессов различными способами в рамках однофазной среды

– моделирование химических реакций/ массообменных процессов в рамках многофазного подхода к описанию движения среды

Тема 8. Использование подвижных сеток для решения задач

Решение задач с учетом деформации сетки. Основные предположения, приводящие к деформации расчетной области. Задание параметров движения узлов расчетной сетки

Тема 9. Практическая работа – решение практических задач, связанных с применением подвижных и деформируемых сеток

– моделирование работы запирающего устройства шарового типа или «бабочка»

– моделирование расчета устройств с перестроением сетки для получения более качественного решения

Б1.В.ДВ.02.03 Цифровизация технологических процессов с использованием математического пакета Aspen

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение в продвинутое моделирование

Введение в продвинутое моделирование, задачи и методы продвинутого моделирования.

Тема 2. Aspen Physical Property System – Ресурс термодинамической информации NIST TDE, Система регрессии данных (Data Regression System DRS) применительно к Aspen Hysys

Использование ресурса термодинамической информации NIST ThermoData Engine (TDE) и системы регрессии данных (DRS) для определения параметров моделирования чистых компонентов и смесей исходя из опытных данных, таких как: коэффициенты бинарного взаимодействия для расчета равновесия пар / жидкость, жидкость / жидкость, плотность, теплоемкость, вязкость и. т. д.

Тема 3. Ректификация, продукты разгонки

Составление и расчет сложных схем с колонными аппаратами, учет рекуперации и рециклов, работа со сложными и вакуумными колоннами на основании конструкторской документации, сходимость при расчете сложных колонн.

Тема 4. Оптимизация

Теоретические основы оптимизации системы, методы аналитической оптимизации, методы определения «слабого» места системы, оптимизация сложных технологических процессов.

Тема 5. Aspen Physical Property System – Ресурс термодинамической информации NIST TDE, Система регрессии данных (Data Regression System DRS)

Использование ресурса термодинамической информации NIST ThermoData Engine (TDE) и системы регрессии данных (DRS) для определения параметров моделирования чистых компонентов и смесей исходя из опытных данных, таких как: коэффициенты бинарного взаимодействия для расчета равновесия пар / жидкость, жидкость / жидкость, плотность, теплоемкость, вязкость и. т. д. применительно к Aspen Plus

Тема 6. Фракционирующее оборудование

Обзор фракционирующего оборудования на примере разгонки сложных азеотропных смесей, расчет и моделирование колонны фракционирования азеотропных смесей, оптимизация.

Тема 7. Периодическое оборудование

Обзор периодического оборудование и алгоритмов его расчета, моделирование периодического реактора, вывод результатов

Тема 8. Введение в Aspen Batch Modeler

Введение, обзор интерфейса, основные отличия от Aspen Plus и Aspen HYSYS, возможности и базовые основы работы, вывод и просмотр результатов расчета, базы данных.

Тема 9. Расчет в Aspen Batch Modeler

Расчет колонны периодического действия, определение оптимальных параметров и режимов работы, вывод результатов

Тема 10. Введение в пинч-анализ

Введение, построение композитных кривых, основные положения.

Тема 11. Табличные алгоритмы, сеточные диаграммы.

Введение, способы построения. Способы оптимизации систем.

Тема 12. Основы выбора утилит

Утилиты в химическом производстве. Выбор оптимальных утилит ведения процесса.

Тема 13. Оптимизация процессов химических производств

Разбор двух примеров оптимизации процессов на базе пинч-метода (новое производство и работающее).

Б1.В.ДВ.02.04 Цифровые методы расчета производств полимерных и композиционных материалов

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:
лекции: 16 ч;
практические занятия: 16 ч;
Язык реализации – русский.
в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Теоретические основы

Общие подходы к моделированию процессов получения полимерных и композиционных материалов. Используемые программные продукты. Моделирование кинетики реакций. Методы прогнозирования свойств и подбора состава композиционных материалов.

Тема 2. Aspen Physical Property System – Ресурс термодинамической информации NIST TDE, Система регрессии данных (Data Regression System DRS)

Использование ресурса термодинамической информации NIST ThermoData Engine (TDE) и системы регрессии данных (DRS) для определения параметров моделирования чистых компонентов и смесей исходя из опытных данных, таких как: коэффициенты бинарного взаимодействия для расчета равновесия пар / жидкость, жидкость / жидкость, плотность, теплоемкость, вязкость и. т. д. применительно к Aspen Plus

Тема 3. Модуль Aspen Polymers

Обзор модуля. Используемые термодинамические пакеты и базы данных. Аппаратурное оформление процессов. Характеризация полимеров. Подходы к моделированию твердых веществ.

Тема 4. Стандартные процессы

Обзор и практический расчет основных промышленных полимеризационных процессов с использованием модуля Aspen Polymers.

Тема 5. Подходы к моделированию композиционных материалов

Понятие композитов и сферы применения. Прогнозирование свойств в зависимости от состава композита. Программные продукты моделирования свойств композитных материалов. Процессы получения и используемое оборудование. Специфика подбора технологического оборудования и параметров процессов получения композитов.

Б1.В.ДВ.02.05 Технология производства ВЖС

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:
лекции: 16 ч;
практические занятия: 16 ч;
Язык реализации – русский.
в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Описание технологической схемы производства

Детальный разбор технологической схемы по блокам. Разбор основных особенностей аппаратурного оформления.

Тема 2. Материальный баланс и мощность завода

Разбор материального баланса процесса получения ВЖС по стадиям. Требования к сырью и материалам. Основные показатели, критические показатели. Входной контроль. Влияние качества сырья на процесс производства ВЖС

Тема 3. Параметры технологического процесса

Разбор по блокам. Регламентные технологические параметры и возможности их регулирования. Структура АСУТП производства по блокам. Основные узлы управления процессом. Влияние технологических параметров на качество полупродуктов и продуктов. Допустимые интервалы параметров процесса.

Тема 4. Общие требования к контрольно-измерительным приборам

КиП. Типы основных датчиков. Принципиальный момент и специфика применяемых приборов. Регулирующие клапаны. Система ПАЗ, специфика. АРМ оператора, детальный разбор функций регулирования и измерения. Предупредительная и аварийная сигнализация и блокировки процесса.

Тема 5. Энергоресурсы производства

Обеспечение производства энергоресурсами (пар, азот, оборотная вода, хладагенты и пр.). Источники, процессы получения (подготовки), параметры работы. Параметры энергоносителей (рабочие и допустимые).

Тема 6. Аппаратурное оформление процесса синтеза ВЖС

Реакторное оборудование. Специфика применяемого оборудования (по блокам), устройство и принцип работы. Штатные и допустимые технологические параметры работы, управление процессом, принципы выбора материального исполнения. Колонное оборудование (по блокам). Специфика определения конструкции аппаратов, основные параметры работы (штатные и допустимые) и алгоритмы управления процессами в колонном оборудовании, материальное исполнение оборудования. Теплообменное и вспомогательное технологическое оборудование (по блокам). Конструктивные особенности аппаратов, типы применяемых насос и компрессоров, принцип подбора оборудования, допустимые и штатные параметры работы, материальное исполнения оборудования.

Тема 7. Отходы производства

Характеристика отходов и выбросов, нормы образования, основные блоки производства, где образуются отходы и выбросы, меры по снижению выбросов и отходов, меры по обеспечению экологической безопасности производства. Способы утилизации отходов и обезвреживания выбросов производства.

Тема 8. Пусковые инструкции, остановка производства

Инструкция по эксплуатации, включая программу по пуску, остановке, аварийной остановке, и т.п.

Тема 9. Аналитическое сопровождение производства

План аналитического контроля, основные точки и методы отбора проб, критичные показатели. Методы аналитического сопровождения по стадиям, основные приборы.

Б1.В.ДВ.03.01 Расширенное использование компьютерных моделирующих систем

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;
практические занятия: 16 ч;
Язык реализации – русский.
в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

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.

Б1.В.ДВ.03.02 Цифровизация металлорганических и нефтехимических производств

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: ч.

Тематический план:

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 металлорганического 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.

Б1.В.ДВ.03.03 Молекулярное моделирование

Элективная дисциплина.

Третий семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение в дисциплину

Введение в дисциплину. Предмет курса. Основные понятия молекулярного моделирования. Единицы измерения в «молекулярном мире». Характерные единицы массы, энергии, времени. Число частиц в моделируемой молекулярной системе. Этапы развития молекулярного моделирования. Области применения молекулярного моделирования.

Тема 2. Силовые поля

Основные представления о силовых полях. Силовое поле AMBER. Функциональный вид взаимодействий. Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Выбор атомных зарядов. Основы работы с пакетами программ моделирования методами молекулярной механики.

Тема 3. Минимизация потенциальной энергии

Понятие о поверхности потенциальной энергии. Минимум, переходное состояние и интермедиа. Гессиант и его использование для характеристики точек. Глобальная и локальная минимизация геометрии. Алгоритмы локальной минимизации. Понятие о порядке минимизатора. Минимизаторы нулевого, первого и второго порядка. Метод симплексов и биекций. Метод следования градиенту, метод сопряженных градиентов. Метод Ньютона и Ньютона-Рафсона. Алгоритмы глобальной минимизации геометрии. Оптимизация геометрии молекулы.

Тема 4. Основы статистической термодинамики

Основные положения статистической термодинамики, их применение в молекулярном моделировании. Метод конформационного анализа Монте-Карло. Броуновская динамика. Оптимизация геометрии молекулы методом Монте-Карло.

Тема 5. Молекулярная динамика

Динамика молекулярных систем. Уравнения движения: Ньютона, Лагранжа, Гамильтона. Молекулярная динамика. Численное интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация). Алгоритм с перескоками (Leap-frog алгоритм). Скоростной алгоритм Верле. Проведение моделирования методом молекулярной динамики.

Тема 6. Особые условия в молекулярном моделировании

Ограничения, налагаемые на расчеты молекулярного моделирования для уменьшения сложности системы, а также для учета особых свойств системы: растворитель, протяженность, термодинамические характеристики. Представление растворителя.

Тема 7. Применение молекулярного моделирования

Применение молекулярного моделирования к моделированию биологических макромолекул, наноструктур, молекул в растворе. Использование молекулярного моделирования в генерировании структуры белков.

Б1.В.ДВ.04.03 Хемоинформатика

Элективная дисциплина.

Третий семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение в дисциплину

Введение в дисциплину. Основные проблемы химии. Прямая и обратная задачи моделирования. Их решение. Предназначение хемоинформатики. Определение хемоинформатики. Хемоинформатика как научная дисциплина. Хемоинформатика как дисциплина теоретической химии. История хемоинформатики.

Тема 2. Представление химических объектов

Представление молекул. Типичные представления молекул в химии (структурная формула, химическая формула, тривиальное имя). Особенности представления в хемоинформатике, требования к представлениям. Виды представлений. Линейные представления (имена, WLN, SMILES, SLN, InChI). Представление молекулярных графов. Битовые строки (структурные ключи, отпечатки пальцев, хэшированные отпечатки пальцев). Матричное представление, виды матриц. Табличное представление. Трехмерные представления. Координаты атомов. Поверхности. Виды поверхностей (ван-дер-ваальсова поверхность, поверхность Коннолли, доступная растворителю поверхность, поверхность исключенного растворителя, поверхность полости фермента, поверхность изоплотности, раскрашенные поверхности). Молекулярная формы. Структуры Маркуша. Типичные форматы файлов (MDL, Sybyl, PDB). Конвертация между представлениями. Конверсия структура-имя и имя-структура. Конверсия структуры в линейные представления. 2D-3D конвертация. Представления реакций. Типичное представление реакций. Представление реакции как набора реагентов и продуктов. Представления реакций как характеристик реакционного центра. Представления реакций как разности продуктов и реагентов. Представление реакции Фуджита. Представление Угги-Дугуджи. Представления химических структур - ручное создание и интерпретация представлений SMILES, InChI. Редактирование структуры молекул с использованием редакторов. Создание файлов, содержащих требуемое представление молекул. Поиск в базе данных по SMARTS. Редактирование реакций. Поиск атом-атомного соответствия в реакциях. Создание файлов, содержащих различные представления реакций.

Тема 3. Химические базы данных

Химические базы данных. Типы баз. Базы молекул, спектров, белков, кристаллографические, биомолекулы. Виды поиска в химических базах данных. Поиск по структуре, подструктуре, суперструктуре и по молекулярному сходству в базах данных. Основные алгоритмы поиска. Использование скринов. Рекурсивный подход. Ульмановский подход. Поиск в 3D базах данных. Фармакофоры. Фармакофорный поиск. Создание и управление компьютерных баз данных химических соединений, реакций и смесей.

Тема 4. Молекулярное разнообразие

Дизайн библиотек данных. Использование для виртуального скрининга и для высокопроизводительного скрининга. Теоретическая комбинаторная химия. Разбросанные и сфокусированные библиотеки. Генерация структур. RECAP. Fragmenter. Кластеризация молекул. Иерархические подходы. Неиерархические подходы. Отбор молекул без кластеризации. Навигация в химическом пространстве молекулярных графов и основанные на скаффолдах методы кластеризации объектов в химическом пространстве. Сравнение библиотек химических соединений, кластеризация объектов и отбор молекул в выборку на основании этого. Навигация в химическом пространстве с использованием метода GTM.

Тема 5. Молекулярные дескрипторы

Дескрипторы. Определение и использование дескрипторов. Роль дескрипторов в хемоинформатике. Многообразие дескрипторов. Классификация дескрипторов по функциональности. Физико-химические дескрипторы. Топологические индексы. Трехмерные. Фрагментные дескрипторы. Фармакофорные дескрипторы. Константы заместителей. Квантово-химические дескрипторы. Дескрипторы молекулярных полей. Дескрипторы молекулярного подобия. Расчет дескрипторов для молекул. Создание входных файлов для анализа связи структуры с реакционной способностью.

Тема 6. Моделирование «структура-свойство»

История моделирования «структура-свойство» SAR/QSAR/QSPR. Классический QSAR (методы Ганча, Фри-Вильсона). SAR/QSAR/QSPR на дескрипторах. Современные подходы. Методы машинного обучения. Интеллектуальный анализ данных в хемоинформатике. Задачи машинного обучения. Методы. MLR, гребневая регрессия, PLS, kNN, искусственные нейронные сети, SVM, решающие деревья, наивный Байес, гауссовы процессы. Использование методов машинного обучения. Валидация и кросс-валидация. ROC кривые. Предобработка данных. Химическая предобработка: отбор данных и стандартизация. Математическая предобработка: стандартизация, шкалирование, нормализация. Случайная корреляция и борьба с ней. Консенсусные подходы. Область применимости. 3D QSAR, основанный на пространственном выравнивании. Методы пространственного выравнивания. CoMFA, CoMSIA, Grid. Методы 3D QSAR, независимые от выравнивания. Grind. Общее понятие об nD QSAR. История моделирования «структура-свойство» SAR/QSAR/QSPR. Отбор дескрипторов, построение моделей структура-свойство и сравнение качества моделей.

Б1.В.ДВ.04.04 Основы техники безопасности и БЖД (металлорганика и нефтехимия)

Элективная дисциплина.

Третий семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Особые указания:

Особые указания по безопасной эксплуатации производства по блокам (металлорганический синтез, нефтехимический синтез), наиболее взрыво- пожароопасные опасные участки производства, параметры, влияющие на безопасность эксплуатации. Вредные и опасные факторы производства, типы и виды средств индивидуальной защиты,

правила использования. Первая помощь при поражении вредными и опасными факторами производства.

Тема 2. Безопасность оборудования

Мероприятия по техническому освидетельствованию, диагностированию, экспертизе промышленной безопасности, техническому обслуживанию и планово-предупредительному ремонту сооружений и технических устройств, применяемых на опасном производственном объекте.

Тема 3. Мероприятия по предотвращению и локализации аварий и инцидентов, а также устранению причин и последствий аварий и инцидентов на опасном производственном объекте

ПЛА, особые указания и специфика локализации аварий производства, факторы, приводящий к авариям, меры устранения и мероприятия по предотвращению аварийных и нештатных ситуаций.

Б1.В.ДВ.04.07 Специализированные цифровые модули AspenOne

Элективная дисциплина.

Третий семестр, зачет с оценкой

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Модуль Blowdown

Работа с модулем в Aspen Hysys, практическое применение модуля. Сценарии расчетов, исходные данные. Влияние параметров на результаты. Моделирование сбросных сетей и подбор предохранительной арматуры, расчеты и интерпретация результатов. Вывод отчетов.

Тема 2. Hysys Safety Analysis

Инструмент обеспечения безопасной эксплуатации аппаратов. Исходные данные и параметры процесса. Результаты расчетов.

Тема 4. EDR. Расчет теплообменного оборудования сложной конструкции

Обзор сложного теплообменного оборудования и принципов его работы, расчет пластинчатых теплообменников, печей и змеевиков.

Тема 4. Динамическое моделирование в Aspen Hysys

Случаи применения динамического моделирования. Исходные данные. Работа с нормативной документацией и каталогами производителей. Динамическое моделирование емкостных аппаратов, сепараторов, колонного оборудования. Анализ и интерпретация результатов расчета. Динамическое моделирование как инструмент оптимизации и анализа ХТС. Введение в теорию и методику разработки цифровых двойников производства.

Тема 5. Динамическое моделирование в Aspen Pus

Исходные данные. Отличительные особенности от Aspen Hysys. Отличия в подходах к динамическому моделированию. Динамическое моделирование емкостных аппаратов,

сепараторов, колонного оборудования. Анализ и интерпретация результатов расчета. Динамическое моделирование как инструмент оптимизации и анализа ХТС.

Б2.О.01.01(У) Ознакомительная практика

Вид: учебная.

Тип: Ознакомительная практика.

Практика обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет

Практика проводится на базе ТГУ. Способы проведения: стационарная.

Форма проведения: путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 3 з.е., 108 ч.

Продолжительность практики составляет: 4,5 нед.

Б2.О.02.01(П) Научно-исследовательская работа

Вид: производственная.

Тип: Научно-исследовательская работа.

Практика обязательная для изучения.

Третий семестр, зачет с оценкой

Практика проводится на базе ТГУ. Способы проведения: стационарная.

Форма проведения: путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 11 з.е., 396 ч.

Продолжительность практики составляет: 16,5 нед.

Б2.О.02.02(Пд) Преддипломная практика

Вид: производственная.

Тип: Преддипломная практика.

Практика обязательная для изучения.

Четвертый семестр, зачет

Практика проводится на базе ТГУ. Способы проведения: стационарная.

Форма проведения: путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 21 з.е., 756 ч.

Продолжительность практики составляет: 31,5 нед.

Б2.В.01.01(П) Технологическая практика

Вид: производственная.

Тип: Технологическая практика.

Практика обязательная для изучения.

Второй семестр, зачет с оценкой

Третий семестр, зачет с оценкой

Практика проводится на базе ТГУ на базе научных институтов СО РАН, на базе профильных организаций (например, ООО «ИХТЦ», ООО «Солагифт», ООО «Завод редких металлов», ООО «Ифар», ООО «НИОСТ», ООО «Томскводоканал», ПАО «Сибур Холдинг» и др.), с которыми ТГУ заключен договор о практической подготовке. Способы проведения: стационарная, выездная. Форма проведения: непрерывно в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 16 з.е., 576 ч.

Продолжительность практики составляет: 24 нед.

Б2.В.01.02(П) Научно-исследовательская работа в семестре

Вид: производственная.

Тип: Научно-исследовательская работа в семестре.

Практика обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет

Практика проводится на базе ТГУ. Способы проведения: стационарная.

Форма проведения: путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 4 з.е., 144 ч.

Продолжительность практики составляет: 6 нед.