

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 технологических процессов с использованием математического
пакета Aspen**

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-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

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-1.3. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК-1.4. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

ИОПК 2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

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

ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.

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

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить знания и навыки продвинутой работы с программным комплексом AspenONE Engineering, включающим такие компоненты как Aspen Hysys, Aspen Plus, EDR;

– Освоить знания и навыки, необходимые для успешного математического моделирования сложных непрерывных и периодических процессов химического и нефтехимического синтеза;

– Приобрести продвинутые навыки работы в современных программных комплексах математического моделирования и понимание алгоритмов работы данных комплексов;

– Освоить теоретическую базу и практические методы и алгоритмы энергооптимизации сетей с применением пинч-анализа в среде Aspen Energy Analyzer..

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам:

- Неорганическая химия
- Органическая химия
- Физическая химия
- Актуальные задачи современной химии;
- Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;
- Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen

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. 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.

Раздел 2. Aspen Plus: продвинутое моделирование 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 оборудования и алгоритмов его расчета, моделирование периодического реактора, вывод результатов

Раздел 3. Aspen Batch Modeler: моделирование периодических процессов

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

Раздел 5. Пинч-анализ

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).

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и практических занятий, проведения занятий с презентациями студентов по индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в третьем семестре проводится в 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 1.3., ИОПК 1.4., ИОПК2.2., ИОПК 3.1., ИОПК 3.2., ИПК 2.1.

Презентация должна включать расчетную модель процесса и основных аппаратов (по 1 каждого типа), краткие результаты расчета исходя из задания, методы оптимизации и пр. 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/>

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»