

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

» августа 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

**Математическое моделирование технологических процессов с использованием
математического пакета Aspen**

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.05.03

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А.С. Князев

Председатель УМК

В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

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 профессиональной адаптировать существующие программные продукты для решения задач деятельности;

- ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках;

- ПК- 3 Способен к решению профессиональных производственных задач.

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-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;

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

- ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов;

- ИПК-3.1. Анализирует имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагает технические средства для решения поставленных задач;

- ИПК-3.2. Производит оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов.

2. Задачи освоения дисциплины

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

Освоить основные знания и навыки, необходимые для успешного математического моделирования процессов химического и нефтехимического синтеза;

Освоить основные знания и навыки, необходимые для успешного математического моделирования процессов массо- и теплообмена;

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

Освоить принципы и алгоритмы расчета и подбора основного и вспомогательного технологического оборудования с использованием программного пакета.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули) по выбору 5 (ДВ5)».

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
Семестр 2, зачет с оценкой.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Дисциплина «Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen» является логическим продолжением в цепи дисциплин по направлению «Химия». Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, органическая химия, физическая химия, актуальные задачи современной химии 2, основы системного анализа и моделирование технологических процессов.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

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

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

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.

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

Зачет с оценкой во втором семестре проводится в устной форме в виде защиты индивидуального задания (проверяет освоение компетенций ОПК-1, ОПК-3, ПК-1, ПК-3) с презентацией и ответами на вопросы аудитории.

Индивидуальное задание выполняется на основании задания по дисциплине «Актуальные задачи современной химии 2», выданного в начале 1 семестра.

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) 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., стерiotипное, 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».