

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

« август » 20__ г.

Рабочая программа дисциплины

Практическое применение математического пакета Aspen

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальна и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: ФТД.11

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 А.С. Князев

Председатель УМК

 В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности;

- ПК-3. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- 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-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 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 (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к факультативным дисциплинам, предлагается обучающимся на выбор.

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

Семестр 3, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Дисциплина «Практическое применение 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
- Информатика
- Актуальные задачи современной химии 2;

- Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;
- Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 з.е., 36 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

Раздел 1. ASPEN HYSYS: продвинутое моделирование процессов.

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

Зачет в третьем семестре проводится путем выполнения индивидуального практического задания, проверяющего освоение компетенций ОПК-3, ПК-3. Результаты выполнения предоставляются в форме расчетной модели и устной форме. Время зачета 2,0 часа.

Примерные практические задания:

1. Рассчитать вакуумную колонну разделения. Даны состав сырья, конечный продукт, требования к конечному продукту, мощность по продукту. Определить оптимальные параметры работы колонны, подобрать контактные устройства, рассчитать процесс с учетом геометрии и типов подобранных контактных устройств, произвести анализ на чувствительность, варьируя параметры процесса, состав сырья и пр. (выдается в задании). Расчет производить с «раскрытием» верха колонны. Обосновать выбор расчетной программы, используемый термодинамический пакет.

Результаты работы определяются оценками «зачтено» или «не зачтено». При определении оценки учитывается выполнение/не выполнение заданий в течение семестра.

Оценка «зачтено» 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 билета. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера. Все практические задания в семестре выполнены и сданы.

Оценка «не зачтено» 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, выполнены и сданы не все практические задания в течение семестра. «Не зачтено» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя и студентов.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

б) Список индивидуальных заданий 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 OneNote, 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».