

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор института химии
д.х.н., проф. Горячева И.Ю.

« 01 » июня 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
Цифровизация химико-технологического процесса




Направление подготовки бакалавриата
20.03.01 Техносферная безопасность

Профили подготовки бакалавриата
Промышленная безопасность технологических процессов и производств

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов,
2023

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Никифоров Игорь Александрович		01.06.2023
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		01.06.2023
Заведующий кафедрой	Кузьмина Раиса Ивановна		01.06.2023
Специалист Учебного управления			

1. Цели освоения дисциплины

Цель преподавания дисциплины «Цифровизация химико-технологического процесса» состоит в формировании компетенций, связанных с повышением качества управления химико-технологических процессов.

2. Место дисциплины в структуре ООП бакалавриата

Дисциплина «Цифровизация химико-технологического процесса» (Б1.О.35) относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению 20.03.01 Техносферная безопасность, профилю «Промышленная безопасность технологических процессов и производств» и осваивается в 7 семестре.

Курсу предшествует изучение высшей математики, физики, вычислительной техники и вычислительной математики, технологии химических процессов и производств.

Освоение дисциплины необходимо для выполнения квалификационной работы бакалавра и получения профессиональных компетенций.

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
ОПК-4. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-4.1. Понимает процессы, методы поиска, сбора, хранения, обработки, предоставления, распространения информации и способы реализации таких процессов и методов ОПК-4.2. Выбирает и использует современные информационно-коммуникационные и интеллектуальные технологии, инструментальные среды, программно-технические платформы и программные средства, в том числе отечественного производства, для решения задач профессиональной деятельности. ОПК-4.3. Анализирует профессиональные задачи, выбирает и использует подходящие ИТ-решения.	Знать: Принципы построения автоматизированных систем управления химико-технологическими процессами Уметь: Пользоваться типовыми автоматизированными системами управления химико-технологическими процессами в роли оперативно-технического персонала Владеть: Методами принятия решений при выборе систем управления химико-технологическим процессом

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)						Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)
				Лекции	Лаборат. раб.		СР	Контроль	Всего	
					Общая трудоемкость	Из них – практическая подготовка				
1	Компьютерное и математическое моделирование технологических систем.	7	1	2					14	
2	Принципы моделирования технологических систем.	7	2	2	4		4		18	Отчет по теме лабораторной работы. Реферат.
3	Термодинамические пакеты моделирования – идеальная система, SRK, PR, UNIQUAC, NRTL, Wilson, Chao-Sidr, Грейсон-стрит. Создание псевдокомпонентов.	7	3-4	4	4		4		20	Отчет по теме лабораторной работы. Реферат.
4	Базовые модели аппаратов - Сепаратор, теплообменник, центробежный насос, запорно-регулирующее оборудование, КИП. Создание простой модели, основанной на сепараторе.	7	5-6	4	6		6		22	Отчет по лабораторной работе
5	Модель аппарата Тарельчатая колонна (1 пит. тарелка). Процесс разделения смеси путем массо- и теплообмена между неравновесными жидкой и паровой фазами при многократном и непрерывном контакте фаз на примере узла отбензинивания нефти	7	7	2	6		6		20	Отчет по лабораторной работе
6	Модели аппаратов Реактор вытеснения и Печь в обвязке со змеевиками.	7	8-13	12	6		6		30	Отчет по лабораторной работе. Контрольная работа

7	Процессы химических превращений в реакторах и передачи тепла от печи на примере узла гидроочистки дизельного топлива.	7	14-15	4	10		10		34	Отчет по лабораторной работе
8	Применение компьютерных моделей технологических систем в КТК	7	16-18	6	-		-		22	Отчет по лабораторной работе
9	Промежуточная аттестация.									Зачет
	Итого: часов за 7 семестр			36	36		36		108	

Содержание лекционного курса

Введение.

Компьютерное и математическое моделирование технологических систем. Стохастические и детерминированные модели. Статические и динамические модели. Принципы решения прямых и обратных задач моделирования. Параметры (коэффициенты) моделей и их неопределенность. Структурная и параметрическая идентификация. Анализ параметрической чувствительности. Исследование поведения технологических систем с применением адекватных моделей.

Раздел 1. Принципы моделирования технологических систем.

Иерархическая структура технологических систем, физико-химические, технологические и вычислительные аспекты решения задач компьютерного моделирования. Химикотехнологические системы и их иерархическая структура. Понятия математического описания, моделирующего алгоритма и расчетного модуля процесса и явления. Принципы разработки алгоритмов математического моделирования. Применение блочного принципа системного анализа при математическом моделировании процессов и явлений. Анализ технологической схемы химикотехнологического процесса как виртуального производства.

Применение пакетов прикладных программ (ППП) и пакетов моделирующих программ (ПМП) для анализа, оптимизации и синтеза химикотехнологических систем. Структура ППП и ПМП и их отличия. Функциональные возможности ППП и ПМП. Основные отечественные и зарубежные ППП и ПМП. Применение ППП и ПМП для компьютерного моделирования технологических систем. Исходные данные для выполнения расчетов и расчетных исследований. Возможности интеграции ППП и ПМП.

Моделирование парожидкостных равновесий.

Моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах жидкость-пар (ПЖР). Основные типы систем уравнений математического описания фазового равновесия жидкость-пар в многокомпонентных системах: а) основанные на использовании уравнений состояния и б) с учетом неидеальности жидкой фазы с применением коэффициентов активности компонентов смеси. Способы учета неидеальности паровой фазы. Варианты алгоритмов расчета равновесного состава с учетом и без учета неидеальности паровой фазы. Решение прямых и обратных задач при моделировании фазового равновесия жидкость-пар.

Моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах жидкость-жидкость (ЖЖР). Специфические особенности описания фазового равновесия в бинарной и многокомпонентной системах. Решение прямых и обратных задач при моделировании фазового равновесия жидкость-жидкость.

Моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах жидкость-жидкость-пар (ПЖЖР). Математическое описание трехфазного равновесия жидкость-жидкость – пар. Анализ числа степеней свободы системы уравнений математического описания. Решение прямых и обратных задач при моделировании фазового равновесия жидкость-жидкость-пар.

Моделирование процессов равновесного испарения и многокомпонентной массопередачи в процессах разделения парожидкостных систем.

Моделирование процесса многокомпонентного испарения жидкость-пар в сепараторах непрерывного действия. Математическое описание процесса дистилляции в многокомпонентном испарителе жидкость-пар. Алгоритм расчета и реализация алгоритма с использованием возможностей ПМП для решения задачи. Графическая иллюстрация решения задачи на примере бинарных систем.

Моделирование процессов многокомпонентного расслаивания и равновесного испарения жидкость-жидкость-пар в декантаторах и сепараторах непрерывного действия. Математическое описание процесса расслаивания в многокомпонентном испарителе жидкость-жидкость. Алгоритм расчета и реализация алгоритма с использованием возможностей ПМП. Графическая иллюстрация решения задачи на примере бинарных систем. Математическое описание процесса дистилляции в многокомпонентном испарителе жидкость-жидкость-пар. Алгоритм расчета и реализация алгоритма с использованием возможностей ПМП для решения задачи. Графическая иллюстрация решения задачи на примере бинарных систем.

Моделирование процесса многокомпонентной массопередачи на ступенях разделения колонн непрерывной ректификации. Математическое описание процесса многокомпонентной ректификации на тарелке колонны с учетом допущения об идеальном перемешивании жидкости и идеальном вытеснении паровой фазы. Аналитическое решение системы уравнений математического описания. Применение возможностей ПМП для решения задачи.

Моделирование процессов абсорбции, ректификации и жидкостной экстракции в колонных аппаратах.

Моделирование стационарного процесса непрерывной ректификации в тарельчатой и насадочной колонне. Математическое описание процесса многокомпонентной массопередачи. Применение возможностей ПМП для решения задачи.

Моделирование стационарного процесса непрерывной абсорбции в насадочной колонне. Математическое описание процесса многокомпонентной абсорбции. Разработка алгоритма решения, основанного на описании движения фаз моделью идеального вытеснения. Применение возможностей ПМП для решения задачи.

Моделирование стационарного процесса непрерывной жидкостной экстракции в тарельчатой колонне. Математическое описание процесса многокомпонентной экстракции. Ограничения на выбор модели фазового равновесия при описании равновесия жидкость-жидкость. Разработка алгоритма решения, основанного на описании движения фаз моделью идеального смешения. Применение возможностей ПМП для решения задачи.

Моделирование реакторных процессов.

Математические модели гомогенных и гетерогенных реакций. Кинетические зависимости для гомогенных и гетерогенных реакций. Закон действующих масс для одновременно протекающих реакций. Обоснование выбора дробных показателей степеней концентраций (парциальных давлений) компонентов в уравнениях скоростей стадий последовательных и параллельных реакций. Уравнения Аррениуса и Ленгмюра-Хиншельвуда, структурная и параметрическая

идентификация параметров этих уравнений. Применение ППП и ПМП для комплексного решения задач структурного и параметрической идентификации коэффициентов кинетических зависимостей.

Моделирование процессов в трубчатых реакторах. Стандартные модули ППП и ПМП для моделирования изотермических, адиабатических и политропических реакторов. Учет влияния режимов движения теплоносителей (прямоток и противоток) при моделировании процессов в реакторе. Алгоритмы решения задачи Коши и краевой задачи. Особенности алгоритмов при решении «жестких» задач.

Моделирование процессов в реакторах с мешалкой. Стандартные модули ППП и ПМП для моделирования изотермических, адиабатических и политропических реакторов.

Совместное моделирование процессов в технологических схемах химических производств. Понятие виртуального производства. Итерационный расчет технологических схем в каскаде аппаратов с заданными требованиями к качеству продукции и рециклическими материальными и тепловыми потоками с применением ПМП. Выбор корректирующих и демпфирующих параметров итерационных алгоритмов расчета технологических схем химико-технологических процессов.

Заключение. Модели и моделирование в системах искусственного интеллекта и экспертных системах. Применение компьютерных моделей технологических систем при автоматизированном проектировании (САПР) и в автоматизированных системах управления технологическими процессами (АСУТП). Статические и динамические модели - основной элемент тренажеров для обучения работе операторов, управляющих технологическими процессами.

Разделы тем для самостоятельного изучения, подготовки к лабораторным занятиям.

1. Модели. Моделирование. Области применения моделирования.
2. Определение модели. Свойства моделей. Цели моделирования. Классификация моделей.
3. Материальное моделирование. Идеальное моделирование
4. Физическое моделирование. Определение. Назначение. Достоинства. Недостатки.
5. Математическое моделирование. Классификация математических моделей. Задачи, которые решаются с помощью математического моделирования.
6. Основные виды математических моделей.
7. Этапы построения математической модели.
8. Схема этапов математического моделирования.
9. Состав математического описания химико-технологического объекта. Требования, предъявляемые к модели химико-технологического объекта.
10. Структура математической модели химико-технологического объекта.
11. Математическое описание структуры потоков в аппарате (гидродинамика). Типовые математические модели структуры потоков в аппарате.
12. Модель идеальное смешение. Модель идеальное вытеснение.

13. Разновидности модели идеальное вытеснение - диффузионное однопараметрическое вытеснение, диффузионное, двухпараметрическое вытеснение. Ячеечная модель.
14. Тепловой баланс химико-технологического объекта.
15. Методы составления математических моделей. Эмпирический метод составления математических моделей. Пассивный эксперимент. Активный эксперимент. Теоретический метод составления математических моделей.
16. Экспериментально-аналитический метод составления математических моделей
17. Области применения различных моделей структуры потоков в аппарате
18. Основные классы уравнений встречающихся в математическом описании. Способы решения дифференциальных уравнений
19. Численные методы решения дифференциальных уравнений. Метод Эйлера первого порядка, Метод Рунге-Кутты 4 порядка
20. Структурные модели.
21. Классификация структурных моделей.
22. Способы построения структурных моделей.
23. Принципы построения математических моделей химико-технологических систем (ХТС). Декомпозиционные методы расчета Интегральные методы.
24. Структурный анализ ХТС (Способы представления структуры ХТС).
25. Классификация и назначение топологических моделей ХТС (графов). Поточные графы. Информационно потоковые графы. Сигнальные графы.
26. Классификация ХТС по особенностям технологической топологии.
27. Типы технологических связей в топологии ХТС.
28. Классификация моделей ХТС. Гомоморфные, изоморфные модели. Классификация ХТС по способу функционирования.
29. Общий вид систем уравнений материально-тепловых балансов ХТС.
30. Идентификация ХТС. Оптимизация ХТС.
31. Основы построения статистических моделей

5. Образовательные технологии

При освоении дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- весь курс лекций сопровождается мультимедийными материалами с использованием проектора.

Практические занятия проводятся в дисплейном классе с использованием пакета моделирующих программ «Универсальный тренажерный комплекс» (УТК), разработки АО «ИНИУС», КТК АВТ, мультимедийного учебника и пр.

Реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе деловых игр, разбор конкретных ситуаций. Лабораторные занятия направлены на формирование у обучающихся умения и навыков в области моделирования и управления процессами и аппаратами химической технологии.

В рамках практической подготовки студентов профессиональные навыки формируются при выполнении индивидуальных и групповых лабораторных

работ, подборе оптимальных параметров проведения технологических процессов, контроль проводят в виде индивидуальных отчетов, коллоквиумов, разборов конкретных ситуаций, деловых игр.

При изучении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья следует применять следующие адаптивные технологии: использование социально-активных рефлексивных методов обучения для создания комфортного психологического климата в студенческой группе, использование дистанционных технологий при реализации программы, работа по индивидуальному плану (время подготовки к сдаче отчета, а также выполнение и оформление лабораторной работы увеличивать на 0.5 часа. При невозможности эффективного выполнения лабораторной работы – проводить в форме лабораторного эксперимента).

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Предлагаемые ниже вопросы могут быть использованы для оперативного контроля за уровнем усвоения учебного материала студентами, в том числе при проведении контрольных работ:

Основные темы лабораторных занятий

2. Моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах жидкость-пар
3. Моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах жидкость-жидкость
4. Моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах жидкость-жидкость-пар
5. Моделирование стационарного процесса непрерывной ректификации в тарельчатой и насадочной колонне.
6. Моделирование стационарного процесса непрерывной абсорбции в насадочной колонне
7. Моделирование стационарного процесса непрерывной жидкостной экстракции в тарельчатой колонне
8. Моделирование процессов в трубчатых реакторах
9. Моделирование процессов в реакторах с мешалкой
10. Применение компьютерных моделей технологических систем в КТК

Практические занятия проводятся в дисплейном классе с использованием следующих программ:

Пакет прикладных моделирующих программ УТК 6.5, разработки АО «ИНИУС», г. Саратов.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы студентов

Рабочей программой дисциплины «Цифровизация химико-технологического процесса» предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 36 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- изучение отдельных разделов тем дисциплины
 - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к лабораторным занятиям;
- работу с Интернет-источниками;
- подготовку к различным формам контроля.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины «Цифровизация химико-технологического процесса» следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как www.rambler.ru, www.yandex.ru, google.ru, www.yahoo.ru и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 7.1 Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация (зачет)	Итого
7	10	40	0	20	0	0	30	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

Лекции

Диапазон баллов	Критерий оценки
0 баллов	Посещение менее 5 лекционных занятий (менее 45%)
1-2 балла	Посещение 5-7 лекционных занятий (28-39%)
3-4 баллов	Посещение 8-9 лекционных занятий (44-50%)

5-6 баллов	Посещение 10-11 лекционных занятий (55- 61%)
7-8 баллов	Посещение 12-14 лекционных занятий (67- 78%)
9 баллов	Посещение 16-18 лекционных занятий (78- 90%)
10 баллов	Посещение 16-18 лекционных занятий (90- 100%) и участие в лекционных дискуссиях

Лабораторные работы

Количество баллов за 1 работу	Критерий оценки
0	Работа не выполнена
1-3	Работа выполнена и оформлена
4-5	Работа выполнена самостоятельно, аккуратно оформлена и сдана в срок

Практические занятия

не предусмотрены

Самостоятельная работа

	0	1-4	5-7	8-10
Реферат	Работа не выполнена	Материал в работе подобран не грамотно, тема до конца не раскрыта	Материал соответствует теме работы, но оформлен не в соответствии с правилами	Материал соответствует теме работы, оформлен в соответствии с правилами и доложен на научном семинаре

Автоматизированное тестирование

не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности

не предусмотрены.

Итоговая аттестация

Таблица 2. Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов в оценку:

60 баллов и более	«зачтено»
меньше 60 баллов	«не зачтено»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Цифровизация химико-технологического процесса».

а) литература:

1. Теоретические основы разработки и моделирования систем автоматизации [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Александр Михайлович Афонин, Юрий Николаевич Царегородцев, Алла Медхатовна Петрова, Юлия Евгеньевна Ефремова. - Москва : Издательство "ФОРУМ", 2011. - 192 с. - ISBN 978-5-91134-479-5 : Б. ц. ЭБС «ИНФРА-М»

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. http://www.fptl.ru/Chem_block.html – различные учебно-методические материалы по химии;
2. <http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html> - учебники, практикумы и справочники по химии.
3. сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/weldept.html>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Оборудование дисплейного класса Института Химии СГУ

Место осуществления практической подготовки: дисплейный класс
Института Химии СГУ.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 20.03.01 «Техносферная безопасность» и профилю подготовки «Промышленная безопасность технологических процессов и производств».

Автор (ы):

Доцент кафедры нефтехимии и техногенной безопасности
Института химии СГУ, к.х.н.

Никифоров И.А.

Программа одобрена на заседании кафедры нефтехимии и техногенной безопасности от «01» июня 2023 года, протокол № 15.