

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ
И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«05» июля 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Оптимизация химико-технологических процессов

Уровень высшего образования:
Магистратура

Направление подготовки (специальность):

14.04.01 Химическая технология

Направленность (профиль) ОПОП:

Технология композиционных материалов и малотоннажного синтеза

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 04.02.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 01 июля 2019 г., №842.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-2.М Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для моделирования свойств материалов и оптимизации технологических процессов	Знать: основные пакеты компьютерных программных комплексов, применяемые при анализе обработке, оптимизации и хранении результатов научных экспериментов; Уметь: разрабатывать алгоритмы обработки экспериментальных данных с применением современных компьютерных технологий и применять современные пакеты компьютерных программ для анализа и оценки результатов самостоятельных научных исследований; Иметь опыт деятельности: в области обработки и оптимизации процессов и явлений в химии и химической технологии с применением современных пакетов компьютерной математики и пакетов моделирующих программ (симуляторов).
ПК-9.М Способность создавать модели технологических процессов, предлагать способы их верификации, проводить исследования в лабораторных и полупромышленных условиях для проверки корректности предлагаемых моделей.	Знать: методы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и численные методы вычислительной математики для реализации на компьютерах моделей химико-технологических процессов; Знать: принципы применения методологии компьютерного моделирования при автоматизированном проектировании и компьютерном управлении химическими производствами Уметь: применять пакеты компьютерной математики и моделирующих программ (симуляторов) для технологических расчетов химико-технологических процессов при решении задач научных исследований, а также задач технологического проектирования химико-технологических систем; Уметь: решать обратные задачи структурной и параметрической идентификации математического описания процессов химических превращений в реакторах с мешалкой и трубчатых реакторах, а также при математическом моделировании термодинамических процессов при парожидкостном равновесии в бинарных и многокомпонентных системах Владеть: методами применения пакетов компьютерной математики и пакетов моделирующих программ (симуляторов) для проведения технологических расчетов и оптимизации процессов химической технологии, а также синтеза химико-технологических систем и подготовки исходных данных для проектирования

<p>ПК-10.М Способность проводить технологические и технические расчёты, разрабатывать проекты технических условий, технологических регламентов и стандартов для внедрения инновационных технологий.</p>	<p>Знать: иерархическую структуру химико-технологических процессов и методику системного анализа химических производств Знать: методы технологических расчетов химико-технологических процессов с применением пакетов компьютерной математики и моделирующих программ (симуляторов); Знать: принципы применения методик технологических расчетов при автоматизированном проектировании (САПР). Уметь: решать прямые и обратные задачи компьютерного моделирования и оптимизации процессов в реакторах с мешалкой, в трубчатых реакторах, в периодических реакторах с мешалкой; Уметь: рассчитывать режимные, технологические и конструкционные параметры процессов в аппаратах химической технологии Уметь: рассчитывать технологические схемы химических производств, в том числе и с обратными (рециклическими) материальными и тепловыми потоками; Уметь: решать задачи оптимизации процессов химической технологии</p>
--	---

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 56 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (18 часов - занятия лекционного типа, 36 часов – занятия семинарского типа, 2 часа - промежуточная аттестация), 52 часа составляет самостоятельная работа магистранта.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: теоретический и практический материал по дисциплинам: информатика, вычислительная математика, моделирование химико-технологических процессов, общая и неорганическая химия, органическая химия, физическая химия, процессы и аппараты химической технологии и общая химическая технология.

Уметь: пользоваться компьютером для решения практических расчетных задач в области оптимизации процессов в химии и химической технологии с использованием современных пакетов компьютерной математики и моделирующих программ .

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы	Самостоятельная работа обучающегося,

дисциплине (модулю)		из них					часы			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Модуль 1.	16	4	4				8	8		8
Модуль 2.	22	5	6				11	11		11
Модуль 3.	22	3	8				11	11		11
Модуль 4.	23	3	9				12	11		11
Модуль 5.	23	3	9				12	11		11
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2					2	2			
Итого		18	36			2	56	54		52

Содержание модулей:

Модуль 1. Характеристика задач оптимизации процессов химической технологии

Иерархическая структура процессов химических производств, их математическое моделирование и оптимизация.

Основные принципы оптимизации стационарных и динамических процессов химической технологии.

Модуль 2. Оптимизация типовых химико-технологических процессов

Аналитические методы оптимизации химико-технологических процессов.

Численные методы одномерной оптимизации.

Численные методы многомерной оптимизации.

Модуль 3. Оптимизация термодинамических процессов на примере определения азеотропных условий при парожидкостном равновесии с применением пакета компьютерной математики.

Модуль 4. Оптимизация физико-химических процессов на примере определения оптимального времени пребывания и температуры в реакторах с мешалкой и трубчатых реакторах с применением пакета компьютерной математики.

Модуль 5. Оптимизация химико-технологических процессов на примере определения оптимальных режимных параметров ректификационных колонн в технологической схеме получения абсолютного спирта с применением пакета моделирующих программ.

5. Образовательные технологии:

-использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;

-преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ и РХТУ им. Д.И. Менделеева.

6. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Темы для самостоятельной работы:

1. Безусловная оптимизация методом классического математического анализа.
2. Безусловная оптимизация численными методами вычислительной математики.
3. Оптимизация методом нелинейного программирования (НЛП)
4. Прямые методы поиска экстремума функции многих переменных, не использующие производные (методы нулевого порядка)
5. Прямые методы поиска экстремума функции многих переменных, использующие производные (методы первого порядка)
6. Определение оптимального времени пребывания смеси в проточном реакторе с мешалкой для последовательной химической реакции в аппарате идеального смешения, приняв в качестве критерия оптимальности выход целевого промежуточного продукта.
7. Определение оптимального времени проведения последовательной реакции, использовав в качестве критерия оптимальности выход промежуточного продукта.
8. Определение оптимальной температуры проведения обратимой двухкомпонентной обратимой реакции в реакторе с мешалкой, использовав в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта.
9. Моделирование парожидкостного равновесия в бинарных системах с учетом неидеальности жидкой и паровой фаз.

10. Определение параметров уравнения Antoine, аппроксимирующего температурную зависимость давления насыщенного пара индивидуального вещества.
11. Условия Redlich-Kister-Herington для проверки термодинамической совместимости бинарных равновесных данных жидкость-пар.
12. Термодинамические модели учета неидеальности жидкой и паровой фаз: коэффициенты активности и коэффициенты фугитивности.
13. Решение задачи параметрической идентификации для определения констант уравнений для расчета коэффициентов активности в многокомпонентных жидких системах при фазовом равновесии.
14. Определение условий азеотропизма путем решения задачи оптимизации с определением температуры и состава азеотропной смеси в бинарной системе.
15. Алгоритм моделирования парожидкостного равновесия при изотермических и изобарических условиях.
16. Алгоритм определения азеотропных условий для изотермических и изобарических равновесных данных.
17. Моделирование процессов в испарителях и конденсаторах многокомпонентных смесей. Расчет фазового равновесия жидкость-пар в многокомпонентных смесях с учетом неидеальности паровой и жидкой фаз.
18. Расчет кинетических параметров гомогенных и гетерогенных химических превращений, а также определение их зависимостей от температур и давлений.
19. Моделирование периодических реакторных процессов с учетом данных о константах скоростей отдельных стадий химических превращений.
20. Моделирование непрерывных реакторных процессов с учетом конверсии ключевых реагентов.
21. Моделирование непрерывных реакторных процессов на основе данных о константах равновесия химических реакций.
22. Моделирование непрерывных реакторных процессов с учетом данных о константах скоростей отдельных стадий химических превращений.
23. Приближенный оценочный и проектный расчет непрерывной ректификации на основе выбора ключевых компонентов разделяемых смесей и определение оптимального давления.
24. Моделирование процессов непрерывной ректификации в тарельчатых и насадочных колоннах. Расчет фазового равновесия газ-жидкость и пар-жидкость с использованием уравнений состояния при различных давлениях. Расчет процессов физической абсорбции и ректификации с использованием концепции теоретической тарелки. Эмпирический учет эффективности контактных устройств колонных аппаратов.
25. Определение оптимальных диаметров и высот ректификационных колонн, а также перепада давления в колоннах.
26. Моделирование и оптимизация технологических схем химических производств с большим числом рециклических (обратных) материальных и тепловых потоков. Основы энерго- и ресурсосбережения в химической технологии.
27. Определение оптимальных параметров технологических процессов. Выбор эффективных алгоритмов оптимизации энерго- и ресурсосберегающих технологий.

7. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbgmu.ru/>

Основная литература

1. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики: учебное пособие. Санкт-Петербург: Лань, 2020. – 404 с.
2. Решение задач безусловной оптимизации химико-технологических процессов с применением пакета прикладных программ вычислительной математики: учебное пособие / А.В. Панкрушина, А.С. Павлов, Т.Н. Гартман, Е.В. Царева, Ф.С. Советин – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2018. – 124 с.
3. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов. – М: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 416 с.
4. MATLAB 7 / Алексеев Е.Р., Чеснокова О.В. – М.: НТ Пресс, 2006. – 464 с.: ил. – (Самоучитель).
5. Моделирование гидравлических и теплообменных процессов с применением пакета MATLAB: учебное пособие/ Под редакцией Т.Н. Гартмана. – М. РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. – 150 с.
6. Основные процессы и аппараты химической технологии. Пособие по курсовому проектированию. Под ред. Ю. И. Дытнерского. 3-е изд., перераб. и дополн. М. «Альянс», 2007 – 496 с.
7. CHEMCAD 6 / USER GUIDE–.: Houston, TEXAS 2011. – 670 с.
8. Гартман Т.Н., Клушин Д. В., Советин Ф. С., Соломатин А. С., Проскуро Е. А. Применение симулятора CHEMCAD для гидравлических расчётов трубопроводных систем. Учебное пособие / под редакцией Гартмана Т. Н. - М. РХТУ им. Д. И. Менделеева. 2012 – 221 с.

Дополнительная литература

1. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. М., Химия. - 1975. - 534 с.
2. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М., Химия. - 1985. - 448 с.
3. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. М: - Высшая школа. - 1991. - 400 с.
4. Гартман Т.Н., Д.В. Клушин, Васильев В.В. и др. Введение в системы прикладной информатики химических предприятий: Учебное пособие. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2006 - 62 с.
5. Гордеев Л.С., Кафаров В.В., Бояринов А.И. Оптимизация процессов химической технологии – М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева. - 1972. – 275 с.

6. Бобров Д.А., Кафаров В.В., Перов В.Л. Оптимизация химико-технологических систем: Учебное пособие Ч.І. М: - МХТИ им. Д.И. Менделеева. - 1975. - 48 с.
7. Бояринов А.И. Моделирование и основы оптимизации химико-технологических процессов. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева. - 1980, - 48 с.
8. Гартман Т.Н., Епишкин А.П., Шакина Э.А. Вычислительная математика для химико-технологических специальностей: Методические указания, теоретический курс и контрольные задания для студентов заочников вузов. -М: Высшая школа. - 1984. - 112 с.
9. Решение типовых задач одномерной и многомерной оптимизации с применением пакета MATLAB: учеб. пособие / под ред. проф. Т.Н. Гартмана. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011 – 94 с.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватель:

Доктор технических наук, профессор Гартман Томаш Николаевич, кафедра информатики и компьютерного проектирования РХТУ им. Д.И. Менделеева, tngartman@gmail.com, 89037243250.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачет. На зачете проверяется достижение результатов обучения, перечисленных в п.2.

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала.

Вопросы к зачету:

1. Пакеты компьютерной математики. Структура программного обеспечения и принципы функционирования. Решение задач моделирования, идентификации и оптимизации химико-технологических процессов с их применением.
2. Пакеты моделирующих программ. Структура программного обеспечения и принципы функционирования. Решение задач анализа, оптимизации и синтеза химических производств с их применением.
3. Решение прямых и обратных задач компьютерного моделирования химико-технологических процессов.
4. Постановка задачи оптимизации химико-технологических процессов. Критерии оптимальности, целевые функции и ресурсы оптимизации. Алгоритмы оптимизации нулевого, первого и второго порядков.
5. Классические методы математического анализа для решения задач одномерной и многомерной оптимизации. Необходимые и достаточные условия экстремумов одной и многих переменных.

6. Применение методов оптимизации для определения оптимальных технологических и режимных параметров процессов в химии и химической технологии. Критерии оптимальности и целевые функции.
7. Применение методов оптимизации для решения задач структурной и параметрической идентификации процессов химической технологии. Критерии оптимальности и целевые функции.
8. Применение методов оптимизации для компьютерного моделирования процессов химической технологии. Критерии оптимальности и целевые функции.
9. Нелинейное программирование. Технологические и экономические критерии оптимальности. Ограничения первого и второго рода.
10. Моделирование фазового равновесия жидкость-пар в бинарных системах с применением пакета компьютерной математики. Решение прямых и обратных задач оптимизационными методами.
11. Моделирование фазового равновесия жидкость-пар в многокомпонентных системах с применением пакета моделирующей программы. Решение прямых и обратных задач оптимизационными методами.
12. Определение азеотропных условий при парожидкостном равновесии методами одномерной и многомерной оптимизации.
13. Постановка и решение задачи оптимизации процесса в периодическом реакторе с мешалкой.
14. Постановка и решение задачи оптимизации процесса в непрерывном реакторе с мешалкой.
15. Постановка и решение задачи оптимизации процесса в непрерывном трубчатом реакторе.
16. Определение кинетических констант гомогенных и гетерогенных, в том числе и каталитических, процессов химических превращений.
17. Определение оптимального давления в ректификационной колонне с применением приближенной модели процесса.
18. Определение оптимального флегмового числа в ректификационной колонне с применением приближенной модели процесса.
19. Определение оптимальной высоты и давления в ректификационной колонне с применением строгой модели процесса.
20. Постановка и решение задачи оптимизация технологической схемы химико-технологического процесса. Критерии оптимальности. Алгоритмы оптимизации. Применение пакетов моделирующих программ - симуляторов химических процессов для этой цели.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания

Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНКИ- ВАНИЯ
<p>Знать: основные пакеты компьютерных программных комплексов, применяемые при анализе обработке, оптимизации и хранении результатов научных экспериментов</p> <p>Знать: иерархическую структуру химико-технологических процессов и методику системного анализа химических производств;</p> <p>Знать: методы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и численные методы вычислительной математики для реализации на компьютерах моделей химико-технологических процессов;</p> <p>Знать: принципы применения методологии компьютерного моделирования при автоматизированном проектировании и компьютерном управлении химическими производствами.</p> <p>Знать: методы технологических расчетов химико-технологических процессов с применением пакетов компьютерной математики и моделирующих программ (симуляторов);</p> <p>Знать: принципы применения методик технологических расчетов при автоматизированном проектировании (САПР).</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь: применять пакеты компьютерной математики и моделирующих программ (симуляторов) для технологических расчетов химико-технологических процессов при решении задач научных исследований, а также задач технологического проектирования химико-технологических систем;</p> <p>Уметь: решать обратные задачи структурной и параметрической идентификации математического описания процессов химических превращений в реакторах с мешалкой и трубчатых реакторах, а также при математическом моделировании термодинамических процессов при парожидкостном равновесии в бинарных и многокомпонентных системах;</p> <p>Уметь: решать прямые и обратные задачи компьютерного моделирования и оптимизации процессов в реакторах с мешалкой, в трубчатых реакторах, в периодических реакторах с мешалкой;</p> <p>Уметь: рассчитывать режимные, технологические и конструкционные параметры процессов в аппаратах химической технологии</p> <p>Уметь: рассчитывать технологические схемы химических производств, в том числе и с обратными (рецик-</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>

<p>лическими) материальными и тепловыми потоками; Уметь: решать задачи оптимизации процессов химической технологии.</p>	
<p>Владеть: методами применения пакетов компьютерной математики и пакетов моделирующих программ (симуляторов) для проведения технологических расчетов и оптимизации процессов химической технологии, а также синтеза химико-технологических систем и подготовки исходных данных для проектирования. Иметь опыт деятельности: в области обработки и оптимизации процессов и явлений в химии и химической технологии с применением современных пакетов компьютерной математики и пакетов моделирующих программ (симуляторов)</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>