



**Рабочая программа
учебной дисциплины**

Ф ТПУ 7.1-21/01

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета: ХТ

_____ В. М. Погребенков
_____ 2008 г.

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИРУЮЩИЕ СИСТЕМЫ В ХТ
Рабочая программа для направления 240100 «Химическая технология и биотехнология», специальности 240802 «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика».

(Очная ТПУ ХТФ Кафедра химической технологии топлива и химической кибернетики)

Факультет Химико-технологический (ХТФ)

Обеспечивающая кафедра Химической технологии топлива (ХТТ)

Курс 5

Семестр 10

Учебный план набора 2008 года с изменениями _____ года

Лекции 36 _____ час (ауд.)

Лабораторные занятия 54 _____ час (ауд.)

Всего аудиторных занятий 90 _____ часов

Самостоятельная (внеаудиторная)

Работа 108 _____ часа

Общая трудоемкость 198 _____ часа

Экзамен в 10 семестре

2008 г.

Предисловие

1. Рабочая программа составлена на основе ОС ТПУ по направлению 240100 «Химическая технология и биотехнология», специальности 240802 «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика», утвержденного _____, и _____

РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании обеспечивающей кафедры «Химической технология топлива и химической кибернетики» 31.08.2009 г., протокол №7 .

2. Разработчик
профессор кафедры ХТТиХК _____ Э.Д. Иванчина

3. Зав. обеспечивающей кафедрой ХТТиХК _____ А.В. Кравцов

4. Рабочая программа СОГЛАСОВАНА с факультетом, и соответствует действующему плану.

Зав. выпускающей кафедры _____ Кравцов А.В.

Аннотация

Компьютерные моделирующие системы в ХТ

240100.38(м)

Каф. ХТТиХК ХТФ

Профессор Иванчина Эмилия Дмитриевна

Тел. (3822) 563443, E-mail: ied@zmail.ru

Цель:

Освоение методов математического моделирования и искусственного интеллекта химико-технологических процессов; Приобретение навыков применения компьютерных моделирующих систем для мониторинга и оптимизации работы промышленных установок.

Знакомство с интеллектуальными компьютерными системами; Принципы построения интеллектуальных систем для расчета, оптимизации и прогнозирования нестационарных каталитических процессов на примере каталитического риформинга, изомеризации, гидрокрекинга (бензинов, средних и тяжелых дистиллятов), каталитического крекинга, процесса Клауса и др.

Содержание:

Применение компьютерных моделирующих систем; Многокритериальный анализ химических производств; Пути повышения эффективности работы установок переработки нефти.

Курс 5 (10 семестр – экзамен)

Всего 198 часов, в т.ч. Лк – 36 часа, Практические занятия – 54 часов.

1 Цели и задачи учебной дисциплины

Широкое внедрение в химию методов компьютерного моделирования и информационных систем не только не освобождают исследователя от необходимости знания математических методов и применения к химическим задачам, но и ,напротив , делает это изучение одним из важнейших этапов подготовки специалиста - химика. Так, приближенное решение нелинейных уравнений позволяет быстро и с достаточной точностью определить выходы продуктов в химических процессах. Для исследования кинетических закономерностей химических явлений необходимо знание приближенных методов решение дифференциальных уравнений, а также методов вычисления интегралов. Владение элементами теории вероятностей и статистическими методами обработки результатов обязательно для анализа экспериментально полученных результатов.

Инженер химик-технолог должен иметь представление:

- о современных методах приближенного решения наиболее характерных задач компьютерной химии;
- о методах решения уравнений математического описания химических процессов ;
- о математическом моделировании;
- о решении систем уравнений математического описания химических объектов;
- об информации, методах ее хранения, обработки и передачи;
- знать и уметь использовать:
- основные понятия и методы теории вероятностей и математической статистики, дискретной математики;
- о математических моделях простейших систем и процессов в химии и технологии;
- вероятностные модели для конкретных процессов и проводить необходимые расчеты в рамках построенной модели;

иметь опыт:

- исследования моделей с учетом их иерархической структуры и оценкой пределов применимости полученных результатов;
- использования основных методов обработки экспериментальных данных, включая пакеты современных прикладных программ;
- численного решения алгебраических уравнений; - исследования и численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений;
- аналитического и численного решения основных уравнений математической физики;
- программирования и использования возможностей вычислительной техники и программного обеспечения;
- использования средств компьютерной графики;
- прогнозирования химико-технологических производств.

1.1. Перечень основных положений рассматриваемого курса.

Необходимо знать материалы дисциплины - высшая математика (системы линейных и нелинейных уравнений, матриц, определители, векторное исчисление).

2. Содержание теоретического раздела дисциплины (лекции 36 часов)

2.1.1. Введение. Предмет и задачи курса, его связь с другими дисциплинами. Учебная литература. Разработка компьютерных систем для анализа эффективности функционирования химических производств. Информационные технологии в химии и химической технологии. Структура экспертной системы для расчета и оптимизации газофракционирующих установок и установок однократной перегонки нефти (**2 часа**).

2.1.2 Опыт разработки и применения экспертных систем в ХТ. Неформализованные задачи ХТ. Постановка задачи синтеза фракционирующих установок. Основные блоки ЭС для анализа и синтеза оптимальных ГФУ. Эвристическо - продукционная процедура синтеза ГФУ (**4 часа**).

2.1.3 Неформализованные задачи оптимальной эксплуатации химических производств. Объекты ситуационного управления. Диагностика причин отклонений в работе промышленных установок. Формирование математических моделей для решения задач ситуационного управления (**4 часа**).

2.1.4 Построение интеллектуальных систем для расчета, оптимизации и прогнозирования химических производств. Теоретические основы, расчет и оптимизация нестационарных ХТП. Общие вопросы дезактивации катализатора. Классификация процессов дезактивации. Отравление

бифункциональных катализаторов. Коксообразование на поверхности катализатора. Физическая дезактивации катализатора (**6 часов**).

2.1.5 Физико-химические модели - основа для построения интеллектуальных систем. Математическое моделирование процессов переработки бензиновой фракции нефти на Pt-катализаторах. Общая классификации процессов на Pt-катализаторах. Основные реакции превращения углеводородов на Pt - катализаторах. Технологическая схема процесса каталитического риформинга бензинов. Синтез оптимальной технологической схемы производства бензинов. Принципы формализации механизма протекания реакций на поверхности катализатора. Принципы выбора гидродинамического режима работы реактора при математическом моделировании. Оценка численных значений параметров математических моделей (**8 часов**).

2.1.6 Математическое моделирование процесса каталитического риформинга бензиновых фракций с учетом дезактивации и старения катализатора. Бифункциональные свойства катализаторов риформинга. Регенерация и активация катализаторов риформинга . Оптимальная стратегия эксплуатации промышленных катализаторов риформинга. Моделирование процессов коксообразования при расчете ХТС. Механизм образования кокса на поверхности катализатора. (**2 часа**).

2.1.7 Системный анализ производства бензинов с использованием ИС. Интеллектуальные системы- инструмент для прогнозирования эффективных технологий . Примеры расчета комплексных технологий. (**2 часа**).

2.1.8. Построение интеллектуальных систем для процессов глубокой переработки нефти (гидрокрекинг тяжелых остатков, каталитический крекинг, висбрекинг, депарафинизация). (**8 часов**).

3. Лабораторные работы (54 часа)

1. Моделирование процесса регенерации катализатора.
2. Моделирование комплексных технологий производства бензинов .
3. Построение интеллектуальной системы для расчета и оптимизации процесса однократной перегонки нефти.
4. Построение интеллектуальной системы для процесса пиролиза этановой фракции.
5. Математическое моделирование процесса термического крекинга. .
6. Моделирование процесса гидрокрекинга бензиновой фракции.
7. Математическое моделирование процесса гидрокрекинга средних дистиллятов.
8. Математическое моделирование процесса каталитического крекинга.
9. Построение компьютерной базы данных для анализа эффективности работы промышленных предприятий.
10. Построение компьютерного тренажера для промышленных установок риформинга.

11. Разработка компьютерной системы для компаундирования товарных бензинов.
12. Моделирование промышленного процесса риформинга бензинов с учетом дезактивации и старения катализатора.

4. Программа самостоятельной познавательной деятельности

Самостоятельная (внеаудиторная) работа студентов состоит в проработке лекционного материала, подготовке к контрольным заданиям и лабораторным работам, выполнении индивидуальных заданий. Она составляет 64 часов и включает следующие пункты:

1. Текущая проработка теоретического материала и материала для самостоятельной аудиторной работы (**10 часов**)
2. Проработка методических указаний для выполнения лабораторных работ (**6 часов**)
3. Изучение физико–химических закономерностей, технологии нефтехимических процессов и процессов переработки твердого топлива (**10 часов**).
4. Выполнение индивидуальных заданий (**38 часов**)

Проработка лекционного материала контролируется предварительным опросом материала и выполнением самостоятельных работ по дисциплине. Подготовка к лабораторным работам контролируется отчетами и “защитой” работ.

Эффективной формой самостоятельной работы является выполнение заданий с элементами научных исследований и подготовка индивидуального реферативного доклада.

5. Текущий и итоговый контроль результатов изучения дисциплины

При изучении дисциплины «Компьютерные моделирующие системы в ХТ» используется рейтинговая система оценка знаний студентов. В течение семестра студент может набрать 100 баллов.

Максимальная рейтинговая оценка (общий рейтинг **ОР**) дисциплины составляет 100 баллов. В нее входят: 1) рейтинг лекций (**РЛ**); 2) рейтинг лабораторных работ (**РЛР**); 3) рейтинг рубежного контроля (**РРК**); 4) рейтинг экзамена (**РЭ**).

Лекционный рейтинг -это оценка за посещение и участие в лекции. Оценка лекции-2 балла. Посетив все лекционные занятия и участвуя в них, студенты имеют максимальный РЛ 36 баллов.

Рейтинг лабораторных работ (**РЛР**)- это оценки за лабораторные работы. Максимальная оценка одной работы 1,5 баллов. Выполняя все лабораторные работы, студенты имеют максимальный РЛР 36 баллов.

В семестре студенты выполняют 3 рубежных контроля, максимальный **РРК** равен 180 баллов.

В конце семестра подсчитывается рейтинг семестра (**РС**), максимальное значение которого 90 баллов:

$$\mathbf{РС} = \mathbf{РЛ} + \mathbf{РЛР} + \mathbf{РРК} = 36 + 36 + 18 = 90.$$

Студент допускается к сдаче экзамена, если он полностью выполнил учебный план и если его рейтинг (**РС**) не менее 450 баллов

Максимальный рейтинг экзамена (**РЭ**) 100 баллов. Форму проведения экзамена - по билетам. Экзамен считается сданным, если его оценка не менее 30 баллов. Эта оценка суммируется с рейтингом семестра и подсчитывается общий рейтинг: **ОР = РС + РЭ**.

Общий рейтинг переводится в оценку по соотношению:

55 - 70 баллов - **УДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО** 70,1 - 85 баллов **ХОРОШО** 85, 1-100 баллов **ОТЛИЧНО**

Если оценка экзамена менее 30 баллов, то экзамен считается не сданным, и студент "теряет рейтинг семестра."

Рейтинг поощряет активных студентов **дополнительными баллами** выполнение заданий повышено! сложности. Преподаватель имеет право выставить студенту оценку «отлично» без экзамена, а если рейтинг студента за семестр превышает 80 баллов.

Контролирующие материалы

В соответствии с рейтинговой системой при изучении курса проводится 3 рубежные контрольные работы. **Рубежные** контроли проводятся в часы практических занятий в письменной форме и включают задания **по** теоретическим разделам дисциплины с использованием практических заданий. Билеты рубежных контрольных работ составлены лектором Иванчиной Э.Д.

В контрольную работу № 1 входят: интеллектуальные компьютерные системы, основные блоки, этапы построения ИС, основные направления использования ИС (**60 баллов**).

В контрольную работу № 2 входят следующие теоретические вопросы: , принципы построения интеллектуальных систем для расчета, оптимизации и прогнозирования нестационарных каталитических процессов на примере каталитического риформинга, изомеризации, гидрокрекинга (бензинов, средних и тяжелых дистиллятов), каталитического крекинга, процесса Клауса и др (**60 баллов**)

В контрольную работу №3 входят Прогнозирование химических производственных систем. Модели представления знаний, анализ и накопления числовой и экспертной информации, информационные, моделирующие, экспертные и обучающие системы в химической технологии (**60 баллов**).

Итог изучения курса - экзамен проводится в период экзаменационной сессии. Экзамен проводится в устном виде по билетам. Иванчиной Э.Д., составлены экзаменационные билеты по курсу, куда включены теоретические вопросы и задачи по курсу .

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

В каталоге **НТБ ТПУ** имеется около 16 наименований учебников и учебных пособий, которые могут быть использованы для изучения дисциплины «Компьютерные моделирующие системы В ХТ». Кроме того, на кафедре **ХТТ** имеется собственное методическое обеспечение дисциплины, которое включает:

1. Рабочая программа дисциплины , рейтинг-план и памятка студенту.
2. Задания для самостоятельной аудиторной работы.
3. Задания для рубежных, зачетных, итоговых контролей.
4. Индивидуальные домашние задания.
5. Методические указания к выполнению лабораторных работ. Компьютерные компоненты МО являются:
6. Учебное пособие для работы в интегрированной среде Турбо-Паскаль.
7. Инструкция для работы в операционной системе DOS.
8. Основы работы в системе WINDOWS
9. Построение интеллектуальных систем в ХТ
10. Модульный принцип расчета химических производств
11. Моделирование комплексных технологий производства бензинов

7. Перечень рекомендуемой литературы

7.1. Основная литература:

1. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д. Компьютерная математика в химии и химической технологии.- 1993.-49 с.
2. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д. Интеллектуальные системы в химии и химической технологии.- Нова-к, 1997 г.
3. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д. Новые информационные технологии в химии и химической технологии.- Томск.-1994 г.
4. Мешалкин В.П. Экспертные системы в химии и химической технологии.- М.-1996 г.
5. Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии.- М.

7.2. Дополнительная:

1. Гордеев Л.С.б Кафаров В.В., Бояринов А.И. Оптимизация процессов в химической технологии.
2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ
3. Сулимов А.Д. Каталитический риформинг бензинов .-М.:Химия,1973.- 152 с.
4. Дехтерман А.Ш. Переработка нефти по топливному варианту.-М.-Химия.-1988.-96 с.
5. Александров И.А.Ректификационные и абсорбционные аппараты .- М.- Химия.-1984 г.-1971 г.-296 с.
6. 6.Фарамазов С.А. Оборудование нефтеперерабатывающих заводов и его эксплуатация.-М.- Хиимя.-1984 .-327 с.

7.3. Методические указания

1. Иванчина Э.Д. Модульный принцип организации вычислений в химической технологии. Процедура-подпрограмма.- Томск: изд. ТПИ, 1989.- 8 с.
2. Москвин В.С., Иванчина Э.Д. Приближённое решение дифференциальных уравнений в химической технологии.- Томск: изд.ТПИ, 1987.- 26 с.
3. Иванчина Э.Д. Работы в Турбо Паскале версии 7.0. - Томск, Ротапринт ТПУ, 1995.- 24 с.
4. Иванчина Э.Д. Основы компьютерной графики.- Томск, Ротапринт ТПУ, 1995.- 19 с.
5. Иванчина Э.Д., Кузьменко Е.А. Обработка экспериментальных данных в компьютерной химии.- Томск, Ротапринт ТПУ, 1993.- 14 с.
6. Иванчина Э.Д. Операционная система MS DOS.- Томск, Ротапринт ТПУ, 1993.- 12 с.
7. Иванчина Э.Д. Разработка моделирующей системы расчёта и оптимизации реакторного блока процесса каталитического риформинга бензинов.- Томск, Ротапринт ТПИ, 1990.- 21 с.
8. Иванчина Э.Д. Структурно-параметрический синтез оптимальных технологических систем.- Томск, Ротапринт ТПИ, 1990.- 17 с.
9. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль А.В. Методы анализа химико-технологических процессов. Учебное пособие.- Томск: изд. ТПУ, 1994.- 75 с.
- 10.Бакланова Л.В. и др. Лабораторный практикум по численным методам.Учебное пособие.-Томск, Ротапринт ТПИ, 1990.-96 с.

Компьютерные моделирующие системы в ХТ
Рабочая программа для специальности 240802 – Основные процессы химиче-
ских производств и химическая кибернетика направления 240100

Составитель: Иванчина Эмилия Дмитриевна
Рецензент: профессор, д.т.н. Кравцов А.В.

Подписано к печати рег. от . Формат 60x84/8. Бумага «Классика».
Печать RISO. Усл.печ.л. 2,33. Уч.-изд.л. 0,93
Заказ . Тираж экз.



Томский политехнический университет
Система менеджмента качества
Томского политехнического университета сертифицирована
NATIONAL QUALITY ASSURANCE по стандарту ISO 9001:2000



ИЗДАТЕЛЬСТВО  ТПУ. 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.