

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана

А. С. Князев

Оценочные материалы по дисциплине

Расширенное использование компьютерных моделирующих систем

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

Цифровая химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Инженер-исследователь

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А. С. Князев

Председатель УМК

В.В. Шелковников

Томск – 2024

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

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 адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности;

ПК-2. Способен к реализации и управлению химическими процессами на базе математического прогнозирования и моделирования;

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК-1.2 Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ для грамотного планирования научного исследования

РООПК-3.1 Знает стандартные и оригинальные программные продукты, современные вычислительные методы

РООПК-3.3 Умеет применять современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств полимерных и композиционных веществ и материалов, а также процессов с их участием

РОПК-2.1 Знает современные технологии производства химической продукции

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- практические задания;
- коллоквиумы.

Практическое задание (ПК-2, ОПК-1, ОПК-3)

Провести разделение реакционной смеси алкилирования бензола. Конверсия по бензолу – 75 %. Исходные данные сырьевого потока:

№	Температура	Давление	Расход	Доля бензола	Доля этилена
1	25 °С	4 МПа	5 т/ч	0,2	0,8

Результатом выполнения практической работы является отчет.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если в отчете отражены все пункты плана отчета, приведены все необходимые расчеты, проведен анализ результатов.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, если в отчете не отражены все пункты плана, нет полного расчета, расчеты неверны.

Коллоквиум (ПК-2)

На коллоквиуме предлагается ответить на вопросы по понятиям целевой функции, ограничений, пределов поиска, классификации проблем оптимизации. В билете два вопроса.

1. Как формулируются ограничения в задачах оптимизации? Приведите пример задачи с несколькими типами ограничений.

Перечислите основные типы классификации проблем оптимизации (например, линейная, нелинейная, дискретная и т.д.).

Критерии оценивания:

Ответ устный.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если он четко и правильно формулирует ответы на оба вопроса, приводит конкретные примеры и объяснения, демонстрирующие глубокое понимание темы, способен адаптировать свои ответы к уточняющим вопросам преподавателя.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, если он не может сформулировать ответы на вопросы или дает неправильные ответы, не приводит примеры или объяснения, подтверждающие понимание темы, не способен ответить на уточняющие вопросы преподавателя или дает некорректные ответы на них.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Экзамен в третьем семестре проводится в письменной форме с последующей презентацией и защитой индивидуального курсового задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории и проверяет РООПК-1.2 ; РООПК-3.1; РООПК-3.3; РОПК-2.1.

Основные темы практической задачи:

1. Моделирование и оптимизация нестандартных технологических операций, таких как: реакционная ректификация, экстракционная ректификация, механически и энергетически интегрированные ректификационные системы;

2. Синтез, моделирование и оптимизация принципиальных технологических схем.

В письменной части (предоставляется совместно с презентацией) должно содержаться:

1. Описание практической задачи, цели и ожидаемые результаты;

2. Подбор моделей расчета фазового равновесия и кинетической модели химического превращения веществ, с соответствующим обоснованием;

3. Описание математической модели объекта работы с допущениями и обоснованием для подбора алгоритмов расчета;

4. Формулировка задачи оптимизации объекта работы: целевая функция, ограничения, пределы поиска, классификация задачи оптимизации и выбор алгоритма решения;

5. Результаты проведения моделирования и оптимизации объекта работы;

6. Выводы;

7. Приложения: исходный код разработанных кинетических библиотек, исходный код программ и подпрограмм, разработанных для решения задач оптимизации.

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.

Информация о разработчиках

1. Норин Владислав Вадимович, директор НОЦ «ГПН-ТГУ», ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ», ассистент кафедры неорганической химии ХФ НИ ТГУ;

2. Карлос Энрике Гарсия Серпас, специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»

3. Решетников Дмитрий Михайлович, начальник отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»