

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

**Цифровизация химико-технологических аппаратов (МКЭ)**

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 и биомедицинскими процессами на базе математического прогнозирования и моделирования.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК-1.3 Умеет применять существующие и разрабатывать новые методики получения и характеристики веществ и материалов

РООПК-1.4 Умеет использовать современное научное оборудование, расчетно-теоретические методы и профессиональное программное обеспечение для решения задач в избранной области химии или смежных наук

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

РООПК-3.2 Умеет работать с различными программными продуктами, используемыми в профессиональной области, эффективно использовать их функциональность для обработки данных, моделирования, анализа и визуализации информации при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

РОПК-2.1 Знает современные технологии производства химической продукции

## **2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания**

Элементы текущего контроля:

- коллоквиумы;
- тесты.

*Практическое задание* (ОПК-1, ОПК-3)

Моделирование химической реакции и массообменного процесса с использованием САЕ-системы. Исходные данные:

- Химическая реакция:  $A+B \rightarrow C+D$
- $C_{A0} = 2$  моль/л,  $C_{B0} = 3$  моль/л
- $k = 0.5$  л/моль·с
- Начальные концентрации вещества в фазе 1: 5 г/л
- Начальные концентрации вещества в фазе 2: 0 г/л
- Коэффициент массопередачи:  $Km = 0,01$  л/с

Порядок выполнения:

1. Моделирование химической реакции с использованием САЕ-системы (например, ANSYS CFX):
  - Создайте модель реакционного сосуда.
  - Задайте начальные концентрации веществ А и В.
  - Установите граничные условия и параметры реакции.
  - Рассчитайте изменение концентраций веществ А, В, С, и D через каждые 10 секунд в течение первых 60 секунд.
  - Постройте графики зависимости концентраций от времени.

- Сравните полученные результаты с аналитическим решением уравнения скорости реакции.
2. Моделирование массообменного процесса с использованием CAE-системы (например, ANSYS CFX):
- Создайте модель массообменного аппарата.
  - Задайте начальные концентрации вещества в фазах 1 и 2.
  - Установите граничные условия и параметры массопередачи.
  - Рассчитайте изменение концентраций вещества X и Y через каждые 5 секунд в течение первых 30 секунд.
  - Постройте графики зависимости концентраций от времени.
  - Сравните полученные результаты с аналитическим решением уравнения массопередачи.

### *Коллоквиум (ПК-2)*

На коллоквиуме предлагается ответить на вопросы по основным уравнениям движения жидкости и газа, граничным условиям применительно многофазным многокомпонентным средам, лагранжев и эйлеров подход моделирования многофазных сред. В билете три вопроса.

1. Опишите основные уравнения движения жидкости и газа. Какие из них наиболее часто используются при моделировании многофазных сред?
2. Какие граничные условия применяются к многофазным многокомпонентным средам? Приведите примеры ситуаций, где эти условия играют ключевую роль.
3. В чем заключаются основные различия и преимущества Лагранжева и Эйлерова подходов при моделировании многофазных сред?

*Критерии оценивания:*

Ответ устный.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если он правильно и полно отвечает на все три вопроса, демонстрирует понимание основных уравнений и их применения, четко формулирует граничные условия и приводит примеры их использования, корректно описывает различия и преимущества Лагранжева и Эйлерова подходов.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, если он неправильно отвечает на один или более вопросов, не понимает основные уравнения или не может их корректно применить, не формулирует граничные условия или приводит некорректные примеры, не различает Лагранжев и Эйлеров подходы или не может привести примеры их использования.

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

Экзамен в третьем семестре проводится в устной форме в виде ответа на билет.

Билет состоит из двух теоретических вопросов, проверяющих РООПК-1.3; РООПК-1.4; РООПК-3.1; РООПК-3.2; РОПК-2.1. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Объяснить различия ламинарного и турбулентного течения жидкости. Методы определения режима течения жидкости.
2. Каковы основные механизмы возникновения турбулентности в потоке?
3. Какие значения для числа Рейнольдса соответствуют переходу к турбулентному режиму течения в сжимаемой и несжимаемой жидкости? Расчетные формулы.
4. Какие основные модели турбулентности вы знаете? Различия и примеры применения.
5. В чем заключаются принципы расчета турбулентных потоков без привлечения моделей турбулентности?

6. Ограничения по использованию моделей турбулентности в различных задачах.
7. В чем заключается принцип задания граничных условий в условиях сопряженного теплообмена?
8. В чем заключаются особенности построения деформируемых расчетных сеток для решения задач МЖГ?
9. Как бы вы описали принцип решения задач с учетом сильных деформаций сеток.

Результаты ответа определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы билета, 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. Имеются ошибки и погрешности, имеющие принципиальный характер.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя. «Неудовлетворительно» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя.

### **Информация о разработчиках**

1. Бутов Владимир Григорьевич, д-р. физ-мат. наук, с.т. научн. сотр, зав. отделом НИИПММ ТГУ
2. Солоненко Виктор Александрович, канд. физ-мат. наук, зав лаб. НИИПММ ТГУ
3. Ящук Алексей Александрович, канд. физ-мат. наук, ст. научн. сотр. НИИПММ ТГУ