

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 13.10.2023 10:06:05  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

**УТВЕРЖДАЮ**  
Проректор по учебной  
и методической работе  
\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский  
« 17 » мая 2019 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**Компьютерное моделирование в химии и химической технологии**

Направление подготовки

**09.03.01 Информатика и вычислительная техника**

Направленность программы бакалавриата

**Автоматизированные системы обработки информации и управления**

Квалификация

**Бакалавр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **информационных технологий и управления**

Кафедра **систем автоматизированного проектирования и управления**

Санкт-Петербург

2019

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент		доцент Л.В. Гольцева
Старший преподаватель		А.В. Козлов

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии» обсуждена на заседании кафедры систем автоматизированного проектирования и управления  
протокол от «18» апреля 2019 г. № 9

Заведующий кафедрой

Т.Б. Чистякова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления  
протокол от «15» мая 2019 г. № 9

Председатель

В.В. Куркина

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Информатика и вычислительная техника»		профессор Т.Б. Чистякова
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины .....	05
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	07
4.3. Занятия семинарского типа.....	09
4.3.1. Семинары, практические занятия .....	09
4.4. Самостоятельная работа.....	11
4.4.1. Тестирование.....	11
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	13
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	14
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	14
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	14
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	15
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	15
10.2. Программное обеспечение.....	15
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	15
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	15
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	16
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...17	
2. Пример задания на курсовой проект.....	24

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.**

В результате освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ПК-2</b></p> <p>Способен осуществлять концептуальное, функциональное и логическое проектирование систем среднего и крупного масштаба и сложности</p>	<p><b>ПК-2.10</b></p> <p>Установка целевых значений показателей деятельности и причинно-следственных связей объекта автоматизации</p>	<p><b>Знать:</b> физико-химические закономерности технологических процессов и явлений (законы описания явлений гидродинамики, химических реакций, теплообмена, массообмена) (ЗН-1);</p> <p><b>Уметь:</b> применять основные физико-химические законы для анализа технологических процессов с целью выявления основных модулей - движения потоков в аппаратах, химических реакций, явлений переноса (У-1);</p> <p><b>Владеть:</b> навыками составления уравнений материального и теплового баланса (Н-1).</p>
	<p><b>ПК-2.11</b></p> <p>Изучение устройства и проведение моделирования прикладных процессов</p>	<p><b>Знать:</b> методы решения статических и динамических моделей; методы синтеза и анализа математических моделей (ЗН-2); основные виды математических моделей химико-технологических процессов (ММ ХТП), этапы разработки ММ (ЗН-3);</p> <p><b>Уметь:</b> использовать соответствующие математические методы решения ММ и разрабатывать алгоритмы решения прикладных задач (У-2); использовать пакеты прикладных программ для анализа и синтеза ММ ХТП (У-3);</p> <p><b>Владеть:</b> Методикой оценки разработанного программного обеспечения (Н-2).</p>

## 2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.12), и изучается на 4 курсе в 7 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Алгебра и геометрия», «Математический анализ», «Физика», «Информатика», «Программирование», «Численные методы и алгоритмы решения дифференциальных уравнений», «Разработка программных комплексов для исследований в химии и химической технологии».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии» знания, умения и навыки могут быть использованы при выполнении выпускной квалификационной работы.

## 3 Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	4/ 144
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>72</b>
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	18
КСР	-
другие виды контактной работы	
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>36</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	Тесты
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	КП, экзамен (36)

## 4 Содержание дисциплины

### 4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Принципы компьютерного моделирования химических процессов и применение ММ в автоматизированных системах	4	4	-	4	ПК-2	ПК-2.10
2	Гидродинамические модели структуры потоков в аппаратах	4	8	-	6	ПК-2	ПК-2.11
3	Математическое описание химических реакций	2	8	-	4	ПК-2	ПК-2.11
4	ММ реакторов с учетом переноса тепла	2	4	-	6	ПК-2	ПК-2.11
5	Явления переноса, их анализ и описание	2	-	-	6	ПК-2	ПК-2.11
6	Эмпирические и имитационные модели процессов	2	6	-	4	ПК-2	ПК-2.11
7	ММ в составе программных комплексов для изучения и управления типовыми ХТП	2	6	-	6	ПК-2	ПК-2.11
Всего на дисциплину		18	36	-	36		

#### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Принципы компьютерного моделирования химических процессов и применение ММ в автоматизированных системах</u> Особенности моделирования ХТП; применение ММ ХТП в автоматизированных системах; классификация ММ; структурные и функциональные модели, примеры; алгоритм разработки ММ ХТП; принципы построения ММ; требования к ММ; основные уравнения детерминированной ММ.	4	ЛВ
2	<u>Гидродинамические модели структуры потоков в аппаратах</u> Методы изучения структуры потоков в аппаратах; типовые воздействия; методы описания типовых моделей гидродинамики; ММ идеального смешения, вытеснения, диффузионная, ячеечная, комбинированные; структурно-топологическое представление моделей; передаточные функции; уравнения переменных состояния; определение параметров ММ гидродинамики с использованием различных методов идентификации (метод Купфмюллера, 0.3-0.7, метод моментов)	4	ЛВ, КтСМ
3	<u>Математическое описание химических реакций</u> Классификация химических реакций, понятие о механизме реакций. Прямая и обратная задачи кинетики; структурно-параметрический синтез ММ кинетики. Описание стехиометрии, кинетики, порядка и молекулярности реакций, зависимости от температуры и влияния катализатора. Построение ММ кинетики для реакторов непрерывного и периодического действия в режимах статики и динамики.	2	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
4	<p><u>ММ реакторов с учетом переноса тепла</u>  Виды процессов теплообмена; теплообмен как сложная система. Тепловые режимы реакторов; построение математической модели политропического реактора типа смешение-смещение и реактора с распределенными параметрами с учетом химических реакций; тепловая устойчивость реакторов. Математические модели теплообменных аппаратов. Моделирование теплообменных аппаратов типа смешение-смещение; смешение-вытеснение; вытеснение-вытеснение; алгоритмы расчета распределения температуры при прямоточном и противоточном течении в кожухотрубчатом аппарате.</p>	2	ЛВ, КтСМ
5	<p><u>Явления переноса, построение ММ массообменных процессов</u>  Виды гетерогенных систем и их классификация. Механизмы переноса – квантовый, молекулярный, конвективный. Физический массообмен и хемосорбция. Взаимосвязь диффузии и химической реакции. Моделирование массообменных процессов на примере процессов абсорбции, адсорбции, сушки дисперсных материалов.</p>	2	ЛВ
6	<p><u>Эмпирические и имитационные модели процессов</u>  Эмпирические модели в составе ММ сложных химико-технологических процессов. Методы планирования эксперимента. Способы получения регрессионных моделей для описания свойств веществ, кинетических и теплофизических констант. Имитационные модели типовых нарушений. Критерии оценки регрессионных моделей (критерии Кохрена, Стьюдента, Фишера).</p>	2	ЛВ, КтСМ



№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
7	<u>ММ в составе программных комплексов для изучения и управления типовыми ХТП</u> Структура программно-тренажерных комплексов для изучения и исследования химико-технологических процессов. Место ММ в структуре комплексов. Способы задания исходных данных и отображения результатов моделирования. Анализ программных комплексов для изучения типовых процессов химической технологии - абсорбции, сушки, нитрования, фильтрования, аэрации, измельчения твердых материалов и др.	2	ЛВ, КтСМ
<b>Итого</b>		18	

### 4.3. Занятия семинарского типа.

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Виды математических моделей, их классификация, вычислительный эксперимент. Изучение общих принципов построения детерминированных ММ. Разработка нормативного документа для оформления программной документации (описание применения).	4	ПЛ
2	Разработка программного обеспечения для решения аналитической ММ аппарата, описываемого моделью идеального смешения и ячеечной моделью.	8	КтСМ

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
3	<p>Изучение алгоритмов решения динамических ММ методами Эйлера и Рунге-Кутты для моделирования кинетики и теплообмена, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ). Поиск устойчивого шага интегрирования. Сравнительный анализ результатов моделирования. Изучение алгоритмов решения нелинейных ММ.</p> <p>Разработка программного обеспечения для решения ММ, использующей численные методы решения ОДУ. (например, аппарата идеального смешения или идеального смешения с проскоком или застойной зоной с заданным механизмом реакций и учитывающей теплообмен с окружающей средой).</p> <p>Разработка интерфейса пользователя для ввода исходных данных и вывода результатов в виде таблиц и графиков.</p>	8	КтСМ
4	<p>Разработка программного обеспечения для решения ММ теплообменного аппарата при различных режимах течения потоков.</p>	4	КтСМ
6	<p>Построение эмпирических моделей экспериментально-статистическими методами, например модели для описания физико-химических свойств веществ, определения кинетических констант химических реакций, параметров гидродинамических моделей.</p>	6	КтСМ
7	<p>Изучение ММ типовых технологических процессов на примере процессов измельчения, фильтрации, отстаивания, аэрации. Изучение математических моделей многостадийных процессов на примере процессов нитрования, полимеризации.</p>	6	КтСМ, Тр
<b>Итого</b>		36	

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Принципы компьютерного моделирования химических процессов и применение ММ в автоматизированных системах.	4	Устный опрос, формирование задания на курсовой проект
2-6	Разработка алгоритмов решения ММ численными методами по темам лабораторных и курсовых проектов	26	Устный опрос по разделам курсового проекта
7	Разработка интерфейсов программных продуктов – ММ аппарата идеального смешения и программного комплекса, разрабатываемого в рамках выполнения курсового проекта	6	Устный опрос, контроль выполнения разделов курсового проекта
<b>Итого</b>		36	

#### 4.4.1 Тестирование

Примеры тестовых заданий:

№	Задание	Варианты ответа
1	По целевому назначению математические модели могут быть:	для исследования, проектирования, управления структурные и функциональные теоретические и эмпирические
2	Для какого типа моделей требуется задание начальных и граничных условий?	Идеального смешения Идеального вытеснения Ячеечная модель
3	Укажите уравнение материального баланса для аппарата, описываемого моделью идеального смешения	$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{1}{\bar{\tau}} (C_{ex}(t) - C(t))$ $\frac{\partial C(t,l)}{dt} = -u \frac{\partial C(t,l)}{\partial l}$ $\bar{\tau}_i \frac{dC_i(t)}{dt} = C_{i-1}(t) - C_i(t), i = 1, 2, \dots, n.$
4	Требования к математическим моделям:	Простота, точность адекватность, экономичность Универсальность, точность адекватность, экономичность Универсальность, линейность, адекватность, экономичность

№	Задание	Варианты ответа
5	<p>В реакторе протекает реакция <math>A+B=2C</math> с константой скорости <math>k</math>.</p> <p>Скорость данной реакции <math>w_r</math></p> <p>описывается уравнением:</p>	$w_r = k \cdot C_C^2$
		$w_r = 2 \cdot k \cdot C_A C_B$
		$w_r = k \cdot C_A C_B ;,$
6	<p>В закрытом реакторе идеального смешения протекают 2 параллельные реакции, механизм которых:</p> <p><math>A_1+2A_2=A_3</math></p> <p><math>A_4+A_2=A_5+A_1</math></p> <p>Скорости реакций равны <math>w_{r_1}</math> и <math>w_{r_2}</math> соответственно. Скорость изменения концентрации компонента <math>A_1</math> определяется:</p>	$\frac{dC_{A_1}}{dt} = w_{r_1} - w_{r_2}$
		$\frac{dC_{A_1}}{dt} = -w_{r_1} - w_{r_2}$
		$\frac{dC_{A_1}}{dt} = -w_{r_1} + w_{r_2}$
7	<p>Политропический режим работы реактора – режим, при котором:</p>	температура в реакторе непостоянна, при этом часть тепла может идти на разогрев реакционной смеси, а часть - на теплообмен с окружающей средой.
		путем подвода или отвода тепла в реакторе поддерживают постоянную температуру в течение всего процесса.
		в реакторе отсутствует теплообмен с окружающей средой и тепло химической реакции полностью расходуется на изменение температуры реакционной смеси.
8	<p>Основное уравнение теплопередачи, где</p> <p><math>K</math> – коэффициент теплопередачи,</p> <p><math>Q</math> – тепловой поток (расход передаваемой теплоты), <math>Вт</math>;</p> <p><math>F</math> – площадь поверхности теплопередачи, <math>м^2</math>;</p> <p><math>\Delta t_{cp}</math> - средняя разность температур горячего и холодного теплоносителя, <math>К</math>.</p>	$Q = K \cdot F \cdot \Delta t_{cp}$
		$Q = K \cdot F / \Delta t_{cp}$
		$Q = K / F \cdot \Delta t_{cp}$
9	Какой из критериев используется для	Стьюдента

№	Задание	Варианты ответа
	оценки адекватности эмпирической математической модели	Кохрена Фишера
10	Определить рабочий объем аппарата идеального смешения с проскоком, если: производительность $G = 200$ л/мин; время пребывания $\tau = 30$ мин; доля проскока $m = 0,3$ .	6000 л 1800 л 7800 л
11	Кривой разгона (F-кривой) называется реакция объекта на:	импульсное возмущение периодическое возмущение ступенчатое возмущение
12	В уравнениях, описывающих однопараметрическую диффузионную модель, используется:	критерий Архимеда критерий Нуссельта критерий Пекле
13	Вычислить значение константы скорости при следующих исходных данных: предэкспоненциальный множитель $k_0 = 2 \cdot 10^{14}$ мин <sup>-1</sup> ; энергия активации $E_a = 74000$ Дж/моль; температура $T = -3^\circ\text{C}$ ; универсальная газовая постоянная $R = 8,31$ Дж/(моль·К)	$\approx 0,097$ $\approx 0,017$ $\approx 0,055$
14	Среди типовых гидродинамических моделей нет модели:	идеального вытеснения идеального поглощения идеального смешения
15	Размерность константы скорости второго порядка:	м <sup>3</sup> /моль (моль·с)/м <sup>3</sup> м <sup>3</sup> /(моль·с)
16	Ячеечная модель описывается системой:	обыкновенных дифференциальных уравнений алгебраических уравнений интегральных уравнений
17	К числу комбинированных гидродинамических моделей относится реактор идеального смешения с:	орошением застойной зоной возвратным потоком

### 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <https://media.technolog.edu.ru>.

## 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена и защиты курсового проекта.

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуется вопросами (заданиями). При сдаче экзамена студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на экзамене:

Вариант № 1				
1.Химико-технологический	процесс	как	объект	математического моделирования.
2.Уравнение материального	баланса	математической	модели	аппарата идеального смешения.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ): результат оценивания – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

## 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

### а) печатные издания:

1 Чистякова, Т. Б. Применение универсальных моделирующих программ для синтеза и анализа технологических процессов : учеб. пособие / Т.Б. Чистякова, Л.В. Гольцева, А.В. Козлов. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2011. – 66 с.

2 Зарубин, В. С. Математическое моделирование в технике : учеб. для втузов / В. С. Зарубин. – 3-е изд. – М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. – 495 с.

3 Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов по спец. "Основные процессы химических производств и химическая кибернетика" / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. - М. : Академкнига, 2006. - 416 с.

### б) электронные учебные издания:

1 Гольцева, Л. В. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Базовый курс : учеб. пособие / Л. В. Гольцева, А. В. Козлов, А. Н. Полосин ; СПбГТИ(ТУ). Каф. систем автоматизир. проектирования и упр. – СПб. : [б. и.], 2012. – 85 с. (ЭБ)

2 Гумеров, А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учеб. пособие для вузов / А. М. Гумеров. – 2-е изд., перераб. – СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2014. – 176 с. (ЭБС «Лань»)

3 Самойлов, Н. А. Примеры и задачи по курсу «Математическое моделирование химико-технологических процессов» : учеб. пособие / Н. А. Самойлов. – 3-е изд., испр. и доп. – СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2013. – 176 с. (ЭБС «Лань»)

4 Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций : учебник / Ю. Г. Марков, И. В. Маркова. – СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2013. – 192 с. (ЭБС «Лань»)

## 8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

учебный план, РПД и учебно-методические материалы:  
<http://media.technolog.edu.ru>;

электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования.

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015 КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной информационно-образовательной среды.

### **10.2. Программное обеспечение.**

- Операционная система MS Windows 10;
- LibreOffice или Microsoft Office;
- Пакет символьной математики Mathcad 14;
- MS Visual Studio.

### **10.3. Базы данных и информационные справочные системы.**

- Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс».

## **11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.**

Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники, на 15 посадочных мест.

Для проведения лабораторных занятий используется компьютерный класс, оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть и имеющими доступ в интернет.

## **12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.



**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Компьютерное моделирование  
в химии и химической технологии»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-2	Способность осуществлять концептуальное, функциональное и логическое проектирование систем среднего и крупного масштаба и сложности	промежуточный

## 2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
<b>ПК-2.10</b> Установка целевых значений показателей деятельности и причинно-следственных связей объекта автоматизации	<b>Рассказывает</b> о физико-химических закономерностях технологических процессов и явлений (законы описания явлений гидродинамики, химических реакций, теплообмена, массообмена) (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы № 1-5 к экзамену	Перечисляет и формулирует закономерности технологических процессов с ошибками	Перечисляет и формулирует закономерности технологических процессов с наводящими вопросами.	Способен самостоятельно изложить физико-химических закономерностях технологических процессов и явлений с конкретными примерами
	<b>Объясняет</b> применение основных физико-химических законов для анализа технологических процессов с целью выявления основных модулей - движения потоков в аппаратах, химических реакций, явлений переноса (У-1)	Результаты выполнения курсового проекта.	Допускает ошибки при анализе технологических процессов с помощью применения физико-химических законов	Применяет физико-химические законы для анализа технологических процессов с отдельными неточностями	Правильно применяет физико-химические законы для анализа технологических процессов, приводит конкретные примеры

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	<b>Демонстрирует</b> навыки составления уравнений материального и теплового баланса (Н-1)	Результаты выполнения курсового проекта.	Составляет уравнения материального и теплового баланса с большим количеством ошибок	Формирует уравнения материального и теплового баланса с 1-2 ошибками и исправляет их с помощью наводящих вопросов	Составляет уравнения материального и теплового баланса самостоятельно
<b>ПК-2.11</b> Изучение устройства и проведение моделирования прикладных процессов	<b>Перечисляет</b> методы решения статических и динамических моделей; методы синтеза и анализа математических моделей (ЗН-2)	Правильные ответы на вопросы № 6-40 к экзамену	Перечисляет методы решения статических и динамических моделей, синтеза и анализа математических моделей с ошибками	Перечисляет методы решения статических и динамических моделей, синтеза и анализа математических моделей с наводящими вопросами	Самостоятельно перечисляет методы решения статических и динамических моделей, синтеза и анализа математических моделей и приводит примеры
	<b>Анализирует</b> использование соответствующих математических методов решения математических моделей; <b>разрабатывает</b> алгоритмы решения прикладных задач (У-2)	Результаты выполнения курсового проекта.	Анализирует использование математических методов и разрабатывает алгоритмы решения прикладных задач с ошибками	Анализирует использование математических методов и разрабатывает алгоритмы решения прикладных задач с наводящими вопросами	Самостоятельно и безошибочно анализирует использование математических методов и разрабатывает алгоритмы решения прикладных задач
	<b>Характеризует</b> основные виды математических моделей химико-технологических процессов	Правильные ответы на вопросы № 6-40 к экзамену	Недостаточно полно характеризует основные виды ММ ХТП, имеет нечеткое	Характеризует основные виды ММ ХТП, перечисляет этапы разработки ММ с	Уверенно и без ошибок характеризует основные виды ММ

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	(ММ ХТП), этапы разработки ММ (ЗН-3)		представление об этапах разработки ММ и подходах к синтезу ММ	отдельными ошибками	ХТП, этапы разработки ММ
	<b>Использует</b> пакеты прикладных программ (ППП) для анализа и синтеза ММ ХТП (У-3)	Результаты выполнения курсового проекта.	Допускает серьезные ошибки при применении ППП для анализа и синтеза ММ ХТП	Использует ППП для анализа и синтеза ММ ХТП с небольшими ошибками	Самостоятельно использует ППП для анализа и синтеза ММ ХТП
	<b>Выполняет</b> методику оценки разработанного программного обеспечения (ПО) (Н-2)		Испытывает серьезные затруднения в применении методики оценки ПО	Реализует методику оценки разработанного ПО с небольшой помощью преподавателя	Самостоятельно выполняет методику оценки разработанного ПО

### 3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

#### Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-2:

1. Химико-технологический процесс как объект математического моделирования.
2. Классификация математических моделей в ХТП.
3. Требования к математическим моделям: адекватность, точность, универсальность, экономичность.
4. Основные этапы разработки математических моделей.
5. Общие принципы построения математических моделей.
6. Структурные и функциональные модели в химико-технологических процессах
7. Гидродинамические модели структуры потоков в аппарате.
8. Кривые разгона и импульсные характеристики при исследовании гидродинамики потоков.
9. Уравнение материального баланса математической модели аппарата идеального смешения.
10. Уравнение материального баланса математической модели аппарата идеального вытеснения
11. Ячеечная модель описания структуры потоков в аппарате.
12. Комбинированные модели описания структуры потоков в аппарате.
13. Связь типовых математических моделей (идеального смешения идеального вытеснения, ячейной модели) с типовыми динамическими звеньями.
14. Математические модели с распределенными и с сосредоточенными параметрами.
15. Математические модели статические и динамические
16. Разработать блок-схему алгоритма решения аналитической ММ идеального смешения.
17. Разработать блок-схему алгоритма решения аналитической ячейной модели
18. Характеристика методов решения ММ с сосредоточенными параметрами
19. Блок-схема алгоритма решения дифференциальных уравнений методом Эйлера.
20. Блок-схема алгоритма решения дифференциальных уравнений методом Рунге – Кутты.
21. Методика решения математических моделей, описываемых системами алгебраических уравнений в среде MathCad.
22. Методика решения математических моделей, описываемых системами дифференциальных уравнений в среде MathCad.
23. Критерии оценки ММ – универсальность, точность, адекватность, экономичность.
24. Методы оценки эмпирических моделей.
25. Имитационные модели нештатных ситуаций.
26. Системный подход к формированию ММ ХТП. Математическое описание химических реакций. Прямая и обратная задачи кинетики.
27. Постановка обратной задачи кинетики. Методы определения кинетических констант.
28. Движущая сила обменных процессов. Взаимосвязь химической реакции и диффузии.
29. Уравнение теплового баланса для политропического реактора
30. Уравнение теплового баланса для адиабатического реактора
31. Уравнение теплового баланса для изотермического реактора в статике и динамике
32. Перенос тепла в реакторах с распределенными параметрами.
33. Перенос тепла в реакторах с сосредоточенными параметрами.
34. Уравнение материального и теплового балансов реактора идеального смешения с рубашкой для изотермического режима. В реакторе происходит экзотермическая реакция  $A \longrightarrow B$  с константой скорости  $K$ .

35. Уравнение материального и теплового балансов реактора идеального смешения с рубашкой для политропического режима. В реакторе происходит экзотермическая реакция  $A \longrightarrow B$  с константой скорости  $K$ .
36. Уравнение материального баланса реактора идеального вытеснения; в реакторе происходит экзотермическая реакция  $A \longrightarrow B$  с константой скорости  $K$ .
35. Движущая сила массообменных процессов.
36. Способы увеличения скорости реакции и скорости массообмена.
37. Использование эмпирических моделей различных этапах проектирования: для описания свойств веществ, кинетических и теплофизических констант и т.д.
38. Методы оценки эмпирических моделей.
39. Инструментальные среды для получения эмпирических моделей.
40. Имитационные модели нештатных ситуаций.

При сдаче экзамена студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше. Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

#### 4. Темы курсового проекта

**Целью курсового проекта** является закрепление практических умений, полученных студентами на лабораторных и практических занятиях и в результате самостоятельной работы по созданию математических моделей различных химико-технологических процессов, разработка алгоритмов решения задачи и создание программного продукта на языках высокого уровня.

**Обобщенная тематика курсового проекта** – «Разработка и анализ математической модели различных химико-технологических процессов».

Исходными данными для курсового проекта являются: индивидуальное задание на разработку конкретного приложения и методические указания к курсовому проекту.

#### Содержание курсового проекта:

- 1 Аналитический обзор, включающий анализ литературных источников по технологии проведения заданного технологического процесса; анализ входных и выходных параметров; анализ аппаратного оформления процесса; анализ физико-химических законов, лежащих в основе проведения процесса; обзор имеющихся математических моделей.
- 2 Постановка цели и задач для создания программного продукта.
- 3 Основная часть проекта включает: анализ процесса как объекта моделирования с указанием всех видов переменных, диапазонов их изменения; разработку эргономичного интерфейса пользователя; математическое описание процесса, обоснование выбора метода решения и разработку алгоритмического и программного обеспечения;
- 4 Выводы об универсальности, точности, адекватности и экономичности модели.
- 5 Тестирование разработанного программного продукта. Результаты численного эксперимента и их объяснение.
- 6 Оформление документации (пояснительной записки) к курсовому проекту.

#### Примерные темы курсового проекта.

Моделирование процесса однократного испарения углеводородов
Моделирование процесса адсорбции в насадочном абсорбере
Моделирование процесса нитрования хлорбензола
Математическое моделирование процесса гравитационного осаждения
Математическое моделирование процесса экструзии полипропилена
Расчет движущей силы абсорбции при различных режимах движения потоков

Моделирование стабилизационной колонны процесса гидроочистки дизельного топлива
Моделирование кожухотрубчатого теплообменника в режиме прямотока и противотока
Моделирование процесса центрифугирования для центрифуги с ножевой выгрузкой осадка
Математическое моделирование процесса экструзии поливинилхлорида
Моделирование процесса сушки дисперсных материалов в сушильном электрошкафу
Моделирование политропического реактора идеального смешения
Моделирование процесса фильтрации на ленточном вакуум – фильтре.
Математическое моделирование процессов термоформования поливинилхлорида
Расчет скорости наночастиц карбида кремния в плазмохимическом реакторе
Математическое моделирование процессов термоформования полистирола
Моделирование процесса сушки дисперсных материалов в распылительной сушилке
Моделирование процесса измельчения в щековой дробилке.
Разработка математических моделей для оценки качества полимерной пленки
Моделирование политропического реактора идеального смешения
Моделирование процесса горения топлива в топке (на примере мазута и сланца)
Математическое моделирование змеевикового теплообменника
Расчет статических характеристик модели реактора идеального смешения
Разработка программного обеспечения для моделирования процесса осаждения в центрифуге
Моделирование процесса измельчения в конусной дробилке
Математическое моделирование пластинчатого теплообменника
Моделирование процесса растворения газов в жидкости
Моделирование процесса фильтрации в барабанном фильтре
Математическое моделирование процесса выпаривания в выпарном аппарате (статический и динамический режимы)
Математическое моделирование теплообменника смешение – смешение с учетом изменения теплоемкости и плотности от температуры
Расчет движущей силы абсорбции при различных режимах движения потоков
Разработка программного модуля для исследования качественных показателей процессов синтеза фуллеренов электродуговым методом
Разработка математической модели распределения ресурсов предприятия
Программный комплекс для классификации микроорганизмов по совокупности признаков

**5. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена.

Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»). При этом «удовлетворительно» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.

**Приложение № 2**  
к рабочей программе дисциплины

Минобрнауки России  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

**ЗАДАНИЕ НА КУРСОВОЙ ПРОЕКТ**

<b>Направление подготовки</b>	09.03.01	Информатика и вычислительная техника
<b>Профиль</b>		Автоматизированные системы обработки информации и управления
<b>Факультет Кафедра</b>		Информационных технологий и управления Систем автоматизированного проектирования и управления
<b>Учебная дисциплина</b>		Компьютерное моделирование в химии и химической технологии
		<b>Группа</b>

**Студент(ка)**

**Тема** Программный комплекс выбора и исследования промышленных циклонов для очистки газов

**Цель курсового проекта:** в связи с повышением требований к экологии актуальной задачей является создание программного комплекса (ПК) для исследования метода очистки газов от твердых примесей, использующих центробежный способ очистки в циклонных аппаратах, и выбор оборудования, обеспечивающего заданное качество очистки.

**Исходные данные:**

1 Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М. : Академкнига, 2006. – 416 с.

2 Норенков, И.П. Основы автоматизированного проектирования: учеб. для вузов / И.П. Норенков. – 4-е изд., перераб. и доп. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2009.– 430 с.

3 Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии: Учебник для вузов.- 11-е изд., стереотипное, доработанное. Перепеч. С изд. 1973 г.-М:ООО ТИД "Альянс, 2005.-753 с.

4 Гольцева, Л. В. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Базовый курс : учеб. пособие / Л. В. Гольцева, А. В. Козлов, А. Н. Полосин. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2012. – 85 с.

5 Карпова, Т.С. Базы данных: модели, разработка, реализация / Т. С. Карпова. – СПб. : Питер, 2013. – 240 с.

6 Малыхина, М.П. Базы данных: основы, проектирование, использование: учебное пособие для вузов по направлению подготовки "Информатика и вычислительная техника" / М. П. Малыхина. - 2-е изд. - СПб. : БХВ-Петербург, 2006. - 517 с.

7 Самойлов, Н. А. Примеры и задачи по курсу «Математическое



моделирование химико-технологических процессов» : учеб. пособие / Н. А. Самойлов. – 3-е изд., испр. и доп. – СПб. ; М. ; Краснодар : Лань, 2013. – 168 с.

8 Пылеулавливающее оборудование [Электронный ресурс] / ООО «Вентиляционные системы» – пылеулавливающие циклоны. – Электрон. дан. – Режим доступа : <http://www.cikloni.ru/>, свободный. – Загл. с экрана.

#### **Перечень подлежащих разработке вопросов**

1. Анализ характеристик промышленных циклонных аппаратов как объектов автоматизированного исследования и проектирования.
2. Формализованное описание объекта исследования. Постановка задачи разработки ПК
- 3 Функциональная структура ПК
- 4 Характеристика информационного обеспечения; Разработка БД, включающей циклоны, газы, твердые частицы.
- 5 Структура и характеристика математического обеспечения; Разработка программно-алгоритмического обеспечения для расчета выходных характеристик процесса и выбора аппаратов, обеспечивающих заданное качество очистки.
- 6 Структура и характеристика интерфейсов пользователей.
- 7 Структура и характеристика программного обеспечения.
- 8 Характеристика технического обеспечения;
- 9Характеристика исходных данных для тестирования ПК.
- 10 Оформление пояснительной записки.

#### **Перечень графического материала:**

- 1 Область применения циклонных аппаратов
- 2 Основные характеристики циклонов, газов, твердых частиц.
- 3 Формализованное описание задачи исследования процесса газоочистки в циклонном аппарате и выбора циклонного аппарата на основании требований.
- 4 Функциональная структура ПК.
- 5 UML-диаграммы вариантов использования для администратора и исследователя.
- 6 Инфологическая и даталогическая модели базы данных.
- 7 Математические модели (ММ) исследования и выбора оборудования
- 8 Интерфейс пользователей.
- 9 Блок-схемы алгоритмов решения ММ.
- 10 Тестовые примеры работы ПК.
- 11 Характеристика программного и аппаратного обеспечения

#### **Характеристики аппаратного и программного обеспечения:**

Персональный компьютер на базе микропроцессора Intel Core 2 Duo (3 ГГц), ОЗУ 4 Гб, НЖМД 80 Гб, монитор ЖК (17"), клавиатура, DVD- и CD-RW дисковод, мышь. Операционная система Windows 7/8.1, СУБД Office Access 2007/2013, среда разработки программного обеспечения Visual Studio 2015, текстовый редактор Office Word презентационная программа Office PowerPoint.

**Консультант по работе** \_\_\_\_\_

**Дата выдачи задания** \_\_\_\_\_

**Дата представления курсового проекта к защите** \_\_\_\_\_

**Зав. каф.** \_\_\_\_\_  
(подпись, дата) (инициалы, фамилия)

**Лектор** \_\_\_\_\_  
(подпись, дата) (инициалы, фамилия)

**Руководитель** \_\_\_\_\_  
(подпись, дата)

**Задание принял к выполнению студент** \_\_\_\_\_