

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

Базы данных и программные продукты в химии и химической технологии

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

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.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.1 Приобретает систематические теоретические и практические знания в избранной области химии или смежных наук, анализирует возникающие в процессе научного исследования проблемы с точки зрения современных научных теорий, осмысливает и делает обоснованные выводы из научной и учебной литературы

ИОПК 1.2 Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 1.3 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 1.4 Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

ИОПК 3.1 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля

ИОПК 3.2 Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

ИОПК 3.3 Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

2.1 Виды оценочных средств

№	Контролируемые темы/разделы	Наименование оценочного средства для текущего контроля	Код индикатора достижения компетенции согласно ОПП
1	Тема 1. Математические пакеты программ	Практическое задание	ИОПК 3.1, ИОПК 3.2, ИОПК 3.3.
2	Тема 3. Программирование	Практическое задание	ИОПК 3.2, ИОПК 3.3.
2	Темы 4-9.	Коллоквиум	ИОПК 1.1, ИОПК 1.2, ИОПК 1.3, ИОПК 1.4

2.2 Содержание оценочных средств

Практическая работа № 1 **Математические пакеты программ**

Провести регрессионный анализ фазового равновесия смеси спиртов. Сравнить данные, полученные по итогам регрессионного анализа с данными расчета по табличным значениям. На основании регрессионного анализа разработать математическую модель и материальный баланс сепаратора разделения смеси спиртов при различных температурах и давлении.

Исходные данные				
	Этанол	Пропанол	Бутанол	Пентанол
T, °C	P0_C2, бар	P0_C3, бар	P0_C4, бар	P0_C5, бар
20,0	0,066	0,024	0,006	0,002
25,0	0,087	0,033	0,009	0,003
50,0	0,309	0,134	0,047	0,019
80,0	1,081	0,523	0,224	0,101
100,0	2,203	1,121	0,526	0,250
120,0	4,146	2,191	1,099	0,549
150,0	9,472	5,215	2,798	1,483

Температура процесса разделения – 100 °C;
Давление процесса – 0,5 бар.

Практическое задание 1 формирует освоение ОПК-3 (ИОПК 3.1, ИОПК 3.2, ИОПК 3.3.).

Критерии оценивания:

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.

Практическая работа 2 **Программирование**

На основании данных, полученных при выполнении практической работы № 1 разработать модель сепаратора разделения смеси спиртов с использованием языка Python. Сравнить результаты расчета с практической работой №1.

Практическое задание 2 формирует освоение ОПК-3 (ИОПК 3.2, ИОПК 3.3.).

Критерии оценивания:

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, расчеты неверны.

Коллоквиум №1

Темы 4-9

На коллоквиуме предлагается описать основные возможности, привести случаи использования, решаемые задачи с помощью различных программных продуктов. В билете два вопроса.

1. Программные комплексы для проведения корреляционного и регрессионного анализа, основные возможности, привести примеры использования. Программный комплекс COMSOL, варианты и примеры применения, для чего предназначен, основные возможности.
2. AutoCAD, NanoCAD. Для чего предназначены программные комплексы, возможности, примеры использования. Программы для разработки детерминированных моделей ХТС, что позволяют, на чем основаны, различия между программными комплексами.;

И тд.

Коллоквиум 1 формирует освоение ОПК-1 (ИОПК 1.1, ИОПК 1.2, ИОПК 1.3, ИОПК 1.4).

Критерии оценивания:

Ответ устный.

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если в ответе указаны все принципиальные возможности программного продукта. Приведены примеры использования для решения реальных задач, описаны основные алгоритмы работы программ (при необходимости) и заложенные в них законы.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, если в ответе не указаны возможности программных продуктов или приведены неверные программные продукты для решения поставленных задач. Нет понимания алгоритма работы программного продукта.

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

Первая часть представляет собой 2 теоретических вопроса, проверяющих ИОПК 1.1, ИОПК 1.4, ИОПК 3.2, ИОПК 3.3. Предоставляется развернутый ответ в устной форме.

Вторая часть содержит один вопрос, проверяющий ИОПК 1.2, ИОПК 1.3, ИОПК 3.1, ИОПК 3.2 и оформлен в виде практического задания (постановка задачи, набор исходных данных). Ответ предоставляется в виде описания алгоритма выполнения поставленной задачи и используемых для выполнения задачи программных продуктов. Допускается вариативность ответа.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Программный комплекс AspenONE Engineering. Ключевые компоненты. Области применения ключевых компонентов.
2. Понятие СУБД. Типы, отличия, области применения, программные продукты.

3. Minitab. Область применения, основные функции, пример решаемой задачи (цель-результат);
4. AspenONE Engineering и ChemCAD. Основные отличия. Пример задач для каждого комплекса.
5. Элементы ActiveX. Основные возможности. Пример задач (мин. 2), решаемых с помощью инструмента.

Примеры практического задания:

1. Рассчитать материальный баланс технологической схемы, состоящей из реактора, двухфазного сепаратора, колонны фракционирования, если известны: состав входного потока, набор реакций, конверсии исходных реагентов и селективность по целевому компоненту, необходимая мощность по продукту. Привести используемый программный продукт для расчета, алгоритм расчета с использованием выбранного программного продукта.
2. Известна транспортируемая среда, состав среды и фазовое состояние/распределение, давление и температура, рельеф прокладки трубопровода, расход среды. Определить диаметр трубопровода, определить возможность отложения твердых соединений или выпадения конденсата и условия образования данных отложений или конденсата. Используемые программные продукты, алгоритм расчета, выходные данные расчета узла запорной арматуры.

Результаты ответа определяются оценками «зачтено» и «не зачтено».

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы билета, выполнено практическое задание; содержание ответа изложено логично и последовательно, практическое задание выполнено согласно актуальным нормативным и правовым актам; 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 «не зачтено» 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.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Оценочные материалы для проверки остаточных знаний включают в себя два теоретических вопроса, на которые необходимо дать развернутые ответы.

Примеры теоретических вопросов:

1. Базы данных, используемые компонентами AspenONE Engineering. Наименование и назначение баз данных.
2. Регрессионные модели ХТС. Достоинства и недостатки, программные пакеты для их разработки, необходимые исходные данные;
3. Понятие СУБД. Типы, отличия, области применения, программные продукты;
4. Области применения и программные продукты для газо-гидродинамических расчетов аппаратов.

Информация о разработчиках

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

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

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