

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 30.05.2022 15:17:38
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
« ____ » _____ 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
Проблемно - ориентированные моделирующие пакеты
в химии и химической технологии

Направление подготовки
09.03.03 Прикладная информатика

Направленность программы бакалавриата
Прикладная информатика в химии

Квалификация
Бакалавр

Форма обучения
Очная

Факультет **информационных технологий и управления**
Кафедра **систем автоматизированного проектирования и управления**

Санкт-Петербург
2019

Б1.В.11

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

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

Рабочая программа дисциплины «Проблемно - ориентированные моделирующие пакеты 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 «Прикладная информатика»		доцент И.В. Новожилова
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	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	07
4.3. Занятия семинарского типа.....	08
4.3.1. Семинары, практические занятия	08
4.4. Самостоятельная работа.....	08
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	08
6. Фондооценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	09
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	09
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	09
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	10
10.2. Программное обеспечение.....	10
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	10
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	10
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	11
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	12

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>ПК-12</p> <p>Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки по отдельным разделам темы</p>	<p>ПК-12.3</p> <p>Проведение экспериментов с применением современных информационных технологий.</p>	<p>Знать:</p> <p>принципы разработки математических моделей химико-технологических процессов (ММ ХТП) и применения проблемно-ориентированных моделирующих пакетов (ПОМП) к решению задач моделирования (ЗН-1); структуру и возможности ПОМП в химии и химической технологии (ЗН-2); о современных методах приближенного решения наиболее характерных задач компьютерной химии (ЗН-3);</p> <p>Уметь:</p> <p>применять возможности ПОМП для решения задач химии и химической технологии (У-1); выполнять вычислительные эксперименты на созданных математических моделях, интерпретировать и анализировать результаты моделирования (У-2); формулировать цели и задачи исследований (У-3);</p> <p>Владеть:</p> <p>методикой разработки программного обеспечения в различных средах моделирования (Н-1); методами исследования моделей с учетом их иерархической структуры и оценкой пределов применимости полученных результатов (Н-2).</p>

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений(Б1.В.11), и изучается на 3 курсе в 5 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», «Прикладная информатика в физико-химических методах исследования вещества».

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

3 Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	4/ 144
Контактная работа с преподавателем:	60
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	36
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	6
другие виды контактной работы	
Самостоятельная работа	48
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	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	История развития компьютерных моделирующих программ.	2	2	-	8	ПК-12	ПК-12.3
2	Методология математического моделирования.	4	6	-	6	ПК-12	ПК-12.3
3	Сравнительная характеристика ПОМП.	2	4	-	6	ПК-12	ПК-12.3
4	Общие принципы создания ММ ХТП с применением ПОМП.	4	8	-	8	ПК-12	ПК-12.3
5	Этапы разработки ММ ХТП с использованием ПОМП.	4	10	-	10	ПК-12	ПК-12.3
6	Разработка ММ ХТП с использованием ПОМП.	2	6	-	10	ПК-12	ПК-12.3
Всего на дисциплину		18	36	-	48		

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Иновационная форма
1	История развития компьютерных моделирующих программ. Предмет и задачи курса, его связь с другими дисциплинами. Новые информационные технологии, основанные на знаниях. История развития компьютерных моделирующих программ. Построение компьютерных моделирующих систем в науке и образовании. Системный анализ химико-технологических процессов. Многокритериальный анализ эффективности функционирования химических производств.	2	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p>Методология математического моделирования. Моделирование как наука. Роль математического моделирования в процессе познания действительности и принятия различных решений. Основные понятия теории моделирования. Принципы моделирования (информационной достаточности, осуществимости, множественности, агрегирования, параметризации). Концептуальная модель. Принципы выбора структуры математической модели (ММ). Модели состояния динамических систем. Детерминированные и стохастические модели. Форма представления динамических систем (системы с непрерывным временем, передаточные функции, гибридные системы).</p>	4	ЛВ, КтСМ
3	<p>Сравнительная характеристика ПОМП. Программные системы моделирования. Основные инструменты. Общие сведения о программных пакетах MathLab-Simulink, MathCad, MVStudium, VisSim, ChemCad, UniSim. Структуры пакетов. Основные задачи и функции.</p>	2	ЛВ
4	<p>Общие принципы создания ММ ХТП с применением ПОМП. Возможности пакетов MathCad, MathLab-Simulink, MVStudium для решения типовых математических задач - задание входных и выходных переменных, решение линейных, нелинейных и дифференциальных уравнений, статистическая обработка данных, работа с массивами, визуализация результатов решения.</p>	4	ЛВ, КтСМ
5	<p>Этапы разработки ММ ХТП с использованием ПОМП. Математическая формулировка задачи; выбор численного метода решения, поиск решения средствами программных пакетов, визуализация результатов моделирования в виде таблиц, диаграмм, графиков, 3D-анимации.</p>	4	ЛВ
6	<p>Разработка ММ в среде проблемно-ориентированных моделирующих программных комплексов. Примеры разработки ММ химических и биотехнологических процессов</p>	2	ЛВ, КтСМ
Итого		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.	2	
2, 3	Этапы построения моделей, запуск модели, библиотеки, системы вывода, численные методы, используемые в различных ПОМП.	10	
4 - 6	Способы получения результатов моделирования в виде графиков, таблиц, диаграмм. Построение ММ гидродинамики, кинетики, теплообмена в среде MathCad. Разработка ММ заданного объекта в среде MVStadium 4.0	24	КтСм
Итого		36	

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ Раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Режимы работы моделирующих программ, основные этапы и модули.	8	Письменный опрос
2-6	Изучение приёмов работы в среде универсального моделирующего пакета MathCad	10	Письменный опрос
2-6	Изучение приёмов работы в среде проблемно – ориентированной моделирующего пакета MVStadium.	10	Устный опрос
2-6	Изучение приёмов работы в среде проблемно – ориентированной моделирующего пакета ChemCad	10	Устный опрос
2-6	Изучение приёмов работы в среде проблемно – ориентированного моделирующего пакета UniSim	10	Устный опрос
Итого		48	

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

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

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. Основные модули проблемно - ориентированных моделирующих пакетов.
2. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений в среде MathCad.

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 «Проблемно-ориентированные моделирующие пакеты 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 MSWindows 10;
- LibreOffice или MicrosoftOffice;
- Пакет символьной математики Mathcad 14;
- Программная среда MVStadiumStandard 4.0.

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 СПбГИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Проблемно-ориентированные моделирующие пакеты
в химии и химической технологии»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-12	Способность проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки по отдельным разделам темы	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)
ПК-12.3 Проведение экспериментов с применением современных информационных технологий	Формулирует принципы разработки ММ ХТП и применения ПОМП к решению задач моделирования (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы №1-4 к экзамену	Перечисляет и формулирует принципы разработки ММ ХТП и применение ПОМП с ошибками.	Перечисляет и формулирует принципы разработки ММ ХТП и применение ПОМП с наводящими вопросами.	Способен самостоятельно изложить принципы разработки ММ ХТП и основы применения ПОМП с конкретными примерами
	Анализирует и применяет возможности ПОМП для решения задач химии и химической технологии (У-1)	Правильные ответы на вопросы № 5-8 к экзамену	Приводит классификацию ММ ХТП и требования к ММ с ошибками	Приводит классификацию ММ ХТП и требования к ММ, допускает неточности и неполно характеризует сферу применения ПОМП	Приводит классификацию ММ ХТП и требования к ММ, 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)
	Рассказывает о структуре и возможностях отдельных ПОМП (ЗН-2)	Правильные ответы на вопросы № 9-27 к экзамену	Описывает структуру и возможности конкретной ПОМП с принципиальными ошибками	Описывает структуру и возможности конкретной ПОМП с незначительными ошибками	Описывает структуру и возможности конкретной ПОМП с примерами
	Выполняет вычислительные эксперименты в заданной среде и анализирует результаты моделирования (У-2)		Выполняет вычислительные эксперименты в заданной среде с помощью преподавателя, допускает ошибки.	Выполняет вычислительные эксперименты в заданной среде нерационально.	Выполняет вычислительные эксперименты в заданной среде самостоятельно.
	Демонстрирует владение методикой разработки ММ ХТП в заданной среде(Н-1)		Слабо владеет методикой разработки ММ ХТП в заданной среде.	Реализует методику разработки ММ ХТП в заданной среде с помощью наводящих вопросов.	Реализует методику разработки ММ ХТП в заданной среде самостоятельно.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Характеризует современные методы приближенного решения типовых задач моделирования в химии и химической технологии с использованием ПОМП (ЗН-3)	Правильные ответы на вопросы №28-32 к экзамену	Недостаточно полно характеризует современные методы приближенного решения типовых задач моделирования с использованием ПОМП	Характеризует современные методы приближенного решения типовых задач моделирования с использованием ПОМП с незначительными ошибками.	Уверенно и без ошибок характеризует современные методы приближенного решения типовых задач моделирования с использованием ПОМП
	Формулирует цели и задачи построения математической модели (У-2)		Не дает четкой формулировки цели и задач построения математической модели	Формулирует цели и задачи построения математической модели с наводящими вопросами.	Формулирует цели и задачи построения математической модели самостоятельно.
	Использует методы исследования моделей с учетом их иерархической структуры и оценивает область применимости моделей с учетом требований, предъявляемых к ММ (Н-2)		Моделирует заданный объект в среде ПОМП, оценивает область применения ММ с учетом предъявляемых требований с помощью преподавателя.	Моделирует заданный объект в среде ПОМП, оценивает область применения ММ с учетом предъявляемых требований, допускает незначительные ошибки.	Моделирует заданный объект в среде ПОМП, оценивает область применения ММ с учетом предъявляемых требований, самостоятельно.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-12:

1. Принципы разработки ММ ХТП.
2. История развития проблемно - ориентированных моделирующих пакетов (ПОМП).
3. Формы представления динамических систем.
4. Классификация ПОМП.
5. Сфера применения ПОМП. Критерии выбора ПОМП Программные продукты, относящиеся к проблемно - ориентированным моделирующим пакетам.
6. Классификация математических моделей по целевому назначению.
7. Классификация математических моделей по способу получения.
8. Требования, предъявляемые к математическим моделям.
9. Основные модули проблемно - ориентированных моделирующих пакетов.
10. Режимы работы моделирующих программ, основные этапы и модули.
11. Создание непрерывных, дискретных и гибридных систем
12. Модели состояния динамических систем.
13. Детерминированные и стохастические модели.
14. Форма представления динамических систем (системы с непрерывным временем, передаточные функции), гибридные системы.
15. Основные объекты пакета MathCad
16. Задание переменных, формирование векторов и матриц операторы , основные типы данных на примере пакета MathCad
17. Элементы программирования в MathCad (цикл, условный оператор)
18. Построение графиков MathCad
19. Решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений в среде MathCad.
20. Основные команды программирования в среде MathCad.
21. Структура пакета ModelVisionStudium
22. Понятие о гибридных системах и их моделирование в среде ModelVisionStudium.
23. Основные компоненты карты поведения в среде ModelVisionStudium.
24. Входной язык системы MVStudium: блоки, связи, поведение, классы и экземпляры классов.
25. Имитационный эксперимент в ModelVisionStudium
26. Метод Рунге- Кутты для решения систем ОДУ.
27. Способы задания уравнений в различных средах.
28. Основные модули в составе ММ химико-технологического процесса
29. Численные методы, используемые при моделировании динамических систем.
30. Выбор структуры математической модели химико-технологических процессов на основании анализа гидродинамики потоков в аппарате.
31. Этапы составления математической модели прямой кинетической задачи.
32. Метод Эйлера решения прямой кинетической задачи.

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

4. 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 СТП 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.