

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования



**Пермский национальный исследовательский  
политехнический университет**

**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по образовательной  
деятельности

 А.Б. Петроченков

« 03 » марта 20 23 г.

### **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Дисциплина:** Специальные главы прикладной математики  
(наименование)

**Форма обучения:** очная  
(очная/очно-заочная/заочная)

**Уровень высшего образования:** магистратура  
(бакалавриат/специалитет/магистратура)

**Общая трудоёмкость:** 144 (4)  
(часы (ЗЕ))

**Направление подготовки:** 01.04.02 Прикладная математика и информатика  
(код и наименование направления)

**Направленность:** Хемобиодинамика и биоинформатика  
(наименование образовательной программы)

## 1. Общие положения

### 1.1. Цели и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины «Специальные главы прикладной математики» является формирование у студентов теоретических и практических знаний в области применения современного программного обеспечения, предназначенного для компьютерного моделирования и решения задач физико-химической гидродинамики, микрофлюидики, химического синтеза, молекулярной динамики.

Задачи учебной дисциплины:

- формирование знаний о методах численного моделирования в области физико-химической гидродинамики, микрофлюидики, вычислительной химии.
- формирование умений и навыков работы с системами компьютерного моделирования физических и химических процессов ANSYS Fluent, ANSYS CFX, COMSOL Multiphysics, ChemOffice, HyperChem и др.

### 1.2. Изучаемые объекты дисциплины

Программные средства компьютерного моделирования физических, химических, гидродинамических процессов: ANSYS Fluent, ANSYS CFX, COMSOL Multiphysics, FlexPDE, ChemOffice, HyperChem и др.

### 1.3. Входные требования

При освоении дисциплины обучающиеся используются знания, умения и навыки, сформированные при изучении следующих блоков учебной программы: «Физико-химическая гидродинамика», «Основы микрофлюидики», «Процессы самоорганизации в химии», «Введение в механику жидкости», «Численные методы исследования в механике жидкости», «Современные компьютерные технологии».

Кроме того, дисциплина существенно опирается на такие разделы математики, как алгебра, анализ, уравнения математической физики и др. При изучении данного курса используются различные разделы химии, физики сплошных сред, теоретическая механика.

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
ОПК-2	ИД-1ОПК-2	Знает структуру и интерфейс современных систем численного моделирования и примеры их реализации	Знает методы получения новых знаний и умений, в том числе в новых областях знаний, связанных с профессиональной деятельностью; порядок поиска, систематизации и реализации научно-	Экзамен

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
ОПК-2	ИД-2ОПК-2	Умеет самостоятельно осваивать и применять новые системы компьютерного моделирования	Умеет, в том числе в с помощью информационных технологий приобретать новые знания и совершенствовать их	Индивидуальное задание
ОПК-2	ИД-3ОПК-2	Владеет общенаучными базовыми знаниями в области физики, химии, механики жидкости	Владеет информационно-коммуникационными технологиями в сфере профессиональной деятельности	Экзамен
ПКО-2	ИД-1ПКО-02	Знает методы вычислительной физики, химии, гидродинамики	Знает методы, направленные на решение задач аналитического характера, предполагающих выбор и многообразие актуальных способов решения задач.	Экзамен
ПКО-2	ИД-2ПКО-02	Умеет формулировать математическую и численную модель для физико-химических задачи; решать задачи физико-химической гидродинамики, микрофлуидики, химического синтеза, молекулярной динамики, компьютерного моделирования процессов и аппаратов био- и химической технологии с применением программных средств компьютерного моделирования физических и химических процессов	Умеет анализировать научные проблемы по тематике проводимых исследований и разработок.	Индивидуальное задание
ПКО-2	ИД-3ПКО-02	Владеет навыками построения физико-механических, математических и компьютерных моделей для решения задач физико-химической гидродинамики, микрофлуидики, вычислительной химии.	Владеет навыками разработки элементов планов и методических программ проведения исследований и разработок; проверки правильности результатов, полученных сотрудниками, работающими под его руководством	Экзамен

### 3. Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		3	
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	36	36	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)	16	16	
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	18	18	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	72	72	
2. Промежуточная аттестация			
Экзамен	36	36	
Дифференцированный зачет			
Зачет			
Курсовой проект (КП)			
Курсовая работа (КР)			
Общая трудоемкость дисциплины	144	144	

### 4. Содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	
3-й семестр				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Раздел 1. Моделирование процессов физико-химической гидродинамики	6	0	8	24
<p>Тема 1. CFD-пакет ANSYS CFX (Fluent). Метод конечных объемов. Возможности, особенности и состав пакета ANSYS Academic Student. Основы работы с ANSYS CFX (Fluent). Создание и работа с проектом задачи в ANSYS Workbench. Создание геометрии задачи в ANSYS Design Modeler. Построение сетки в ANSYS Mesh. Этапы описания задачи в ANSYS CFX (Fluent).</p> <p>Тема 2. Моделирование физико-химических процессов в пакете ANSYS CFX (Fluent). Модель химического реактора загрузочного (проточного) типа для реакции нейтрализации. Расчет сложной реакции с привлечением импорта файлов CHEMKIN: гомогенное воспламенение сжатого метана. Моделирование фармацевтических производств: ферментативная реакция с кинетикой Михаэлиса-Ментена. Применение модулей оптимизации: расчет распределения катализатора в реакторе для максимизации общей скорости реакции раствора. Сепарация химических соединений: мембранный диализ, высокоэффективная жидкостная хроматография (HPLC), управляемая диффузия в микроканальной H-ячейке.</p> <p>Тема 3. Программная среда для решения уравнений в частных производных FlexPDE. Метод конечных элементов. Возможности, особенности и состав МКЭ-пакета FlexPDE. Основы работы с пакетом FlexPDE. Рабочее окно программы, главное меню. Сценарий описания и решения задачи. Разделы и инструкции сценария. Операторы и функции FlexPDE.</p> <p>Тема 4. Моделирование гидродинамических процессов в среде FlexPDE. Модель химического реактора загрузочного (проточного) типа для реакции нейтрализации.</p> <p>Тема 5. Системы имитационного моделирования химико-технологических процессов: Aspen Plus, Aspen Hysys, CHEMCAD, Design II, PRO/II, ProMax, GIBBS .</p>				
Раздел 2. Моделирование в микрофлюидике	6	0	6	24
<p>Тема 6. Универсальная среда численного моделирования в различных областях научных исследований COMSOL Multiphysics. Модули гидродинамики и теплопередачи: вычислительная гидродинамика, микрофлюидика, миксеры, течения в пористых средах, молекулярные течения, теплопередача, течения в трубопроводах. Модули химии: химические реакции,</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>электрохимия, электро-осаждение, топливные элементы. Многоцелевые модули: модуль оптимизации, модуль трассировки частиц, библиотека материалов.</p> <p>Тема 7. Микрожидкостное смешивание. Активные смесители: диэлектрофоретический, электрокинетический (периодический электроосмотический миксер), пульсации давления, ультразвуковой акустический, магнитогидродинамический. Конвективные механизмы перемешивания: конвекция двойной диффузии, конвекция Релея-Тейлора. Пассивное смешивание: зигзагообразные каналы, пересекающиеся каналы, встроенные барьеры.</p> <p>Тема 8. Разделение смесей. Диэлектрофоретическое (DEP) разделение частиц с различными размерами, формой и диэлектрическими свойствами в жидком носителе. Расчет установки для отделения эритроцитов от тромбоцитов.</p> <p>Тема 9. Двухфазные течения. Модель капиллярного течения с учетом силы поверхностного натяжения и прилипания стенок: level set – метод, phase field –метод. Система доставки лекарств, растворимых в воде, по капилляру. Электро-настраиваемая линза: мениск, образующийся между двумя несмешивающимися жидкостями (одной проводящей и одной изолирующей), приводится в действие электропроводящим эффектом на диэлектрике (EWOD). Моделирование потока жидкости в струйной дюзе, например, в принтере. Эффект Марангони: разрушение длинной струи жидкости в результате периодического градиента поверхностного натяжения.</p>				
Раздел 3. Моделирование в компьютерной химии и молекулярной динамике	4	0	4	24
<p>Тема 10. Типовые задачи компьютерной химии: поиск зависимостей типа «структура — свойство»; генерация наборов химических структур, отвечающих заданным параметрам (составу, наличию функциональных групп и т. д.); перечисление всевозможных химических реакций между заданными реагентами (так называемый «компьютерный синтез»). Знакомство с программным пакетом ChemOffice. Химический редактор ChemDraw; запись схемы реакции с указанием реакционных центров.</p> <p>Тема 11. Уравнения молекулярной динамики. Метод списков Верле. Решеточные газы, уравнение Больцмана. Модели LGA и LBE. Химические</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
реакции в решеточных моделях. Моделирование в молекулярной динамике с помощью программы HyperChem. Построение и редактирование молекул. Формирование полипептида. Измерение параметров структур. Создание и редактирование полипептидной цепи. Минимизация энергии системы. Моделирование динамики и состояния равновесия.				
ИТОГО по 3-му семестру	16	0	18	72
ИТОГО по дисциплине	16	0	18	72

### Тематика примерных практических занятий

№ п.п.	Наименование темы практического (семинарского) занятия
1	Основы работы с ANSYS CFX (Fluent). Модель химического реактора загрузочного (проточного) типа для реакции нейтрализации.
2	Гомогенное воспламенение сжатого метана (сложная кинетика горения включает 53 вида, участвующих в 325 реакциях). Настройка механизма реакции путем импорта файлов CHEMKIN с формулами химических реакций, кинетикой и термодинамическими данными. Моделирование фармацевтических производств: ферментативная реакция с кинетикой Михаэлиса-Ментена.
3	Применение модулей оптимизации: расчет распределения катализатора в реакторе для максимизации общей скорости реакции раствора. Сепарация химических соединений: мембранный диализ, высокоэффективная жидкостная хроматография (HPLC), управляемая диффузия в микроканальной Н-ячейке.
4	Моделирование гидродинамических процессов в среде FlexPDE. Модель химического реактора загрузочного (проточного) типа для реакции нейтрализации.
5	Микрожидкостное смешивание. Активные смесители: диэлектрофоретический, электрокинетический (периодический электроосмотический миксер), пульсации давления. Конвективные механизмы перемешивания: конвекция двойной диффузии, конвекция Релея-Тейлора.
6	Пассивное смешивание в микрожидкостных устройствах: зигзагообразные каналы, пересекающиеся каналы, встроенные барьеры. Диэлектрофоретическое (DEP) разделение частиц в микрожидкостных устройствах. Расчет установки для отделения эритроцитов от тромбоцитов.
7	Двухфазные течения в микрожидкостных устройствах: система доставки лекарств по капилляру; электро-настраиваемая жидкая линза; моделирование потока жидкости в струйной дюзе (принтере).
8	Знакомство с программным пакетом ChemOffice. Химический редактор ChemDraw. Поиск зависимостей типа «структура — свойство»; генерация наборов химических структур, отвечающих заданным параметрам; перечисление всевозможных химических реакций между заданными реагентами.
9	Моделирование в молекулярной динамике с помощью программы HyperChem. Построение и редактирование молекул. Формирование полипептида. Измерение параметров структур. Создание и редактирование полипептидной цепи. Минимизация энергии системы. Моделирование динамики и состояния равновесия.

## 5. Организационно-педагогические условия

### 5.1. Образовательные технологии, используемые для формирования компетенций

Проведение лекционных занятий по дисциплине основывается на активном методе обучения, при котором учащиеся не пассивные слушатели, а активные участники занятия, отвечающие на вопросы преподавателя. Вопросы преподавателя нацелены на активизацию процессов усвоения материала, а также на развитие логического мышления. Преподаватель заранее намечает список вопросов, стимулирующих ассоциативное мышление и установление связей с ранее освоенным материалом.

Практические занятия проводятся на основе реализации метода обучения действием: определяются проблемные области, формируются группы. При проведении практических занятий преследуются следующие цели: применение знаний отдельных дисциплин и креативных методов для решения проблем и принятия решений; отработка у обучающихся навыков командной работы, межличностных коммуникаций и развитие лидерских качеств; закрепление основ теоретических знаний.

При проведении учебных занятий используются интерактивные лекции, групповые дискуссии, ролевые игры, тренинги и анализ ситуаций и имитационных моделей.

### 5.2. Методические указания для обучающихся по изучению дисциплины

При изучении дисциплины обучающимся целесообразно выполнять следующие рекомендации:

1. Изучение учебной дисциплины должно вестись систематически.
2. После изучения какого-либо раздела по учебнику или конспектным материалам рекомендуется по памяти воспроизвести основные термины, определения, понятия раздела.
3. Особое внимание следует уделить выполнению отчетов по практическим занятиям, лабораторным работам и индивидуальным комплексным заданиям на самостоятельную работу.
4. Вся тематика вопросов, изучаемых самостоятельно, задается на лекциях преподавателем. Им же даются источники (в первую очередь вновь изданные в периодической научной литературе) для более детального понимания вопросов, озвученных на лекции.

## 6. Перечень учебно-методического и информационного обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

### 6.1. Печатная учебно-методическая литература

№ п/п	Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц)	Количество экземпляров в библиотеке
<b>1. Основная литература</b>		
1	Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред / О. М. Белоцерковский. - Москва: Наука, Физматлит, 1984.	14
2	Каплун А. Б. ANSYS в руках инженера : практическое руководство / А. Б. Каплун, Е. М. Морозов, М. А. Олферьева. - Москва: УРСС, 2004.	26
3	Марков Ю. Г. Математические модели химических реакций : учебник / Ю. Г. Марков, И. В. Маркова. - Санкт-Петербург[и др.]: Лань, 20013.	6
<b>2. Дополнительная литература</b>		
<b>2.1. Учебные и научные издания</b>		

1	Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии : учебник для вузов / А.Г.Касаткин. - М.: Альянс, 2005.	1
2	Колесниченко И. В. Введение в механику несжимаемой жидкости : учебное пособие / И. В. Колесниченко, А. Н. Шарифулин. - Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2019.	5
3	Мазунин С. А. Физико-химический анализ в химии и химической технологии : учебное пособие для вузов / С. А. Мазунин. - Пермь: Изд-во ПГНИУ, 2014.	9
4	Стромберг А. Г. Физическая химия : учебник для вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко. - Москва: Высш. шк., 2006.	76
5	Тарасевич Ю. Ю. Математическое и компьютерное моделирование: вводный курс : учебное пособие / Ю. Ю.Тарасевич. - Москва: УРСС, 2001.	5
<b>2.2. Периодические издания</b>		
1	Вычислительная механика сплошных сред : журнал / Российская академия наук, Уральское отделение; Институт механики сплошных сред. - Пермь: ИМСС УрО РАН, 2008 - .	
2	Журнал физической химии / Российская академия наук. Отделение химии и наук о материалах. - Москва: Наука, 1930 - .	
3	Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа : научный журнал / Российская академия наук. - Москва: Наука, 1966 - .	
4	Успехи химии : обзорный журнал по химии / Российская академия наук; Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского. - Москва: РАН, 1932 - .	
<b>2.3. Нормативно-технические издания</b>		
	Не используется	
<b>3. Методические указания для студентов по освоению дисциплины</b>		
	Не используется	
<b>4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента</b>		
1	Кларк Т. Компьютерная химия: Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы : пер. с англ. / Т. Кларк. - Москва: Мир, 1990.	1
2	Математическое моделирование физико-химических процессов в среде Comsol Multiphysics 5.2 : учебное пособие / А. В. Коваленко [и др.]. - Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2017.	1
3	Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - М.: Солон-Пресс, 2005.	2

## 6.2. Электронная учебно-методическая литература

Вид литературы	Наименование разработки	Ссылка на информационный ресурс	Доступность (сеть Интернет / локальная сеть; авторизованный / свободный доступ)
Дополнительная литература	Гартман Т. Н. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики : учебное пособие / Гартман Т. Н., Клушин Д. В. - Санкт-Петербург: Лань, 2020.	<a href="http://elib.pstu.ru/Record/lanRU-LAN-BOOK-126905">http://elib.pstu.ru/Record/lanRU-LAN-BOOK-126905</a>	локальная сеть; свободный доступ
Дополнительная литература	Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика (2-е издание). М.: Физматлит, 1959	<a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&amp;book_id=257423">https://biblioclub.ru/index.php?page=book_view_red&amp;book_id=257423</a>	сеть Интернет; свободный доступ

## 6.3. Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, используемое при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Вид ПО	Наименование ПО
Операционные системы	Windows 10 (подп. Azure Dev Tools for Teaching)
Офисные приложения.	Microsoft Office Professional 2007. лиц. 42661567
Системы управления проектами, исследованиями, разработкой, проектированием, моделированием и внедрением	ANSYS (лиц. 1062978 )
Среды разработки, тестирования и отладки	MS Visual studio 2019 community (Free)

## 6.4. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Наименование	Ссылка на информационный ресурс
База данных Elsevier "Freedom Collection"	<a href="https://www.elsevier.com/">https://www.elsevier.com/</a>
База данных Scopus	<a href="https://www.scopus.com/">https://www.scopus.com/</a>
База данных Springer Nature e-books	<a href="http://link.springer.com/">http://link.springer.com/</a> <a href="http://jwww.springerprotocols.com/">http://jwww.springerprotocols.com/</a> <a href="http://materials.springer.com/">http://materials.springer.com/</a> <a href="http://zbmath.org/">http://zbmath.org/</a> <a href="http://npg.com/">http://npg.com/</a>
База данных Web of Science	<a href="http://www.webofscience.com/">http://www.webofscience.com/</a>
Научная библиотека Пермского национального исследовательского политехнического университета	<a href="http://lib.pstu.ru/">http://lib.pstu.ru/</a>

Наименование	Ссылка на информационный ресурс
Электронно-библиотечная система Лань	<a href="https://e.lanbook.com/">https://e.lanbook.com/</a>
Электронно-библиотечная система IPRbooks	<a href="http://www.iprbookshop.ru/">http://www.iprbookshop.ru/</a>
Информационные ресурсы Сети КонсультантПлюс	<a href="http://www.consultant.ru/">http://www.consultant.ru/</a>

### **7. Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине**

Вид занятий	Наименование необходимого основного оборудования и технических средств обучения	Количество единиц
Лекция	Лекционная аудитория, оборудованная проектором и экраном	1
Лекция	Ноутбук	1
Практическое занятие	Персональный компьютер	4

### **8. Фонд оценочных средств дисциплины**

Описан в отдельном документе
------------------------------

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Пермский национальный исследовательский политехнический  
университет»

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**

для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине  
«Специальные главы прикладной математики»  
*Приложение к рабочей программе дисциплины*

<b>Направление подготовки:</b>	01.04.02 Прикладная математика и информатика
<b>Направленность (профиль) образовательной программы:</b>	Хемобиодинамика и биоинформатика
<b>Квалификация выпускника:</b>	«Магистр»
<b>Выпускающая кафедра:</b>	Прикладная физика
<b>Форма обучения:</b>	Очная

**Курс:** 2 **Семестр:** 3

**Трудоёмкость:**

Кредитов по рабочему учебному плану:	4	ЗЕ
Часов по рабочему учебному плану:	144	ч.

**Форма промежуточной аттестации:**  
Экзамен: 3

**Фонд оценочных средств** для проведения промежуточной аттестации обучающихся для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине является частью (приложением) к рабочей программе дисциплины. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине разработан в соответствии с общей частью фонда оценочных средств для проведения промежуточной аттестации основной образовательной программы, которая устанавливает систему оценивания результатов промежуточной аттестации и критерии выставления оценок. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине устанавливает формы и процедуры текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.

### **1. Перечень контролируемых результатов обучения по дисциплине, объекты оценивания и виды контроля**

Согласно РПД освоение учебного материала дисциплины запланировано в течение одного семестра (3-го семестра учебного плана) и разбито на 3 учебных модуля. В каждом модуле предусмотрены аудиторские лекционные и лабораторные занятия, а также самостоятельная работа студентов. В рамках освоения учебного материала дисциплины формируется компоненты компетенций *знать, уметь, владеть*, указанные в РПД, которые выступают в качестве контролируемых результатов обучения по дисциплине (табл. 1.1).

Контроль уровня усвоенных знаний, усвоенных умений и приобретенных владений осуществляется в рамках текущего, рубежного и промежуточного контроля при изучении теоретического материала, сдаче отчетов по лабораторным работам и экзамена. Виды контроля сведены в таблицу 1.1.

Таблица 1.1. Перечень контролируемых результатов обучения по дисциплине

Контролируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУВы)	Вид контроля					
	Текущий		Рубежный		Итоговый	
	С	ТО	ОИЗ	Т/КР		Экзамен
<b>Усвоенные знания</b>						
<b>3.1</b> знать методы вычислительной физики, химии, гидродинамики	С1	ТО1		КР1		ТВ
<b>3.2</b> знать структуру и интерфейс некоторых современных систем численного моделирования и примеры их реализации		ТО2		КР2		ТВ
<b>3.3.</b> знать основные программы компьютерного моделирования (функции, возможности) в области вычислительной гидродинамики и мультифизики, универсальные пакеты решения уравнений в частных производных, пакеты постобработки и визуализации результатов, облачные сервисы для вычислений.		ТО3		КР2		ТВ
<b>Освоенные умения</b>						
<b>У.1</b> уметь формулировать математическую и численную модель для физико-химических задач			ОИЗ1	КР1		ПЗ
<b>У.2</b> уметь решать задачи физико-химической гидродинамики, микрофлюидики с применением программных средств компьютерного моделирования			ОИЗ2 - ОИЗ5			ПЗ
<b>У.3.</b> уметь самостоятельно осваивать и применять новые системы компьютерного моделирования			ОИЗ6			ПЗ
<b>Приобретенные владения</b>						

<b>В.1</b> владеть общенаучными базовыми знаниями в области физики, химии, механики жидкости	С1			КР1		КЗ
<b>В.2</b> владеть навыками построения физико-механических, математических и компьютерных моделей для решения задач физико-химической гидродинамики, микрофлуидики, вычислительной химии.						КЗ
<b>В.3</b> владеть навыками разработки планов проведения исследований и разработок; проверки правильности результатов.				КР2		КЗ

*С* – собеседование по теме; *ТО* – коллоквиум (теоретический опрос); *ОИЗ* – отчет по индивидуальному заданию; *Т/КР* – рубежное тестирование (контрольная работа); *ТВ* – теоретический вопрос; *ПЗ* – практическое задание; *КЗ* – комплексное задание.

Итоговой оценкой достижения результатов обучения по дисциплине является промежуточная аттестация в виде экзамена, проводимая с учетом результатов текущего и рубежного контроля.

## **1. Виды контроля, типовые контрольные задания и шкалы оценивания результатов обучения**

Текущий контроль успеваемости имеет целью обеспечение максимальной эффективности учебного процесса, управление процессом формирования заданных компетенций обучаемых, повышение мотивации к учебе и предусматривает оценивание хода освоения дисциплины. В соответствии с Положением о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, специалитета и магистратуры в ПНИПУ предусмотрены следующие виды и периодичность текущего контроля успеваемости обучающихся:

- входной контроль, проверка исходного уровня подготовленности обучаемого и его соответствия предъявляемым требованиям для изучения данной дисциплины;

- текущий контроль усвоения материала (уровня освоения компонента «знать» заданных компетенций) на каждом групповом занятии и контроль посещаемости лекционных занятий;

- промежуточный и рубежный контроль освоения обучаемыми отдельных компонентов «знать», «уметь» заданных компетенций путем компьютерного или бланочного тестирования, контрольных опросов, контрольных работ (индивидуальных домашних заданий), защиты отчетов по индивидуальным заданиям, рефератов, эссе и т.д.

Рубежный контроль по дисциплине проводится на следующей неделе после прохождения модуля дисциплины, а промежуточный – во время каждого контрольного мероприятия внутри модулей дисциплины;

- межсессионная аттестация, единовременное подведение итогов текущей успеваемости не менее одного раза в семестр по всем дисциплинам для каждого направления подготовки (специальности), курса, группы;

- контроль остаточных знаний.

### **2.1. Текущий контроль усвоения материала**

Текущий контроль усвоения материала в форме собеседования или выборочного теоретического опроса студентов проводится по каждой теме.

Результаты по 4-балльной шкале оценивания заносятся в книжку преподавателя и учитываются в виде интегральной оценки при проведении промежуточной аттестации.

## **2.2. Рубежный контроль**

Рубежный контроль для комплексного оценивания усвоенных знаний, освоенных умений и приобретенных владений (табл. 1.1) проводится в форме отчетов по индивидуальным заданиям и рубежных контрольных работ (после изучения каждого модуля учебной дисциплины).

### **2.2.1. Отчеты по индивидуальным заданиям (лабораторным работам)**

Всего запланировано 6 индивидуальных заданий. Типовые темы индивидуальных заданий приведены в РПД.

Отчет по индивидуальному заданию составляется, и его защита проводится индивидуально каждым студентом. Типовые шкала и критерии оценки приведены в общей части ФОС образовательной программы.

### **2.2.2. Рубежная контрольная работа**

Согласно РПД запланировано 2 рубежные контрольные работы (КР) после освоения студентами первых двух учебных модулей дисциплины. Первая КР по модулю 1 «Моделирование в компьютерной химии и молекулярной динамике», вторая КР – по модулю 2 «Моделирование в микрофлюидике».

#### **Типовые задания первой КР:**

1. Составить математическую модель задачи реакции нейтрализации в замкнутом реакторе простой конфигурации.
2. Подготовить ссылки на две системы облачного моделирования в области вычислительной гидродинамики. Выяснить условия их использования.

#### **Типовые задания второй КР:**

1. Физические особенности микрофлюидной гидродинамики.
2. Компьютерные модели используемые при решении задач микрофлюидики.
3. Составить перечень основных способов визуализации результатов в модуле постобработки ANSYS CFD Post.

Типовые шкала и критерии оценки результатов рубежной контрольной работы приведены в общей части ФОС образовательной программы.

## **2.3. Промежуточная аттестация (итоговый контроль)**

Допуск к промежуточной аттестации осуществляется по результатам текущего и рубежного контроля. Условиями допуска являются успешная сдача всех лабораторных работ и положительная интегральная оценка по результатам текущего и рубежного контроля.

Промежуточная аттестация, согласно РПД, проводится в виде экзамена по дисциплине устно по билетам. Билет содержит теоретические вопросы (ТВ) для проверки усвоенных знаний, практические задания (ПЗ) для проверки освоенных умений и комплексные задания (КЗ) для контроля уровня приобретенных владений всех заявленных компетенций.

Билет формируется таким образом, чтобы в него попали вопросы и практические задания, контролирующие уровень сформированности *всех* заявленных компетенций. Форма билета представлена в общей части ФОС

образовательной программы.

### **2.3.1. Типовые вопросы и задания для экзамена по дисциплине**

#### **Типовые вопросы для контроля усвоенных знаний:**

1. Основные понятия метода конечных элементов.
2. Общая характеристика пакета вычислительной гидродинамики ANSYS CFX (Fluent)
3. Метод конечного объема на прямоугольной сетке.
4. Рефренсное, абсолютное, относительное, динамическое и гидростатическое давление в задачах гидромеханики.
5. Модели турбулентности и параметры описания турбулентности в ANSYS CFX.
6. Базовые уравнения гидромеханики в ANSYS CFX: переноса импульса, переноса энергии, уравнение состояния.
7. Модели переноса частиц в ANSYS CFX.
8. Модели мультифазного течения в ANSYS CFX.
9. Модели горения и химических реакций в ANSYS CFX.
10. Модель многокомпонентной жидкости в ANSYS CFX.

#### **Типовые вопросы и практические задания для контроля освоенных умений:**

1. Препроцессор ANSYS CFX. Продемонстрируйте создание граничных условий для двумерной задачи тепловой конвекции.
2. Препроцессор ANSYS CFX. Продемонстрируйте создание и описание нового материала типа смеси.
3. Препроцессор ANSYS CFX. Продемонстрируйте импорт сетки.
4. Субдомены (Subdomains) в ANSYS CFX. Привести примеры использования.
5. Геометрическое моделирование в программе Design Modeler. Продемонстрируйте инструменты создания эскизов.

#### **Типовые комплексные задания для контроля приобретенных владений:**

1. На основе инструкций, данных в учебных материалах, а также заранее подготовленных геометрии и сетки, составить проект ANSYS CFX (Fluent) и решить задачу тепловой конвекции в квадратной полости.
2. Продемонстрируйте постобработку в ANSYS CFD Post.
3. На основе предложенного описания и эскизов создать трехмерную геометрическую модель. Построить сетку, продемонстрировав работу с глобальными и локальными параметрами.

Перечень типовых ситуационных заданий и кейсов для проверки умений и владений представлен в приложении 1. *Полный перечень теоретических вопросов и практических заданий в форме утвержденного комплекта экзаменационных билетов хранится на выпускающей кафедре.*

### **2.3.2. Шкалы оценивания результатов обучения на экзамене**

Оценка результатов обучения по дисциплине в форме уровня сформированности компонентов *знать, уметь, владеть* заявленных компетенций

проводится по 4-х балльной шкале оценивания путем выборочного контроля во время экзамена.

Типовые шкала и критерии оценки результатов обучения при сдаче экзамена для компонентов *знать, уметь и владеть* приведены в общей части ФОС образовательной программы.

### **3. Критерии оценивания уровня сформированности компонентов и компетенций**

#### **3.1. Оценка уровня сформированности компонентов компетенций**

При оценке уровня сформированности компетенций в рамках выборочного контроля при экзамене считается, что *полученная оценка за компонент проверяемой в билете компетенции обобщается на соответствующий компонент всех компетенций, формируемых в рамках данной учебной дисциплины.*

Типовые критерии и шкалы оценивания уровня сформированности компонентов компетенций приведены в общей части ФОС образовательной программы.

#### **3.2. Оценка уровня сформированности компетенций**

Общая оценка уровня сформированности всех компетенций проводится путем агрегирования оценок, полученных студентом за каждый компонент формируемых компетенций, с учетом результатов текущего и рубежного контроля в виде интегральной оценки по 4-х балльной шкале. Все результаты контроля заносятся в оценочный лист и заполняются преподавателем по итогам промежуточной аттестации.

Форма оценочного листа и требования к его заполнению приведены в общей части ФОС образовательной программы.

При формировании итоговой оценки промежуточной аттестации в виде экзамена используются типовые критерии, приведенные в общей части ФОС образовательной программы.

### **Приложение 1.**

#### ***Типовые ситуационные задания и кейсы для проверки умений и владений***

##### ***Задание № \_\_. (анализ кейс-стади)***

Проверяемые результаты обучения: y2; v2

Задание. Внимательно прочитайте текст предложенного кейса и ответьте на вопросы задания.

#### **Критерии оценки ситуационных заданий**

***Оценка «пять» ставится, если обучающийся осознанно излагает и оценивает суть данной ситуации, с аргументацией своей точки зрения, умеет анализировать, обобщать и предлагает верные пути решения складывающейся ситуации.***

***Оценка «четыре» ставится, если обучающийся понимает суть ситуации, логично строит свой ответ, но допускает незначительные неточности при определении путей решения.***

***Оценка «три» ставится, если обучающийся ориентируется в сущности складывающейся ситуации, но нуждается в наводящих вопросах, не умеет анализировать и не совсем верно намечает пути решения ситуации.***

*Оценка «два» ставится, если обучающийся не ориентируется и не понимает суть данной ситуации, не может предложить путей ее решения, либо допускает грубые ошибки.*

**Ситуация 1.** Компьютерное моделирование проводится в ANSYS CFX, задача эволюционная. В препроцессоре подготовлено описание задачи. Однако после запуска решателя выяснилось, что счет идет слишком медленно, общее время счета оценивается недопустимо большим. Невязки находятся в пределах  $10^{-5}$ . Что можно предпринять, чтобы обеспечить разумное время вычислений? Постарайтесь описать несколько вариантов действий.

**Ситуация 2.** Решается задача моделирования обтекания препятствия в канале. Проводится верификация решения. После того как результаты получены, стало ясно, что результаты неточные, отклонение от результата контрольной тестовой задачи 50%. Опишите возможные причины.

**Ситуация 3.** Решена трехмерная задача химической реакции нейтрализации в реакторе. Результат – поля концентраций реагентов и продуктов в различные моменты времени. Как можно наглядно визуализировать эти поля в ANSYS CFD Post и в ParaView?