Комплект типовых заданий для текущей аттестации
(защита практических работ)

по дисциплине «Информационные технологии в химии и химической технологии»

(наименование дисциплины)

Критерии оценки

Каждая тема оценивается от 3 до 6 баллов.
Ответ засчитывается на **пороговом** уровне, если за выполненные задания, оценка составляет 3 балла;

Ответ засчитывается на **базовом** уровне, если за выполненные задания, оценка составляет 4-5 баллов;

Ответ засчитывается на **продвинутом** уровне, если выполнены все задания, оценка составляет 6 балла.

Тема 1. Компьютерные сети. Интернет. Основные понятия.
1. Общие понятия о компьютерных сетях. Структура Internet , средства подключения и навигации.
2. Понятие о микропроцессорной технике.
3. Понятие о поисковых серверах.

Тема 2. Защита информации и работа в информационной среде.
1. Какие Интернет-сервисы можно использовать для поддержки своей научной карьеры?
2. Какие меры безопасности нужно помнить при использовании компьютерных технологий?

Тема 3. Поисковые системы для научных целей.
1. Правила оформления текстовых документов.
2. Виды химической информации в Сети: справочная информация, информация о веществах и оборудовании, патентная и научная информация.

Тема 4. Теоретические основы систем компьютерного проектирования.
1. Специфические особенности текстовых документов, содержащих химическую информацию: графики, блок-схемы, графические формулы химических соединений, символическая запись химических процессов.
2. Программное обеспечение подготовки текстовых документов: возможности Microsoft Office, графический редактор Visio, приложение ChemWind.

Тема 5. Обработка данных средствами электронных таблиц MS EXCEL.
1. По числовым данным согласно варианту построить график в программе *Excell*:

Вариант							
1		2		3		4	
X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
1	11	8	54	5	57	4	45
2	13	10	21	8	90	12	76
3	15	15	11	10	65	36	82
4	19	18	6	14	32	72	12
5	14	23	1	18	21	88	5
6	18	35	8	22	11	91	1

Тема 6. Системы программирования. Основные программные продукты для расчетов.

1. Программное обеспечение подготовки текстовых документов: возможности Microsoft Office, графический редактор Visio, приложение ChemWin.
2. Виды компьютерных моделей химических процессов: вычислительные и молекулярно-динамические.
3. Средства реализации вычислительных моделей: пакеты MathCad, Mathlab, ChemCad и КОМПАС

Тема 7. Программное обеспечение MathCad, ChemCad, ChemWin, MatLab, КОМПАС.

1. Средства моделирования, основанные на клеточных автоматах
2. Структурные схемы современного аппаратного обеспечения химического эксперимента.
3. Алгоритмы автоматизации электрохимического эксперимента и управления электрохимическими процессами.
4. Виды компьютерных моделей химических процессов: вычислительные и молекулярно-динамические.

Тема 8. Расчет массы реагентов и продуктов химической реакции.

1. Построить график функции согласно варианту средствами программы MathCad и Matlab.

Вариант	Функция	Интервал изменения переменной
1	$4\cos x^2$	1……2
2	$4e^{x^2}$	-2…….2
3	$6 - \sin^2 x$	2…..10
4	$2x^3 - 4x^2 - 1$	0…….5
5	$X + e^x$	1….4

2. Рассчитайте хронопотенциометрические зависимости катодного восстановления ионов при плотностях тока 0,05, 0,1, 0,2, 0,3 мА/см^2, если коэффициент диффузии ионов составляет $2\cdot 10^{-5}$, начальная концентрация ионов табл. 0,8, на расстоянии 5 мм от поверхности электрода концентрация соответствует объемной, шаг по координате 0,2, шаг по времени 1 с, количество узлов временной сетки 15.

Тема 9. Расчет химического реактора.

1. Рассчитайте в MathCad состав выходного потока из реактора идеального смешения (kinetic reactor), в котором происходит синтез аммиака: $N_2 + 3H_2 \leftrightarrow 2NH_3$
2. Проведите в Mathlab расчет равновесной смеси в реакции: $2SO_2 + O_2 \leftrightarrow 2SO_3$