

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Бифуркационный анализ химических систем»

Направление подготовки – 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена к.т.н., доцентом, доцентом кафедры кибернетики химико-технологических процессов А.С. Скичко.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры кибернетики химико-технологических процессов «04» июня 2024 г., протокол № 14.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 28.04.02 Нанотехнологии, магистерская программа «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них», рекомендациями методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И.Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Бифуркационный анализ химических систем» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области математики, вычислительной математики, физической химии, гетерогенного катализа и каталитических процессов, математического и компьютерного моделирования, методов нелинейной динамики, а также численных методов решения уравнений математических моделей.

Цель дисциплины – приобретение теоретических знаний и практических навыков использования современных методов бифуркационного анализа химических систем для решения широкого круга задач исследования и прогнозирования различных режимов протекания процессов химической технологии, биотехнологии и нанотехнологии, а также управления хаотическими режимами в химических системах.

Задачи дисциплины:

- обучение теоретическим основам и технологии проведения бифуркационного (параметрического) анализа;
- обучение практическим навыкам исследования режимов протекания химико-технологических, биотехнологических и нанотехнологических процессов на основе анализа их параметрических портретов и бифуркационных диаграмм;
- овладение навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем;
- ознакомление с основами управления хаотическими режимами в химических системах.

Дисциплина «Бифуркационный анализ химических систем» преподаётся в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **профессиональных компетенций и индикаторов их достижения:**

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский и инновационный				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их	ПК-1.3 Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.2 Умеет проводить измерения и контроль параметров технологических операций процессов производства наноматериалов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- теоретические основы бифуркационного анализа;
- технологию проведения однопараметрического и двухпараметрического анализа реакционных систем;
- типы хаотического поведения в химических системах;
- способы управления хаосом.

Уметь:

- прогнозировать и анализировать возможные качественные изменения в системах;
- проводить однопараметрический и двухпараметрический анализ химических систем;
- выявлять различные режимы функционирования химических систем и прогнозировать их поведение на основе анализа математических моделей;
- стабилизировать хаотический режим с помощью алгоритма пропорциональной обратной связи.

Владеть:

- методологией проведения бифуркационного анализа;
- навыками выявления возможных сценариев эволюции химических систем по их параметрическим портретам;
- методологией управления хаосом с обратной связью;
- практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем;
- навыками визуализации результатов прогнозирования.

3. ОБЪЁМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	5	180	135
Контактная работа – аудиторные занятия:	2,36	85	63,75
Лекции	0,48	17	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,94	34	25,5
Лабораторные работы (ЛР)	0,94	34	25,5
Самостоятельная работа	2,64	95	71,25
Контактная самостоятельная работа	2,64	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		94,6	70,95
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лек.	ЛЗ	ПЗ	СР
1.	Раздел 1. Бифуркации в химических системах	46	5	8	10	23
1.1	Основные понятия качественной теории дифференциальных уравнений	11	1	–	3	7
1.2	Основные понятия теории бифуркаций	11	1	–	3	7
1.3	Сложные бифуркации в двумерных нелинейных системах	24	3	8	4	9
2.	Раздел 2. Параметрический анализ химических систем	80	6	20	16	38
2.1	Технология проведения однопараметрического анализа	17	1	5	4	7
2.2	Технология проведения двухпараметрического анализа	17	1	5	4	7
2.3	Примеры параметрического анализа реакционных систем	46	4	10	8	24
3.	Раздел 3. Детерминированный хаос в химических системах	54	6	6	8	34
3.1	Хаотические режимы в химических системах	22	3	–	4	15
3.2	Теория управления хаосом	32	3	6	4	19
	ИТОГО	180	17	34	34	95

4.2. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Бифуркации в химических системах

1.1. Основные понятия качественной теории дифференциальных уравнений.

Общий вид макроскопических моделей химических процессов. Фазовые портреты систем. Основные элементы фазовых портретов двумерных систем: траектории, неподвижные точки, предельные циклы. Методы исследования типа неподвижных точек двумерных систем. Матрица Якоби, её след и собственные числа. Методика исследования двумерных систем в полярных координатах.

1.2. Основные понятия теории бифуркаций.

Понятие бифуркации. Локальные и нелокальные бифуркации. Основные виды бифуркаций, наблюдаемых в реакционных системах. Математическая модель реакции каталитического окисления СО как пример двумерной нелинейной системы с бифуркацией седло-узел. Математическая модель реакционной системы «брюсселятор» как пример двумерной нелинейной системы с бифуркацией Андронова-Хопфа. Бифуркационная память систем и типы её проявления.

1.3. Сложные бифуркации в двумерных нелинейных системах.

Математическая модель ферментативного процесса с субстратным ингибированием как пример двумерной нелинейной системы с двумя последовательными бифуркациями седло-узел. Бифуркации в нелинейных системах, заданных в полярных координатах. Бифуркация рождения двух предельных циклов. Бифуркация седло-узел со скачком в режим релаксационных автоколебаний.

Раздел 2. Параметрический анализ химических систем

2.1. Технология проведения однопараметрического анализа.

Общая методика анализа стационарных состояний и определения точек бифуркаций. Признаки бифуркаций. Методика обнаружения в системе бифуркации седло-узел. Методика

обнаружения в системе бифуркации Андронова-Хопфа. Бифуркационные диаграммы. Триггер и гистерезис в модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием.

2.2. Технология проведения двухпараметрического анализа.

Параметрические портреты. Линии бифуркаций: линия кратности и линия нейтральности. Методики их построения. Алгоритмы продолжения по параметру. Точка трёхкратного равновесия системы. Анализ взаимного расположения линий кратности и нейтральности и выявление параметрических областей различных режимов динамического поведения химических систем.

2.3. Примеры параметрического анализа реакционных систем.

Автокаталитический триггер в модели адсорбции вещества на катализаторе. Модель каталитического окисления СО. Гетерогенно-каталитическая система с буферной стадией. Термокинетические модели гетерогенных реакций. Модель с учётом процессов окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции каталитического окисления СО.

Раздел 3. Детерминированный хаос в химических системах

3.1. Хаотические режимы в химических системах.

Понятие детерминированного хаоса. Примеры хаотического поведения в химических системах. Характерные особенности поведения систем с детерминированным хаосом. Странные аттракторы. Переход к хаосу через каскад бифуркаций удвоения периода в дискретных отображениях. Кластерная модель кристаллизации малорастворимых веществ как пример системы с каскадом бифуркаций удвоения периода. Переход к хаосу в модели Рёсслера. Странный аттрактор в модели процесса получения фосфорной кислоты в реакторе с рециклом. Показатели Ляпунова и методика выявления с их помощью хаотических режимов.

3.2. Теория управления хаосом.

Понятие стабилизации хаотического поведения динамических систем. Способы управления хаосом. Управление хаосом без обратной связи. Подавление хаоса в колебательной химической реакции. Подавление хаоса в процессах кристаллизации малорастворимых веществ. Управление хаосом с обратной связью. Алгоритм пропорциональной обратной связи. Требования, предъявляемые к системе, для применения алгоритма пропорциональной обратной связи. Понятие диапазона управления. Влияние величины диапазона управления на возможность стабилизации хаоса, длительность переходного периода и качество стабилизации. Стабилизация циклов периода 1 и 2 в логистическом отображении. Использование алгоритма пропорциональной обратной связи для управления хаотическими колебаниями в процессах кристаллизации малорастворимых веществ. Управление хаосом в реакции Белоусова–Жаботинского.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	теоретические основы бифуркационного анализа	+	+	
2	технологии проведения однопараметрического и двухпараметрического анализа реакционных систем		+	
3	типы хаотического поведения в химических системах			+
4	способы управления хаосом			+
	Уметь:			
5	прогнозировать и анализировать возможные качественные изменения в системах	+	+	+
6	проводить однопараметрический и двухпараметрический анализ химических систем		+	

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
7	выявлять различные режимы функционирования химических систем и прогнозировать их поведение на основе анализа математических моделей		+	+	+
8	стабилизировать хаотический режим с помощью алгоритма пропорциональной обратной связи				+
	Владеть:				
9	методологией проведения бифуркационного анализа		+	+	
10	навыками выявления возможных сценариев эволюции химических систем по их параметрическим портретам			+	
11	методологией управления хаосом с обратной связью				+
12	практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем		+	+	+
13	навыками визуализации результатов прогнозирования		+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:					
14	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области наноинженерии и решать их	ПК-1.3 Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	+	+	+
15	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.2 Умеет проводить измерения и контроль параметров технологических операций процессов производства наноматериалов		+	+
16	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов	+	+	+
		ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

№	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1.1	Методы исследования типа неподвижных точек двумерных систем. Матрица Якоби, её след и собственные числа.	2
2	1.1	Методика исследования двумерных систем в полярных координатах.	1
3	1.2	Основные виды бифуркаций, наблюдаемых в реакционных системах.	3
4	1.3	Математическая модель ферментативного процесса с субстратным ингибированием.	1
5	1.3	Бифуркации в нелинейных системах, заданных в полярных координатах.	3
6	2.1	Технология проведения однопараметрического анализа.	4
7	2.2	Параметрические портреты и методики их построения.	2
8	2.2	Методика выявления параметрических областей различных режимов поведения химических систем.	2
9	2.3	Автокаталитический триггер в модели адсорбции вещества на катализаторе.	1
10	2.3	Реакция каталитического окисления СО.	1
11	2.3	Гетерогенно-каталитическая система с буферной стадией.	2
12	2.3	Термокинетические модели гетерогенных реакций.	2
13	2.3	Модель с учётом процессов окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции каталитического окисления СО.	2
14	3.1	Примеры хаотического поведения в химических системах. Странные аттракторы.	1
15	3.1	Переход к хаосу через каскад бифуркаций удвоения периода в дискретных отображениях.	2
16	3.1	Показатели Ляпунова и методика выявления с их помощью хаотических режимов.	1
17	3.2	Способы управления хаосом.	2
18	3.2	Стабилизация циклов периода 1 и 2 в логистическом отображении с использованием алгоритма пропорциональной обратной связи.	2
		ИТОГО	34

6.2. Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «Бифуркационный анализ химических систем», а также способствует выработке практических навыков использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем и визуализации результатов прогнозирования. Лабораторные работы охватывают все разделы дисциплины. В практикум входит 6 работ, выполнение каждой работы оценивается 3 баллами (всего – 18 баллов).

№	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1.3	Проведение вычислительных экспериментов по исследованию бифуркации рождения двух предельных циклов.	4

№	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
2	1.3	Проведение вычислительных экспериментов по исследованию бифуркации седло-узел со скачком в режим релаксационных автоколебаний.	4
3	2.1	Проведение вычислительных экспериментов по однопараметрическому исследованию качественных изменений в модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием.	5
4	2.2	Построение параметрического портрета модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием и выявление параметрических областей различных режимов протекания процесса.	5
5	2.3	Проведение вычислительных экспериментов по двухпараметрическому исследованию качественных изменений в модели адсорбции вещества на катализаторе с буферной стадией, выявление параметрических областей различных режимов протекания процесса и визуализация результатов прогнозирования поведения системы в различных параметрических областях.	10
6	3.2	Компьютерная реализация алгоритма пропорциональной обратной связи для управления хаотическими колебаниями в логистическом отображении. Проведение вычислительных экспериментов по исследованию влияния величины диапазона управления на возможность стабилизации хаоса, длительность переходного периода и качество стабилизации.	6
		ИТОГО	34

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы;
- подготовку отчётов по лабораторным работам;
- подготовку к защите отчётов (устным опросам) по лабораторным работам;
- подготовку к выполнению контрольных работ;
- подготовку к сдаче зачёта с оценкой.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

(РАЗДЕЛ ВЫПОЛНЕН В АВТОРСКОЙ РЕДАКЦИИ)

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение лабораторных работ (максимальная оценка 18 баллов, по 3 балла за каждую из 6 работ), защиту отчётов по лабораторным работам (максимальная оценка 24 балла, по 4 балла за каждый из 6 отчётов), выполнение контрольных работ (максимальная оценка 18 баллов, 10 баллов за работу № 1 и 8 баллов за работу № 2) и итогового контроля в форме зачёта с оценкой (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы

Реферативно-аналитическая работа рабочей программой дисциплины не предусмотрена.

8.2. Описание оценочных средств для текущего контроля освоения дисциплины

8.2.1. Описание заданий для лабораторных работ

Для текущего контроля предусмотрено выполнение 6 лабораторных работ, выполнение каждой работы оценивается 3 баллами (максимальная оценка 18 баллов). Темы работ и соответствие работ разделам дисциплины представлены в разделе 6.2. Ниже представлены подробное описание заданий и примеры вариантов заданий.

Работа № 1.

Задана система уравнений в полярных координатах:

$$\begin{cases} \frac{dr}{dt} = r[\alpha - k_2 - (r - k_1)^2] \\ \frac{d\varphi}{dt} = k_3 \end{cases}$$

Требуется исследовать расчётно-графическим способом поведение системы в зависимости от значений α . Построить фазовые портреты системы (не менее 6), подобрав для них значения α таким образом, чтобы показать основные этапы эволюции поведения изучаемой системы. При этом значения α рекомендуется выбирать таким образом, чтобы радиусы отображаемых предельных циклов можно было определить точно. Начальные условия для траекторий, их количество, шаг Δt и масштаб графиков подобрать таким образом, чтобы тип и основные характеристики отображаемых структур были очевидны. Для численного решения использовать явную схему Эйлера.

Примеры вариантов работы:

Вариант	k_1	k_2	k_3
1	1,3	-0,7	1,2
2	1,4	0	-0,8
3	0,9	0,3	-1,4

При выдаче задания вариант генерируется автоматически с помощью специальной программы.

Работа № 2.

Задана система уравнений в полярных координатах:

$$\begin{cases} \frac{dr}{dt} = r(k_1 - r) \\ \frac{d\varphi}{dt} = \alpha - k_2 - k_3 \sin(\varphi + k_4\pi) \end{cases}$$

Требуется исследовать расчётно-графическим способом поведение системы в зависимости от значений α (в заданном диапазоне). Построить фазовые портреты системы (не менее 8), подобрав для них значения α таким образом, чтобы показать основные этапы эволюции поведения изучаемой системы. Для выбранных значений α , при которых в системе существует предельный цикл, дополнительно к фазовому портрету построить временные зависимости $x(t)$, $y(t)$ с целью демонстрации бифуркационной памяти в системе. Начальные условия для траекторий, их количество, шаг Δt и масштаб графиков подобрать таким образом, чтобы тип и основные характеристики отображаемых структур были очевидны; при этом на графиках временных зависимостей $x(t)$, $y(t)$ должны отчётливо прослеживаться особенности колебаний. Для численного решения использовать явную схему Эйлера.

Примеры вариантов работы:

Вариант	k_1	k_2	k_3	k_4	Диапазон α
1	0,8	-0,5	1,2	1/4	$\geq k_2$
2	1,2	0,5	0,7	2/5	$\geq k_2$
3	1,6	0	1,5	-1/6	$\leq k_2$

При выдаче задания вариант генерируется автоматически с помощью специальной программы.

Работа № 3.

В реакторе идеального смешения непрерывного действия протекает ферментативный процесс по схеме:



где E – фермент (прикрепляется неподвижно на сетке), S – субстрат (подаётся протоком), ES , SES – промежуточные комплексы, P – продукт ферментативного синтеза. Математическая модель процесса имеет вид:

$$\frac{dS}{dt} = S_0 D - SD - W, \quad \frac{dP}{dt} = -PD + W, \quad W = \frac{kE_0 S}{K_S + S + K_i S^2},$$

где S_0 – концентрация субстрата в питающем потоке, E_0 – начальная концентрация фермента, D – скорость разбавления (величина, обратная времени пребывания), K_i – константа субстратного ингибирования.

Требуется провести однопараметрическое исследование качественных изменений в модели расчётно-графическим способом. Управляющий параметр для исследования (S_0 или D) выбрать по собственному усмотрению. Построить бифуркационную диаграмму зависимости стационарных состояний в системе от выбранного управляющего параметра таким образом, чтобы триггер и гистерезис, наблюдаемые в модели, были представлены объективно и отчётливо. Для численного решения системы использовать явную схему Эйлера. Диапазон варьирования значений выбранного управляющего параметра, шаг Δt и масштаб диаграммы подобрать самостоятельно исходя из соображения качественного, убедительного и полноценного представления результата исследования.

Примеры вариантов работы:

Вариант	S_0 (при выборе D в качестве варьируемого параметра)	D (при выборе S_0 в качестве варьируемого параметра)	k	E_0	K_S	K_i
1	14	0,2	6,5	1	1	0,5
2	10	0,2	5,4	0,7	0,6	0,5
3	12	0,04	0,9	1,1	0,75	0,5

Работа № 4.

Рассматривается математическая модель из задания № 3.

Требуется провести двухпараметрическое исследование качественных изменений системы в координатной плоскости параметров (D , S_0) расчётно-графическим способом. Построить параметрический портрет системы таким образом, чтобы на линии кратности была

отчётливо видна точка трёхкратного равновесия системы. Отобразить на параметрическом портрете диапазон варьирования управляющего параметра из задания № 3 (при этом масштаб графика подобрать таким образом, чтобы этот диапазон был очевидным).

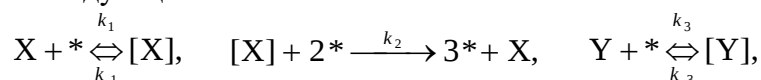
Продemonстрировать с помощью фазовых портретов различные режимы протекания процесса в разных параметрических областях (выбор начальных условий для траекторий и их количества сделать исходя из соображения отчётливой демонстрации количества и типа неподвижных точек, наблюдаемых в той или иной параметрической области). Пары значений D и S_0 для построения фазовых портретов выбрать самостоятельно с помощью параметрического портрета. Количество требуемых фазовых портретов определить самостоятельно исходя из соображения полноценного представления возможных режимов поведения системы в разных параметрических областях и наблюдаемых в системе бифуркаций. На каждом фазовом портрете в обязательном порядке отметить:

- прямую неподвижных точек, соответствующую уравнению $\bar{P} = S_0 - \bar{S}$;
- неподвижные точки.

На параметрическом портрете обозначить точки, соответствующие всем построенным фазовым портретам. Для численного решения системы использовать явную схему Эйлера. Шаг Δt и масштаб графиков подобрать самостоятельно исходя из соображения качественного, убедительного и полноценного представления результата исследования.

Работа № 5.

Рассматривается процесс, в котором вещества X и Y адсорбируются на поверхность катализатора согласно следующей кинетической схеме:



где $*$ – «свободное место» на поверхности катализатора; X , Y – вещества в газовой фазе; $[X]$, $[Y]$ – вещества X и Y , адсорбированные на поверхности катализатора.

Если температура и давление газовой фазы постоянны, то кинетическая модель процесса имеет вид:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 z - k_{-1} x - k_2 z^2 x, \quad \frac{dy}{dt} = k_3 z - k_{-3} y,$$

где x , y – поверхностные концентрации веществ X и Y , отнесённые к максимальному количеству свободных мест (т.е. нормированные от 0 до 1); z – нормированная концентрация свободных мест, причём: $z = 1 - x - y$.

Требуется провести двухпараметрическое исследование качественных изменений системы в координатной плоскости параметров (k_{-1}, k_1) расчётно-графическим способом. Построить параметрический портрет системы, отобразив на нём линии кратности и нейтральности.

Продemonстрировать с помощью фазовых портретов различные режимы протекания процесса в разных параметрических областях (выбор начальных условий для траекторий и их количества сделать исходя из соображения отчётливой демонстрации всех структур, наблюдаемых в той или иной параметрической области). Пары значений k_1 и k_{-1} для построения фазовых портретов выбрать самостоятельно с помощью параметрического портрета. Количество требуемых фазовых портретов определить самостоятельно исходя из соображения полноценного представления возможных режимов поведения системы в разных параметрических областях и наблюдаемых в системе бифуркаций. На каждом фазовом портрете в обязательном порядке отметить:

- прямую $y = 1 - x$, ограничивающую область физического смысла фазового портрета;
- прямую неподвижных точек, соответствующую уравнению $\bar{y} = (1 - \bar{x})k_3 / (k_3 + k_{-3})$;
- неподвижные точки.

На параметрическом портрете обозначить точки, соответствующие всем построенным фазовым портретам. Для численного решения системы использовать явную схему Эйлера. Шаг

Δt и масштаб графиков подобрать самостоятельно исходя из соображения качественного, убедительного и полноценного представления результата исследования.

Примеры вариантов работы:

Вариант	k_2	k_3	k_3
1	1,5	0,003	0,003
2	1,4	0,007	0,007
3	1,5	0,007	0,005

Работа № 6.

Заданы дискретное логистическое отображение $x_{j+1} = f(\alpha, x_j)$ и интервал допустимых значений управляющего параметра α .

Требуется реализовать управление хаотическим режимом с помощью алгоритма пропорциональной обратной связи при значении управляющего параметра α_0 , соответствующем правой границе заданного интервала. Начальное условие x_0 задать по собственному усмотрению с точностью до 0,1.

Провести вычислительные эксперименты по исследованию влияния величины диапазона управления на возможность стабилизации хаоса, длительность переходного периода и качество стабилизации. Результаты исследования отразить с помощью следующих точечных графиков:

- зависимость $x_j = f(j)$ без стабилизации хаотического режима;
- зависимость $x_j = f(j)$ со стабилизацией хаотического режима в неустойчивой неподвижной точке $\bar{x}_2(\alpha_0)$ для каждого выбранного значения величины диапазона управления;
- график управления системой $\alpha = f(j)$ для каждого выбранного значения величины диапазона управления.

Значения величины диапазона управления при проведении исследования выбирать самостоятельно исходя из соображения качественного, убедительного и полноценного представления результатов исследования.

Примеры вариантов работы:

Вариант	Отображение	интервал α
1	$x_{j+1} = \frac{1}{2} \alpha x_j (1 - \sqrt{x_j})$	$\alpha \in [0; 13,5]$
2	$x_{j+1} = \frac{1}{3} \alpha x_j (1 - \sqrt{x_j})$	$\alpha \in [0; 20,25]$
3	$x_{j+1} = \frac{2}{9} \alpha x_j (1 - \sqrt[3]{x_j})$	$\alpha \in [0; 42,6]$

8.2.2. Требования к отчётам по лабораторным работам

Выполнение каждой лабораторной работы завершается написанием отчёта и его защитой. Каждый отчёт должен составляться именно для своего индивидуального варианта задания, учитывать его особенности и вывод требуемых соотношений; изложение общих теоретических вопросов в отчётах не требуется. Индивидуальную теоретическую подготовку к проведению вычислительных экспериментов в отчётах требуется выполнять исключительно в рукописном варианте.

На защите отчётов по лабораторным работам студент должен уметь рассказать о результатах исследования заданных систем по графикам и уметь сопоставить эти результаты с теоретическим анализом, проведённым при подготовке отчёта, а также знать все определения и общие теоретические положения соответствующего раздела дисциплины. Контрольные вопросы студенту во время защиты отчётов преподаватель может задавать по собственному усмотрению, руководствуясь целью выявления глубины понимания студентом проработанного теоретического материала и качества выполненного компьютерного исследования.

8.2.3. Темы и примеры контрольных работ

Для текущего контроля предусмотрено **2 контрольные работы**. Максимальная оценка за контрольные работы составляет 18 баллов (10 баллов за работу № 1 и 8 баллов за работу № 2).

Контрольная работа № 1

Контрольная работа № 1 предусматривает оценку теоретических знаний по разделам № 1 и № 2. Тема работы: «**Бифуркации в химических системах и их параметрический анализ**».

Контрольная работа № 1 состоит из **2 контрольных вопросов**, каждый из которых оценивается **5 баллами**.

Примеры вариантов контрольной работы № 1

Вариант № 1

1. Методика обнаружения в системе бифуркации седло-узел.
2. Описание бифуркации рождения двух предельных циклов.

Вариант № 2

1. Общий вид макроскопических моделей химических процессов. Фазовые портреты систем.

2. Модель с учётом процессов окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции каталитического окисления СО. Бифуркации, наблюдаемые в модели.

Вариант № 3

1. Линия кратности на параметрическом портрете. Методика построения.
2. Математическая модель реакционной системы «брюсселятор» как пример двумерной нелинейной системы с бифуркацией Андронова-Хопфа.

Контрольная работа № 2

Контрольная работа № 2 предусматривает оценку знаний, умений и навыков по разделу № 3. Тема работы: «**Детерминированный хаос в химических системах**».

Контрольная работа № 2 состоит из **2 контрольных вопросов**, каждый из которых оценивается **4 баллами**.

Примеры вариантов контрольной работы № 2

Вариант № 1

1. Характерные особенности поведения систем с детерминированным хаосом.
2. Использование алгоритма пропорциональной обратной связи для управления хаотическими колебаниями в процессах кристаллизации малорастворимых веществ.

Вариант № 2

1. Способы управления хаосом.
2. Странный аттрактор в модели процесса получения фосфорной кислоты в реакторе с рециклом.

Вариант № 3

1. Показатели Ляпунова и методика выявления с их помощью хаотических режимов.
2. Подавление хаоса в колебательной химической реакции.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (зачёт с оценкой, 3 семестр)

Билет включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. Максимальная оценка за каждый вопрос – 20 баллов.

1. Общий вид макроскопических моделей химических процессов. Фазовые портреты систем. Привести примеры.

2. Основные элементы фазовых портретов двумерных систем: траектории, неподвижные точки, предельные циклы. Привести примеры.
3. Методы исследования типа неподвижных точек двумерных систем. Привести примеры.
4. Матрица Якоби, её след и собственные числа.
5. Методика исследования двумерных систем в полярных координатах. Привести примеры.
6. Понятие бифуркации. Локальные и нелокальные бифуркации. Основные виды бифуркаций, наблюдаемых в реакционных системах.
7. Математическая модель реакции каталитического окисления СО как пример двумерной нелинейной системы с бифуркацией седло-узел.
8. Математическая модель реакционной системы «брюсселятор» как пример двумерной нелинейной системы с бифуркацией Андронова-Хопфа.
9. Бифуркационная память систем и типы её проявления. Привести примеры.
10. Математическая модель ферментативного процесса с субстратным ингибированием как пример двумерной нелинейной системы с двумя последовательными бифуркациями седло-узел.
11. Бифуркация рождения двух предельных циклов.
12. Бифуркация седло-узел со скачком в режим релаксационных автоколебаний.
13. Общая методика анализа стационарных состояний химических систем и определения точек бифуркаций. Привести примеры.
14. Методика обнаружения в системе бифуркации седло-узел. Признак бифуркации.
15. Методика обнаружения в системе бифуркации Андронова-Хопфа. Признак бифуркации.
16. Бифуркационные диаграммы химических систем. Привести примеры.
17. Триггер и гистерезис в модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием.
18. Параметрические портреты химических систем. Линии бифуркаций: линия кратности и линия нейтральности. Анализ их взаимного расположения. Точка трёхкратного равновесия системы.
19. Линия кратности на параметрическом портрете. Методика построения.
20. Линия нейтральности на параметрическом портрете. Методика построения.
21. Алгоритмы продолжения по параметру при построении параметрических портретов химических систем.
22. Методика выявления параметрических областей различных режимов динамического поведения химических систем.
23. Параметрический анализ модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием.
24. Автокаталитический триггер в модели адсорбции вещества на катализаторе. Бифуркационная диаграмма модели.
25. Модель адсорбции вещества на катализаторе. Параметрический анализ модели.
26. Триггер в модели каталитического окисления СО. Бифуркационная диаграмма модели.
27. Модель каталитического окисления СО. Параметрический анализ модели.
28. Модель гетерогенно-каталитической системы с буферной стадией. Методика построения параметрического портрета.
29. Модель гетерогенно-каталитической системы с буферной стадией. Параметрический анализ модели.
30. Термокинетические модели гетерогенных реакций. Методика построения параметрического портрета.
31. Термокинетические модели гетерогенных реакций. Параметрический анализ модели.
32. Модель с учётом процессов окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции каталитического окисления СО. Методика построения параметрического портрета.

33. Модель с учётом процессов окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции каталитического окисления СО. Параметрический анализ модели.
34. Понятие детерминированного хаоса. Примеры хаотического поведения в химических системах.
35. Понятие детерминированного хаоса. Характерные особенности поведения систем с детерминированным хаосом.
36. Странные аттракторы. Привести примеры.
37. Переход к хаосу через каскад бифуркаций удвоения периода в дискретных отображениях.
38. Кластерная модель кристаллизации малорастворимых веществ как пример системы с каскадом бифуркаций удвоения периода.
39. Переход к хаосу в модели Ресслера.
40. Странный аттрактор в модели процесса получения фосфорной кислоты в реакторе с рециклом.
41. Показатели Ляпунова и методика выявления с их помощью хаотических режимов.
42. Показатели Ляпунова. Пример расчёта показателей Ляпунова для двумерной системы.
43. Понятие стабилизации хаотического поведения динамических систем. Привести примеры.
44. Способы управления хаосом. Краткое описание каждого способа.
45. Методика управления хаосом без обратной связи. Привести примеры.
46. Подавление хаоса в колебательной химической реакции.
47. Подавление хаоса в процессах кристаллизации малорастворимых веществ.
48. Методика управления хаосом с обратной связью. Привести примеры.
49. Управление хаосом с обратной связью. Алгоритм пропорциональной обратной связи. Требования, предъявляемые к системе, для применения алгоритма пропорциональной обратной связи.
50. Управление хаосом с обратной связью. Понятие диапазона управления. Влияние величины диапазона управления на возможность стабилизации хаоса, длительность переходного периода и качество стабилизации.
51. Управление хаосом с обратной связью. Стабилизация цикла периода 1 в логистическом отображении.
52. Управление хаосом с обратной связью. Стабилизация цикла периода 2 в логистическом отображении.
53. Использование алгоритма пропорциональной обратной связи для управления хаотическими колебаниями в процессах кристаллизации малорастворимых веществ.
54. Использование алгоритма пропорциональной обратной связи для управления хаотическими колебаниями в реакции Белоусова–Жаботинского.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и пример билета для зачёта с оценкой

Зачёт с оценкой по дисциплине «Бифуркационный анализ химических систем» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачёта с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к различным разделам.

Пример билета для зачёта с оценкой:

"Утверждаю"
Зав. каф. КХТП
Глебов М.Б.

Министерство науки и высшего образования РФ
Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева
Кафедра кибернетики химико-технологических процессов
28.04.02 Наноинженерия
Магистерская программа –

«__» ____ 20__ г.

«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

БИФУРКАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

БИЛЕТ № 1

1. Бифуркационные диаграммы химических систем. Привести примеры.
2. Управление хаосом с обратной связью. Стабилизация цикла периода 2 в логистическом отображении.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А) Основная литература:

1. Куркина Е.С. Курсовые задачи по синергетике. Методы поиска пространственно-временных структур : учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. 98 с.
2. Кольцова Э.М., Гордеев Л.С., Третьяков Ю.Д., Вертегел А.А. Термодинамика необратимых процессов и нелинейная динамика : учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2020. 430 с. [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://urait.ru/book/termodinamika-neobratimyh-processov-i-nelineynaya-dinamika-455051> (дата обращения: 5.04.2024).

Б) Дополнительная литература:

1. Кольцова Э.М., Гордеев Л.С. Синергетика в химии и химической технологии : учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2020. 295 с. [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://urait.ru/book/sinergetika-v-himii-i-himicheskoy-tehnologii-454395> (дата обращения: 5.04.2024).
2. Куркина Е.С. Автоколебания, структуры и волны в химических системах. Методы математического моделирования. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. 219 с.
3. Пригожин И. От существующего к возникающему: время и сложность в физических науках : пер. с англ. – М.: Наука. Физматлит, 1985. 327 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Журнал «International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering». ISSN: 0218-1274.
- Журнал «Nonlinear Dynamics and Systems Theory». ISSN: 1562-8353.
- Журнал «International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation». ISSN: 1565-1339.
- Журнал «Regular and Chaotic Dynamics». ISSN: 1560-3547.
- Журнал «Chaos (Woodbury, N.Y.)». ISSN: 1054-1500.

- Журнал «Journal of Computational and Nonlinear Dynamics». ISSN: 1555-1423.
- Журнал «Nonlinear Oscillations». ISSN: 1536-0059.
- Журнал «Nonlinearity». ISSN: 0951-7715.
- Журнал «Нелинейная динамика». ISSN: 1816-448X.
- Журнал «Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика». ISSN: 0869-6632.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- демонстрационные программы, создающие визуализацию бифуркаций Андронова–Хопфа, удвоения периода, странного аттрактора Лоренца;
- банк вариантов контрольных работ – 20;
- банк вариантов заданий для лабораторных работ – 20;
- банк билетов для зачёта с оценкой – 30.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине.

Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ составляет на 01.01.2024 года 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине проводятся в форме лекций, практических и лабораторных занятий и самостоятельной работы студента.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе

Учебная аудитория для проведения лекций и практических занятий вместимостью не менее 15 человек, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Компьютерный класс, насчитывающий не менее 10 посадочных мест, с предустановленным лицензионным программным обеспечением (Windows, Microsoft Excel) и выходом в Интернет для выполнения лабораторных работ.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащённые компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия

Учебные пособия по дисциплине.

Электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Демонстрационные программы, создающие визуализацию бифуркаций Андронова–Хопфа, удвоения периода, странного аттрактора Лоренца.

Примеры выполнения лабораторных работ.

11.3. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

На кафедре КХТП используются информационно-методические материалы: инструкции по технике безопасности в компьютерном классе; методические рекомендации к практическим и лабораторным занятиям; учебные пособия; электронные учебные пособия; кафедральные библиотеки электронных изданий; учебно-методические разработки кафедры в электронном виде; раздаточный материал к разделам дисциплины; справочные материалы.

На кафедре КХТП используются электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; электронные конспекты лекций; учебно-методические разработки в электронном виде; демонстрационные программы; специализированное программное обеспечение; справочные материалы в электронном виде.

11.4. Перечень лицензионного программного обеспечения

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	10	Бессрочно
2	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 47837477	10	Бессрочно

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Бифуркации в химических системах	Знает: теоретические основы бифуркационного анализа. Умеет: прогнозировать и анализировать возможные качественные изменения в системах; выявлять различные режимы функционирования химических систем и прогнозировать их поведение на основе анализа математических моделей. Владеет: методологией проведения бифуркационного анализа; практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем; навыками визуализации результатов прогнозирования.	Оценка за лабораторные работы № 1, 2 и защиту отчётов по ним. Оценка на зачёте.
Раздел 2. Параметрический анализ химических	Знает: теоретические основы бифуркационного анализа: технологию проведения однопараметрического и	Оценка за контрольную работу № 1.

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
систем	двухпараметрического анализа реакционных систем. Умеет: прогнозировать и анализировать возможные качественные изменения в системах; проводить однопараметрический и двухпараметрический анализ химических систем; выявлять различные режимы функционирования химических систем и прогнозировать их поведение на основе анализа математических моделей. Владеет: методологией проведения бифуркационного анализа; навыками выявления возможных сценариев эволюции химических систем по их параметрическим портретам; практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем; навыками визуализации результатов прогнозирования.	Оценка за лабораторные работы № 3–5 и защиту отчётов по ним. Оценка на зачёте.
Раздел 3. Детерминированный хаос в химических системах	Знает: типы хаотического поведения в химических системах; способы управления хаосом. Умеет: прогнозировать и анализировать возможные качественные изменения в системах; выявлять различные режимы функционирования химических систем и прогнозировать их поведение на основе анализа математических моделей; стабилизировать хаотический режим с помощью алгоритма пропорциональной обратной связи. Владеет: методологией управления хаосом с обратной связью; практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции химических систем; навыками визуализации результатов прогнозирования.	Оценка за контрольную работу № 2. Оценка за лабораторную работу № 6 и защиту отчёта по ней. Оценка на зачёте.

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного

бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К РПД

«Бифуркационный анализ химических систем»

основной образовательной программы

28.04.02 Наноинженерия

Магистерская программа

«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
2		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
3		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях»**

Направление подготовки 28.04.02 Нанотехнологии

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена зав. кафедрой химического и фармацевтического инжиниринга, д.т.н., профессором Н.В. Меньшутиной, ассистентом кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, к.т.н. Е.К. Моховой

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева «29» августа 2024 г., протокол №12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.02 Наноинженерия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химического и фармацевтического инжиниринга** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области «Математика», «Информатика», «Физическая химия», «Процессы и аппараты химической технологии», «Общая химическая технология» и аналогичных дисциплин.

Цель дисциплины «Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии» – изучение методов масштабирования и способов трансфера технологий в наноинженерии.

Задачи дисциплины:

- изучение методов моделирования аппаратов и технологических схем;
- изучение общих понятий теории размерности и подобия, способов применения методов моделирования для разработки аппаратов;
- изучение основ синтеза и анализа химико-технологических систем (ХТС).

Дисциплина **«Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии»** преподаётся во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведётся по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	Химическое, химико-технологическое производство - Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3 Способен к анализу технологических процессов с целью повышения показателей энерго- и ресурсосбережения.	ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов наноинженерии ПК-3.3 Владеет методами оценки технологических процессов с позиции эффективного использования материальных и энергетических ресурсов и обеспечения безопасности в области профессиональной деятельности.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- математические модели типовых процессов химической технологии и наноинженерии;
- современные методы компьютерного моделирования для разработки аппаратов и технологических схем;
- основные соотношения для расчета гидродинамики, тепло- и массопереноса в различных химико-технологических процессах;
- общие понятия теории размерности и подобия;
- основы синтеза и анализа химико-технологических систем (ХТС).

Уметь:

- применять современные методы компьютерного моделирования для разработки нового оборудования и технологических схем;
- рассчитывать материальные и энергетические балансы ХТС;
- рассчитывать себестоимость и применять ее как критерий оценки экономической эффективности производства;
- применять основные критерии подобия для масштабирования аппаратов.

Владеть:

- навыками использования современных методов компьютерного моделирования;
- навыками составления технологической схемы производства и расчета ее материальных и энергетических балансов, экономической эффективности.

3. ОБЪЁМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Виды учебной работы	Объём дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	0,94	34	25,5
Лекции	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,47	17	12,75
Самостоятельная работа (СР):	3,06	110	82,5
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№	Раздел дисциплины	Акад. часов			
		Всего	Лекции	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
1.	Раздел 1. Методы моделирования аппаратов и технологических систем.	48	5	5	38
1.1	Типовые модели аппаратов	22	2	2	18
1.2	Моделирование гидродинамики, тепло- и массопереноса в различных химико-технологических процессах	26	3	3	20
2.	Раздел 2. Общие понятия теории размерности и подобия, применение методов компьютерного моделирования для расчета аппаратов.	48	6	6	36
2.1	Теория размерности и подобия	23	3	3	17
2.2	Применением методов компьютерного моделирования для расчета различного химико-технологического оборудования	25	3	3	19
3.	Раздел 3. Основы синтеза и анализа химико-технологических систем (ХТС).	48	6	6	36
3.1	Основы синтеза и анализа ХТС	20	2	2	16
3.2	Расчет экономической эффективности производства	14	2	2	10
3.3	Рассмотрение масштабирования на примере разработки промышленного производства	14	2	2	10
	ИТОГО	144	17	17	110

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Методы моделирования аппаратов и технологических систем.

В разделе 1 рассматриваются типовые математические модели аппаратов и современные методы компьютерного моделирования. Будут изучены основные соотношения для расчета гидродинамики, тепло- и массопереноса в различных химико-технологических процессах.

Раздел 2. Общие понятия теории размерности и подобия, применение методов компьютерного моделирования для расчета аппаратов.

В разделе 2 изучаются основные понятия теории размерности и подобия. Будет рассмотрены примеры их использования при разработке промышленного оборудования. Будут применены методы компьютерного моделирования для расчета различного технологического оборудования.

Раздел 3. Основы синтеза и анализа химико-технологических систем (ХТС).

В разделе 3 рассматриваются основы синтеза и анализа химико-технологических систем. Будут рассмотрены принципы расчёта материальных и энергетических балансов ХТС. Будут рассмотрены способы рассчитывать себестоимость и применять ее как критерий оценки экономической эффективности производства.

Заключение. В заключении подводятся итоги курса и инструктаж слушателей по подготовке к итоговой аттестации и ее прохождению.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	
	Знать:				
1	математические модели типовых процессов химической технологии и нанотехнологии.	+			
2	современные методы компьютерного моделирования для разработки аппаратов и технологических схем.	+			
3	основные соотношения для расчета гидродинамики, тепло- и массопереноса в различных химико-технологических процессах.		+		
4	общие понятия теории размерности и подобия.		+		
5	основы синтеза и анализа химико-технологических систем (ХТС).			+	
	Уметь:				
6	применять современные методы компьютерного моделирования для разработки нового оборудования и технологических схем.	+	+		
7	рассчитывать материальные и энергетические балансы ХТС.			+	
8	рассчитывать себестоимость и применять ее как критерий оценки экономической эффективности производства.			+	
9	применять основные критерии подобия для масштабирования аппаратов.		+		
	Владеть:				
10	навыками использования современных методов компьютерного моделирования.	+	+	+	
11	навыками составления технологической схемы производства и расчета ее материальных и энергетических балансов, экономической эффективности.			+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
14	ПК-3 Способен использовать информационные технологии, методы	ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для	+	+	+

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов нанотехнологии			
15	ПК-3 Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов и изделий из них	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1 Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Применение типовых моделей аппаратов	2
2	1	Моделирование гидродинамики, тепло- и массопереноса с применением вычислительной гидродинамики	3
3	2	Теория размерности и подобия в химической технологии	3
4	2	Расчет химико-технологического оборудования с применением методов компьютерного моделирования	3
5	3	Основы синтеза ХТС	2
6	3	Основы расчета экономической эффективности производства	2
7	3	Применение изученных подходов для масштабирования процесса сверхкритической сушки	2

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине **«Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях»**, а также способствует приобретению практических навыков в области масштабирования и трансфера технологий.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 30 баллов (максимально 10 баллов за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины **«Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях»** предусмотрена самостоятельная работа студента магистратуры в объеме 110 акад. ч. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче зачет с оценкой (2 семестр) и лабораторного практикума (2 семестр) по дисциплине **«Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях»**.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1 Примерная тематика реферативно-аналитической работы

Дисциплиной «*Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях*» не предусмотрено выполнение реферативно-аналитической работы.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы 30 баллов, что составляет по 10 баллов за каждую работу. 30 баллов отводится на лабораторные работы.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

1. Приведите описание модели идеального смешения.
2. Приведите описание модели идеального вытеснения.

Вопрос 1.2.

1. Приведите уравнения для описания движения несжимаемой вязкой жидкости.
2. Приведите подробное описание метода конечных объемов.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

1. Перечислите, запишите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критерии подобия массообменных процессов.
2. Перечислите, запишите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критерии подобия теплообменных процессов.

Вопрос 2.2.

1. Предложите концепцию для расчета и увеличения эффективности процесса жидкостной экстракции в насадочной колонне с применением методов компьютерного моделирования.
2. Предложите концепцию для расчета и увеличения эффективности процесса тепловой сушки в ленточной сушилке с применением методов компьютерного моделирования.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 3.1.

1. Перечислите методы синтеза ХТС и дайте их описание.
2. Приведите пример синтеза ХТС.

Вопрос 3.2.

1. Перечислите основные вклады в себестоимость продукции химико-технологического производства.
2. Приведите пример расчета себестоимости.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.3 Структура и пример билетов для зачета с оценкой (2 семестр)

Зачет с оценкой по дисциплине *«Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии»* проводится в 2 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

8.3.1 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – зачёт с оценкой)

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40 баллов

1. Приведите описание модели идеального смешения.
2. Перечислите, запишите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критерии подобия массообменных процессов.
3. Перечислите основные типовые модели аппаратов и приведите их математическую запись.
4. Перечислите, приведите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критериев подобия массообменных процессов.
5. Перечислите, приведите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критериев подобия теплообменных процессов.
6. Перечислите, приведите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критериев подобия гидродинамических процессов.
7. Приведите математическую запись системы уравнений для предсказания движения идеальной несжимаемой жидкости.
8. Приведите математическую запись системы уравнений для предсказания движения вязкой несжимаемой жидкости.
9. Приведите расчет материального баланса на примере процесса сверхкритической сушки.
10. Приведите расчет энергетического баланса на примере процесса сверхкритической сушки.
11. Перечислите различные типы затрат, которые входят в расчет себестоимости. Приведите пример расчета себестоимости единицы производимой продукции на произвольном примере.
12. Составьте технологическую схему химико-технологического производства, которая будет включать как основное оборудование, так и вспомогательное.

Полный перечень оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4 Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (2 семестр)

Зачёт с оценкой по дисциплине *«Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии»* проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачёта с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы зачёта с оценкой оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 15 баллов, второй – 25 баллов.

Пример билета для зачёта с оценкой:

«Утверждаю»
зав. кафедрой ХФИ

____ Н.В. Меньшутина
(Подпись) (И.О. Фамилия)
«__» _____ 20__ г.

Министерство науки и высшего образования РФ
Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева

Кафедра химического и фармацевтического инжиниринга

28.04.02 Наноинженерия

Магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

Дисциплина «Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии»

Билет № 1

1. Приведите описание модели идеального смешения
2. Перечислите, запишите математическую запись, опишите физический смысл и возможности применения критерии подобия массообменных процессов

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1 Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Меньшутина Н.В., Матасов А.В. Современные информационные системы хранения, обработки и анализа данных для предприятий химической и смежных отраслей: учебное пособие. – М.: РХТУ им. Менделеева, 2011. – 308 с.
2. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. - М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.

Б. Дополнительная литература

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. В 2 т. Т. 1. – М.: Наука. – 1987.
2. Учайкин В. В. Механика. Основы механики сплошных сред. - Издательство Лань. - 2022, 860 с.
<https://e.lanbook.com/book/209819>

9.2 Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Теоретические основы химической технологии» ISSN 0040-3571.
- Журнал «Химическая промышленность сегодня» ISSN 2713-2854.
- Журнал «Chemical Engineering Journal» ISSN 1385-8947.
- Журнал «Nature Reviews Chemistry» ISSN 2397-3358.
- Журнал «ACS Sustainable Chemistry & Engineering» ISSN 2168-0485.
- Журнал «Nature Reviews Chemistry» ISSN 2397-3358.
- Журнал «Computer Aided Chemical Engineering» ISSN 1570-7946.
- Журнал «Theoretical and Computational Fluid Dynamics» ISSN 0935-4964.
- Журнал «Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering» ISSN 0045-7825.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- Ресурсы ELSEVIER: www.sciencedirect.com.
- Платформа Springer Link: <https://rd.springer.com>.

9.3 Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 30);
- банк тестовых заданий для итогового контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 30).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях»* проводятся в форме лекций, лабораторных и практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1 Оборудование, необходимое в образовательном процессе

Для изучения дисциплины «*Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии*» имеется лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для магистрантов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2 Учебно-наглядные пособия

По дисциплине «*Масштабирование и трансфер технологий в наноинженерии*» доступны учебные материалы. Реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины в виде презентаций. Доступны комплексы лабораторных работ и требования к отчетам, варианты заданий, руководство по работе с оборудованием, электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3 Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами, проекторы, экраны; аудитории со стационарными комплексами отображения информации с любого электронного носителя; WEB-камеры; цифровой фотоаппарат; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4 Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплинам вариативной части программы; методические рекомендации к практическим занятиям; каталоги типов и видов продукции из неметаллических материалов; каталоги продукции промышленных предприятий; раздаточный материал к лекционным курсам; учебные фильмы по процессам технологии и способам производства отдельных видов изделий; электронные учебные издания по дисциплинам вариативной части, научно-популярные электронные издания.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры Химического и фармацевтического инжиниринга для магистрантов, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева, имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин, преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5 Перечень лицензионного программного обеспечения

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62- 64ЭА/2013 от 02.12.2013	24 лицензии для активации на рабочих станциях	бессрочная

2.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175-262ЭА/2019 от 30.12.2019	150 лицензий для активации на рабочих станциях	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Договор № 99-155ЭА-223/2024	-	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Методы моделирования аппаратов и технологических систем	<i>Знает:</i> математические модели типовых процессов химической технологии; современные методы компьютерного моделирования для разработки аппаратов и технологических схем. <i>Умеет:</i> применять современные методы компьютерного моделирования для разработки нового оборудования и технологических схем. <i>Владеет:</i> навыками использования современных методов компьютерного моделирования.	Оценка за контрольную работу №1 Оценка за лабораторную работу №1 Оценка за зачёт с оценкой
Раздел 2. Общие понятия теории размерности и подобия, применение методов компьютерного моделирования для расчета аппаратов	<i>Знает:</i> основные соотношения для расчета гидродинамики, тепло- и массопереноса в различных химико-технологических процессах; общие понятия теории размерности и подобия. <i>Умеет:</i> применять современные методы компьютерного моделирования для разработки нового оборудования и технологических схем; применять основные критерии подобия для масштабирования аппаратов.	Оценка за контрольную работу №2 Оценка за лабораторную работу №2 Оценка за зачёт с оценкой

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
	<i>Владеет:</i> навыками использования современных методов компьютерного моделирования.	
Раздел 3. Основы синтеза и анализа химико-технологических систем	<i>Знает:</i> основы синтеза и анализа химико-технологических систем (ХТС). <i>Умеет:</i> рассчитывать материальные балансы ХТС; рассчитывать себестоимость и применять ее как критерий оценки экономической эффективности производства. <i>Владеет:</i> навыками составления технологической схемы производства и расчета ее материальных и энергетических балансов, экономической эффективности.	Оценка за контрольную работу №3 Оценка за лабораторную работу №3 Оценка за зачёт с оценкой

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);
- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;
- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Масштабирование и трансфер технологий в нанотехнологиях»
основной образовательной программы – программа магистратуры
по направлению подготовки 28.04.02 Нанотехнологии
магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»
Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Методы нелинейной динамики в нанопроцессах»

Направление подготовки – 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена к.т.н., доцентом, доцентом кафедры кибернетики химико-технологических процессов А.С. Скичко.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры кибернетики химико-технологических процессов «04» июня 2024 г., протокол № 14.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 28.04.02 Нанотехнологии, магистерская программа «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них», рекомендациями методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой кибернетики химико-технологических процессов РХТУ им. Д.И.Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «Методы нелинейной динамики в нанопроцессах» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области математики, вычислительной математики, физической химии, общей химической технологии, моделирования процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, а также численных методов решения уравнений математических моделей химико-технологических процессов.

Цель дисциплины – приобретение теоретических знаний и практических навыков использования современных методов анализа нелинейных систем для решения широкого круга задач исследования и прогнозирования тенденций протекания процессов различной природы, включая процессы химической технологии, биотехнологии и нанотехнологии.

Задачи дисциплины:

- обучение теоретическим основам и методам неравновесной термодинамики, качественной теории дифференциальных уравнений, бифуркационного анализа;
- обучение теоретическим методам и практическим навыкам исследования устойчивости протекания химико-технологических, биотехнологических и нанотехнологических процессов;
- обучение практическим навыкам анализа причин возникновения диссипативных структур;
- обучение практическим навыкам исследования возможных путей эволюции химико-технологических, биотехнологических и нанотехнологических процессов на основе их математических моделей;
- ознакомление с основами теории хаоса.

Дисциплина «Методы нелинейной динамики в нанопроцессах» преподаётся во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **профессиональных компетенций и индикаторов их достижения:**

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их	ПК-1.3 Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов нанотехнологии ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов и изделий из них	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- теоретические основы качественной теории дифференциальных уравнений, теории бифуркаций, теории хаоса, неравновесной термодинамики;
- типы неподвижных точек и методы их определения;
- основные типы бифуркаций в нелинейных системах;
- сценарии возникновения в нелинейных системах колебательных и хаотических режимов и их характерные особенности;
- методы термодинамического анализа открытых физико-химических систем.

Уметь:

- определять неподвижные точки систем и их тип;
- строить фазовые портреты двумерных систем;
- проводить термодинамический анализ открытых физико-химических систем с целью выявления дестабилизирующих процессов;
- прогнозировать эволюцию физико-химических систем на основе их математических моделей.

Владеть:

- методами исследования устойчивости линейных и нелинейных систем;
- практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции физико-химических систем;
- навыками визуализации результатов прогнозирования;
- навыками выявления возможных сценариев эволюции систем по их глобальным фазовым портретам.

3. ОБЪЁМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
Лекции	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,95	34	25,5
Самостоятельная работа	2,58	93	69,75
Контактная самостоятельная работа	2,58	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		92,6	69,75
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек-ции	ЛР	СР
1.	Раздел 1. Качественная теория дифференциальных уравнений	46	5	11	30
1.1	Неподвижные точки систем	16	2	4	10
1.2	Нелинейные двумерные системы	8	1	2	5
1.3	Автоколебательные режимы в нелинейных системах	8	1	2	5
1.4	Нелинейные системы с множественностью устойчивых стационарных состояний	14	1	3	10
2.	Раздел 2. Элементы бифуркационного анализа и теории хаоса	62	8	14	40
2.1	Бифуркации	15	2	3	10
2.2	Основные типы бифуркаций в двумерных системах	16	2	4	10
2.3	Бифуркация удвоения периода	16	2	4	10
2.4	Странные аттракторы	9	1	2	6
2.5	Элементы теории хаоса	6	1	1	4
3.	Раздел 3. Основы термодинамики неравновесных процессов	36	4	9	23
3.1	Введение в неравновесную термодинамику	7	1	1	5
3.2	Термодинамика линейных необратимых систем	9	1	3	5
3.3	Термодинамика нелинейных необратимых систем	20	2	5	13
	ИТОГО	144	17	34	93

4.2. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Качественная теория дифференциальных уравнений

1.1. Неподвижные точки систем.

Понятия фазового пространства, фазовой точки, траектории, фазового портрета системы, неподвижной точки. Типы устойчивости неподвижных точек. Неподвижные точки одномерных систем и методика их анализа. Линейные и нелинейные двумерные системы. Типы неподвижных точек линейных двумерных систем. Первый метод Ляпунова. Примеры исследования устойчивости линейных двумерных систем.

1.2. Нелинейные двумерные системы.

Особенности нелинейных систем. Понятия глобального фазового портрета нелинейной системы и локального фазового портрета в окрестности неподвижной точки. Методика линеаризации нелинейных систем. Теорема о линеаризации. Примеры исследования устойчивости нелинейных систем.

1.3. Автоколебательные режимы в нелинейных системах.

Понятие предельного цикла. Типы предельных циклов. Отличия предельных циклов от нейтрально устойчивых неподвижных точек. Методы исследования систем с предельными циклами. Теорема Пуанкаре–Бенедиксона. Примеры анализа систем с предельными циклами. Структурная устойчивость систем. Понятие флуктуации.

1.4. Нелинейные системы с множественностью устойчивых стационарных состояний.

Особенности нелинейных систем с множественностью устойчивых стационарных состояний. Понятие границы областей притяжения устойчивых стационарных состояний системы. Понятие погрешности задания начальных условий физических систем. Возможности прогнозирования эволюции систем с множественностью устойчивых стационарных состояний с

учётом внешних случайных воздействий на систему. Модель ферментативного процесса с субстратным ингибированием, как пример нелинейной системы с множественностью устойчивых стационарных состояний. Подробный анализ данной системы.

Раздел 2. Элементы бифуркационного анализа и теории хаоса

2.1. Бифуркации.

Структура математических моделей систем. Понятие управляющих параметров. Виды воздействия изменения значений управляющих параметров на систему. Понятия бифуркации и точки бифуркации. Бифуркационный анализ модели ферментативного процесса с субстратным ингибированием. Бифуркационная память систем. Прогнозирование возможных бифуркаций в системах.

2.2. Основные типы бифуркаций в двумерных системах.

Бифуркация седло-узел. Неподвижная точка седло-узел. Характерные особенности поведения систем при бифуркации седло-узел. Бифуркация седло-узел с жёсткой и мягкой потерей устойчивости. Примеры анализа систем, в которых наблюдается бифуркация седло-узел. Бифуркация Андронова-Хопфа. Характерные особенности поведения систем при бифуркации Андронова-Хопфа. Примеры анализа систем, в которых наблюдается бифуркация Андронова-Хопфа.

2.3. Бифуркация удвоения периода.

Непрерывные и дискретные системы. Логистическое уравнение Ферхюльста в непрерывной и дискретной формах. Анализ области допустимых значений параметра логистического уравнения. Неподвижные точки логистического уравнения в непрерывной форме. Неподвижные точки дискретного логистического уравнения. Методика анализа устойчивости неподвижных точек дискретных систем. Возникновение циклов в дискретных системах. Бифуркация удвоения периода. Хаос как результат бесконечного усложнения порядка системы. Теория универсальности Фейгенбаума. Связь каскада бифуркаций удвоения периода с накоплением расчётной ошибки в явных разностных схемах. Философия восприятия мира как непрерывной и как дискретной системы.

2.4. Странные аттракторы.

Понятие странного аттрактора. Понятие невозможности прогнозирования поведения систем со странными аттракторами. Система Лоренца. Неподвижные точки системы Лоренца. Эволюция в системе Лоренца. Аттрактор Лоренца. Система Рёсслера. Эволюция в системе Рёсслера. Аттрактор Рёсслера. Характерные особенности эволюции систем со странными аттракторами.

2.5. Элементы теории хаоса.

Понятие детерминированного хаоса. Характерные особенности поведения систем с детерминированным хаосом. Демонстрация хаотических режимов в нелинейных системах.

Раздел 3. Основы термодинамики неравновесных процессов

3.1. Введение в неравновесную термодинамику.

Краткий исторический очерк о развитии основ научного представления о необратимых процессах. Открытые и закрытые системы. Термодинамические потоки и движущие силы. Производство энтропии – диссипативная функция термодинамических систем. Свойства диссипативной функции.

3.2. Термодинамика линейных необратимых систем.

Соотношения взаимности Онзагера. Явление термодиффузии и диффузионный термоэффект. Устойчивость стационарных состояний термодинамических систем. Принцип минимума производства энтропии. Функция Ляпунова. Второй метод Ляпунова. Однозначность эволюции линейных необратимых систем.

3.3. Термодинамика нелинейных необратимых систем.

Неоднозначность эволюции нелинейных необратимых систем. Функция Ляпунова для систем вдали от равновесия. Принципы термодинамического анализа. Химические и биохимические осцилляторы. Задачи о тепловой и концентрационной устойчивости химико-технологических и биотехнологических процессов.

Обобщение математического и термодинамического подходов к исследованию поведения и эволюции систем.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:				
1	теоретические основы качественной теории дифференциальных уравнений, теории бифуркаций, теории хаоса, неравновесной термодинамики		+	+	+
2	типы неподвижных точек и методы их определения		+		
3	основные типы бифуркаций в нелинейных системах			+	
4	сценарии возникновения в нелинейных системах колебательных и хаотических режимов и их характерные особенности		+	+	
5	методы термодинамического анализа открытых физико-химических систем				+
	Уметь:				
6	определять неподвижные точки систем и их тип		+		
7	строить фазовые портреты двумерных систем		+	+	
8	проводить термодинамический анализ открытых физико-химических систем с целью выявления дестабилизирующих процессов				+
9	прогнозировать эволюцию физико-химических систем на основе их математических моделей		+	+	+
	Владеть:				
10	методами исследования устойчивости линейных и нелинейных систем		+	+	+
11	практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции физико-химических систем		+	+	
12	навыками визуализации результатов прогнозирования		+	+	
13	навыками выявления возможных сценариев эволюции систем по их глобальным фазовым портретам			+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
14	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области наноинженерии и решать их	ПК-1.3 Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов	+	+	
15	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов	+	+	+
		ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов наноинженерии	+	+	

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	+	+	

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Практические занятия по дисциплине не предусмотрены.

6.2. Лабораторные занятия

№	№ раздела дисциплины	Темы лабораторных занятий	Часы
1	1.1	Неподвижные точки и их устойчивость. Первый метод Ляпунова. Решение задач. Построение фазовых портретов двумерных линейных систем.	4
2	1.2	Линеаризация нелинейных систем. Решение задач.	2
3	1.3	Исследование систем с предельными циклами.	2
4	1.4	Построение фазовых портретов двумерных нелинейных систем с множественностью устойчивых стационарных состояний.	3
5	2.1	Бифуркации в нелинейных системах с управляющими параметрами. Построение фазовых портретов двумерных нелинейных систем, в которых наблюдаются бифуркации. Анализ проявления бифуркационной памяти.	3
6	2.2	Исследование систем с типовыми бифуркациями (седло-узел и Андронова-Хопфа). Решение задач. Построение и анализ фазовых портретов систем.	4
7	2.3	Исследование устойчивости неподвижных точек одномерного логистического отображения. Исследование циклов одномерного логистического отображения. Построение и анализ параметрического портрета исследуемой системы.	4
8	2.4	Исследование системы Лоренца. Построение и анализ двумерных проекций фазового портрета системы, отражающих эволюцию в системе.	2
9	2.5	Анализ характерных особенностей поведения систем с детерминированным хаосом на конкретных примерах.	1
10	3.1	Открытые термодинамические системы. Потoki и движущие силы (примеры, взаимосвязь). Диссипативная функция термодинамических систем (структура, свойства).	1
11	3.2	Термодинамика линейных необратимых систем. Соотношения взаимности Онзагера (примеры). Устойчивость стационарных состояний. Принцип минимума производства энтропии (доказательство).	2

№	№ раздела дисциплины	Темы лабораторных занятий	Часы
12	3.2	Применение принципа минимума производства энтропии в задачах химической технологии.	1
13	3.3	Термодинамика нелинейных необратимых систем. Применение методов термодинамического анализа для исследования устойчивости реакционных схем.	3
14	3.3	Исследование автокаталитических биохимических реакций. Примеры решения задач о тепловой и концентрационной устойчивости химико-технологического процесса.	2
		ИТОГО	34

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам;
- выполнение расчётно-графических работ согласно индивидуальному заданию;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы;
- подготовку к сдаче зачёта по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимую для изучения дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

(РАЗДЕЛ ВЫПОЛНЕН В АВТОРСКОЙ РЕДАКЦИИ)

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 30 баллов), расчётно-графических работ (максимальная оценка 30 баллов) и итогового контроля в форме зачёта с оценкой (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Темы и примеры контрольных работ для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольные работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет 30 баллов (17 баллов за работу № 1 и 13 баллов за работу № 2).

Контрольная работа № 1

Контрольная работа № 1 предусматривает оценку знаний, умений и навыков по разделам № 1 и № 2. Тема работы: «**Определение типа неподвижных точек; исследование систем с предельными циклами; бифуркационный анализ систем**».

Контрольная работа № 1 состоит из **6 заданий**. Задание № 1 оценивается **2 баллами**, задания №№ 2–6 – **3 баллами** каждое.

Пример варианта контрольной работы № 1 (17 баллов)

Задание 1 (2 балла). В реакторе идеального смешения протекает реакция $2X \rightarrow C$. Для уравнения, описывающего данный процесс, найти неподвижные точки и определить их тип ($b = 4$, $x_0 = 8$, $k = 1$):

$$\frac{dx}{dt} = -kx^2 + b(x_0 - x).$$

Задание 2 (3 балла). Для системы уравнений, описывающей обратимую реакцию в реакторе идеального смешения $2X \rightleftharpoons Y$, определить неподвижные точки и их тип ($k_1 = 1$, $k_{-1} = 1$, $b = 2$, $x_0 = 6$):

$$\frac{dx}{dt} = -k_1x^2 + b(x_0 - x) + k_{-1}y, \quad \frac{dy}{dt} = k_1x^2 - k_{-1}y - by.$$

Задание 3 (3 балла). Для заданной системы уравнений определить неподвижные точки и их тип:

$$\frac{dx}{dt} = 2xy - 4x \quad \frac{dy}{dt} = y - 2x.$$

Задание 4 (3 балла). Для заданной системы уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{2}{3}x + \frac{3}{4}y + \frac{3}{8}x(x^2 + y^2) \quad \frac{dy}{dt} = -\frac{3}{4}x - \frac{2}{3}y + \frac{3}{8}y(x^2 + y^2)$$

- найти неподвижную точку и определить её тип,
- используя полярные координаты, найти предельный цикл,
- построить глобальный фазовый портрет.

Задание 5 (3 балла). Провести бифуркационный анализ заданной системы:

$$\frac{dx}{dt} = 2x^2 - 3\alpha x + \alpha^2 + \frac{1}{2}$$

- найти неподвижные точки и определить их тип при разных значениях α ,
- определить бифуркационные значения α .

Задание 6 (3 балла). Провести бифуркационный анализ заданной системы:

$$x_{j+1} = \frac{3}{28}\alpha x_j(1 - x_j^7)$$

- найти неподвижные точки,
- для каждой неподвижной точки определить интервал значений параметра α , соответствующий области устойчивости точки.

Контрольная работа № 2

Контрольная работа № 2 предусматривает оценку знаний, умений и навыков по разделу № 3. Тема работы: «**Методы термодинамического анализа в задачах химической технологии и при анализе биохимических процессов**».

Контрольная работа № 2 состоит из **3 заданий**. Задание № 1 оценивается **5 баллами**, задание № 2 – **2 баллами**, задание № 3 – **6 баллами**.

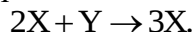
Пример варианта контрольной работы № 2 (13 баллов)

Задание 1 (5 баллов). В некоторой линейной системе действует 4 силы, причём X_1 , X_2 , X_3 – векторы, а X_4 – скаляр. Система находится в состоянии стационарности 2-го порядка. Для заданной системы:

- записать условия стационарности,

- записать соотношения Онзагера,
- вывести формулу для производства энтропии,
- сформулировать и доказать необходимое условие теоремы о минимуме производства энтропии.

Задание 2 (2 балла). В проточном реакторе с мешалкой протекает химическая реакция:



Производная термодинамической функции Ляпунова (для случая $\delta y = 0$) имеет вид:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \delta S dV = R v_q x \left(\frac{\delta x}{x} \right)^2 - R v_q x_0 \left(\frac{\delta x_0}{x_0} \right)^2 + K_T F_s \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2 + \rho C_T v_q \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2 + \\ + V \left(-2wR \left(\frac{\delta x}{x} \right)^2 - (E + 2Q)w \frac{\delta x}{x} \frac{\delta T}{T^2} - \frac{E Q w}{RT^2} \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2 \right).$$

Определить условие на время пребывания в реакторе, выполнение которого гарантирует концентрационную устойчивость режима по компоненту X. При решении принять, что тепловая устойчивость системы выполняется, и пульсации во входном потоке отсутствуют: $\delta x_0 = \delta T = 0$.

Задание 3 (6 баллов). Вывести выражение для производной термодинамической функции Ляпунова для системы из задания № 2 (при выводе учитывать только δx , δT) и на его основе провести термодинамический анализ системы (анализ стабилизирующих и дестабилизирующих эффектов).

8.2. Темы и примеры расчётно-графических работ для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 расчётно-графические работы (РГР), в которых используется сквозная нумерация заданий. Максимальная оценка за РГР составляет 30 баллов (10 баллов за РГР № 1, 11 баллов за РГР № 2 и 9 баллов за РГР № 3).

РГР № 1

РГР № 1 предусматривает оценку знаний, умений и навыков по разделу № 1. Тема РГР: «Исследование линейных и нелинейных систем: расчёт с помощью численных методов, построение фазовых портретов и сопоставление с результатами теоретического анализа».

РГР № 1 состоит из 4 заданий. Задания №№ 1–3 оцениваются 2 баллами каждое, задание № 4 – 4 баллами.

Пример варианта РГР № 1 (10 баллов)

Общие требования к заданиям № 1, 2, 3. Для заданной системы уравнений:

- найти неподвижную точку;
- построить фазовый портрет, подобрав начальные условия, шаг по времени Δt и масштаб таким образом, чтобы тип точки и её координаты на графике были очевидны (чтобы грамотно показать неустойчивую координату в задании № 2, начальные условия следует задавать как можно ближе к ней);
- для одного из выбранных начальных условий построить динамику системы (т.е., зависимости $x(t)$ и $y(t)$) таким образом, чтобы поведение системы в окрестности неподвижной точки и её координаты были очевидны.

Задание 1 (2 балла). В реакторе идеального смешения непрерывного действия протекают реакции по схеме: $X \xrightarrow{k_1} Y \xrightarrow{k_2} P$. Математическая модель реактора имеет вид:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\tau}(x_0 - x) - k_1 x, \quad \frac{dy}{dt} = -\frac{1}{\tau}y + k_1 x - k_2 y.$$

Значения параметров процесса: $x_0 = 1.7$, $k_1 = 1.2$, $k_2 = 0.5$, $\tau = 2$.

Для решения использовать явную схему Эйлера. Количество начальных условий, необходимых для построения фазового портрета: не менее 8.

Задание 2 (2 балла). Система уравнений: $\frac{dx}{dt} = -2x + 2.4$; $\frac{dy}{dt} = 2.5y - 5$.

Для решения использовать явную схему Эйлера. Количество начальных условий, необходимых для построения фазового портрета: не менее 8.

Задание 3 (2 балла). Математическая модель процесса кристаллизации в реакторе имеет вид:

$$\frac{d\mu_0}{dt} = k\mu_1 - b + q, \quad \frac{d\mu_1}{dt} = \mu_0(\eta_1 - \eta_2) + d,$$

где μ_0 – нулевой момент функции распределения кристаллов по размерам, характеризующий общее количество частиц в единице объёма реактора; μ_1 – первый момент функции распределения, характеризующий суммарный линейный размер кристаллов; k – константа скорости образования зародышей; b – скорость отбора зародышей; q – скорость пополнения крупными частицами; η_1 – скорость роста кристаллов; η_2 – скорость растворения кристаллов; d – суммарный линейный размер поступающих частиц. Значения параметров процесса:

$$k = 2.5, \quad b = 6.5, \quad q = 1.5, \quad \eta_1 = 1, \quad \eta_2 = 2, \quad d = 2.5.$$

Для решения использовать явную схему Эйлера. Количество начальных условий: не менее 2.

Задание 4 (4 балла). В реакторе идеального смешения непрерывного действия протекает ферментативный процесс по схеме:



где E – фермент (прикрепляется неподвижно на сетке), S – субстрат (подаётся протоком), ES , SES – промежуточные комплексы, P – продукт ферментативного синтеза. Первая реакция описывает преобразование субстрата в продукт через образование промежуточного фермент-субстратного комплекса; вторая реакция – пассивацию фермент-субстратного комплекса при избытке субстрата (т.е. субстратное ингибирование ферментативного процесса). Математическая модель процесса при условии постоянства суммарной концентрации всех форм фермента имеет вид:

$$\frac{dS}{dt} = S_0 D - SD - W, \quad \frac{dP}{dt} = -PD + W, \quad W = \frac{kE_0 S}{K_S + S + K_I S^2},$$

где S_0 – концентрация субстрата в питающем потоке, E_0 – начальная концентрация фермента, D – скорость разбавления (величина, обратная времени пребывания), K_I – константа субстратного ингибирования. Значения параметров процесса:

$$S_0 = 14, \quad D = 0.2, \quad k = 6.5, \quad E_0 = 1, \quad K_S = 1, \quad K_I = 0.5.$$

Требуется: найти неподвижные точки (для этого допускается использование численных методов) и построить глобальный фазовый портрет системы, подобрав начальные условия, шаг по времени Δt и масштаб таким образом, чтобы тип точек и их координаты на графике были очевидны. Для численного решения системы использовать явную схему Эйлера.

Количество начальных условий, необходимых для построения фазового портрета: не менее 12.

РГР № 2

РГР № 2 предусматривает оценку знаний, умений и навыков по разделу № 2. Тема РГР: «Исследование систем с типовыми бифуркациями (седло-узел и Андронова-Хопфа): расчёт с помощью численных методов, построение фазовых портретов и сопоставление с результатами теоретического анализа».

РГР № 2 состоит из 2 заданий (№ 5 и № 6 в общем списке заданий для РГР). Задание № 5 оценивается 8 баллами, задание № 6 – 3 баллами.

Пример варианта РГР № 2 (11 баллов)

Задание 5 (8 баллов). Провести бифуркационный анализ системы уравнений из задания № 4 (работа № 1), выбрав в качестве управляющего параметра D . С помощью численного исследования системы определить оба бифуркационных значения α_0 с точностью до 4-го знака после запятой и построить для каждой бифуркации фазовые портреты при: а) $D = \alpha_0 - \Delta\alpha$,

б) $D = \alpha_0$, в) $D = \alpha_0 + \Delta\alpha$. Итого 6 фазовых портретов. $\Delta\alpha$ выбрать самостоятельно, исходя из требования качественной демонстрации на фазовых портретах бифуркационной памяти изучаемой системы. Для численного решения системы использовать явную схему Эйлера. Количество начальных условий, необходимых для построения каждого фазового портрета: не менее 12.

Провести аналогичный бифуркационный анализ системы, выбрав в качестве управляющего параметра S_0 .

Задание 6 (3 балла). Для системы уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = 3\alpha x - 15y - 2x(x^2 + y^2), \quad \frac{dy}{dt} = 15x + 3\alpha y - 2y(x^2 + y^2)$$

при следующих значениях управляющего параметра α : а) -6 , б) -1.5 , в) 1.5 , г) 6 , найти неподвижные точки; построить фазовые портреты, подобрав начальные условия (для а – не менее 3; для б – не менее 2; для в и г – внутри и вне предельного цикла), шаг Δt и масштаб таким образом, чтобы типы точек, их координаты, а также тип предельного цикла и его радиус (в случаях в и г) были очевидны. Для решения использовать явную схему Эйлера.

РГР № 3

РГР № 3 предусматривает оценку знаний, умений и навыков по разделу № 2. Тема РГР: «Исследование систем с хаотическими режимами (система Лоренца, одномерное отображение): расчёт с помощью численных методов, построение фазовых и параметрических портретов и сопоставление с результатами теоретического анализа».

РГР № 3 состоит из 2 заданий (№ 7 и № 8 в общем списке заданий для РГР). Задание № 7 оценивается 3 баллами, задание № 8 – 6 баллами.

Пример варианта РГР № 3 (9 баллов)

Задание 7 (3 балла). Для системы уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma y - \sigma x, \quad \frac{dy}{dt} = rx - y - xz, \quad \frac{dz}{dt} = xy - bz$$

Построить проекцию фазового портрета на координатную плоскость (x, z) при следующих значениях управляющих параметров и начальных условиях: $\sigma = 10$, $b = 2.7$,

- а) $r = 0$, $x_0 = 5$, $y_0 = 5$, $z_0 = \bar{z} + dz_0$, $dz_0 = 5, 15, 30, 50$ (на одном графике);
- б) $r = 5$, $x_0 = \bar{x}$, $y_0 = \bar{y}$, $z_0 = \bar{z} + dz_0$, $dz_0 = 5, 15, 30, 50$ (на одном графике);
- в) $r = 5$, $x_0 = \bar{x}$, $y_0 = \bar{y}$, $z_0 = \bar{z} + dz_0$, $dz_0 = 9.1, 9.2$ (на одном графике);
- г) $r = 15$, $x_0 = \bar{x}$, $y_0 = \bar{y}$, $z_0 = \bar{z} + dz_0$, $dz_0 = 5, 15, 40, 70$ (на одном графике);
- д) $r = 15$, $x_0 = \bar{x}$, $y_0 = \bar{y}$, $z_0 = \bar{z} + dz_0$, $dz_0 = 11.8, 11.81, 11.82, 11.83$ (на разных графиках);
- е) $r = 25$, $x_0 = \bar{x}$, $y_0 = \bar{y}$, $z_0 = \bar{z} + dz_0$, $dz_0 = 28$.

Шаг по времени $\Delta t = 0,002$. Использовать полуявную схему Эйлера. Количество расчётных точек – не менее 8000.

Задание 8 (6 баллов). Отображение: $x_{j+1} = \frac{1}{2}\alpha x_j(1 - \sqrt{x_j})$; $\alpha \in [0, 13.5]$.

1. Исследовать расчётно-графическим способом поведение функции $x_j = f(j)$ в зависимости от значений α . Построить точечные графики зависимости $x_j = f(j)$ (не менее 14), подобрав для них значения α таким образом, чтобы показать основные этапы эволюции поведения изучаемой системы. В качестве начального условия выбрать $x_0 = 0.6$.

2. Построить параметрический портрет системы: график $\bar{x}_n = f(\alpha)$ для $\alpha \in [0, 13.5]$, рекомендуемый шаг по α – 0.05.

$\bar{x}_n$ – значения, которые может принимать зависимость $x_j = f(j)$ после установления в системе характерного поведения (т.е., после окончания периода разгона системы – приблизительно после 50–70 итераций). В случае если система имеет более одного конечного состояния при

определённом α , в качестве $\bar{x}_n$ следует использовать не менее 50 последовательных итераций (пропустив период разгона системы).

3. Определить с высокой точностью значение α , при котором происходит 2-е раздвоение (оно понадобится при оформлении отчёта).

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (зачёт с оценкой, 2 семестр)

Билет включает контрольные вопросы и задачи по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет содержит два контрольных вопроса и одну задачу. Максимальная оценка за каждый контрольный вопрос – **15 баллов**. Максимальная оценка за задачу – **10 баллов**. Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – **40 баллов**.

Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины:

1. Открытые и закрытые системы. Термодинамические потоки и движущие силы. Диссипативная функция термодинамических систем (структура, свойства).
2. Соотношения взаимности Онзагера. Понятие линейной системы. Принцип Кюри. Принцип симметрии феноменологических коэффициентов. Эффекты Соре и Дюфура.
3. Стационарные состояния. Понятие устойчивости стационарного состояния системы. Понятие функции Ляпунова. Второй метод Ляпунова исследования устойчивости систем. Принцип минимума производства энтропии для систем, близких к равновесию.
4. Доказательство принципа минимума производства энтропии.
5. Понятие систем, удалённых от равновесия. Понятие функции Ляпунова. Второй метод Ляпунова исследования устойчивости систем. Функция Ляпунова для систем, удалённых от равновесия, и её производная. Избыточное производство энтропии. Методика выявления процессов, стабилизирующих и дестабилизирующих систему.
6. Методика анализа устойчивости химических реакторов. Изменение избытка энтропии за счёт теплообмена и массообмена реактора с окружающей средой. Методика вывода избыточного производства энтропии химического реактора.
7. Термодинамический анализ устойчивости химико-технологического процесса.
8. Термодинамический анализ концентрационной устойчивости автокаталитических биохимических процессов.
9. Анализ устойчивости процессов кристаллизации малорастворимых и хорошо растворимых веществ.
10. Понятие фазовой плоскости, фазовой траектории, неподвижной точки. Устойчивые и неустойчивые точки в пространстве $n = 1$ (построить примеры).
11. Классификация неподвижных точек для линейной дифференциальной системы при $n = 2$.
12. Неподвижные точки – узел (устойчивый и неустойчивый) и седло: сравнение исследования по 1-му методу Ляпунова с решением системы.
13. Неподвижные точки – фокус (устойчивый и неустойчивый) и центр: сравнение исследования по 1-му методу Ляпунова с решением системы.
14. Теорема о качественной эквивалентности решений нелинейной системы уравнений и её линейного приближения в окрестности неподвижной точки. Методика линеаризации нелинейных систем уравнений.
15. Понятие предельного цикла. Пример на построение предельного цикла. Типы предельных циклов. Понятие структурной устойчивости колебаний в системах с предельными циклами. Привести примеры.
16. Колебания в двумерном пространстве. Структурная устойчивость колебаний. Примеры математических моделей, описывающих колебания.
17. Нелинейные системы с множественностью устойчивых стационарных состояний (на примерах математических моделей биотехнологии).

18. Понятия бифуркации, бифуркационного параметра. Бифуркация типа "седло-узел". Бифуркационная память.
19. Понятия бифуркации, бифуркационного параметра. Бифуркация Андронова–Хопфа. Необходимый признак этого типа бифуркации.
20. Порядок и хаос в одномерных отображениях. Универсальность Фейгенбаума.
21. Неподвижные точки дискретного логистического уравнения. Устойчивость неподвижных точек. Графическая иллюстрация устойчивости неподвижных точек.
22. Понятие странного аттрактора. Эволюция в системе Лоренца.

Примеры задач для итогового контроля освоения дисциплины:

1. Определить неподвижные точки и их тип для системы уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = 3x - x^2 \quad \frac{dy}{dt} = xy - 2y$$

2. Для заданного уравнения найти неподвижные точки и определить их тип:

$$\frac{dx}{dt} = x^2(x+2)(x-2)$$

3. Для заданной системы уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = 14.7x + 4.2y - 1.2x(x^2 + y^2) \quad \frac{dy}{dt} = -4.2x + 14.7y - 1.2y(x^2 + y^2)$$

1) найти неподвижную точку и определить её тип, 2) используя полярные координаты, найти предельный цикл, 3) построить глобальный фазовый портрет.

4. Провести бифуркационный анализ заданной системы:

$$x_{j+1} = 0.16\alpha x_j(1 - x_j^{25})$$

1) найти неподвижные точки, 2) для каждой неподвижной точки определить интервал значений параметра α , соответствующий области устойчивости точки.

5. Провести бифуркационный анализ заданной системы:

$$\frac{dx}{dt} = x^2 + x + \alpha x + 1$$

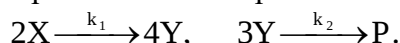
1) найти неподвижные точки и определить их тип при разных значениях α , 2) определить бифуркационные значения α .

6. Провести бифуркационный анализ заданной системы:

$$\frac{dx}{dt} = 3x^2 + 4\alpha + 6, \quad \frac{dy}{dt} = 2x + 5y$$

1) найти неподвижные точки, 2) исследовать их тип методом линеаризации нелинейной системы, 3) построить фазовые портреты системы при разных значениях параметра α , 4) указать бифуркационное значение α , тип бифуркации и признак данного типа бифуркации.

7. В периодическом реакторе с мешалкой протекают химические реакции по схеме:



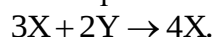
Производная термодинамической функции Ляпунова (при $\delta T = 0$) имеет вид:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \delta S dV = VR \left(4w_1 \left(\frac{\delta x}{x} \right)^2 - 8w_1 \frac{\delta x}{x} \frac{\delta y}{y} + 9w_2 \left(\frac{\delta y}{y} \right)^2 \right).$$

Определить условие в виде соотношения между скоростями стадий реакционной схемы (w_1/w_2), выполнение которого гарантирует концентрационную устойчивость режима в реакторе.

8. В некоторой линейной системе действует 4 силы, причём X_1, X_2 – векторы, а X_3, X_4 – скаляры. Система находится в состоянии стационарности 2-го порядка. Для заданной системы: 1) записать условия стационарности, 2) записать соотношения Онзагера, 3) вывести формулу для производства энтропии, 4) сформулировать и доказать необходимое условие теоремы о минимуме производства энтропии.

9. В проточном реакторе с мешалкой протекает химическая реакция:



Производная термодинамической функции Ляпунова (при $\delta y = 0$) имеет вид:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \delta S dV = R v_q x \left(\frac{\delta x}{x} \right)^2 - R v_q x_0 \left(\frac{\delta x_0}{x_0} \right)^2 + K_T F_s \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2 + \rho C_T v_q \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2 + V \left(-3wR \left(\frac{\delta x}{x} \right)^2 - (E + 3Q)w \frac{\delta x}{x} \frac{\delta T}{T^2} - \frac{EQw}{RT^2} \left(\frac{\delta T}{T} \right)^2 \right).$$

Определить условие на время пребывания в реакторе, выполнение которого гарантирует концентрационную устойчивость режима по компоненту X. При решении принять, что тепловая устойчивость системы выполняется, и пульсации во входном потоке отсутствуют: $\delta x_0 = \delta T = 0$.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и пример билета для зачёта с оценкой

Зачёт с оценкой по дисциплине «Методы нелинейной динамики в нанопроцессах» проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы и задачи по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачёта с оценкой состоит из 2 вопросов и 1 задачи, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для зачёта с оценкой:

"Утверждаю" Зав. каф. КХТП Глебов М.Б.	Министерство науки и высшего образования РФ Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева Кафедра кибернетики химико-технологических процессов 28.04.02 Наноинженерия Магистерская программа –
«__» _____ 20__ г.	«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

МЕТОДЫ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ В НАНОПРОЦЕССАХ

БИЛЕТ № 1

1. Открытые и закрытые системы. Термодинамические потоки и движущие силы. Диссипативная функция термодинамических систем (структура, свойства). (15 баллов).

2. Понятия бифуркации, бифуркационного параметра. Бифуркация типа "седло-узел". Бифуркационная память. (15 баллов).

3. Определить неподвижные точки и их тип для системы уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = 3x - x^2 \quad \frac{dy}{dt} = xy - 2y. \text{ (10 баллов).}$$

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А) Основная литература:

1. Кольцова Э.М., Гордеев Л.С. Синергетика в химии и химической технологии : учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2020. 295 с.

[Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://urait.ru/book/sinergetika-v-himii-i-himicheskoy-tehnologii-454395> (дата обращения: 5.04.2024).

2. Кольцова Э.М., Гордеев Л.С., Третьяков Ю.Д., Вертегел А.А. Термодинамика необратимых процессов и нелинейная динамика : учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2020. 430 с. [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://urait.ru/book/termodinamika-neobratimyh-processov-i-nelineynaya-dinamika-455051> (дата обращения: 5.04.2024).

Б) Дополнительная литература:

1. Куркина Е.С. Автоколебания, структуры и волны в химических системах. Методы математического моделирования. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. 219 с.

2. Куркина Е.С. Курсовые задачи по синергетике. Методы поиска пространственно-временных структур : учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. 98 с.

3. Пригожин И. От существующего к возникающему: время и сложность в физических науках : пер. с англ. – М.: Наука. Физматлит, 1985. 327 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению РГР.

Научно-технические журналы:

– Журнал «International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering». ISSN: 0218-1274.

– Журнал «Nonlinear Dynamics and Systems Theory». ISSN: 1562-8353.

– Журнал «International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation». ISSN: 1565-1339.

– Журнал «Chaos, Solitons & Fractals». ISSN: 0960-0779.

– Журнал «Regular and Chaotic Dynamics». ISSN: 1560-3547.

– Журнал «Chaos (Woodbury, N.Y.)». ISSN: 1054-1500.

– Журнал «Journal of Computational and Nonlinear Dynamics». ISSN: 1555-1423.

– Журнал «Nonlinear Oscillations». ISSN: 1536-0059.

– Журнал «Nonlinearity». ISSN: 0951-7715.

– Журнал «Нелинейная динамика». ISSN: 1816-448X.

– Журнал «Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика». ISSN: 0869-6632.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- конспекты лекций в формате *.pdf – 9;
- компьютерные презентации интерактивных лекций – 9, (общее число слайдов – 178);
- демонстрационные программы, создающие визуализацию бифуркаций Андронова–Хопфа, удвоения периода, странного аттрактора Лоренца;
- демонстрационные расчётные модули в EXCEL для ознакомления с методологией выполнения наиболее сложных заданий в РГР (задания № 5 и № 8);
- банк вариантов контрольных работ – 30;
- банк вариантов РГР – 20;
- банк билетов для зачёта с оценкой – 30.

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. При этом данный список дополняется следующим разделом:

– групповой чат в ЭИОС, индивидуальные чаты и тематическая группа в социальной сети <http://vk.com/>, групповые онлайн-конференции и индивидуальные онлайн-собеседования в Discord.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине.

Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ составляет на 01.01.2024 года 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине проводятся в форме лекций, лабораторных занятий и самостоятельной работы студента.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе

Учебная аудитория для проведения лекций и лабораторных занятий вместимостью не менее 10 человек, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Компьютерный класс, насчитывающий не менее 10 посадочных мест, с предустановленным лицензионным программным обеспечением (Windows, Microsoft Excel) и выходом в Интернет для выполнения и контроля РГР.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащённые компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия

Учебные пособия по дисциплине.

Электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Демонстрационные программы, создающие визуализацию бифуркаций Андронова–Хопфа, удвоения периода, странного аттрактора Лоренца.

Демонстрационные расчётные модули в EXCEL для ознакомления с методологией выполнения наиболее сложных заданий в РГР.

Примеры выполнения РГР.

11.3. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

На кафедре КХТП используются информационно-методические материалы: инструкции по технике безопасности в компьютерном классе; методические рекомендации к лабораторным

занятиям; учебные пособия; электронные учебные пособия; кафедральные библиотеки электронных изданий; учебно-методические разработки кафедры в электронном виде; раздаточный материал к разделам дисциплины; справочные материалы.

На кафедре КХТП используются электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; электронные конспекты лекций; учебно-методические разработки в электронном виде; демонстрационные программы; специализированное программное обеспечение; справочные материалы в электронном виде.

11.4. Перечень лицензионного программного обеспечения

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	10	Бессрочно
2	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 47837477	10	Бессрочно

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Качественная теория дифференциальных уравнений	Знает: теоретические основы качественной теории дифференциальных уравнений, теории бифуркаций, теории хаоса, неравновесной термодинамики; типы неподвижных точек и методы их определения; сценарии возникновения в нелинейных системах колебательных и хаотических режимов и их характерные особенности. Умеет: определять неподвижные точки систем и их тип; строить фазовые портреты двумерных систем; прогнозировать эволюцию физико-химических систем на основе их математических моделей. Владеет: методами исследования устойчивости линейных и нелинейных систем; практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции физико-химических систем; навыками визуализации результатов прогнозирования.	Оценка за контрольную работу № 1, задания № 1–4 (наивысший балл – 11). Оценка за РГР № 1 (наивысший балл – 10). Оценка на зачёте.
Раздел 2. Элементы бифуркационного анализа и теории хаоса	Знает: теоретические основы качественной теории дифференциальных уравнений, теории бифуркаций, теории хаоса, неравновесной термодинамики; основные типы бифуркаций в нелинейных системах; сценарии возникновения в нелинейных системах колебательных и хаотических режимов и их характерные особенности.	Оценка за контрольную работу № 1, задания № 5, 6 (наивысший балл – 6). Оценка за РГР № 2 и 3

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
	Умеет: строить фазовые портреты двумерных систем; прогнозировать эволюцию физико-химических систем на основе их математических моделей. Владеет: методами исследования устойчивости линейных и нелинейных систем; практическими навыками использования современных вычислительных технологий для прогнозирования эволюции физико-химических систем; навыками визуализации результатов прогнозирования; навыками выявления возможных сценариев эволюции систем по их глобальным фазовым портретам.	(наивысший балл – 20). Оценка на зачёте.
Раздел 3. Основы термодинамики неравновесных процессов	Знает: теоретические основы качественной теории дифференциальных уравнений, теории бифуркаций, теории хаоса, неравновесной термодинамики; методы термодинамического анализа открытых физико-химических систем. Умеет: проводить термодинамический анализ открытых физико-химических систем с целью выявления дестабилизирующих процессов; прогнозировать эволюцию физико-химических систем на основе их математических моделей. Владеет: методами исследования устойчивости линейных и нелинейных систем.	Оценка за контрольную работу № 2 (наивысший балл – 13). Оценка на зачёте.

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«Методы нелинейной динамики в нанопроцессах»

основной образовательной программы

28.04.02 Наноинженерия

Магистерская программа

«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
2		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
3		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»**

Направление подготовки 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва, 2024

Программа составлена доцентом кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, к.т.н., доцентом Е.В. Гусевой.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева «29» августа 2024 г., протокол № 12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.02 Наноинженерия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химического и фармацевтического инжиниринга** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области процессов и аппаратов химической технологии, математики, информатики, физической химии, общей химической технологии, процессов и аппаратов химической технологии.

Цель дисциплины «Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности» – изучение микрофлюидных и мембранных технологий, включающих основные типы микрофлюидных и мембранных аппаратов, основные типы процессов разделения на мембранах для жидких и газовых систем, находящих применение в фармацевтической и биофармацевтической отраслях промышленности. Дисциплина включает теоретические основы различных микрофлюидных и мембранных процессов (баромембранных, диффузионно-мембранных, термомембранных и электромембранных). Основные подходы к моделированию различных микрофлюидных, отдельных мембранных и/или интегрированных мембранных процессов, в том числе с использованием прикладных программных пакетов.

Задачи дисциплины:

- изучение основных способов получения микрофлюидных устройств (формообразование, фотолитография, микропечать ("мягкая" литография) и т.д.;
- изучение подходов к моделированию процессов в микрофлюидных устройствах (особенности процессов, протекающих в микрофлюидных устройствах, гидродинамика, массоперенос); особенности моделирования процессов роста клеток в микрофлюидных устройствах;
- изучение на примерах основных областей применения микрофлюидных процессов (рост клеток, диагностика заболеваний, орган-на-чипе, получение наночастиц, процессы инкапсуляции, химический синтез и синтез фармацевтических субстанций и т.д.);
- изучение основных принципов процессов разделения на мембранах для жидких и газовых систем;
- изучение теоретических основ различных мембранных процессов (баромембранных, диффузионно-мембранных, термомембранных и электромембранных), используемых для фармацевтики;
- изучение основных подходов к моделированию отдельных мембранных и/или интегрированных мембранных процессов, а также к проектированию мембранных схем разделения, в том числе с использованием прикладных программных пакетов.

Дисциплина **«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»** преподается в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-1 Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их.	ПК-1.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения научных исследований в области профессиональной деятельности.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных композиционных наноматериалов и наноструктурированных материалов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производств).	структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	ПК-2.2 Умеет проводить измерения и контроль параметров технологических операций процессов производства наноматериалов. ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии.	Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового,	– Химическое, химико-технологическое производство.	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»,

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- основные процессы разделения на мембранах для жидких и газовых систем;
- основные типы микрофлюидных и мембранных аппаратов;
- основные теоретические основы различных микрофлюидных и мембранных процессов (баромембранных, диффузионно-мембранных, термомембранных и электромембранных);
- принципы и подходы к моделированию этих процессов с позиций системного анализа.

Уметь:

- рассчитывать движущую силы и основные параметры процессов мембранного разделения;
- определять подходы к расчету различных микрофлюидных устройств;
- проводить расчеты по подбору схем мембранного разделения в программных пакетах.

Владеть:

- основными принципами и подходами к моделированию основных процессов мембранного разделения и различных микрофлюидных процессов;
- программными пакетами для расчетов и подбора отдельных мембранных аппаратов и/или интегрированных мембранных процессов;
- программными пакетами для проектирования и подбора схем мембранного разделения.

3. ОБЪЁМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Виды учебной работы	Объём дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,41	51	38,25
в том числе в форме практической подготовки:	0,11	4	3
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки:	0,11	4	3
Самостоятельная работа (СР):	2,59	93	69,75
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лекции	ПЗ	ЛР	Сам. работа
1	Раздел 1. Микрофлюидные процессы в промышленности	44	4	6	4	30
1.1	Введение в микрофлюидные процессы	13,25	1,25	2	–	10
1.2	Основные способы получения микрофлюидных устройств	17,5	1,5	2	4	10
1.3	Подходы к моделированию процессов в микрофлюидных устройствах	13,25	1,25	2	–	10
2	Раздел 2. Мембранные технологии в промышленности	100	13	11	13	63
2.1	Введение в мембранные процессы	19	2	2	–	15
2.2	Баромембранные процессы (микрофильтрация, ультрафильтрация, нанофильтрация, обратный осмос)	27,5	3	2	8,5	14
2.3	Диффузионно-мембранные процессы (газоразделение, первапорация, диализ, процессы на жидких мембранах)	15	2	2	–	11
2.4	Электромембранные и термомембранные процессы	22,5	3	2	4,5	13
2.5	Интегрированные мембранные процессы.	16	3	3	–	10
	ИТОГО	144	17	17	17	93

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Микрофлюидные процессы в промышленности.

Введение в микрофлюидные процессы. Описание основных типов микрофлюидных устройств по назначению.

Основные способы получения микрофлюидных устройств (формообразование, фотолитография, микропечать («мягкая» литография).

Подходы к моделированию процессов в микрофлюидных устройствах (особенности процессов, протекающих в микрофлюидных устройствах, гидродинамика, массоперенос). Особенности моделирования процессов роста клеток в микрофлюидных устройствах.

Раздел 2. Мембранные технологии в промышленности.

Введение в мембранные процессы. Классификации. Основные типы мембранных элементов. Обзорный материал о различных мембранных процессах, находящихся применение в химической, фармацевтической и биологической отраслях промышленности (баромембранные, диффузионно-мембранные, термомембранные и электромембранные процессы). Основные классификации мембран, мембранных процессов, материалов для получения мембран. Основные типы мембранных элементов, их преимущества и недостатки. Области применения.

Баромембранные процессы. Классификация баромембранных процессов, их движущая сила. Основные факторы, влияющие на баромембранные процессы. Процессы обратного осмоса (о/о), ультрафильтрации (у/ф), микрофильтрации (м/ф). Основные области применения.

Диффузионно-мембранные процессы. Классификация диффузионно-мембранных процессов (газоразделение, перапарация, диализ, процессы с использованием жидких мембран). Основные схемы работы аппаратов. Факторы, влияющие на диффузионно-мембранные процессы: материал мембраны, гидродинамика, температуры, состав разделяемой смеси, природа, форма и размер молекул веществ в разделяемой смеси. Основные области применения.

Электромембранные процессы. Основные аспекты электромембранных процессов. Ионнообменные мембраны. Конструкции электродиализных аппаратов. Основные области применения.

Термомембранные процессы. Процесс мембранной дистилляции. Влияние свойств материала мембраны на процесс разделения (смачиваемость, поверхностное натяжение, поверхностная энергия полимера). Основные области применения.

Интегрированные мембранные процессы. Мембранные реакторы и биореакторы. Классификация. Процессы, протекающие в мембранных биореакторах. Типы мембранных биореакторов. Основные области применения. Проектирование мембранных схем разделения.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2
	<i>Знать:</i>		
1	основные процессы разделения на мембранах для жидких и газовых систем.		+
2	основные типы микрофлюидных и мембранных аппаратов.	+	+
3	основные теоретические основы различных микрофлюидных и мембранных процессов (баромембранных, диффузионно-мембранных, термомембранных и электромембранных).	+	+
4	принципы и подходы к моделированию этих процессов с позиций системного анализа.	+	+
	<i>Уметь:</i>		
5	рассчитывать движущую силы и основные параметры процессов мембранного разделения.		+
6	определять подходы к расчету различных микрофлюидных устройств.	+	
7	проводить расчеты по подбору схем мембранного разделения в программных пакетах.		+
	<i>Владеть:</i>		
8	основными принципами и подходами к моделированию основных процессов мембранного разделения и различных микрофлюидных процессов.	+	+
9	программными пакетами для расчетов и подбора отдельных мембранных аппаратов и/ или интегрированных мембранных процессов.		+
10	программными пакетами для проектирования и подбора схем мембранного разделения.		+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>			
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	
11	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их.	ПК-1.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения научных исследований в области профессиональной деятельности.	+
12	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных	+

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2
	функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	нанообъектов и наноструктурированных материалов.		
13	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	ПК-2.2 Умеет проводить измерения и контроль параметров технологических операций процессов производства наноматериалов.	+	+
14	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии.	+	+
15	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов.	+	+
16	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1 Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине

№	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1.1	Рассмотрение способов получения микрофлюидных устройств	2
	1.2-1.3	Подбор микрофлюидных устройств для конкретного применения	4
2	2.1	Рассмотрение физико-химических свойств полимерных и керамических мембран	2
	2.2	Расчет основных характеристик мембранного процесса: селективности, проницаемости, коэффициента проницаемости для разных мембранных процессов	2
	2.3	Расчет гидравлического сопротивления мембраны для различных мембран	2
3	2.4-2.5	Расчет и подбор мембраны из каталога на основе исходных данных для конкретного процесса	5

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине **«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»**, а также способствует приобретению практических навыков проведения технологических процессов.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 40 баллов (максимально 10 баллов за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1	Лабораторная работа №1. Расчет основных потоков микрофлюидного элемента при подаче двух несмешивающихся фаз	4
2	2	Лабораторная работа №2. Расчет процесса микрофльтрации различных биологических суспензий	4
3	2	Лабораторная работа №3. Расчет процессов в мембранном биореакторе	4,5
4	2	Лабораторная работа №4. Расчет процесса обратного осмоса и подбор технологической схемы	4,5

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины **«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»** предусмотрена самостоятельная работа студента магистратуры в объеме 93 акад. ч. в 3 семестре. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче зачет с оценкой (3 семестр) и лабораторного практикума (3 семестр) по дисциплине **«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»**.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

(РАЗДЕЛ ВЫПОЛНЕН В АВТОРСКОЙ РЕДАКЦИИ)

8.1 Примерная тематика реферативно-аналитической работы

Дисциплиной **«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»** не предусмотрено выполнение реферативно-аналитической работы.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольные работы (по всем разделам). Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (3 семестр) составляет по 10 баллов за каждую. 40 баллов отводятся на лабораторные работы.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1

1. Описать метод получения микрофлюидных устройств – «мягкая» литография.
2. Основные области применения микрофлюидных устройств в медицине.

Вопрос 1.2

1. Гидродинамические особенности течения потоков в микрофлюидных устройствах.
2. Привести примеры использования микрофлюидных устройств в клеточных технологиях.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1

1. Классификация процессов мембранного разделения с движущими силами для каждого процесса.

2. Перечислить все мембранные элементы. Трубчатый мембранный элемент, преимущества и недостатки, материал мембраны, для каких процессов применяется.

Вопрос 2.2.

1. Основные схемы организации процесса первапорации.
2. Процесс электродеионизации. Особенности, применение.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.3 Структура и пример билетов для зачета с оценкой (3 семестр)

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой (3 семестр) – 40 баллов.

8.3.1 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – зачёт с оценкой)

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Описать режимы течения потоков и формирования капель в базовых вариантах генератора капель (соосные потоки, режим фокусировки потока, Т – инъекции).

2. Описать качественные модели формирования капель с использованием характеристических чисел. Какие силы соотносятся в числах Рейнольдса, Дина, Пекле, Онезорге, Вебера, Бонда?

3. Два основных подхода, используемых при моделировании мультифазной системы. В чем их принципиальное различие? Их преимущества и недостатки.

4. Особенности образования стабильных макроэмульсий в микрофлюидных устройствах.

5. Особенности модификации рабочих поверхностей микрочипа для капельной микрофлюидики?

6. Преимущества и недостатки применения микрочипов для формирования двойных эмульсий в отличие от применения двух отдельных чипов для однократной эмульсии.

7. Топологии генераторов капель микрофлюидных чипов. Т-инжектор.

8. Топологии генераторов капель микрофлюидных чипов. Инжектор с пневматическим клапаном.

9. Топологии генераторов капель микрофлюидных чипов. Мембранный инжектор (просачивание дисперсной фазы через множество отверстий).

10. Топологии генераторов капель микрофлюидных чипов. Соосное течение.

11. Топологии генераторов капель микрофлюидных чипов. Фокусировка потока.

12. Пассивные устройства для коалесценции капель. Коалесценция капель в каналах и реакционных камерах специальной геометрии.

13. Активные устройства для коалесценции капель.

14. Классификация процессов мембранного разделения с движущими силами для каждого процесса.

15. Основные материалы для изготовления микрофлюидных чипов. Основные методы соединения (герметизации) составных частей.

16. Изготовление микрофлюидных устройств методом «мягкой» литографии в полидиметилсилоксане.

17. Лаборатория на чипе. Описание. Основные применения.
18. Основные классификации и характеристики мембран, используемых для микрофлюидики. Примеры использования.
19. Орган-на-чипе. Особенности конструкции. Преимущества и недостатки. Примеры использования.
20. Микрофлюидные устройства с двойным слоем для клеточных культур.
21. Микрофлюидные микробиологические топливные элементы.
22. Микрофлюидные биореакторы. Преимущества и недостатки.
23. Микрофлюидные устройства для химического синтеза.
24. Привести классификацию мембран, материалы для их изготовления, преимущества, недостатки. Основные требования, предъявляемые к мембранам.
25. Основные характеристики мембранного процесса. Схемы организации потоков.
26. Методы получения мембран.
27. Перечислить все мембранные элементы. Трубчатый мембранный элемент, преимущества и недостатки, материал мембраны, для каких процессов применяется.
28. Перечислить все мембранные элементы. Половолоконный мембранный элемент, преимущества и недостатки, материал мембраны, для каких процессов применяется.
29. Перечислить все мембранные элементы. Плоскопараллельный мембранный элемент, преимущества и недостатки, материал мембраны, для каких процессов применяется.
30. Перечислить все мембранные элементы. Рулонный мембранный элемент, преимущества и недостатки, материал мембраны, для каких процессов применяется.
31. Перечислить все мембранные элементы. Патронный мембранный элемент, преимущества и недостатки, материал мембраны, для каких процессов применяется.
32. Расположить в порядке убывания движущей силы следующие баромембранные процессы: нанофильтрация, микрофильтрация, обратный осмос, ультрафильтрация. Указать значения движущих сил. Чем это можно объяснить?
33. Расположить в порядке возрастания размера пор мембраны следующие баромембранные процессы: ультрафильтрация, обратный осмос, нанофильтрация, микрофильтрация. Указать значения размера пор мембраны. Чем это можно объяснить?
34. Понятие осмотического давления, как оно определяется. Описать влияние давления на баромембранные процессы. Описать влияние гидродинамических параметров на баромембранные процессы.
35. Описать влияние температуры и концентрации на баромембранные процессы. Описать влияние электрического и магнитного полей на баромембранные процессы.
36. Описать влияние природы и состава растворенных веществ на баромембранные процессы и диффузионно-мембранные процессы. Указать специфические особенности.
37. Описать основные подходы к моделированию баромембранных процессов.
38. Описать основные подходы к моделированию перапорации.
39. Описать основные подходы к моделированию газоразделения.
40. Основные типы оборудования для водоподготовки для фармацевтики. Привести пример технологической схемы.

Полный перечень оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4 Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (3 семестр)

Зачёт с оценкой по дисциплине «*Микрофлюидные и мембранные технологии*» в

промышленности» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины.

Пример билета для зачёта с оценкой:

«Утверждаю»
зав. кафедрой

Н.В. Меньшутина
(Подпись) (И.О. Фамилия)
«__» _____ 20__ г.

Министерство науки и высшего образования РФ
Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева
Кафедра химического и фармацевтического
инжиниринга
28.04.02 Наноинженерия
Магистерская программа – «Функциональные и
композиционные наноматериалы, изделия из них»

Дисциплина «Микрофлюидные и мембранные
технологии в промышленности»

Билет № 1

1. Описать качественные модели формирования капель с использованием характеристических чисел. Какие силы соотносятся в числах Рейнольдса, Дина, Пекле, Онезорге, Вебера, Бонда?
2. Описать влияние гидродинамических параметров на баромембранные процессы.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1 Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Каграманов, Г. Г. Диффузионные мембранные процессы. Диализ [Электронный ресурс]: учебные пособия / Г. Г. Каграманов, Е. Н. Фарносова. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. – 112 с.
2. Дибров, Г. А. Первапарация [Электронный ресурс]: учебное пособие / Г. А. Дибров. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2018. – 52 с.

Б. Дополнительная литература

1. Дытнерский Ю. И. Мембранные процессы разделения жидких смесей / Дытнерский Ю.И. – М.: Химия», 1975. – 232 с.
2. Дытнерский Ю.И. Баромембранные процессы. Теория и расчет / Дытнерский Ю.И. – М.: Химия, 1986. – 272 с.
3. Свитцов А.А. Введение в мембранные технологии / Свитцов А.А. - М.: ДеЛи принт, 2007 – 280 с.
4. Мулдер М. Введение в мембранную технологию / М. Мулдер. – М.: Мир, 1999. – 513 с. [Электронный ресурс]: - Режим доступа: https://www.studmed.ru/mulder-m-vedenie-v-membrannuyu-tehnologiyu_060b31cdb4f.html (дата обращения: 25.03.2024).
5. Евстапов А.А. Основы нанотехнологий. Часть 1. Микро- и нанотехнологии для биологических и медицинских исследований. Часть 2. Капельная микрофлюидика: учебное пособие / Белоусов К.И., Евстапов А.А., Кухтевич И.В., Посмитная Я.С. – Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2015. – 56 с. [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://books.ifmo.ru/file/pdf/1839.pdf> (дата обращения 25.03.2024).

9.2 Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Мембраны и мембранные технологии», ISSN – 2218-1172;
- Журнал «Journal of Membrane Science», ISSN – 0376-7388;
- Журнал «Microfluidics and Nanofluidics», ISBN – 1613-4982;
- Журнал «Microfluidics», ISBN – ISSN 2045-2322 (online);
- Журнал «Computer Aided Chemical Engineering», ISSN – 1570-7946.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- Ресурсы ELSEVIER: www.sciencedirect.com.
- Платформа Springer Link: <https://rd.springer.com>.

9.3 Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 40);
- компьютерные презентации интерактивных лекций;
- конспекты лекций в формате *.pdf;
- банк вариантов контрольных работ – 40;
- банк вариантов лабораторных работ – 40;
- банк билетов для итогового контроля освоения дисциплины (зачёт с оценкой) – 40;
- предустановленное лицензионное программное обеспечение в компьютерном классе (Windows, Microsoft Office).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»* проводятся в форме лекций, лабораторных и практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1 Оборудование, необходимое в образовательном процессе

На кафедре химического и фармацевтического инжиниринга имеется учебная аудитория для проведения лекций вместимостью не менее 30 человек, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащённые компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Лаборатории кафедры оснащены современным оборудованием: спектрофотометр «Экрос» ПЭ-5400 (Россия), оптический микроскоп MicrosAustria (Австрия), многофункциональное устройство и др.

Материально-техническая база кафедры химического и фармацевтического инжиниринга постоянно обновляется и является достаточной для проведения необходимых лабораторных занятий.

11.2 Учебно-наглядные пособия

По дисциплине *«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»* доступны учебные материалы. Реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины в виде презентаций. Доступны комплексы лабораторных работ и требования к отчетам, варианты заданий, руководство по работе с оборудованием, электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3 Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства

На кафедре химического и фармацевтического инжиниринга, реализующей основную профессиональную образовательную программу по направлению **28.04.02 Наноинженерия**, магистерская программа *«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»* имеется в достаточном количестве персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, USB-портами, принтерами, многофункциональными устройствами и программными средствами; мультимедийное проекционное оборудование; веб-камеры; цифровой фотоаппарат; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет; беспроводная точка доступа в локальную сеть и сеть Интернет.

11.4 Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплинам вариативной части программы; методические рекомендации к практическим занятиям; каталоги типов и видов продукции из неметаллических материалов; каталоги продукции промышленных предприятий; раздаточный материал к лекционным курсам; учебные фильмы по процессам технологии и способам производства отдельных видов изделий;

электронные учебные издания по дисциплинам вариативной части, научно-популярные электронные издания.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры химического и фармацевтического инжиниринга для магистрантов, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева, имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин, преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5 Перечень лицензионного программного обеспечения

№ п/п	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	WINDOWS 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013 от 02.12.2013	24 лицензии для активации на рабочих станциях	бессрочная
2.	Microsoft Office Standard 2019 В составе: • Word • Excel • Power Point • Outlook	Контракт №175-262ЭА/2019 от 30.12.2019	150 лицензий для активации на рабочих станциях	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Договор № 99-155ЭА-223/2024	-	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Микрофлюидные процессы в	<i>Знает:</i> основные типы микрофлюидных и мембранных аппаратов; основные теоретические основы различных	Оценка за лабораторную работу №1

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
промышленности	микрофлюидных и мембранных процессов (баромембранных, диффузионно-мембранных, термомембранных и электромембранных); принципы и подходы к моделированию этих процессов с позиций системного анализа. <i>Умеет:</i> определять подходы к расчету различных микрофлюидных устройств. <i>Владеет:</i> основными принципами и подходами к моделированию основных процессов мембранного разделения и различных микрофлюидных процессов.	Оценка за контрольную работу № 1 Оценка на зачете с оценкой
Раздел 2. Мембранные технологии в промышленности	<i>Знает:</i> основные процессы разделения на мембранах для жидких и газовых систем; основные типы микрофлюидных и мембранных аппаратов; основные теоретические основы различных микрофлюидных и мембранных процессов (баромембранных, диффузионно-мембранных, термомембранных и электромембранных); принципы и подходы к моделированию этих процессов с позиций системного анализа. <i>Умеет:</i> рассчитывать движущую силы и основные параметры процессов мембранного разделения; проводить расчеты по подбору схем мембранного разделения в программных пакетах. <i>Владеет:</i> основными принципами и подходами к моделированию основных процессов мембранного разделения и различных микрофлюидных процессов; программными пакетами для расчетов и подбора отдельных мембранных аппаратов и/или интегрированных мембранных процессов; программными пакетами для проектирования и подбора схем мембранного разделения.	Оценка за лабораторные работы №2, 3, 4 Оценка за контрольную работу № 2 Оценка на зачете с оценкой

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального

государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Микрофлюидные и мембранные технологии в промышленности»
основной образовательной программы – программа магистратуры
по направлению подготовки 28.04.02 Наноинженерия, магистерская программа –
«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»**

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Моделирование микро-и наноструктур с использованием клеточных
автоматов»**

Направление подготовки 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена к.т.н., доцентом кафедры химического и фармацевтического инжиниринга Лебедевым И.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева «29» августа 2024 г., протокол №12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.03.02 Наноинженерия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химического и фармацевтического инжиниринга** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** относится к части дисциплин учебного плана, и рассчитана на изучение во 2 семестре. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку по математике, теории вероятности и программированию, и аналогичным дисциплинам других направлений подготовки бакалавров.

Цель дисциплины «Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов» – изложить основы методов моделирования микро- и наноструктур, а также их свойств с использованием клеточно-автоматного подхода в задачах разработки моделей и проведения вычислительных экспериментов, интерпретации полученных исследований и обучить студентов навыкам практической работы по разработке и реализации клеточно-автоматных моделей микро- и наноструктур.

Задачи дисциплины:

- изучение теоретических основ моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода;
- изучение классификации клеточно-автоматных моделей (клеточных автоматов), основных допущений и границ применимости моделей;
- изучение типовых клеточно-автоматных моделей;
- изучение математического представления клеточно-автоматных моделей;
- изучение реализации клеточно-автоматных моделей в виде компьютерных моделей с использованием современных языков программирования;
- изучение работы с клеточно-автоматными моделями с использованием существующего ПО;
- изучение разработки клеточно-автоматных моделей в задачах цифрового представления микро- и наноструктур и прогнозирования их свойств.

Дисциплина **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Изучение дисциплины **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Системное и критическое мышление	УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Знает методы осуществления поиска вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации. УК-1.2 Умеет определять в рамках выбранного алгоритма вопросы или задачи, подлежащие дальнейшей разработке.

Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области наноинженерии и решать их	ПК-1.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения научных исследований в области профессиональной деятельности	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
	технологического производства).			научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов нанотехнологии ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6) – Профессиональный стандарт 40.004 «Специалист в области

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
			и изделий из них	технологического обеспечения полного цикла производства объемных нанометаллов, сплавов, композитов на их основе и изделий из них», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 03.02.2014 № 72н. Обобщенная трудовая функция С. Процессы жизненного цикла продукции. С /03.7. Проектирование и разработка технологического процесса производства продукции (уровень квалификации – 7) – Профессиональный стандарт 40.020 «Специалист в области технологического обеспечения полного цикла производства объемных нанокерамик, соединений, композитов на их

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
				основе и изделий из них», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121н. Обобщенная трудовая функция С. Процессы жизненного цикла продукции. С /03.7. Обеспечение технологических операций процесса производства нанопроductии и обслуживания технологического оборудования (уровень квалификации – 7) – Профессиональный стандарт 40.104 «Специалист по измерению параметров и модификации свойств наноматериалов и наноструктур», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 14.12.2018 № 807н. Обобщенная трудовая функция.

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
				С. Совершенствование процессов измерений параметров и модификации свойств наноматериалов и наноструктур. С /0.6. Модернизация существующих и внедрение новых методов и оборудования для измерений параметров наноматериалов и наноструктур (уровень квалификации – 6) – Профессио­наль­ный стандарт 40.159 «Специалист по аддитивным технологиям», утвер­жден­ный приказом Минис­тер­ства труда и социальной защиты Российской Федерации от 05.10.2020 № 697н. Обобщенная трудовая функция С. Производство сложных изделий методами аддитивных технологий. С /01.6. Проектирование модели сложного изделия,

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
				изготавливаемого методами аддитивных технологий

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- основы моделирования с помощью клеточных автоматов;
- существующие клеточно-автоматные модели для моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов и их свойств;
- существующие программные решения для моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода.

Уметь:

- разрабатывать клеточно-автоматные 2D и 3D модели микро- и наноструктур функциональных материалов;
- разрабатывать клеточно-автоматные модели свойств микро- и наноструктур функциональных материалов;
- реализовывать клеточно-автоматные модели в виде программных модулей на языках программирования высокого уровня.

Владеть:

- навыками использования готовых пакетов программы GenStruct для генерации цифровых копий микро- и наноструктур и расчета их свойств по сгенерированной структуре.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	5	180	135
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,42	51	38,25
Лекции	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,95	34	25,5
Самостоятельная работа	3,58	129	96,75
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	3,58	129	96,75
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение.

Предмет и методы изучаемой дисциплины. Цели и задачи курса. Описание основных разделов курса. Структура курса и правила рейтинговой системы. Введение в предметную область. Основные понятия, определения, терминология.

Раздел 1. Основы моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода.

1.1. Клеточно-автоматное моделирование. История возникновения. Области применения клеточно-автоматного моделирования. Понятие клеточного автомата. Классификация клеточных автоматов. Математическое описание клеточного-автомата. Алфавит состояний. Синхронные и асинхронные клеточные автоматы. Основные типы окрестностей клеточного автомата: Мура, фон Неймана, Марголуса.

1.2. Изучение классических клеточных автоматов. Элементарные (одномерные) клеточные автоматы. Правило 30. Двухмерные и трехмерные клеточные автоматы. Игра «Жизнь» и ее модификации. Направления развития клеточно-автоматного подхода. Объединение клеточных автоматов с другими моделями.

Раздел 2. Методы моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием клеточно-автоматного подхода.

2.1 Математическое моделирование структур материалов. Многоуровневая структура изучения новых материалов. Квантовая химия и молекулярная динамика. Метод Монте-Карло. Тенденции развития наномоделирования.

2.2 Представление структур функциональных материалов в дискретной форме. Основные допущения к клеточно-автоматным моделям микро- и наноструктур. Изучение основных методов моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием двухмерных и трехмерных клеточно-автоматных моделей. Изучение алгоритмов слабоперекрывающихся сфер, перекрывающихся пор, модель случайных структур, алгоритмов «частица-кластер» (DLA, RLA, BPCA, MultiDLA, Random Walker и их модификации), алгоритмов «кластер-кластер» (DLCA, RLCA, BCCA и их модификации). Знакомство и работа с программным пакетом GenStruct. Связь реальных физических параметров с параметрами моделей.

2.3 Основы аналитических исследований структурных свойств нанопористых материалов – обработка результатов азотной порометрии методами BET и BJH, анализ полученных данных. Изучение структурных свойств цифровых микро- и наноструктур. Методы расчета удельной площади поверхности и распределения пор по размерам цифровых структур с помощью программного пакета GenStruct. Сравнение расчетных и экспериментальных данных удельной площади поверхности и распределения пор по размерам. Связь входных параметров моделей структур материалов со свойствами сгенерированных структур.

Раздел 3. Методы моделирования свойств функциональных наноматериалов и процессов с использованием клеточно-автоматного подхода.

3.1 Особенности моделирования свойств функциональных материалов. Понятие цифрового двойника. Расчет механических свойств высокопористых материалов с использованием модели на основе волнового алгоритма. Расчет механических свойств твердых тел сложного состава. Расчет электропроводящих свойств пористых тел.

3.2 Моделирование процессов с использованием клеточно-автоматных моделей. Основные допущения. Моделирование процессов диффузии, адсорбции, растворения, кристаллизации, химических реакций.

3.3 Моделирование гидродинамики в нанопористых структурах с помощью метода решеточных уравнений Больцмана (LBM). Отличие метода решеточных уравнений Больцмана от методов вычислительной гидродинамики, области применения. Основные допущения LBM. Связь параметров модели и реальных физических величин. Объединение модели на основе метода LBM с клеточно-автоматными моделями. Моделирование процессов растворения, массопереноса и сорбции в нанопористой структуре с помощью программного пакета GenStruct.

Раздел 4. Компьютерные клеточно-автоматные модели.

4.1 Реализация клеточно-автоматных моделей на языке программирования высокого уровня C#. Многоуровневая архитектура программы. Создание иерархии классов. Двухмерная и трехмерная визуализация эволюции клеточного автомата.

4.2 Ускорение работы клеточно-автоматных моделей с использованием параллельных вычислений. Реализация параллельных алгоритмов для вычисления на центральных процессорах (CPU) встроенными средствами языка C#. Параллельные вычисления на видеокартах, технология CUDA.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Лаб. работы	Сам. работа
	Введение. Предмет и методы изучаемой дисциплины. Цели и задачи курса. Описание основных разделов курса. Структура курса и правила рейтинговой системы. Введение в предметную область. Основные понятия, определения, терминология.	1	1	0	0
1.	Раздел 1. Основы моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода	32	2	0	30

1.1	1 Клеточно-автоматное моделирование. История возникновения. Области применения клеточно-автоматного моделирования. Понятие клеточного автомата. Классификация клеточных автоматов. Математическое описание клеточного-автомата. Алфавит состояний. Синхронные и асинхронные клеточные автоматы. Основные типы окрестностей клеточного автомата: Мура, фон Неймана, Марголуса.	17	2	0	15
1.2	Изучение классических клеточных автоматов. Элементарные (одномерные) клеточные автоматы. Правило 30. Двухмерные и трехмерные клеточные автоматы. Игра «Жизнь» и ее модификации. Направления развития клеточно-автоматного подхода. Объединение клеточных автоматов с другими моделями.	16	1	0	15
2.	Раздел 2. Методы моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием клеточно-автоматного подхода.	51	5	11	35
2.1	Математическое моделирование структур материалов. Многоуровневая структура изучения новых материалов. Квантовая химия и молекулярная динамика. Метод Монте-Карло. Тенденции развития наномоделирования.	12	2	0	10

2.2	Представление структур функциональных материалов в дискретной форме. Основные допущения к клеточно-автоматным моделям микро- и наноструктур. Изучение основных методов моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием двухмерных и трехмерных клеточно-автоматных моделей. Изучение алгоритмов слабоперекрывающихся сфер, перекрывающихся пор, модель случайных структур, алгоритмов «частица-кластер» (DLA, RLA, BPCA, MultiDLA, Random Walker и их модификации), алгоритмов «кластер-кластер» (DLCA, RLCA, BCCA и их модификации). Знакомство и работа с программным пакетом GenStruct. Связь реальных физических параметров с параметрами моделей.	11	1	5	10
2.3	Основы аналитических исследований структурных свойств нанопористых материалов – обработка результатов азотной порометрии методами BET и ВЈН, анализ полученных данных. Изучение структурных свойств цифровых микро- и наноструктур. Методы расчета удельной площади поверхности и распределения пор по размерам цифровых структур с помощью программного пакета GenStruct. Сравнение расчетных и экспериментальных данных удельной площади поверхности и распределения пор по размерам. Связь входных параметров моделей структур материалов со свойствами сгенерированных структур.	17	2	6	15
3.	Раздел 3. Методы моделирования свойств функциональных наноматериалов и процессов с использованием клеточно-автоматного подхода	50	5	11	34

3.1	Особенности моделирования свойств функциональных материалов. Понятие цифрового двойника. Расчет механических свойств высокопористых материалов с использованием модели на основе волнового алгоритма. Расчет механических свойств твердых тел сложного состава. Расчет электропроводящих свойств пористых тел.	18	2	0	11
3.2	Моделирование процессов с использованием клеточно-автоматных моделей. Основные допущения. Моделирование процессов диффузии, адсорбции, растворения, кристаллизации, химических реакций.	19	2	5	11
3.3	Моделирование гидродинамики в нанопористых структурах с помощью метода решеточных уравнений Больцмана (LBM). Отличие метода решеточных уравнений Больцмана от методов вычислительной гидродинамики, области применения. Основные допущения LBM. Связь параметров модели и реальных физических величин. Объединение модели на основе метода LBM с клеточно-автоматными моделями. Моделирование процессов растворения, массопереноса и сорбции в нанопористой структуре с помощью программного пакета GenStruct.	19	1	6	12
4.	Раздел 4. Компьютерные клеточно-автоматные модели	46	4	12	30
4.1	Реализация клеточно-автоматных моделей на языке программирования высокого уровня C#. Многоуровневая архитектура программы. Создание иерархии классов. Двухмерная и трехмерная визуализация эволюции клеточного автомата.	26	2	6	15

4.2	Ускорение работы клеточно-автоматных моделей с использованием параллельных вычислений. Реализация параллельных алгоритмов для вычисления на центральных процессорах (CPU) встроенными средствами языка C#. Параллельные вычисления на видеокартах, технология CUDA.	25	2	6	15
	ИТОГО	180	17	34	129
	Зачет с оценкой	-	-	-	-
	ИТОГО	180			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение

Предмет и методы изучаемой дисциплины. Цели и задачи курса. Описание основных разделов курса. Структура курса и правила рейтинговой системы. Введение в предметную область. Основные понятия, определения, терминология.

Раздел 1. Основы моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода.

1.1. Клеточно-автоматное моделирование. История возникновения. Области применения клеточно-автоматного моделирования. Понятие клеточного автомата. Классификация клеточных автоматов. Математическое описание клеточного-автомата. Алфавит состояний. Синхронные и асинхронные клеточные автоматы. Основные типы окрестностей клеточного автомата: Мура, фон Неймана, Марголуса.

Булевы, целочисленные, дробные КА. Стохастические и детерминированные КА. Двухмерные и трехмерные решетки, гексагональные решетки, треугольные решетки.

1.2. Изучение классических клеточных автоматов. Элементарные (одномерные) клеточные автоматы. Правило 30. Двухмерные и трехмерные клеточные автоматы. Игра «Жизнь» и ее модификации. Направления развития клеточно-автоматного подхода. Объединение клеточных автоматов с другими моделями.

Автоматы Стивена Вольфрама и Джона Конвея, представление одномерного автомата, связь с реальными объектами.

Раздел 2. Методы моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием клеточно-автоматного подхода.

2.1 Математическое моделирование структур материалов. Многоуровневая структура изучения новых материалов. Квантовая химия и молекулярная динамика. Метод Монте-Карло. Тенденции развития наномоделирования.

Локальная конфигурация, локальный оператор, использование нескольких локальных операторов, нано-, мезо- и макроуровни структуры, их особенности и подходы к моделированию.

2.2 Представление структур функциональных материалов в дискретной форме. Основные допущения к клеточно-автоматным моделям микро- и наноструктур. Изучение основных методов моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием двухмерных и трехмерных клеточно-автоматных моделей. Изучение алгоритмов слабоперекрывающихся сфер, перекрывающихся пор, модель случайных структур, алгоритмов «частица-кластер» (DLA, RLA, BPCA, MultiDLA, Random Walker и их модификации), алгоритмов «кластер-кластер» (DLCA, RLCA, BCCA и их модификации). Знакомство и работа с программным пакетом GenStruct. Связь реальных физических параметров с параметрами моделей.

Модели агрегации, ограниченной диффузией, агрегации, ограниченной реакцией, баллистической агрегации «частица-кластер», кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией, кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией,

баллистической агрегации «кластер-кластер». Модели волокнистых структур на основе кривых Безье. Типы граничных условий.

- 2.3 Основы аналитических исследований структурных свойств нанопористых материалов – обработка результатов азотной порометрии методами BET и BJH, анализ полученных данных. Изучение структурных свойств цифровых микро- и наноструктур. Методы расчета удельной площади поверхности и распределения пор по размерам цифровых структур с помощью программного пакета GenStruct. Сравнение расчетных и экспериментальных данных удельной площади поверхности и распределения пор по размерам. Связь входных параметров моделей структур материалов со свойствами сгенерированных структур.

Типы изотерм, определение мезопористой структуры, накопительные и дифференциальные кривые распределения пор по размерам, дискретизация кривых, определение отклонения расчетных кривых распределения пор по размерам от экспериментальных, влияние входных параметров моделей на кривые распределения пор по размерам.

Раздел 3. Методы моделирования свойств функциональных наноматериалов и процессов с использованием клеточно-автоматного подхода.

- 3.1 Особенности моделирования свойств функциональных материалов. Понятие цифрового двойника. Расчет механических свойств высокопористых материалов с использованием модели на основе волнового алгоритма. Расчет механических свойств твердых тел сложного состава. Расчет электропроводящих свойств пористых тел.

Модели расчета прочности и модуля Юнга, зависимость прочности от пористости структуры, волновой алгоритм, модель электропроводности на основе теории графов.

- 3.2 Моделирование процессов с использованием клеточно-автоматных моделей. Основные допущения. Моделирование процессов диффузии, адсорбции, растворения, кристаллизации, химических реакций.

Разработка правил перехода клеточного автомата на основе дифференциальных уравнений, правило перехода на основе закона Фика, правила перехода на основе математических моделей растворения, особенности моделирования химических реакций с использованием клеточных автоматов.

- 3.3 Моделирование гидродинамики в нанопористых структурах с помощью метода решеточных уравнений Больцмана (LBM). Отличие метода решеточных уравнений Больцмана от методов вычислительной гидродинамики, области применения. Основные допущения LBM. Связь параметров модели и реальных физических величин. Объединение модели на основе метода LBM с клеточно-автоматными моделями. Моделирование процессов растворения, массопереноса и сорбции в нанопористой структуре с помощью программного пакета GenStruct.

Уравнение Больцмана в дискретной форме, допущения для его использования в гидродинамике, соблюдение закона сохранения масс, кинематическая вязкость, выбор размера решетки и шага по времени, особенности моделирования гидродинамики на решетке малого размера.

Раздел 4. Компьютерные клеточно-автоматные модели.

4.1 Реализация клеточно-автоматных моделей на языке программирования высокого уровня C#. Многоуровневая архитектура программы. Создание иерархии классов. Двухмерная и трехмерная визуализация эволюции клеточного автомата. Парадигмы объектно-ориентированного подхода в архитектуре программ. Реализация объектно-ориентированного подхода в современных высокоуровневых языках программирования. Использование двух- и трехмерных массивов для хранения и внесение изменений в состояния клеток автомата. Разделение программы на классы. Обработка граничных условий. Графические библиотеки для визуального представления. Представление булевых, целочисленных и дробных клеточных автоматов. Создание интерактивного графического поля клеточного автомата.

4.2 Ускорение работы клеточно-автоматных моделей с использованием параллельных вычислений. Реализация параллельных алгоритмов для вычисления на центральных процессорах (CPU) встроенными средствами языка C#. Параллельные вычисления на видеокартах, технология CUDA.

Крупно- и мелкозернистый параллелизм, библиотеки для параллельных вычислений, особенности написания кода для параллельных алгоритмов, работа с памятью, обращение к памяти из разных потоков, потокобезопасные коллекции.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать: (перечень из п.2)				
1	– основы моделирования с помощью клеточных автоматов;	+	+	+	
2	– существующие клеточно-автоматные модели для моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов и их свойств;		+	+	
3	– существующие программные решения для моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода.			+	+
	Уметь: (перечень из п.2)				
4	– разрабатывать клеточно-автоматные 2D и 3D модели микро- и наноструктур функциональных материалов;		+		+
5	– разрабатывать клеточно-автоматные модели свойств микро- и наноструктур функциональных материалов;			+	+
6	– реализовывать клеточно-автоматные модели в виде программных модулей на языках программирования высокого уровня.			+	+
	Владеть: (перечень из п.2)				
7	– навыками использования готовых пакетов программы GenStruct для генерации цифровых копий микро- и наноструктур и расчета их свойств по сгенерированной структуре			+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие (какие) компетенции и индикаторы их достижения: (перечень из п.2)					
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК			
	УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Знает методы осуществления поиска вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации.		+	+

		УК-1.2 Умеет определять в рамках выбранного алгоритма вопросы или задачи, подлежащие дальнейшей разработке.	+	+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
8	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области наноинженерии и решать их	ПК-1.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения научных исследований в области профессиональной деятельности		+	+	+
9	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов		+	+	
		ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов наноинженерии			+	+
		ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	+	+		

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Практические занятия по дисциплине «**Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов**» не предусмотрены

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «**Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов**», а также дает:

- знания об основных подходах к разработке компьютерных моделей клеточных автоматов;
- умения разрабатывать собственные компьютерные модели клеточных автоматов
- умения пользоваться пакетами прикладных программ для разработки моделей клеточных автоматов;

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 40 баллов (максимально по 5 баллов за каждую работу, всего 8 работ). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	2.2	Установка и использование программного пакета GenStruct. Знакомство с интерфейсом и особенностями работы.	2
2	2.2	Проведение тестовых вычислительных экспериментов с различными клеточно-автоматными моделями	3
3	2.3	Моделирование цифровых структур с использованием моделей «частица-кластер» и «кластер-кластер». Анализ выходных параметров, сравнение с экспериментальными структурами.	6
4	3.2	Моделирование процессов диффузии, адсорбции, растворения, химических реакций. Расчет эмпирических параметров, сравнение с экспериментальными результатами.	5
5	3.3	Знакомство с модулем для расчета гидродинамики пакета GenStruct. Расчет гидродинамики на типовых геометриях.	3
6	3.3	Расчет гидродинамики в цифровых пористых структурах	3
7	4.1	Разработка пользовательского интерфейса. Ввод и вывод данных, визуализация работы клеточного автомата.	6
8	4.2	Разработка параллельных алгоритмов с использованием мелко- и крупнозернистого параллелизма	6

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче зачета с оценкой по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 20 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 40 баллов) и итогового контроля в форме зачета с оценкой (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине «**Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов**» не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольные работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (2 семестр) составляет 10 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

1. Определение клеточного автомата. Классификация клеточных автоматов.
2. Виды алфавитов клеточного автомата и их особенности

Вопрос 1.2.

1. Клеточные автоматы, используемые при моделировании микро- и наноструктур.
2. Модель агрегации, ограниченной диффузией. Основные допущения модели.

Раздел 2,3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

1. Основные пакеты программ для разработки клеточно-автоматных моделей.
2. Типовая схема архитектуры компьютерной модели клеточных автоматов.

Вопрос 2.2.

1. Сравнение цифрового представления структуры и экспериментального образца. Оценка точности работы модели.
2. Вычислительные эксперименты по получению цифрового представления, соответствующего экспериментальному образцу.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины.

Билет включает контрольные вопросы по разделам 1-2 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – зачёт с оценкой).

1. Понятие клеточного автомата (КА). Классификация клеточных автоматов.
2. Понятие алфавита клеточного автомата и его типы. Типы решеток. Правила перехода.
3. Игра «Жизнь», элементарные КА, Правило 30.
4. Булевы, целочисленные, дробные КА. Синхронные и асинхронные КА. Стохастические и детерминированные КА.
5. Особенности моделирования микро- и наноструктур. Основные типы КА, используемые для моделирования микро- и наноструктур.
6. Модели «частица-кластер». Модели «кластер-кластер». Основные допущения. Границы применимости.
7. Модели агрегации, ограниченной диффузией, агрегации, ограниченной реакцией, баллистической агрегации «частица-кластер». Входные параметры, граничные условия.
8. Модели кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией, кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией, баллистической агрегации «кластер-кластер». Входные параметры, граничные условия.
9. Модели волокнистых структур на основе кривых Безье. Входные параметры, граничные условия.
10. Прямоугольные и гексагональные типы решеток КА. Особенности и границы применимости.
11. Архитектура компьютерной модели клеточных автоматов. Объектно-ориентированный подход.
12. Хранение поля клеточного автомата. Реализация правил перехода.
13. Разделение программы на классы. Обработка граничных условий.
14. Использование двух- и трехмерных массивов для хранения и внесение изменений в состояния клеток автомата.
15. Входные параметры компьютерной модели клеточных автоматов. Подходы к установке параметров клеточного автомата и начальной конфигурации поля.
16. Пользовательский интерфейс. Разделение логики и интерфейса программы компьютерной модели клеточных автоматов.
17. Ввод входных параметров через интерфейс в логику программы, вывод данных из логики в интерфейс. Консольный интерфейс.
18. Ввод входных параметров через интерфейс в логику программы, вывод данных из логики в интерфейс. Графический интерфейс.
19. Ввод входных параметров через интерфейс в логику программы, вывод данных из логики в интерфейс. Чтение и запись в файл.

20. Визуализация работы клеточного автомата. Представление булевых, целочисленных и дробных клеточных автоматов.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой (2 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «**Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов**» проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы по 1-2 разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачёта с оценкой состоит из 2-х вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для зачёта с оценкой

«Утверждаю» зав. кафедрой ХФИ (Должность, наименование кафедры) _____ Н.В. Меньшутина (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра химического и фармацевтического инжиниринга
	28.04.02 Наноинженерия Профиль – «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»
	Дисциплина «Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»
Билет № 1	
1. Понятие клеточного автомата (КА). Классификация клеточных автоматов.	
2. Хранение поля клеточного автомата. Реализация правил перехода.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Меньшутина Н.В., Лебедев И.В., Е.В. Гусева Е.В., Колнооченко А.В. Цифровые двойники новых материалов: клеточно-автоматное моделирование структуры и свойств: [учеб. пособие] / Меньшутина Н.В., Лебедев И.В., Е.В. Гусева Е.В., Колнооченко А.В.; РХТУ им. Д.И. Менделеева. М: Изд-во РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2020. — 103 с.

2. Гартман Т.Н., Панкрушина А.В., Васильев А.С. Решение вычислительных задач на языке Python в химии и химической технологии: [учеб. пособие] / Гартман Т.Н., Панкрушина А.В., Васильев А.С.; РХТУ им. Д.И. Менделеева. М.: Изд-во РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2020. 176 с.

Б. Дополнительная литература

1. Меньшутина Н.В., Матасов А.В. Лебедев И.В. Современные информационные системы хранения данных, обработки и анализа данных для предприятий химической и смежных отраслей. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2022. 300 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы:

- Журнал «Программные продукты и системы». ISSN 0236-235X (Print). ISSN 2311-2735 (Online).
- Журнал «Вестник Московского университета. Серия 15: Вычислительная математика и кибернетика». ISSN: 0137-0782.
- Журнал «Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика». ISSN: 2305-9052.
- Журнал «Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии». ISSN: 1726-3522.
- Журнал «Journal of Numerical Mathematics». ISSN: 1570-2820.
- Журнал «Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications». ISSN: 1004-8979.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://intuit.ru>
 - <http://wolframalfa.com>
 - <http://mathnet.ru>
- <http://arxiv.org> и archive.org

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы дисциплины подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 8, (общее число слайдов – 203);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 20);
- компьютерный класс на 15 посадочных мест с предустановленным базовым программным обеспечением, в том числе с возможностью подключения к сети Интернет.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** проводятся в форме лекций и лабораторных занятий, а также самостоятельной работы обучающихся.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

На кафедре Химического и фармацевтического инжиниринга имеется учебная аудитория для проведения лекций вместимостью не менее 30 человек, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащённые компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Кафедра обладает программным обеспечением, приведенным в разделе 11.5.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

По дисциплине **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины. Приведены примеры решения работ. По дисциплине **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** доступны учебные материалы. Реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины в виде презентаций. Доступны комплексы лабораторных работ и требования к отчетам, варианты заданий, электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Организован доступ к свободно распространяемым образовательным порталам и сайтам для использования информационно-справочных ресурсов.

Магистры могут использовать данные электронные ресурсы для самостоятельной подготовки, а в последующем – при выполнении научно-исследовательской работы и написания выпускной квалификационной работы.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

На кафедре Химического и фармацевтического инжиниринга имеется в достаточном количестве персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, USB-портами, принтерами, multifunctional устройствами и программными средствами; мультимедийное проекционное оборудование; веб-камеры; цифровой фотоаппарат; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет; беспроводная точка доступа в локальную сеть и сеть Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Для реализации дисциплины **«Моделирование микро- и наноструктур с использованием клеточных автоматов»** на кафедре Химического и фармацевтического инжиниринга используются информационно-методические материалы: учебные пособия; электронные учебные пособия; электронные презентации к разделам лекционных курсов; учебно-методические разработки кафедр в электронном виде; видеоуроки к разделам дисциплин.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры Химического и фармацевтического инжиниринга для бакалавров, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева, имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин,

преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	24	Бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, MicrosoftOpenLicense Номер лицензии 47837477	24	Бессрочно
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022,

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Основы моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода.	<i>Знает:</i> – основы моделирования с помощью клеточных автоматов.	Контрольная работа 1. Зачет с оценкой.
Раздел 2. Методы моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов с использованием клеточно-автоматного подхода.	<i>Знает:</i> – существующие клеточно-автоматные модели для моделирования микро- и наноструктур функциональных материалов и их свойств. – существующие программные решения для моделирования с использованием клеточно-автоматного подхода. <i>Умеет:</i> – разрабатывать клеточно-автоматные 2D и 3D модели микро- и наноструктур	Контрольная работа 2. Оценка за лабораторный практикум (2 семестр). Зачет с оценкой.

	функциональных материалов. <i>Владеет:</i> – навыками использования готовых пакетов программы GenStruct для генерации цифровых копий микро- и наноструктур и расчета их свойств по сгенерированной структуре.	
Раздел 3. Методы моделирования свойств функциональных наноматериалов и процессов с использованием клеточно-автоматного подхода.	<i>Владеет:</i> – разрабатывать клеточно-автоматные модели свойств микро- и наноструктур функциональных материалов; – реализовывать клеточно-автоматные модели в виде программных модулей на языках программирования высокого уровня.	Оценка за лабораторный практикум (2 семестр)
Раздел 4. Компьютерные клеточно-автоматные модели.	<i>Умеет:</i> – реализовывать клеточно-автоматные модели в виде программных модулей на языках программирования высокого уровня.	Оценка за лабораторный практикум (2 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Моделирование микро-и наноструктур с использованием клеточных автоматов»
основной образовательной программы – программа магистратуры
по направлению подготовки 28.04.02 Наноинженерия
магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»
Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «___» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»

Направление подготовки 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, к.т.н., доцентом Е.В. Гусевой.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга «29» августа 2024 г., протокол № 12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.02 Нанотехнологии** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химического и фармацевтического инжиниринга** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области математики, вычислительной математики, физической химии, нанотехнологии в биотехнологии, математического и компьютерного моделирования, а также численных методов решения уравнений математических моделей.

Цель дисциплины – изучение студентами основных положений и концепций молекулярной биофизики, учитывая атомный состав живых организмов, специфические особенности биомолекулярных систем и биомолекулярной механики, ознакомление с основными принципами и механизмами ферментативного катализа; рассмотрение основных концепций и направлений развития бионанотехнологий, включая структурные и функциональные принципы бионанотехнологий; ознакомление с основными подходами к молекулярному моделированию.

Задачи дисциплины:

- изучение основных положений и концепций субклеточной и молекулярной биофизики, базовых представлений биофизики сложных систем и биоэнергетики;
- изучение специфических особенностей биомолекулярных систем и биомолекулярной механики;
- изучение строения и функций биомембран;
- изучение основных положений ферментативного (био) катализа, механизмов и кинетики ферментативных реакций;
- изучение основных концепций и направлений развития бионанотехнологии, подходов к созданию бионаномашин;
- изучение основных аналитических методов, используемых в бионанотехнологии;
- изучение структурных и функциональных принципов бионанотехнологии.

Дисциплина **«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»** преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский и инновационный				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
			ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии	

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов Наноинженерии.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6).
			ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них.	

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- основные положения и концепции молекулярной биофизики, основные концепции и направления развития бионанотехнологии;
- специфические особенности биомолекулярных систем и биомолекулярной механики;
- основные группы биологических соединений (аминокислоты, белки, нуклеиновые кислоты, углеводы, липиды);
- основные пакеты программ, используемые для молекулярного моделирования.

Уметь:

- анализировать физические взаимодействия в биосистемах, учитывая особенности ковалентных и нековалентных взаимодействий;
- анализировать структуру биомолекул на основе структурных и функциональных принципов бионанотехнологии;

Владеть:

- основными принципами и подходами для проведения расчетов по ферментативной кинетике;
- основными подходами для расчета кинетики трансмембранного транспорта.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	5	180	135
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,88	68	51
в том числе в форме практической подготовки	0,22	8	6
Лекции	0,94	34	25,5
Лабораторные работы (ЛР)	0,94	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки	0,22	8	6
Самостоятельная работа	2,12	76	57
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,12	76	57
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

		Акад. часов			
		Всего	Лекции	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
	Введение	0,5	1	—	—
1	Раздел 1. Основы и особенности молекулярной биофизики биосистем	18	6	—	13
1.1	Основные положения и концепции субклеточной и молекулярной биофизики	7	3	—	6
1.2	Основы цитологии. Специфика живой материи	11	3	—	7
2	Раздел 2. Основные группы биологических соединений	35	10	12	11
2.1	Основные группы биологических соединений	16	5	4	6
2.2	Пространственная организация биополимеров	11	2	4	3
2.3	Строение биомембран	8	3	4	2
3	Раздел 3. Биотермодинамика и ферментативная кинетика	29	8	4	17
3.1	Основы биотермодинамики	8	3	—	7
3.2	Ферментативный биокатализ	12	3	2	6
3.3	Пассивный и активный трансмембранный транспорт	9	2	2	4
4	Раздел 4. Бионанотехнологии. Основные концепции и направления развития	61	8	18	35
4.1	Структурные и функциональные принципы бионанотехнологии. Биосенсоры.	21	3	8	10
4.2	Основные аналитические методы и оборудование в бионанотехнологии	12	3	—	10
4.3	Предсказание структуры и функций макромолекул. Элементы биоинформатики.	28	2	10	15
	Заключение	0,5	1	—	—
	ИТОГО	144	34	34	76

	Экзамен	36			
	ИТОГО	180			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение

Основные понятия и определения. Особенности и различия бионанотехнологии и нанобиотехнологии. Нанобиотехнология в биотехнологии. Размеры биологических наноструктур.

Раздел 1. Основы и особенности молекулярной биофизики биосистем

1.1. Основные положения и концепции субклеточной и молекулярной биофизики. Общие положения биофизики белков и нуклеиновых кислот. Базовые представления биофизики сложных систем и биоэнергетики. Общие положения физиологической и анатомической биофизики. Основные концепции биофизики среды обитания.

1.2. Основы цитологии. Специфика живой материи. Клетка. Клеточная теория. Атомный состав живых организмов. Специфические особенности биомолекулярных систем. Специфика биомолекулярной механики. Принципы молекулярного узнавания Крейна. Энергетическое сопряжение. Физические взаимодействия в биосистемах. Особенности ковалентных связей в биомолекулах. Особенности нековалентных взаимодействий. Комбинаторный характер молекулярного разнообразия.

Раздел 2. Основные группы биологических соединений

2.1 Основные группы биологических соединений. Аминокислоты. Классификация. Специальные аминокислоты. Белки. Иерархия белковых структур. Нуклеиновые кислоты. Структура нуклеиновых кислот. Углеводы. Классификация и структуры.

2.2 Пространственная организация биополимеров. Белковая глобула. Фолдинг белка. Фазовые переходы в белках.

2.3 Строение биомембран. Самосборка липидных структур. Межмолекулярные взаимодействия в биомембранах. Фазовые переходы липидов в биомембранах.

Раздел 3. Биотермодинамика и ферментативная кинетика

3.1 Основы биотермодинамики. Внутренняя энергия и степени свободы. Закон Больцмана. Первое начало термодинамики. Теплоемкость. Уравнение Майера. Энтропия. Второе начало термодинамики. Статистическое определение энтропии.

3.2 Ферментативный биокатализ. Основные положения ферментативного (био) катализа. Специфика биокатализаторов. Классификация ферментов. Специфика ферментативных реакций. Фермент-субстратный комплекс. Механизмы ферментативного катализа. Примеры ферментативных процессов. Механизмы и кинетика ферментативных реакций. Стационарная кинетика Михаэлиса-Ментен. Регуляция скоростей ферментативных реакций.

3.3 Пассивный и активный трансмембранный транспорт. Классификация видов пассивного транспорта. Уравнение Теорелла. Уравнение Нернста-Планка. Закон Фика. Пассивная (простая) диффузия через мембрану. Проницаемость фосфолипидной мембраны для различных молекул. Сравнение. Диффузия полярных молекул воды через мембрану. Транспорт через мембрану с помощью белков-транспортёров. Облегченная диффузия. Отличия облегченной диффузии от пассивной. Трансмембранный транспорт глюкозы. Поры в липидном бислое. Активный транспорт. Энергетические потенциалы биомембран. Мембранный потенциал. Потенциалы покоя. АТФ насосы. Уравнение Гольдмана. Уравнение Томаса

Раздел 4. Бионанотехнологии. Основные концепции и направления развития

4.1 Эволюционный и инженерный подход к созданию бионаномашин. Структурные принципы бионанотехнологии. Структура и стабильность биомолекул. Самоассемблирование и самоорганизация. Функциональные принципы бионанотехнологии. Информационно-управляемое ассемблирование бионаномашин.

Примеры бионаномашин. Рибосома как информационно-управляемый наноассемблер. Особенности и принципы химических нанотрансформаций в биосистемах. Биосенсоры.

4.2 Основные аналитические методы и оборудование в бионанотехнологии.

4.3 Моделирование макромолекул. Предсказание структуры и функций макромолекул. Элементы биоинформатики.

Заключение

Обобщение пройденного материала; рассматривается как полученные знания могут быть применены при проведении научных исследований в области использования молекулярной биофизики и бионанотехнологий. Подведение итогов курса.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	основные положения и концепции молекулярной биофизики, основные концепции и направления развития бионанотехнологии	+			+
2	специфические особенности биомолекулярных систем и биомолекулярной механики	+			
3	основные группы биологических соединений (аминокислоты, белки, нуклеиновые кислоты, углеводы, липиды)		+	+	+
4	основные пакеты программ, используемые для молекулярного моделирования				+
	Уметь:				
5	анализировать физические взаимодействия в биосистемах, учитывая особенности ковалентных и нековалентных взаимодействий	+	+	+	+
6	анализировать структуру биомолекул на основе структурных и функциональных принципов бионанотехнологии	+	+		+
	Владеть:				
7	основными принципами и подходами для проведения расчетов по ферментативной кинетике			+	
8	основными подходами для расчета кинетики трансмембранного транспорта	+	+	+	+
	В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:				
9	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов	+	+	+
10	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические	ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов	+	+	+

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии				
11	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.2 Умеет использовать информационные технологии для исследования и прогнозирования структуры и свойств в области материалов нанотехнологии			+	+
12	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов и изделий из них			+	

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Практические занятия по дисциплине «Молекулярная биофизика и бионанотехнологии» не предусмотрены.

6.2. Лабораторные занятия

Предусмотрены лабораторные занятия обучающегося в магистратуре в объеме 34 акад. ч.

№	№ раздела дисциплины	Темы лабораторных занятий	Часы
---	----------------------	---------------------------	------

№	№ раздела дисциплины	Темы лабораторных занятий	Часы
1	2, 4	Работа с базами данных по биологическим соединениям https://www.ncbi.nlm.nih.gov/ . Сбор информации по гену, кодирующему конкретный белок	8
2	2, 4	Работа с базой UNIPROT https://www.uniprot.org/	8
3	4	Работа с программами по выравниванию аминокислотных последовательностей: BLAST https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi ; Clustal Omega https://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/clustalo/	8
4	3	Расчет кинетики ферментативного катализа для реакций с разными ферментами. Расчет концентраций основных ионов при трансмембранном переносе.	4
5	2, 4	Работа базой данных RCSB Protein Data Bank (открытый доступ в интернете). Разбор конкретных примеров по структуре белковых соединений https://www.rcsb.org/	6
		ИТОГО	34

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины «Молекулярная биофизика и бионанотехнологии» предусмотрена самостоятельная работа студента магистратуры в объеме 76 акад. ч в семестре. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче экзамена по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

(РАЗДЕЛ ВЫПОЛНЕН В АВТОРСКОЙ РЕДАКЦИИ)

Для текущего контроля освоения дисциплины предусмотрены следующие оценочные средства: реферат (максимальная оценка – 18 баллов), 3 контрольные работы (максимальная оценка за каждую работу – 4 балла, всего за 3 работы – 12 баллов), задания для лабораторных работ (максимальная оценка за каждое задание – 6 баллов, всего за 5 заданий – 30 баллов). Итоговой формой контроля освоения дисциплины является экзамен.

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы

1. Структура и конформация биомолекул.
2. Специфика живой материи. Клетка. Клеточная теория.
3. Атомный состав живых организмов.
4. Физические взаимодействия в биосистемах.
5. Строение и классификация углеводов.
6. Углеводы. Оптическая изомерия в углеводах.
7. Углеводы. Стереоиизомеры.
8. Углеводы. Основные моносахариды.
9. Биологические полисахариды. Особенности строения. Простые и сложные углеводы. Применение.
10. Особенности строения аминокислот. Классификация. Применение.
11. Строение и функции липидов.
12. Белки. Особенности образования. Пептидная связь. Структуры белков. Конформации.
13. Белки. Белковый фолдинг. Понятие убиквитирования.
14. Структура молекулы РНК. Виды. Функции.
15. Классификация ферментов. Оксидоредуктазы.
16. Классификация ферментов. Трансферазы.
17. Классификация ферментов. Гидролазы.
18. Классификация ферментов. Лиазы.
19. Классификация ферментов. Изомеразы.
20. Классификация ферментов. Лигазы (синтетазы).
21. Строение биологических мембран.
22. Пores в липидном бислое.
23. АТФ насосы. Примеры. Уравнение Гольдмана. Уравнение Томаса.
24. Основные положения и концепции субклеточной биофизики.
25. Принципы молекулярного узнавания Крейна.
26. Основы биотермодинамики. Внутренняя энергия и степени свободы.
27. Закон Больцмана. Первое начало термодинамики. Теплоемкость. Уравнение Майера.
28. Энтропия. Второе начало термодинамики. Статистическое определение энтропии.
29. Реакция ферментативного катализа.
30. Два механизма ферментативного катализа: кислотно-основной и ковалентный.
31. Строение биологических мембран.
32. Пассивный и активный трансмембранный транспорт.
33. Уравнение Нернста-Планка.
34. Закон Фика.
35. Диффузия полярных молекул воды через мембрану.
36. Облегченная диффузия.
37. Энергетические потенциалы биомембран.
38. Мембранный потенциал.
39. Потенциалы покоя.
40. Эволюционный и инженерный подход к созданию бионаномашин.
41. Самоассемблирование и самоорганизация биомолекул.
42. Бионанотехнологии в фармацевтике. Получение рекомбинантных белков.
43. Микробиологические системы для нанобиотехнологии.
44. Биосенсоры.
45. Методы структурного анализа.

46. Методы микроскопии.
47. Методы оптической спектроскопии.
48. Масс-спектрометрия. Ионизация образцов.
49. Моделирование макромолекул. Пакеты программ. Описание.
50. Матрицы Blosum и PAM при выравнивании близко родственных последовательностей, назначение и отличия.

8.2. Примеры контрольных работ для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы.

Контрольная работа № 1

Максимальная оценка – 4 балла

1. Особенности и различия бионанотехнологии и нанобиотехнологии. Нанобиотехнология в биотехнологии.
2. Структура и конформация биомолекул. Взаимосвязь структуры и функции молекул. Конформационные переходы. Межмолекулярное связывание.
3. Строение и классификация углеводов.
4. Третичная и четвертичная структуры белков. Белковый фолдинг. Примеры. Понятие убиквитирования.

Контрольная работа № 2

Максимальная оценка – 4 балла

1. Основы биотермодинамики. Внутренняя энергия и степени свободы
2. Классификация ферментов. Оксидоредуктазы.
3. Реакция ферментативного катализа в общем виде, описание механизма (стадии).
4. Пассивный и активный трансмембранный транспорт. Классификация видов пассивного транспорта. Уравнение Теорелла.

Контрольная работа № 3

Максимальная оценка – 4 балла

1. Эволюционный и инженерный подход к созданию бионаномашин. Структурные принципы бионанотехнологии.
2. Бионанотехнологии в фармацевтике. Получение рекомбинантных белков. Технология рекомбинантных ДНК.
3. Биосенсоры. Понятие биосенсоров. Классификации биосенсоров. Требование к биосенсорам.
4. Методы структурного анализа. Рентгеновская кристаллография.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (экзамен, 2 семестр)

1. Особенности и различия бионанотехнологии и нанобиотехнологии. Нанобиотехнология в биотехнологии.
2. Понятие биофизики. История развития.
3. Разделы биофизики. Российская и европейская классификация. История.
4. Структура и конформация биомолекул. Взаимосвязь структуры и функции молекул. Конформационные переходы. Межмолекулярное связывание.
5. Основные положения и концепции субклеточной биофизики.
6. Общие положения биоэнергетики (понятия биотермодинамики и биокинетики).

7. Общие положения физиологической и анатомической биофизики (биомеханика).
8. Концепция бифизики среды обитания.
9. Специфика живой материи. Клетка. Клеточная теория.
10. Атомный состав живых организмов.
11. Специфика биомолекулярной механики. Гравитация и инерция. Атомная гранулярность. Тепловое движение.
12. Принципы молекулярного узнавания Крейна.
13. Физические взаимодействия в биосистемах. Особенности ковалентных связей в биомолекулах.
14. Физические взаимодействия в биосистемах. Особенности нековалентных взаимодействий.
15. Строение и классификация углеводов.
16. Оптическая изомерия в углеводах. Примеры.
17. Углеводы. Стереизомеры. Примеры.
18. Основные моносахариды.
19. Биологические полисахариды. Особенности строения. Простые и сложные углеводы. Применение.
20. Особенности строения аминокислот. Классификация. Применение.
21. Особенности образования белков. Пептидная связь. Структуры белков. Первичная и вторичные структуры белков. Конформации
22. Третичная и четверичная структуры белков. Белковый фолдинг. Примеры. Понятие убиквитирования.
23. ДНК. Фосфородиэфирная связь. Правило Э.Чаргаффа. Комплементарность. Уровни компактизации ДНК. Основные функции.
24. Структура молекулы РНК. Виды. Функции.
25. Строение и функции липидов.
26. Основы биотермодинамики. Внутренняя энергия и степени свободы.
27. Закон Больцмана. Первое начало термодинамики. Теплоемкость. Уравнение Майера.
28. Энтропия. Второе начало термодинамики. Статистическое определение энтропии.
29. Понятие ферментативного биокатализа. Основные понятия энзимологии. Специфические черты биокатализаторов. Понятие активного центра.
30. Классификация ферментов. Оксидоредуктазы.
31. Классификация ферментов. Трансферазы.
32. Классификация ферментов. Гидролазы.
33. Классификация ферментов. Лиазы.
34. Классификация ферментов. Изомеразы.
35. Классификация ферментов. Лигазы (синтетазы).
36. Реакция ферментативного катализа в общем виде, описание механизма (стадии).
37. Модели фермент-субстратного связывания, модель "ключ- замок" Фишера.
38. Модели фермент-субстратного связывания модель "рука-перчатка" Кошланда.
39. Описать два механизма ферментативного катализа: кислотно-основной и ковалентный. Примеры.
40. Кинетика ферментативной реакции. Уравнение Михаэлиса-Ментена. Вывод уравнения.
41. Уравнение Михаэлиса-Ментена. Физический смысл константы Михаэлиса. Влияние температуры и рН на скорость ферментативной реакции.

42. Строение биологических мембран.
 43. Пассивный и активный трансмембранный транспорт. Классификация видов пассивного транспорта. Уравнение Теорелла.
 44. Уравнение Нернста-Планка.
 45. Закон Фика. Пассивная (простая) диффузия через мембрану. Проницаемость фосфолипидной мембраны для различных молекул. Сравнение.
 46. Диффузия полярных молекул воды через мембрану. Транспорт через мембрану с помощью белков-транспортёров.
 47. Облегченная диффузия. Отличия облегченной диффузии от пассивной. Трансмембранный транспорт глюкозы.
 48. Пores в липидном бислое. Активный транспорт.
 49. Энергетические потенциалы биомембран. Мембранный потенциал. Потенциалы покоя.
 50. АТФ насосы. Примеры. Уравнение Гольдмана. Уравнение Томаса.
 51. Эволюционный и инженерный подход к созданию бионаномашин. Структурные принципы бионанотехнологии.
 52. Структура и стабильность биомолекул. Самоассемблирование и самоорганизация.
 53. Функциональные принципы бионанотехнологии. Информационно-управляемое ассемблирование бионаномашин.
 54. Примеры бионаномашин. Рибосома как информационно-управляемый наноассемблер.
 55. Технология рекомбинантных ДНК.
 56. Химический синтез ДНК.
 57. Бионанотехнологии в фармацевтике. Получение рекомбинантных белков.
 58. Микробиологические системы для нанобиотехнологии.
- Иммунодиагностика.
59. Особенности и принципы химических нанотрансформаций в биосистемах.
 60. Биосенсоры. Понятие биосенсоров. Классификации биосенсоров. Требование к биосенсорам.
 61. Классификация биосенсоров. Аналитические и калибровочные характеристики.
 62. Устройство и принцип действия. Механизм действия. Примеры.
 63. Классификация биосенсоров. Особенности по сравнению с химическим сенсором.
 64. Электрохимический биосенсор.
 65. Оптический биосенсор.
 66. Гравиметрический биосенсор.
 67. Методы структурного анализа. Рентгеновская кристаллография.
 68. Электронный парамагнитный резонанс.
 69. Ядерный магнитный резонанс.
 70. Методы микроскопии. Электронная микроскопия.
 71. Атомно-силовая микроскопия.
 72. Туннельная микроскопия.
 73. Методы оптической спектроскопии. Молекулярная спектроскопия.
 74. Инфракрасная спектроскопия.
 75. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.
 76. Масс-спектрометрия. Ионизация образцов.
 77. Электро-распылительная ионизация (ESI)/
 78. Лазерно-десорбционная ионизация с участием конденсированной матрицы (MALDI)/

79. Анализаторы масс. Детектирование сигнала.
80. Программа BLAST для выравнивания родственных последовательностей.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4 Структура и пример билета для экзамена (2 семестр)

Экзамен по дисциплине «Молекулярная биофизика и бионанотехнологии» проводится в 2 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 3-х вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы к экзамену оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 15 баллов, второй – 15 баллов, третий – 10 баллов. Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов.

Пример билета для экзамена:

<i>«Утверждаю»</i> <i>зав. кафедрой ХФИ</i> <i>Н.В. Меньшутина</i> (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева Кафедра химического и фармацевтического инжиниринга 28.04.02 Наноинженерия Магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них» Дисциплина - «Молекулярная биофизика и бионанотехнологии» Билет № 1
---	--

1. Структура и конформация биомолекул. Взаимосвязь структуры и функции молекул. Конформационные переходы. Межмолекулярное связывание.
2. Классификация ферментов. Оксидоредуктазы.
3. Примеры бионаномашин. Рибосома как информационно-управляемый наноассемблер.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А) Основная литература:

1. Луценко Н. Г. Начала биохимии [Текст] : в 2 ч. : Учебное пособие / Н. Г. Луценко, С. В. Калёнов, А. В. Белодед. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. - ISBN 978-5-7237-0922-5. Ч.1 : Курс лекций. - 2011. - 156 с.
2. Луценко Н. Г. Начала биохимии [Текст] : в 2 ч. : Учебное пособие / Н. Г. Луценко, С. В. Калёнов, А. В. Белодед. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. - ISBN 978-5-7237-0922-5. Ч.2 : Информационные материалы к лекциям. - 2011. - 103 с.
3. Основы биохимии. Статическая биохимия [Текст] : учебное пособие / О. Д. Лопина [и др.]. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 172 с.
4. Газит Э. Нанобиотехнология: необъятные перспективы развития. – М.: Научный мир, 2011. – 152 с. [Электронный ресурс]: - Режим доступа:

https://www.studmed.ru/gazit-e-nanobiotehnologiya-neobyatnye-perspektivy-razvitiya_8ef2b83c43d.html (дата обращения: 07.04.2024).

Б) Дополнительная литература:

1. Эмануэль Н. М. Химическая и биологическая кинетика/ Н. М. Эмануэль, И. В. Березин, С. Д. Варфоломеев. - М. : Изд-во МГУ, 1983. - 295 с.
2. Кафаров В.В., Винаров А.Ю., Гордеев Л.С. Моделирование биохимических реакторов. – М. : Лесн. пром-ть, 1979, 344 с.
3. Огурцов А.Н. Введение в биофизику. Физические основы биотехнологии: учебное пособие/ А.Н. Огурцов. – Х. .: НТУ «ХПИ», 2008. – 320 с.
4. Ризниченко Г. Ю. Лекции по математическим моделям в биологии (изд. 2-е, испр. и дополн.). Ижевск: Изд-во РХД, 2011. 560 с.
5. Биофизика: учебник / А.Б. Рубин. М.: КНОРУС, 2016. 190 с.
6. Огурцов А.Н. Биологические мембраны: учебное пособие/ А.Н. Огурцов. – Х. .: НТУ «ХПИ», 2012. – 368 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- «Программные продукты и системы», ISSN (печатной версии) – 0236-235X, ISSN (онлайновой версии) – 2311-2735;
- «Стандарты и качество», ISSN – 0038-9692;
- «Теоретические основы химической технологии», ISSN – 0040-3571;
- «Computers and Chemical Engineering» ISSN – 0098-1354;
- «Нанотехнологии: разработка, применение – XXI век», ISSN – 2225-0980;
- «Наноинженерия», ISSN – 2223-4586;
- «Биотехнология», ISSN 0234-2758 (Print); 2500-2341 (Online)
- «Математическая биология и биоинформатика», ISSN 1994-6538
- «Biotechnology and Bioengineering», ISSN:1097-0290 (Online)
- «Biochemical Engineering Journal» ISSN 1369-703X
- «Journal of Bioscience and Bioengineering» ISSN 1389-1723.

Интернет-ресурсы:

1. Информационный портал RusNanoNet. Режим доступа: <http://www.rusnanonet.ru> (дата обращения: 07.04.2024).
2. Лабораторное оборудование компании «БИОХИМПРО». [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.biohimpro.ru (дата обращения: 07.04.2024).
3. Protein Data Bank. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.rcsb.org/> (дата обращения: 07.04.2024)
4. Базы данных National Center for Biotechnology Information [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/> (дата обращения: 07.04.2024)
5. База белковых соединений UniProt [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.uniprot.org/> (дата обращения: 07.04.2024)
6. Программы по выравниванию аминокислотных последовательностей: BLAST и Clustal Omega [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi>; <https://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/clustalo/> (дата обращения: 07.04.2024)

Сайты на актуальные компании производителей лабораторного и промышленного оборудования ежегодно обновляются по материалам международной выставки «Химия», «Фармтек» и др.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- конспекты лекций в формате *.pdf – 17;
- компьютерные презентации интерактивных лекций – 17;
- банк вариантов рефератов – 30;
- банк вариантов контрольных работ – 30;
- банк билетов для зачёта с оценкой – 30.

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. При этом данный список дополняется следующим разделом:

– групповой чат в ЭИОС, индивидуальные чаты и тематическая группа, групповые онлайн-конференции и индивидуальные онлайн-собеседования в MS Teams.

1. Федеральный закон Российской Федерации от 29.12.2012 № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации». [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <http://pravo.gov.ru/proxy/ips/?docbody=&nd=102162745&intelsearch=273-%D4%C7> (дата обращения: 14.04.2024).

2. Федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования // Координационный совет учебно-методических объединений и научно-методических советов высшей школы. Портал Федеральных образовательных стандартов высшего образования [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://fgosvo.ru/fgosvo/152/150/25/> (дата обращения: 14.04.2024).

3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 23.08.2017 № 816 «Об утверждении Порядка применения организациями, осуществляющими образовательную деятельность, электронного обучения, дистанционных образовательных технологий при реализации образовательных программ». [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <http://pravo.gov.ru/proxy/ips/?docbody=&nd=102447332&intelsearch=816+-%EF%F0%E8%EA%E0%E7> (дата обращения: 14.04.2024).

4. Профессиональный стандарт 40.004 «Специалист в области технологического обеспечения полного цикла производства объемных нанометаллов, сплавов, композитов на их основе и изделий из них», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации 03.02.2014 № 72н.

5. Профессиональный стандарт 40.020 «Специалист в области технологического обеспечения полного цикла производства объемных нанокерамик, соединений, композитов на их основе и изделий из них», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 11.04.2014 № 234н.

6. Профессиональный стандарт 26.006 «Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации 08.09.2015 № 604н.

7. Профессиональный стандарт 40.104 «Специалист по измерению параметров и модификации свойств наноматериалов и наноструктур», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 08.09.2015 № 611н.

При освоении дисциплины студенты должны использовать информационные и информационно-образовательные ресурсы следующих порталов и сайтов:

1. Система федеральных образовательных порталов. Система открытого образования. Консалтинговый центр ИОС ОО РФ. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.openedu.ru> (дата обращения: 14.04.2024).

2. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам». [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://window.edu.ru/> (дата обращения: 14.04.2024).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз. Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине проводятся в форме лекций, практических и лабораторных занятий и самостоятельной работы студента.

11.1 Оборудование, необходимое в образовательном процессе

Для изучения дисциплины *«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»* имеется лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для магистрантов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2 Учебно-наглядные пособия

По дисциплине *«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»* доступны учебные материалы. Реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины в виде презентаций. Доступны комплексы лабораторных работ, варианты заданий, электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3 Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-

программные и аудиовизуальные средства

На кафедре Химического и фармацевтического инжиниринга используются информационно-методические материалы: инструкции по технике безопасности в компьютерном классе; методические рекомендации к практическим и лабораторным занятиям; учебные пособия; электронные учебные пособия; кафедральные библиотеки электронных изданий; учебно-методические разработки кафедры в электронном виде; раздаточный материал к разделам дисциплины; справочные материалы.

На кафедре Химического и фармацевтического инжиниринга используются электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; электронные конспекты лекций; учебно-методические разработки в электронном виде; демонстрационные программы; специализированное программное обеспечение; справочные материалы в электронном виде.

11.4 Перечень лицензионного программного обеспечения

Для реализации дисциплины *«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»* на кафедре Химического и фармацевтического инжиниринга используются информационно-методические материалы: учебные пособия; электронные учебные пособия; электронные презентации к разделам лекционных курсов; учебно-методические разработки кафедр в электронном виде; видеоуроки к разделам дисциплин.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры Химического и фармацевтического инжиниринга для магистрантов, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин, преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5 Перечень лицензионного программного обеспечения

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	24	Бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, MicrosoftOpenLicense Номер лицензии 47837477	24	Бессрочно
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022,

12 ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Основы и особенности молекулярной биофизики биосистем	<i>Знает:</i> - основные положения и концепции молекулярной биофизики, основные концепции и направления развития бионанотехнологии; - специфические особенности биомолекулярных систем и биомолекулярной механики <i>Умеет:</i> - анализировать физические взаимодействия в биосистемах, учитывая особенности ковалентных и нековалентных взаимодействий; - анализировать структуру биомолекул на основе структурных и функциональных принципов бионанотехнологии. <i>Владеет:</i> - основными подходами для расчета кинетики трансмембранного транспорта	Оценка за контрольную работу 1. Оценка за реферат Оценка за экзамен.
Раздел 2. Основные группы биологических соединений	<i>Знает:</i> - основные группы биологических соединений (аминокислоты, белки, нуклеиновые кислоты, углеводы, липиды); <i>Умеет:</i> - анализировать физические взаимодействия в биосистемах, учитывая особенности ковалентных и нековалентных взаимодействий; - анализировать структуру биомолекул на основе структурных и функциональных принципов бионанотехнологии. <i>Владеет:</i> - основными подходами для расчета кинетики трансмембранного транспорта	Оценка за контрольную работу 1, 2. Оценка за лабораторную работу 1, 2, 5. Оценка за реферат Оценка за экзамен.
Раздел 3. Биотермодинамика и ферментативная кинетика	<i>Знает:</i> - основные группы биологических соединений (аминокислоты, белки, нуклеиновые кислоты, углеводы, липиды); <i>Умеет:</i> - анализировать физические взаимодействия в биосистемах,	Оценка за контрольную работу 2. Оценка за лабораторную работу 4. Оценка за реферат Оценка за экзамен.

	учитывая особенности ковалентных и нековалентных взаимодействий. <i>Владеет:</i> - основными принципами и подходами для проведения расчетов по ферментативной кинетике; - основными подходами для расчета кинетики трансмембранного транспорта.	
Раздел 4. Бионанотехнологии. Основные концепции и направления развития	<i>Знает:</i> - основные положения и концепции молекулярной биофизики, основные концепции и направления развития бионанотехнологии; - основные группы биологических соединений (аминокислоты, белки, нуклеиновые кислоты, углеводы, липиды); - основные пакеты программ, используемые для молекулярного моделирования. <i>Умеет:</i> - анализировать структуру биомолекул на основе структурных и функциональных принципов бионанотехнологии; - анализировать структуру биомолекул на основе структурных и функциональных принципов бионанотехнологии. <i>Владеет:</i> - основными подходами для расчета кинетики трансмембранного транспорта	Оценка за контрольную работу 3. Оценка за лабораторную работу 1-3, 5. Оценка за реферат Оценка за экзамен.

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Молекулярная биофизика и бионанотехнологии»
основной образовательной программы – программа магистратуры
по направлению подготовки 28.04.02 Наноинженерия
магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»
Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания кафедры №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания кафедры №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания кафедры №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания кафедры №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания кафедры №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов»**

Направление подготовки 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена: профессором кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, д.т.н., доцентом М.Г. Гордиенко

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга «29» августа 2024 г., протокол № 12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.02 Наноинженерия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Основы создания нанобъектов и наноструктурированных материалов»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области коллоидной химии, физической химии, материаловедения, математического моделирования.

Цель дисциплины «Основы создания нанобъектов и наноструктурированных материалов» - формирование у студентов представления об основах создания нанобъектов и наноструктурированных материалов, с учетом термодинамических явлений, возникающих на границе раздела фаз, методов и способов стабилизации коллоидных систем, явлений самоорганизации, диффузии и агрегации нанобъектов в коллоидных системах. Отдельно студенты знакомятся с математическими законами, описывающими процессы зарождения и роста нанобъектов, формирования и стабилизации самоорганизующихся систем, поведение коллоидов.

Задачи дисциплины:

- обучение магистрантов теоретическим основам и методам получения нанобъектов и наноструктурированных материалов с учетом процессов и явлений, происходящих на границе раздела фаз;
- обучение магистрантов термодинамическим основам таких явлений, как плавление нанофазы и ее растворение, зарождение и рост кристалла, диффузия и агрегация, смачивание и др.;
- обучение магистрантов практическим навыкам прогнозирования поведения наносистем в зависимости от размера дисперсной фазы и условий среды;
- обучение магистрантов практическим навыкам решения задач в предметной области;
- ознакомление магистрантов с основами поведения коллоидных систем.

Дисциплина **«Основы создания нанобъектов и наноструктурированных материалов»** преподаётся в 3 семестре и заканчивается экзаменом. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины **«Основы создания нанобъектов и наноструктурированных материалов»** при подготовке магистров по направлению подготовки **28.04.02 Наноинженерия**, магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них» направлено на приобретение следующих **профессиональных компетенций и индикаторов их достижения:**

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский и инновационный				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	– Химическое, химико-технологическое производство – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-1 Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их.	ПК-1.3 Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Химическое, химико-технологическое производство – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
			ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии	
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой	– Химическое, химико-технологическое производство – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в	ПК-3 Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования,	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать:

- термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов;
- влияние размера нанобъектов и нанофазы на их свойства;
- принципы и методы стабилизации коллоидных наносистем и наноструктурированных жидкостей;
- коллоидные основы синтеза нанобъектов;
- понятие и классификацию поверхностно-активных веществ, принципы явления самоорганизации нанобъектов и их применения для синтеза наноструктурированных материалов;
- основы поведения коллоидных систем;
- особенности диффузии и агрегации нанобъектов в коллоидных системах.

Уметь:

- выбирать методы синтеза нанобъектов и наноструктурированных материалов в зависимости от требуемых задач;
- регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов;
- математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов;
- выбирать методы стабилизации коллоидных систем и наноструктурированных жидкостей.

Владеть:

- понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз;
- математическим аппаратом, применяемым для описания в наносистемах явлений зарождения, роста, агрегации, агломерации, а также стабилизации таких систем.

3. ОБЪЁМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Виды учебной работы	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	6	216	162
Контактная работа (КР):	2,36	85	63,75
Лекции (Лек)	0,47	17	12,75
Лабораторные занятия (ЛЗ)	0,94	34	25,5
Практические занятия (ПЗ)	0,94	34	25,5
Самостоятельная работа (СР):	2,64	95	71,25
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,64	95	71,25
Вид контроля:	Экзамен		
Экзамен	1	36	27

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий для магистрантов

№	Раздел дисциплины	Акад. часов				
		Всего	Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
	Введение	0,5	0,5	0	0	0
1.	Раздел 1. Термодинамические явления на границе раздела фаз	27	2	5	5	15
2.	Раздел 2. Стабилизация дисперсных систем, наноструктурированные жидкости	31	3	6	6	16
3.	Раздел 3. Синтез наноразмерных объектов	31	3	6	6	16
4.	Раздел 4. Поверхностно-активные вещества, явления самоорганизации и применение ПАВ для получения наноструктурированных материалов	31	3	6	6	16
5.	Раздел 5. Поведение коллоидных систем	30	3	5,5	5,5	16
6.	Раздел 6. Явления диффузии и агрегации нанообъектов в коллоидных системах	29	2	5,5	5,5	16
	Заключение	0,5	0,5	0	0	0
	ИТОГО	180	17	34	34	95
	Экзамен	36				
	ИТОГО	216				

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Предмет и методы изучаемой дисциплины. Цели и задачи дисциплины. Описание основных разделов дисциплины. Структура дисциплины и правила рейтинговой системы.

Раздел 1. Термодинамические явления на границе раздела фаз

В рамках данного раздела рассматриваются термодинамические основы явлений, возникающих на границе раздела основной и нанофазы, зависимости между размерами нанобъектов и их свойствами, зародышеобразование и рост кристалла, энергия Гиббса для капиллярных систем, основы статической термодинамики.

Раздел 2. Стабилизация дисперсных систем, наноструктурированные жидкости

В рамках данного раздела рассматриваются основы коллоидной химии, в том числе теорию ДЛВО и основы стабилизации коллоидных систем ПАВ-ми. Изучаются такие методы стабилизации наночастиц, как покрытие их лигандами, включая фосфолипиды и ПАВ, химическая модификация поверхности. Дополнительно рассматриваются методы измерения и оценки степени агрегации нанобъектов.

Раздел 3. Синтез наноразмерных объектов

В рамках данного раздела обучаемые знакомятся с методами получения наночастиц. Подробно рассматриваются явления зародышеобразования, роста, включая их математическое описание. Также рассмотрены способы контроля формы получаемых нанобъектов: нанокристаллов и наночастиц.

Раздел 4. Поверхностно-активные вещества, явления самоорганизации и применение ПАВ для получения наноструктурированных материалов

В рамках данного раздела обучаемые знакомятся с видами ПАВ, стабилизаторов и блочных со-полимеров, используемых при синтезе нанобъектов. Рассматриваются явления адсорбции и самоорганизации на границе раздела фаз, методы стабилизации наномульсий, нанопен, и твердых нанодисперсий.

Раздел 5. Поведение коллоидных систем

В данном разделе обучаемые знакомятся с поведением коллоидных систем, коллоидных и жидких кристаллов, поведением двойных и тройных систем, включающих ПАВ или амфифильные блочные со-полимеры. Отдельно рассматривается поведение фаз в микроэмульсиях.

Раздел 6. Явления диффузии и агрегации нанобъектов в коллоидных системах

В данном разделе рассматриваются термодинамические основы явлений диффузии и агрегации, различные способы оценки коэффициента диффузии в наносистемах.

Заключение. Подведение итогов дисциплины.

5 СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6
	Знать:						
1	термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов	+	+	+	+	+	+
2	влияние размера нанобъектов и нанофазы на их свойства	+	+	+			+
3	принципы и методы стабилизации коллоидных		+		+	+	

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6
	наносистем и наноструктурированных жидкостей						
4	коллоидные основы синтеза нанообъектов	+	+	+	+	+	+
5	понятие и классификацию поверхностно-активных веществ, принципы явления самоорганизации нанообъектов и их применения для синтеза наноструктурированных материалов		+		+	+	
6	основы поведения коллоидных систем		+		+	+	
	Уметь:						
7	выбирать методы синтеза нанообъектов и наноструктурированных материалов в зависимости от требуемых задач			+	+	+	+
8	регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов	+	+	+	+	+	+
9	математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанообъектов и наноструктурированных материалов	+	+	+	+	+	+
10	выбирать методы стабилизации коллоидных систем и наноструктурированных жидкостей		+		+	+	
	Владеть:						
11	понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз	+	+		+	+	+
12	математическим аппаратом, применяемым для описания в наносистемах явлений зарождения, роста, агрегации, агломерации, а также стабилизации таких систем		+		+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:							
13	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК					
14	ПК-1 Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их	ПК-1.3 Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов		+	+	+	+
15	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов			+	+	+

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6
16	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии		+	+	+	+	+
17	ПК-3 Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов		+	+		+	+
18	ПК-3 Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов и наноструктурированных материалов и изделий из них	+		+			+

6 ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1 Практические занятия

Предусмотрены практические занятия в объеме 34 акад. ч.

№	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Расчет энергии Гиббса. Определение значения температуры плавления. Расчет растворимости нанофазы в рассматриваемой системе.	3

2	1	Расчет показателя растекаемости и краевого угла смачиваемости.	2
3	2	Расчет энергии взаимодействия наночастиц в коллоидных растворах.	6
4	3	Расчет критического размера частиц при зародышеобразовании.	3
5	3	Расчет химического потенциала в перенасыщенных растворах.	3
6	4	Расчет константы мицеллообразования и параметра упаковки.	6
7	5	Расчет предельного размера капель масла в воде. Определение отношения площади границы раздела фаз к объему, занимаемому нанофазой.	5,5
8	6	Расчет времени коагуляции и среднего размера агломерата.	5,5
ИТОГО			34

6.2 Лабораторные работы

Лабораторный практикум по дисциплине «*Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов*» выполняется в соответствии с Учебным планом в 3 семестре и занимает 34 акад ч (25,5 астр. ч). Лабораторные работы охватывают все разделы дисциплины. В практикум входит 8 работ. В зависимости от трудоёмкости включенных в практикум работ их число может быть уменьшено. Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «*Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов*», а также способствует наработке практических навыков компьютерного моделирования процессов химической технологии и биотехнологии.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 40 баллов (максимально по 5 баллов за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

№	№ раздела дисциплины	Темы лабораторных работ	Часы
1	1	Изучение влияние размеров нанофазы/нанообъекта на такие физико-химические свойства как точка плавления, растворимость нанофазы/нанообъекта	5
2	1	Изучение влияния физико-химических свойств нанофазы/нанообъекта на смачиваемость, растекаемость и угол контакта фаз	
3	2	Изучение зависимости потенциальной энергии взаимодействия от расстояния между коллоидными частицами в соответствии с теорией ДАВО. Условия стабилизации системы	6
4	3	Изучение явления зародышеобразования в растворах. Изучение влияния параметров на рост кристаллов в растворах	6
5	3	Изучение кинетики реакции в микрореакторах с применением трех моделей обмена веществом между мицеллами	
6	4	Изучение кинетики адсорбции ПАВ на границе раздела фаз	6
7	5	Расчет и построение фазовых диаграмм бинарных и	5,5

№	№ раздела дисциплины	Темы лабораторных работ	Часы
		тройных систем	
8	6	Изучение явлений диффузии и агрегации в наносистемах	5,5
	ИТОГО		34

Лабораторная работа №1

Для заданного чистого вещества построить зависимости молярной энергии Гиббса для твердой, жидкой фаз и диспергированных частиц от температуры при условии, что давление среды постоянно. Средний размер наночастиц принять равным значениям из таблицы. Из условия равновесия химических потенциалов фаз определить температуры плавления диспергированных наночастиц и монолитной твердой фазы. Построить зависимость температуры плавления диспергированных наночастиц от их среднего размера. Сделать выводы о влиянии среднего размера частиц на изменения температуры плавления.

Для сферических наночастиц построить функцию изменения растворимости от среднего размера наночастиц при разных значениях поверхностного натяжения. Сделать выводы о том, как влияют размер частиц и поверхностное натяжение на границе раздела фаз на растворимость частиц.

Лабораторная работа №2

По заданным физико-химическим параметрам системы твердое-жидкость-пар определить угол смачиваемости, коэффициент смачиваемости и провести ранжирование систем по степени смачиваемости поверхности жидкостью. Сделать выводы как физико-химические свойства веществ влияют на смачиваемость гладкой поверхности заданного материала определенной жидкостью.

Основываясь на модельных представлениях Вензеля и Кассе-Бакстера построить зависимости контактного угла от значений шероховатости поверхности. Объяснить «эффект лотоса».

Лабораторная работа №3

Основываясь на теории ДЛФО рассчитать изменение потенциальной энергии взаимодействия, предварительно рассчитав изменение ее составляющих, как функции расстояния между частицами. Рассмотреть два варианта: длинный и короткий дебаевский радиус. Отобразить расчеты графически. Рассчитать, как изменится потенциальная энергия поверхности при стабилизации наночастиц лигандами при заданном значении толщины поверхностного слоя. Сделать выводы.

Лабораторная работа №4

По входным данным, приведенным в таблице рассчитать, как размер частицы влияет на свободную энергию зародышеобразования. Отобразить полученные данные графически. Рассчитать и отобразить графически влияние степени пересыщения раствора мономера и температуры на движущую силу процесса зародышеобразования (разницу химических потенциалов мономера в растворе и кристалла). Сделать выводы о влиянии условий на процесс зародышеобразования. Рассчитать снижение энергетического барьера при гетерогенном зародышеобразовании.

По входным данным, приведенным в таблице, рассчитать, как критический размер частицы влияет на скорость роста кристалла. Построить графическую зависимость и выделить на ней разные режимы роста кристаллов. Дополнительно ответить на вопрос, какие параметры процесса кристаллизации влияют на форму образующегося кристалла.

Лабораторная работа №5

По входным данным, описывающим эмульсию рассчитать концентрационные профили веществ при протекании химической реакции для трех случаев:

1. При контакте мицелл происходит переход только 1 молекулы растворенных веществ в клетку с меньшей концентрацией;
2. Перемешивание происходит по принципу «слияние-разделение», т.е. концентрация растворимых веществ в мицеллах выравнивается мгновенно;
3. При контакте мицелл между ними формируется канал обмена, характеризующейся константой обмена, равной произведению числа молекул вещества в мицелле с более высоким содержанием данного вещества на псевдослучайное число, лежащее в диапазоне от 0 до 0.5.

По результатам оформить отчет. Сделать выводы о влиянии используемой модели на форму концентрационных профилей. Для каких случаев какая модель обмена подходит лучше?

Лабораторная работа №6

Построение зависимости величины адсорбции Γ от концентрации вещества и температуры. Сделать выводы.

Для приведенных молекул по табличным значениям определить значения гидрофильно-липофильного баланса (ГЛБ) и сделать вывод к какому классу ПАВ принадлежат молекулы.

Лабораторная работа №7

Построение фазовых диаграмм для раствора заданного полимера А, для смеси полимеров А и Б, для тройной системы из двух полимеров А и Б и растворителя, основываясь на положениях теории Флори-Хаггинса. Дать описание построенных фазовых диаграмм.

Лабораторная работа №8

Используя клеточно-автоматный подход смоделировать рост кластера для следующих случаев:

- а) агрегация, ограниченная диффузией; единственный центр роста кластера;
- б) агрегация, ограниченная диффузией; 10 центров роста кластеров (случайное расположение);
- в) агрегация, ограниченная скоростью реакции (вероятность реакции принять равной 0,25, 0,5 и 0,75); единственный центр роста кластера;
- г) агрегация, ограниченная скоростью реакции (вероятность реакции принять равной 0,25, 0,5 и 0,75); 10 центров роста кластера;

Для построенных кластеров определить их фрактальную размерность, сделать выводы о влиянии вида модели и параметров модели на получаемую структуру кластера.

7 САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студента в объеме 95 акад. часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- подготовку к лабораторным работам;
- выполнение домашних работ согласно индивидуальному заданию;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы.

Домашние работы представляют собой набор вопросов по темам лекционных и практических занятий, направленных на проработку и закрепление навыков, а также оценку знаний. Каждая домашняя работа включает 3 вопроса. Ответы предполагаются в развернутой форме, объемом от $\frac{3}{4}$ до 1 страницы машинописного текста (кегель 14, одинарный междустрочный интервал). Ответы могут содержать поясняющие рисунки и схемы, выполненные как от руки, так и компьютерными средствами.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимую для изучения дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8 ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1 Примерная тематика реферативно-аналитической работы

Реферативно-аналитическая работа не предусмотрена.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Текущий контроль освоения дисциплины проходит в форме написания и защиты домашних работ. Максимальная оценка составляет 10 баллов за каждую домашнюю работу. Домашняя работа №1 охватывает 1-3 разделы дисциплины. Домашняя работа №2 охватывает 4-6 разделы дисциплины.

Примеры домашних работ

Домашняя работа № 1

Задание 1

Рассмотрите равновесные состояния системы иммобилизованных на твердой подложке биомолекул при ее погружении в водный раствор электролита (см. рисунок). Выразите в общем виде изменение энергии Гиббса в представленном цикле, приняв допущение, что биомолекула может находиться в зависимости от концентрации электролита только в двух конформациях: конформации А или конформации В.

Переход из конформации А в конформацию В может быть записан в форме обратимой реакции: $A + jC \leftrightarrow B$.

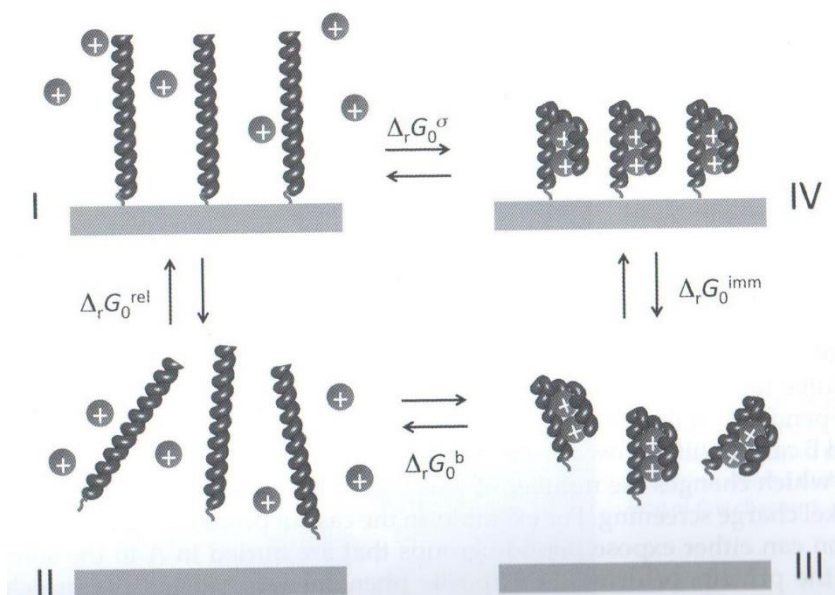


Рисунок к вопросу 1

Задание 2

К методам анализа степени агрегации наночастиц относят следующие методы: динамическое рассеяние света; турбидиметрия; электрофорез в геле; ультрацентрифугирование; колометрия.

Для каждого метода кратко поясните принцип измерения при анализе агломератов наночастиц.

Задание 3

На рисунке представлены кристаллы оксида цинка, полученные кристаллизацией из раствора при добавлении разных объемов уксусной кислоты.

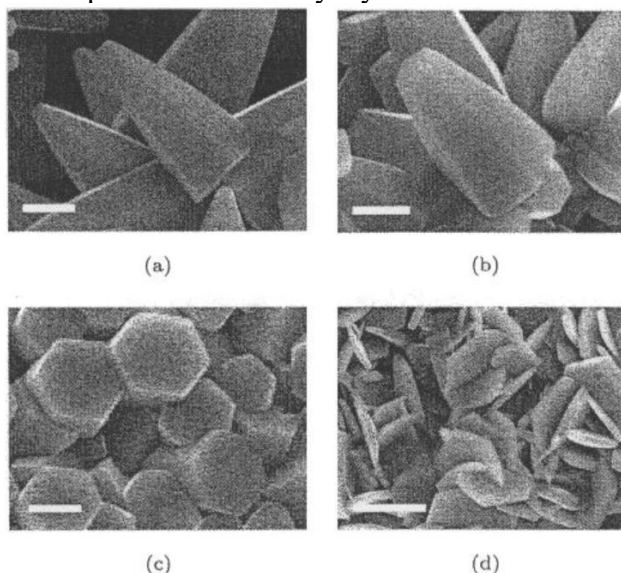


Рисунок к вопросу 3 (количества введенной уксусной кислоты увеличивается от (а) к (d))
Объясните причины изменения формы кристаллов.

Домашняя работа № 2

Задание 1

Самостоятельно изучите такие системы, как магнитные наносuspensions или магнитные жидкости. Что они из себя представляют и как формируются? Какую роль играют ПАВ при формировании магнитных наносuspensions? Как меняется величина магнитной восприимчивости в зависимости от объемной концентрации магнитных наночастиц? Чем обусловлено ограничение размера наночастиц, используемых в магнитных жидкостях?

Задание 2

Одним из методов формирования материалов на основе диоксида кремния, имеющих поры как мезо- так и макро размеров, является проведение гелеобразования в среде двух несмешивающихся фаз (эмульсии). В ходе эксперимента было проведено исследование влияния соотношения водной фазы / ПАВ / масляной фазы на параметры получаемой пористой структуры. В качестве водной фазы использовались вода и водный силикат натрия (жидкое стекло, ЖС), масса которых во всех экспериментах была одинаковой (20 и 3 г соответственно); в качестве масляной фазы – н-парафины (н-П), масса которых варьировалась от 10 до 30 г с шагом в 10 г; в качестве поверхностно-активного вещества, стабилизирующего эмульсию и оказывающего дополнительный эффект на структурообразование, был взят додецилсульфат натрия (ДДСН), масса которого варьировалась от 1 до 3 г с шагом 1 г. Гелеобразование проводили в кислых условиях путем добавления к образцам 6 г концентрированного раствора соляной кислоты и выдерживания в течение 24 ч при температуре 100 С. Образцы промывали раствором соляной кислоты и этилового спирта, взятых в равных объемах, сушили при комнатной температуре и прокаливали при температуре 500 С. На рисунке приведены изображения образцов, полученные методом растровой электронной микроскопии.

Объясните причины изменения структуры материала с ростом:
а – количества вводимого н-парафина; б – количества вводимого ДДСН.

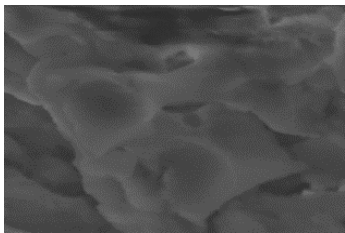
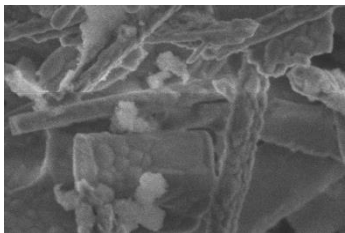
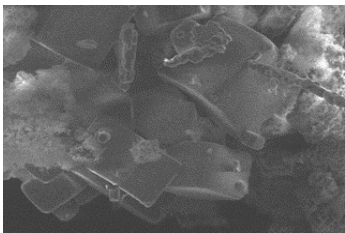
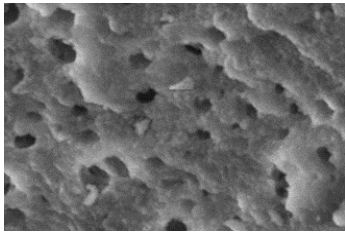
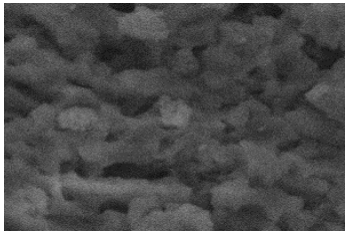
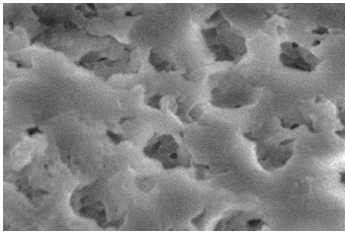
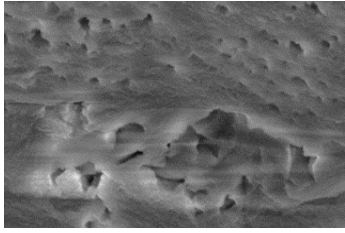
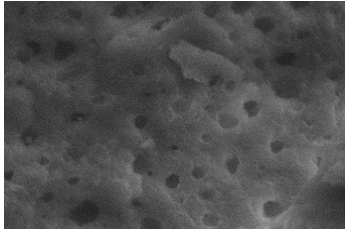
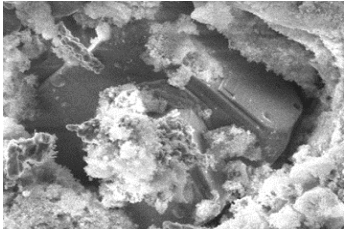
МФ, г	Количество ПАВ, г		
	1	2	3
10			
20			
30			

Рисунок к вопросу 2

Задание 3

На рисунке ниже приведены ТЭМ-изображения наночастиц Pd в коллоидном растворе, при условии формирования разного поверхностного заряда на частицах.

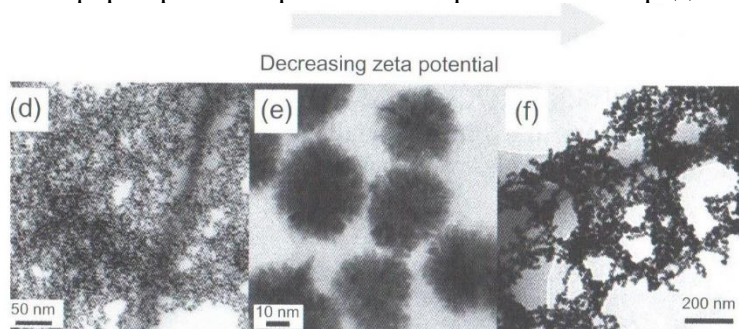


Рисунок к вопросу 3

Проанализируйте, что происходит при изменении поверхностного заряда частиц? Как зависит механизм агрегации от поверхностного заряда? Какое влияние на представленные системы окажет повышение температуры, разбавление системы растворителем, введение ПАВ, способствующего снижению поверхностного заряда частиц?

8.3 Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (экзамен, 3 семестр)

Экзамен по дисциплине включает контрольные вопросы и задания по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет включает 2 вопроса, оцениваемых по 20 баллов каждый.

Максимальная оценка – 40 баллов.

Примеры вопросов для итогового контроля освоения дисциплины:

1. Термодинамические законы для системы с границей раздела фаз.
2. Влияние размера частиц нанофазы на температуру плавления и растворимость.
3. Краевой угол смачиваемости, показатель растекаемости. Супергидрофобные свойства наноматериалов.
4. Принципы и методы стабилизации коллоидных наносистем и наноструктурированных жидкостей.
5. Описание процесса зародышеобразования (гомогенное и гетерогенное) и роста кристаллов.
6. Влияние степени пересыщения раствора, температуры системы. Определение критических размеров кристалла.
7. Регулирование размера и формы кристалла.
8. Основные положения теории ДЛФО.
9. Понятие и классификация поверхностно-активных веществ. Гидрофильно-липофильный баланс.
10. Адсорбция ПАВ на границе двух несмешивающихся жидкостей. Адсорбция ПАВ на границе твердое-жидкость-газ.
11. Фазовые равновесия в растворах, их стабилизация. Микроэмульсии.
12. Понятия коллоидных и жидких кристаллов.
13. Явления диффузии и агрегации при получении наноматериалов.
14. Теория Смолуховского.
15. Агломерация, ограниченная диффузией. Агломерация, ограниченная реакцией. Фрактальная агломерация.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4 Структура и пример билетов для экзамена

Экзамен по дисциплине **«Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов»** проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для экзамена состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам: 1 вопрос по разделам 1-3, 2 вопрос – по разделам 4-6. Ответы на вопросы экзамена оцениваются из максимальной оценки 40 баллов по 20 баллов за вопрос.

Пример билета для экзамена:

*«Утверждаю»
зав. кафедрой ХФИ*

(Должность, наименование кафедры)

Н.В. Меньшутина

(Подпись) (И. О. Фамилия)

«__» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования РФ
Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева**

Кафедра химического и фармацевтического инжиниринга

28.04.02 Нанотехнологии

Магистерская программа –

**«Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»**

**Дисциплина - «Основы создания нанообъектов
и наноструктурированных материалов»**

Билет № 1

1. Влияние размера частиц нанофазы на температуру плавления и растворимость.

2. Понятия коллоидных и жидких кристаллов.

9 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1 Рекомендуемая литература

А) Основная литература:

1. **Поленов, Ю. В.** Физико-химические основы нанотехнологий : учебник / Ю. В. Поленов, Е. В. Егорова. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 180 с. — ISBN 978-5-8114-4113-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/125699> (дата обращения: 01.03.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. **Плетнев, М. Ю.** Технология эмульсий. Гидрофильно-липофильный баланс и обращение фаз : учебное пособие / М. Ю. Плетнев. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 100 с. — ISBN 978-5-8114-4777-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/126719> (дата обращения: 01.03.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. **Шабатина, Т. И.** Нанохимия и наноматериалы : учебное пособие / Т. И. Шабатина, А. М. Голубев. — Москва : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. — 63 с. — ISBN 978-5-7038-3965-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/58569> (дата обращения: 01.03.2024). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Б) Дополнительная литература:

1. **Юртов, Е. В.** Процессы получения наночастиц и наноматериалов [Текст] : учебно-методический комплекс / Е.В. Юртов. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2010. 152 с.

2. **Сергеев, Г. Б.** Нанохимия [Текст] / Г.Б. Сергеев. М. : Изд-во МГУ, 2003. 288 с.

9.2 Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.
- Научно-технические журналы:
 - Ж. «Современные наукоемкие технологии» ISSN 1812-7320;
 - Ж. «Нанотехнологии в строительстве: научный интернет-журнал» ISSN 2075-8545;
 - Ж. «Российские нанотехнологии» ISSN 1995-0780;
 - Ж. «Нанотехнологии и охрана здоровья» ISSN 2076-4804;
 - Ж. «Нанотехника» ISSN 1816-4498;
 - Ж. «Инновации» ISSN 2071-3010;
 - Ж. «Наноиндустрия» ISSN 1933-8578.

9.3 Средства обеспечения освоения дисциплины

Учебно-методические материалы на сайте кафедры кибернетики химико-технологических процессов. При проведении расчетов и оформлении отчетов в рамках лабораторных работ используется пакет Microsoft Office, лицензированная версия которого установлена на персональных компьютерах РХТУ им. Д.И. Менделеева. В рамках лабораторных работ используется оборудование Центра коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева.

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. При этом первый пункт списка дополняется или заменяется на доступ к групповым чатам, к видео-лекциям (канал youtube, Moodle), к вебинарам (webinar.ru, zoom.us), онлайн-конференции.

10 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз. Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

В соответствии с учебным планом занятия проводятся в форме лекций, лабораторных, практических занятий и самостоятельной работы студента.

11.1 Оборудование, необходимое в образовательном процессе

Для изучения дисциплины **«Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов»** имеется лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для магистрантов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2 Учебно-наглядные пособия

По дисциплине **«Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов»** доступны учебные материалы. Доступны комплексы лабораторных работ и требования к отчетам, варианты заданий, руководство по выполнению работ.

Организован доступ к свободно распространяемым образовательным порталам и сайтам для использования информационно-справочных ресурсов. Магистры могут использовать данные электронные ресурсы для самостоятельной подготовки, а в последующем – при выполнении научно-исследовательской работы и написания выпускной квалификационной работы.

11.3 Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами, проекторы, экраны; аудитории со стационарными комплексами отображения информации с любого электронного носителя; WEB-камеры; цифровой фотоаппарат; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4 Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений, программы; методические рекомендации к практическим занятиям; каталоги типов и видов продукции из неметаллических материалов; каталоги продукции промышленных предприятий; раздаточный материал к лекционным курсам; учебные фильмы по процессам технологии и способам производства отдельных видов изделий; электронные учебные издания по дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений, научно-популярные электронные издания.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры химического и фармацевтического инжиниринга для магистрантов, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева, имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин, преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5 Перечень лицензионного программного обеспечения

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	24	Бессрочно
2.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 47837477	24	Бессрочно
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт № 72-99ЭА/2022 от 29.08.2022	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт № 72-99ЭА/2022 от 29.08.2022,

12 ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Термодинамические явления на границе раздела фаз	Знает: термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов; влияние размера нанобъектов и нанопазы на их свойства; коллоидные основы синтеза нанобъектов; Умеет: регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов; математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов; Владеет: понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз;	Оценка за лабораторные работы № 1 и 2. Оценка за ДР № 1. Оценка на Экзамене.
Раздел 2. Стабилизация дисперсных систем, наноструктурированные жидкости	Знает: термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов; влияние размера нанобъектов и нанопазы на их свойства; принципы и методы стабилизации коллоидных наносистем и наноструктурированных жидкостей; коллоидные основы синтеза нанобъектов; понятие и классификацию поверхностно-активных веществ, принципы явления самоорганизации нанобъектов и их применения для синтеза наноструктурированных материалов; основы поведения коллоидных систем Умеет: регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов; математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов; выбирать методы стабилизации коллоидных систем и наноструктурированных жидкостей Владеет: понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз; математическим аппаратом, применяемым для описания в наносистемах явлений зарождения, роста, агрегации, агломерации, а также стабилизации таких систем	Оценка за лабораторную работу № 3. Оценка за ДР № 1. Оценка на экзамене.

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 3. Синтез наноразмерных объектов	Знает: термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов; влияние размера нанобъектов и нанофазы на их свойства; коллоидные основы синтеза нанобъектов; Умеет: выбирать методы синтеза нанобъектов и наноструктурированных материалов в зависимости от требуемых задач; регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов; математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов;	Оценка за лабораторную работу № 4, 5. Оценка за ДР № 1. Оценка на экзамене.
Раздел 4. Поверхностно-активные вещества, явления самоорганизации и применение ПАВ для получения наноструктурированных материалов	Знает: термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов; принципы и методы стабилизации коллоидных наносистем и наноструктурированных жидкостей; коллоидные основы синтеза нанобъектов; понятие и классификацию поверхностно-активных веществ, принципы явления самоорганизации нанобъектов и их применения для синтеза наноструктурированных материалов; основы поведения коллоидных систем Умеет: выбирать методы синтеза нанобъектов и наноструктурированных материалов в зависимости от требуемых задач; регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов; математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов; выбирать методы стабилизации коллоидных систем и наноструктурированных жидкостей Владеет: понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз; математическим аппаратом, применяемым для описания в наносистемах явлений зарождения, роста, агрегации, агломерации, а также стабилизации таких систем	Оценка за лабораторную работу 6. Оценка за ДР № 2. Оценка на экзамене.
Раздел 5. Поведение коллоидных систем	Знает: термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов; принципы и методы стабилизации коллоидных наносистем и наноструктурированных	Оценка за лабораторную работу № 7. Оценка за ДР № 2.

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
	жидкостей; коллоидные основы синтеза нанобъектов; понятие и классификацию поверхностно-активных веществ, принципы явления самоорганизации нанобъектов и их применения для синтеза наноструктурированных материалов; основы поведения коллоидных систем Умеет: выбирать методы синтеза нанобъектов и наноструктурированных материалов в зависимости от требуемых задач; регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов; математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов; выбирать методы стабилизации коллоидных систем и наноструктурированных жидкостей Владеет: понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз; математическим аппаратом, применяемым для описания в наносистемах явлений зарождения, роста, агрегации, агломерации, а также стабилизации таких систем	Оценка на экзамене.
Раздел 6. Явления диффузии и агрегации нанобъектов в коллоидных системах	Знает: термодинамические основы синтеза нанобъектов, наноструктурированных коллоидных систем и нанокомпозитов; влияние размера нанобъектов и нанофазы на их свойства; коллоидные основы синтеза нанобъектов; выбирать методы синтеза нанобъектов и наноструктурированных материалов в зависимости от требуемых задач; Умеет: регулировать свойства наноматериалов с учетом термодинамических законов; математически описывать явления, протекающие на микроуровне при синтезе нанобъектов и наноструктурированных материалов; Владеет: понятийным аппаратом и основами термодинамики для описания явлений на границе раздела фаз; математическим аппаратом, применяемым для описания в наносистемах явлений зарождения, роста, агрегации, агломерации, а также стабилизации таких систем	Оценка за лабораторную работу № 8. Оценка за ДР № 2. Оценка на экзамене.

13 ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Основы создания нанообъектов и наноструктурированных материалов»
основной образовательной программы
28.04.02 Нанотехнологии
магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»
Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
2		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Сверхкритические технологии в промышленности»**

Направление подготовки 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена зав. кафедрой химического и фармацевтического инжиниринга, д.т.н., профессором Меньшутиной Н.В., доцентом кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, к.т.н. П.Ю. Цыганковым

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева «29» августа 2024 г., протокол № 12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.02 Наноинженерия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химического и фармацевтического инжиниринга** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Сверхкритические технологии в промышленности»** относится к вариативной части учебного плана, является дисциплиной по выбору и рассчитана на изучение в 3 семестре. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области процессов и аппаратов химической технологии, математики, информатики, физической химии, общей химической технологии.

Цель дисциплины «Сверхкритические технологии в промышленности» – изучение основных процессов и аппаратов для получения и обработки материалов различной природы и свойств с использованием сверхкритических флюидов в промышленности, а также ознакомление с основными подходами к моделированию данных систем.

Задачи дисциплины:

- изучение сверхкритического состояния вещества и свойств сверхкритических флюидов, а также смесей на их основе;
- изучение современных технологий получения и обработки материалов с использованием сверхкритических флюидов;
- изучение конструкций и принципов работы ёмкостного оборудования высокого давления;
- изучение конструкций и принципов работы оборудования для создания давления при нормальных и высоких температурах;
- ознакомление с контрольно-измерительными приборами для работы при высоких и сверхвысоких давлениях;
- изучение методик исследования фазовых равновесий при высоких давлениях;
- ознакомление с подходами и методами моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий.

Дисциплина **«Сверхкритические технологии в промышленности»** читается в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	– Химическое, химико-технологическое производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-1 Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области нанотехнологий и решать их.	ПК-1.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения научных исследований в области профессиональной деятельности.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового,	– Химическое, химико-технологическое	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных наноматериалов и	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»,

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	производство. – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производств).	исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	наноструктурированных материалов.	утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
			ПК-2.2 Умеет проводить измерения и контроль параметров технологических операций процессов производства наноматериалов.	
			ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологий.	
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и	– Химическое, химико-технологическое производство.	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	– Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них	Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- основные типы процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов;
- основные типы, конструкции и характеристики технологического оборудования для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов;
- физические основы сверхкритических флюидов, позволяющие предсказывать свойства чистых сверхкритических флюидов, а также смесей на их основе;
- типы, конструкции и особенности вспомогательного технологического оборудования и контрольно-измерительных приборов для систем, работающих под высоким и сверхвысоким давлением;
- методики исследования фазовых равновесий при высоких давлениях в системах различной природы;
- методы и подходы к моделированию процессов и аппаратов сверхкритических технологий.

Уметь:

- выбирать оборудование для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов;
- рассчитывать параметры и режимы работы основного и вспомогательного оборудования сверхкритических технологий;
- проводить исследования фазовых равновесий систем различной природы при высоких давлениях;
- комплектовать установки, работающие при высоких давлениях, запорно-регулирующей арматурой и контрольно-измерительными приборами;
- использовать современные аналитические методы для исследования свойств сверхкритических флюидов;
- выбирать наиболее подходящие методы и инструменты для моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий.

Владеть:

- основами процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов;
- современным инструментарием разработки и создания оборудования сверхкритических технологий;
- основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов;
- современными знаниями в области сверхкритических флюидов и смесей на их основе.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Виды учебной работы	Объём дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,41	51	38,25
в том числе в форме практической подготовки:	0,11	4	3
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,47	17	12,75
в том числе в форме практической подготовки:	0,11	4	3

Виды учебной работы	Объём дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Самостоятельная работа (СР):	2,59	93	69,75
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лекции	ПЗ	ЛР	СР
	Введение	1	0,5	0,5	—	—
1	Раздел 1. Сверхкритическое состояние вещества	14	2	2	—	10
1.1	Фазовые состояния	7	1	1	—	5
1.2	Сверхкритическое состояние вещества	7	1	1	—	5
2	Раздел 2. Сверхкритические технологии получения монолитных и жидких материалов	14	2	2	—	10
2.1	Технологии и физические основы получения монолитных и жидких материалов с использованием сверхкритических флюидов	7	1	1	—	5
2.2	Аппаратурное оформление технологий получения монолитных и жидких материалов с использованием сверхкритических флюидов	7	1	1	—	5
3	Раздел 3. Сверхкритические технологии получения дисперсных материалов	22	2	2	8	10
3.1	Технологии и физические основы получения дисперсных материалов с использованием сверхкритических флюидов	15	1	1	8	5
3.2	Аппаратурное оформление технологий получения дисперсных материалов с использованием сверхкритических флюидов	7	1	1	—	5
4	Раздел 4. Ёмкостные аппараты высокого давления для сверхкритических технологий	14	2	2	—	10
4.1	Основные типы и конструкции ёмкостных аппаратов высокого давления	7	1	1	—	5
4.2	Конструкционные материалы, применяемые для работы при высоких и сверхвысоких давлениях	7	1	1	—	5
5	Раздел 5. Контрольно-измерительные приборы для процессов, протекающих при высоких и сверхвысоких давлениях	15	1,5	1,5	—	12
5.1	Методы измерения высоких и сверхвысоких давлений	5	0,5	0,5	—	4
5.2	Измерение и регулировка расхода сжатой среды	5	0,5	0,5	—	4
5.3	Измерение температуры при высоком давлении	5	0,5	0,5	—	4

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лекции	ПЗ	ЛР	СР
6	Раздел 6. Вспомогательное оборудование и детали установок сверхкритических технологий	16	2	2	—	12
6.1	Методы создания давления при нормальных и высоких температурах	4	0,5	0,5	—	3
6.2	Нагревание при высоких давлениях	4	0,5	0,5	—	3
6.3	Запорно-регулирующая арматура установок высокого давления	4	0,5	0,5	—	3
6.4	Перемешивание и циркуляция под давлением	4	0,5	0,5	—	3
7	Раздел 7. Аналитические методы исследования систем при высоких давлениях	20	2,5	2,5	—	15
7.1	Методики исследований фазовых равновесий при высоких давлениях	4	0,5	0,5	—	3
7.2	Методы отбора проб и методы анализа	4	0,5	0,5	—	3
7.3	Определение сжимаемости газов и жидкостей	4	0,5	0,5	—	3
7.4	Методика измерения поверхностного натяжения на границе жидкость – газ	4	0,5	0,5	—	3
7.5	Оптические, рентгеновские и иные спектральные методы, электрические измерения	4	0,5	0,5	—	3
8	Раздел 8. Инструменты и методы моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий	28	2,5	2,5	9	14
8.1	Особенности моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий	3	0,5	0,5	—	2
8.2	Современные инструменты моделирования	3	0,5	0,5	—	2
8.3	Мультимасштабные подходы к моделированию	3	0,5	0,5	—	2
8.4	Моделирование многофазных систем при высоких давлениях	9,5	0,5	0,5	4,5	4
8.5	Модели турбулентных течений	9,5	0,5	0,5	4,5	4
	ИТОГО	144	17	17	17	93

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Краткий исторический очерк развития сверхкритических технологий и методов исследований систем при высоких и сверхвысоких давлениях. Современные области применения сверхкритических технологий. Цели и задачи дисциплины. Основные понятия и определения.

Раздел 1. Сверхкритическое состояние вещества. Что такое сверхкритическое состояние вещества. Фазовые диаграммы. Критическая точка. Свойства сверхкритических флюидов. Вещества, применяемые в качестве сверхкритических растворителей. Уравнения состояния вещества.

Раздел 2. Сверхкритические технологии получения монолитных и жидких материалов. Классификация технологий получения монолитных и жидких материалов. Основные конструкции технологических аппаратов и типовые технологические схемы. Режимы работы оборудования. Физические основы сверхкритических процессов получения монолитных и жидких материалов.

Раздел 3. Сверхкритические технологии получения дисперсных материалов. Классификация технологий получения дисперсных материалов. Основные конструкции технологических аппаратов и типовые технологические схемы. Режимы работы оборудования. Физические основы сверхкритических процессов получения дисперсных материалов.

Раздел 4. Ёмкостные аппараты высокого давления для сверхкритических технологий. Основные типы и конструкции ёмкостных аппаратов высокого давления. Конструкционные материалы, применяемые для работы при высоких и сверхвысоких давлениях.

Раздел 5. Контрольно-измерительные приборы для процессов, протекающих при высоких и сверхвысоких давлениях. Методы измерения высоких и сверхвысоких давлений. Измерение и регулировка расхода сжатой среды. Измерение температуры при высоком давлении.

Раздел 6. Вспомогательное оборудование и детали установок сверхкритических технологий. Методы создания давления при нормальных и высоких температурах. Сжатие газов. Сжатие жидкостей и твёрдых тел. Создание высоких давлений с одновременным приложением силы сдвига. Нагревание при высоких давлениях. Сжатие при низких температурах. Запорно-регулирующая арматура установок высокого давления. Затворы лабораторных аппаратов. Перемешивание и циркуляция под давлением. Общее оборудование лабораторий сверхкритических технологий.

Раздел 7. Аналитические методы исследования систем при высоких давлениях. Методики исследований фазовых равновесий при высоких давлениях: система жидкость – газ, система твёрдое тело – жидкость, система газ – газ, система твёрдое тело – газ. Методы отбора проб и методы анализа. Определение сжимаемости газов и жидкостей. Методика измерения поверхностного натяжения на границе жидкость – газ. Оптические, рентгеновские и иные спектральные методы, электрические измерения.

Раздел 8. Инструменты и методы моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий. Особенности моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий. Современные инструменты моделирования. Мультимасштабные подходы к моделированию. Моделирование многофазных систем при высоких давлениях. Модели турбулентных течений.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	Раздел дисциплины	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6	Раздел 7	Раздел 8
	Знать:								
1	основные типы процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов		+	+					
2	основные типы, конструкции и характеристики технологического оборудования для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов		+	+	+				
3	физические основы сверхкритических флюидов, позволяющие предсказывать свойства чистых сверхкритических флюидов, а также смесей на их основе	+	+	+					
4	типы, конструкции и особенности вспомогательного технологического оборудования и контрольно-измерительных приборов для систем, работающих под высоким и сверхвысоким давлением					+	+		
5	методики исследования фазовых равновесий при высоких давлениях в системах различной природы							+	
6	методы и подходы к моделированию процессов и аппаратов сверхкритических технологий								+
	Уметь:								
7	выбирать оборудование для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов	+	+	+	+				
8	рассчитывать параметры и режимы работы основного и вспомогательного оборудования сверхкритических технологий		+	+	+		+		
9	проводить исследования фазовых равновесий систем различной природы при высоких давлениях	+				+		+	
10	комплектовать установки, работающие при высоких давлениях, запорно-регулирующей арматурой и контрольно-измерительными приборами					+			
11	использовать современные аналитические методы для исследования свойств сверхкритических флюидов							+	
12	выбирать наиболее подходящие методы и инструменты для моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий								+
	Владеть:								
13	основами процессов получения и обработки материалов с использованием технологий	+	+	+					

№	Раздел дисциплины		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6	Раздел 7	Раздел 8
	сверхкритических флюидов									
14	современным инструментарием разработки и создания оборудования сверхкритических технологий					+				+
15	основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов			+	+	+	+	+		
16	современными знаниями в области сверхкритических флюидов и смесей на их основе		+						+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>										
17	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК								
18	ПК-1. Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области наноинженерии и решать их.	ПК-1.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения научных исследований в области профессиональной деятельности.	+	+	+	+	+	+	+	+
19	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	ПК-2.1 Знает основы процессов и технологий получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов.	+	+	+	+				
20	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	ПК-2.2 Умеет проводить измерения и контроль параметров технологических операций процессов производства наноматериалов.					+	+		
21	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных	ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов наноинженерии.							+	

№	Раздел дисциплины		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6	Раздел 7	Раздел 8
	наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.									
22	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.1 Знает основные методы обработки данных для анализа результатов исследований при получении функциональных и композиционных наноматериалов.							+	+
23	ПК-3. Способен использовать информационные технологии, методы математического моделирования и обработки данных для исследования, прогнозирования, расчетов структуры, свойств и процессов получения функциональных и композиционных наноматериалов	ПК-3.3 Владеет навыками математического моделирования для расчета основных параметров и масштабирования процессов получения функциональных и композиционных нанообъектов и наноструктурированных материалов и изделий из них								+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1 Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

Предусмотрены практические занятия обучающегося
магистратуры в объеме 17 акад. ч.

№	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1.1	Решение задач обработки фазовых диаграмм веществ	1,5
	1.2	Расчёт свойств чистых веществ и их смесей с использованием уравнений состояния и правил смешения	1
2	2.1	Расчёт материального и теплового баланса процесса получения монолитных и жидких материалов с использованием сверхкритических флюидов	1
	2.2	Создание технологических схем процесса получения монолитных и жидких материалов с использованием сверхкритических флюидов	1
3	3.1	Расчёт материального и теплового баланса процесса получения дисперсных материалов с использованием сверхкритических флюидов	1
	3.2	Создание технологических схем процесса получения дисперсных материалов с использованием сверхкритических флюидов	1
4	4.1	Расчёт толщины обечайки аппарата высокого давления	1
	4.2	Расчёт предельных напряжений конструкционных материалов	1
5	5.1	Подбор средств измерения давления	0,5
	5.2	Подбор средств измерения расхода	0,5
	5.3	Подбор средств измерения температуры	0,5
6	6.1	Расчёт насоса высокого давления	0,5
	6.2	Расчёт давления в аппарате, создаваемого при нагреве жидких и газообразных сред	0,5
	6.3	Расчёт проходного сечения игольчатого клапана	0,5
	6.4	Расчёт производительности циркуляционного насоса	0,5
7	7.1	Построение процессных кривых на диаграммах фазового состояния	0,5
	7.2	Расчёт конструкции пробоотборного штуцера	0,5
	7.3	Расчёт коэффициентов сжимаемости газов и жидкостей	0,5
	7.4	Расчёт коэффициента поверхностного натяжения по экспериментальным данным	0,5
	7.5	Обработка результатов спектрального анализа	0,5
8	8.1	Построение CAD-модели аппарата	0,5
	8.2	Построение расчётной сетки	0,5
	8.3	Расчёт течения сверхкритического флюида	0,5

№	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
	8.4	Построение модели многофазных систем в сверхкритическом состоянии	0,5
	8.5	Расчёт турбулентного течения сверхкритического флюида	0,5

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине *«Сверхкритические технологии в промышленности»*, а также способствует приобретению практических навыков проведения технологических процессов с использованием сверхкритических флюидов и составления математических моделей технологических процессов и аппаратов.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 40 баллов (максимально 10 баллов за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости. Общий рейтинг по дисциплине представлен далее в разделе 8.1.

Примеры лабораторных работ и модули, которые они охватывают

№	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	3	Лабораторная работа №1. Исследование фазового состояния многокомпонентной системы при переходе в сверхкритическое состояние	4
2	3	Лабораторная работа №2. Получение порошков на основе субмикронных частиц с использованием технологии быстрого расширения сверхкритических флюидов	4
3	8	Лабораторная работа №3. Моделирование процесса растворения веществ в сверхкритическом флюиде в аппарате проточного типа	4,5
4	8	Лабораторная работа №4. Моделирование турбулентных режима истечения сверхкритического флюида из сопла форсунки	4,5

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Учебной программой дисциплины *«Сверхкритические технологии в промышленности»* предусмотрена самостоятельная работа студента в объёме 93 акад. часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам;
- выполнение расчётно-графических работ согласно индивидуальному заданию;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы;
- подготовку к сдаче зачета и лабораторного практикума по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал,

законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

(РАЗДЕЛ ВЫПОЛНЕН В АВТОРСКОЙ РЕДАКЦИИ)

8.1 Примерная тематика реферативно-аналитической работы

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине *«Сверхкритические технологии в промышленности»* не предусмотрена.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольные работы (по одной контрольной работе по разделам 4 и 8). Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (3 семестр) составляет по 10 баллов за каждую. 40 баллов отводятся на лабораторные работы

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вариант 1

Задание 1. Химия сверхкритических жидкостей. Диаграмма состояния однокомпонентной системы. Критическое состояние и его особенности. Для бутанола $P(\text{кр.}) = 35,7$ атм., а $t(\text{кр.}) = 152,8$ °С. Оцените критический объем бутанола.

Задание 2. Составить тепловой баланс аппарата высокого давления проточного типа, используемого для получения субмикронных частиц. Внешний диаметр аппарата $\frac{3}{4}$ ", толщина стенки аппарата 0,08", высота аппарата 500 мм. Диоксид углерода подаётся со скоростью 100 нл/ч.

Вариант 2

Задание 1. Перечислить основные стадии процесса сверхкритической экстракции. Дать классификацию аппаратов, применяемых для экстракции.

Задание 2. Рассчитать удельную теплоёмкость и коэффициент теплопроводности сверхкритической смеси «диоксид углерода – этанол», находящихся при температуре 53°С и давлении 107 атм. Рассчитать коэффициенты диффузии компонентов смеси при указанных условиях.

Раздел 8. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вариант 1

Задание 1. Спектральные методы анализа состава многокомпонентных систем в сверхкритическом состоянии, применяемые в производственных процессах. Дать классификацию, указать области применения. Привести схемы аппаратного оформления.

Задание 2. Привести основные уравнения модификаций модели турбулентности к-ε. Указать особенности модификаций и их отличия.

Вариант 2

Задание 1. Методы расчёта коэффициентов диффузии для многокомпонентных систем в сверхкритическом состоянии.

Задание 2. На примере фазовой диаграммы системы «сверхкритический CO₂ – изопропанол» построить график проведения процесса сверхкритической сушки.

8.3 Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – зачёт с оценкой)

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 3 вопроса.

1 вопрос – 10 баллов, вопрос 2 – 15 баллов, вопрос 3 – 15 баллов.

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40 баллов.

8.3.1 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – зачёт с оценкой)

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины и содержит 3 вопроса.

1 вопрос – 10 баллов, вопрос 2 – 15 баллов, вопрос 3 – 15 баллов.

1. Фазовые диаграммы сверхкритического процесса сушки (для двух разных растворителей в золе).

2. Аппарат для проведения процесса сверхкритической сушки. Схема. Описание процесса сверхкритической сушки.

3. Объяснить процесс сверхкритической адсорбции. Схема движения потоков в реакторе.

4. Стадии процесса сверхкритической экстракции. Привести эскиз аппарата для процесса сверхкритической экстракции.

5. Привести эскиз аппарата для процесса сверхкритической сушки.

6. Привести эскиз аппарата для процесса сверхкритической адсорбции.

7. Привести эскиз аппарата для процесса сверхкритической экстракции.

8. Схема движения потоков в реакторе.

9. Основные уравнения для описания состояния системы под давлением. Сверхкритический флюид.

10. Сверхкритические процессы RESS, SAS.

11. Основные параметры ведения процесса сверхкритической сушки.

12. Основные стадии процесса сверхкритической адсорбции. Использование аэрогелей для доставки лекарственных средств.

13. Фазовая диаграмма диоксида углерода. Физический смысл линий на фазовой диаграмме. Критическое давление, критическая температура.

14. Основные этапы сверхкритической сушки. Механизмы массопереноса на каждом из этапов.

15. Физический смысл линий на фазовой диаграмме. Критическое давление, критическая температура.

16. Влияние температуры и давления на первый этап сверхкритической сушки.

17. Влияние температуры и давления на второй этап сверхкритической сушки.

18. Влияние расхода сушильного агента (сверхкритического диоксида углерода) на второй этап сверхкритической сушки.

19. Зависимость сверхкритической сушки от температуры и давления.

20. Вещества, используемые в качестве сверхкритических флюидов. Их характеристики.
21. Основные этапы сверхкритической адсорбции.
22. Параметры (температура, давление) проведения процесса сверхкритической адсорбции.
23. Сверхкритические флюиды и их характеристики.
24. Влияние параметров процесса на растворимость веществ.
25. Способ организации процесса сверхкритической адсорбции (периодический, непрерывный).
26. Массообменные процессы, протекающие при сверхкритической адсорбции.
27. Зависимость сверхкритической адсорбции от температуры и давления.
28. Основные этапы сверхкритической экстракции.
29. Механизмы массопереноса сверхкритической экстракции.
30. Методы интенсификации процесса сверхкритической экстракции.
31. Параметры (температура, давление) проведения процесса сверхкритической экстракции.
32. Зависимость сверхкритической экстракции от температуры и давления.
33. Равновесные фазовые диаграммы для двухкомпонентной системы «диоксид углерода–этиловый спирт» при различных температурах.
34. Равновесные фазовые диаграммы для двухкомпонентной системы «диоксид углерода–этиловый спирт» при различных температурах. Анализ фазовых диаграмм. Ведение процесса сверхкритической сушки.
35. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Запись уравнения. Физический смысл переменных входящих в уравнение.
36. Уравнение Пенга-Робинсона. Запись уравнения. Физический смысл переменных входящих в уравнение.
37. Физический смысл переменных входящих в уравнение Ван-дер-Ваальса.
38. Физический смысл переменных входящих в уравнение Пенга-Робинсона.
39. Сравнение конвективной сушки и сверхкритической сушки. Основные преимущества сверхкритической сушки.
40. Способы проведения сверхкритической сушки. Достоинства и недостатки каждого из способов.
41. Основные преимущества сверхкритической сушки.
42. Низкотемпературная сверхкритическая сушка.
43. Достоинства и недостатки способов проведения сверхкритической сушки.
44. Влияния расхода сверхкритического растворителя на этапы сушки.
45. Высокотемпературная сверхкритическая сушка.
46. Способ организации процесса сверхкритической сушки (периодический, непрерывный).
47. Периодический способ организации процесса сверхкритической сушки.
48. Непрерывный способ организации процесса сверхкритической сушки.
49. Аппаратурное оформление сверхкритической сушки. Основные узлы.
50. Контрольно-измерительные приборы и автоматика (КИПиА) в технологической схеме сверхкритической сушки.
51. Какие контрольно-измерительные приборы и автоматику (КИПиА) можно использовать в технологической схеме сверхкритической сушки.
52. Достоинства и недостатки различных способов проведения сверхкритической сушки.
53. Понятие сверхкритической адсорбции.
54. Применение технологии сверхкритической адсорбции.
55. Требования, предъявляемые к адсорбенту (пористому материалу) и к адсорбтиву при проведении сверхкритической адсорбции.

56. Преимущества использования сверхкритических флюидов для внедрения веществ в пористые материалы.
57. Преимущества использования сверхкритической адсорбции для создания композиций аэрогель-АФИ.
58. Аппаратурное оформление сверхкритической адсорбции. Основные узлы.
59. КИПиА в технологической схеме сверхкритической адсорбции.
60. Понятие сверхкритической экстракции.
61. Использование сорастворителей в сверхкритической экстракции.
62. Области применения сверхкритической экстракции.
63. Преимущества сверхкритической экстракции над классической экстракцией.
64. Основные отличия процесса сверхкритической сушки и сверхкритической экстракции.
65. Способы организации процесса сверхкритической экстракции.
66. Способ организации процесса сверхкритической экстракции при высоком содержании экстрагируемого вещества (проточный).
67. Способ организации процесса сверхкритической экстракции при низком содержании экстрагируемого вещества.
68. Способ организации процесса сверхкритической экстракции при высоком и низком содержании экстрагируемого вещества.
69. Аппаратурное оформление сверхкритической экстракции. Основные узлы.
70. Основные отличия аппаратурного оформления сверхкритической сушки и сверхкритической экстракции.
71. КИПиА технологической схемы сверхкритической экстракции.
72. Процессы микронизации в которых сверхкритический флюид выступает в качестве растворителя. Области применения.
73. Процесс быстрого расширения сверхкритического раствора (RESS).
74. Параметры (температура, давление) проведения процесса RESS.
75. Процессы быстрого расширения сверхкритического раствора в жидкий растворитель (RESOLV) и быстрого расширения сверхкритического раствора в воду (RESAS).
76. Параметры (температура, давление) проведения процессов RESAS и RESOLV.
77. Основные отличия процессов RESS и RESOLV.
78. Основные отличия процессов RESS и RESAS.
79. Преимущества RESOLV и RESAS над RESS.
80. Преимущества RESS над RESAS и RESOLV.
81. Недостатки RESAS и RESOLV на примере RESS.
82. Аппаратурное оформление процесса RESS. Основные узлы.
83. Аппаратурное оформление процессов RESAS и RESOLV. Основные узлы.
84. Отличия аппаратурного оформления процессов RESAS и RESOLV от RESS.
85. Процессы RESS и RESAS и их основные отличия.
86. Процессы микронизации в которых сверхкритический флюид выступает в качестве антирастворителя. Области применения.
87. Процесс осаждения в сверхкритическом антирастворителе (SAS).
88. Параметры (температура, давление) проведения процесса SAS.
89. Процесс осаждение в газофазном антирастворителе (GAS).
90. Параметры (температура, давление) проведения процесса GAS.
91. Получение частиц из газонасыщенного раствора методом PGSS.
92. Применение метода PGSS. Параметры (температура, давление) проведения процесса PGSS.
93. Параметры (температура, давление) проведения процесса PGSS.
94. Этапы моделирования сверхкритических процессов.

95. Построение геометрии виртуального аппарата.
96. Генерация и адаптация расчётной сетки.
97. Основные уравнения, используемые при расчётах сверхкритических процессов.
98. Уравнение сохранения энергии для процессов, протекающих в среде сверхкритического флюида.
99. Уравнение сохранения массы для процессов, протекающих в среде сверхкритического флюида.
100. Уравнение сохранения импульса.

8.4 Структура и пример билетов для зачёта с оценкой

Зачёт с оценкой по дисциплине проводится в 3 семестре и включает контрольные задания по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачёта с оценкой состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для зачёта с оценкой:

«Утверждаю зав.
кафедрой»
Зав. каф. ХФИ
(Должность, наименование кафедры)
_____ Н.В. Меньшутина
(Подпись) (И. О. Фамилия)
«__» _____ 20__ г.

Министерство науки и высшего образования РФ
Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева
Кафедра химического и фармацевтического
инжиниринга
28.04.02 Наноинженерия
Магистерская программа – «Функциональные и
композиционные наноматериалы, изделия из них»
Дисциплина «Сверхкритические технологии в
промышленности»

Билет № 1

1. Основные этапы сверхкритической адсорбции.
2. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Запись уравнения. Физический смысл переменных входящих в уравнение.
3. Процесс осаждения в сверхкритическом антирастворителе (SAS).

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1 Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Меньшутина Н.В., Смирнова И.В., Гуриков П.А. Аэрогели — новые наноструктурированные материалы: получение, свойства и биомедицинское применение: учебное пособие. – М.: РХТУ им. Менделеева, 2012. – 59 с.

Б. Дополнительная литература

1. Фишер М. Природа критического состояния. Москва. «Мир». – 1968. – 354 с.
2. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия. – 1985. – 448 с.
3. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. Москва. «Мир». – 1973. – 424 с.
4. Ма Ш. Современная теория критических явлений. Москва. «Мир». – 1978. – 304 с.
5. Жузе Т.П. Сжатые газы как растворители. Москва. «Наука». – 1974. – 111 с.

6. Жузе Т.П. Роль сжатых газов как растворителей. Москва. «Недра». – 1981. – 165 с.
7. Циклис Д.С. Техника физико-химических исследований при высоких и сверхвысоких давлениях. М.: Химия. – 1976.

9.2 Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Сверхкритические Флюиды: Теория и Практика», ISSN – 1992-8130;
- Журнал «The Journal of Supercritical Fluids», ISSN – 0896-8446;
- Журнал «Физика и техника высоких давлений», ISSN – 0868-5924;
- Журнал «High Pressure Phase Behaviour of Multicomponent Fluid Mixtures», ISBN – 978-0-444-88627-9;
- Журнал «High Pressure Liquids and Solutions», ISBN – 978-0-444-81946-8;
- Журнал «Computer Aided Chemical Engineering», ISSN – 1570-7946;
- Журнал «Computers and Chemical Engineering» ISSN – 0098-1354;
- Журнал «Drying Technology», ISSN – 1532-2300;

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет:

- Ресурсы ELSEVIER: www.sciencedirect.com.

9.3 Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций;
- конспекты лекций в формате *.pdf;
- банк вариантов контрольных работ – 50;
- банк вариантов лабораторных работ – 50;
- банк билетов для итогового контроля освоения дисциплины (зачёт с оценкой) – 50;
- предустановленное лицензионное программное обеспечение в компьютерном классе (Windows, Microsoft Office).

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. При этом первый пункт списка дополняется или заменяется на:

- доступ к групповым чатам (ЕИОС), к вебинарам (webinar.ru, zoom.us), онлайн-конференции, электронная почта.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Сверхкритические технологии в промышленности»* проводятся в форме практических занятий, лабораторных работ и самостоятельной работы обучающегося.

11.1 Оборудование, необходимое в образовательном процессе

На кафедре химического и фармацевтического инжиниринга имеется учебная аудитория для проведения лекций вместимостью не менее 30 человек, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащённые компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Лаборатории кафедры оснащены современным оборудованием: лабораторная установка для грануляции и покрытия Hüttlin (Bosch, Германия), лабораторная установка псевдоожиженного слоя Mini-Glatt (Германия), установка распылительной сушки Buchi Mini-Spray Dryer (Швейцария), изолятор компании SKAN AG (Швейцария), установка распылительной сушки Niro (Дания), лиофильная сушилка CoolSafe (Дания), стерилизующий ферментер/ биореактор Biostat Sartorius (Германия), установки собственной конструкции для проведения процессов в среде сверхкритических флюидов, тестер для проведения теста на растворение Sotax AT7 (Швейцария), спектрофотометр «Экрос» ПЭ-5400 (Россия), оптический микроскоп MicrosAustria (Австрия), вагоанализатор Axis Apg500 (Польша), многофункциональное устройство и др.

Материально-техническая база кафедры химического и фармацевтического инжиниринга постоянно обновляется и является достаточной для проведения необходимых лабораторных занятий.

11.2 Учебно-наглядные пособия

По дисциплине *«Сверхкритические технологии в промышленности»* доступны учебные материалы. Реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины в виде презентаций. Доступны комплексы лабораторных работ и требования к отчетам, варианты заданий, руководство по работе с оборудованием, электронный раздаточный материал к разделам курса.

11.3 Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства

На кафедре химического и фармацевтического инжиниринга имеется в достаточном количестве персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, USB-портами, принтерами, multifunctional устройствами и программными средствами; мультимедийное проекционное оборудование; веб-камеры; цифровой фотоаппарат; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет; беспроводная точка доступа в локальную сеть и сеть Интернет.

11.4 Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

Для реализации дисциплины *«Сверхкритические технологии в промышленности»* на кафедре химического и фармацевтического инжиниринга используются информационно-методические материалы: учебные пособия; электронные учебные пособия; электронные презентации к разделам лекционных курсов; учебно-методические разработки кафедр в электронном виде; видеоуроки к разделам дисциплин.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры химического и фармацевтического инжиниринга для магистрантов, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева, имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин, преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5 Перечень лицензионного программного обеспечения

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	24	Бессрочно
2.	Microsoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, MicrosoftOpenLicense, Номер лицензии 47837477	24	Бессрочно
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022,

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Сверхкритическое состояние вещества	<i>Знает:</i> физические основы сверхкритических флюидов, позволяющие предсказывать свойства чистых сверхкритических	Оценка на зачёте с оценкой

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
	флюидов, а также смесей на их основе. <i>Умеет:</i> выбирать оборудование для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов; проводить исследования фазовых равновесий систем различной природы при высоких давлениях. <i>Владеет:</i> основами процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов; современными знаниями в области сверхкритических флюидов и смесей на их основе.	
Раздел 2. Сверхкритические технологии получения монолитных и жидких материалов	<i>Знает:</i> основные типы процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов; основные типы, конструкции и характеристики технологического оборудования для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов; физические основы сверхкритических флюидов, позволяющие предсказывать свойства чистых сверхкритических флюидов, а также смесей на их основе. <i>Умеет:</i> выбирать оборудование для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов; рассчитывать параметры и режимы работы основного и вспомогательного оборудования сверхкритических технологий. <i>Владеет:</i> основами процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов; основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов.	Оценка на зачёте с оценкой
Раздел 3. Сверхкритические технологии получения дисперсных материалов	<i>Знает:</i> основные типы процессов получения и обработки материалов с использованием технологий	Оценка за лабораторные работы №1-2

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
	сверхкритических флюидов; основные типы, конструкции и характеристики технологического оборудования для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов; физические основы сверхкритических флюидов, позволяющие предсказывать свойства чистых сверхкритических флюидов, а также смесей на их основе. <i>Умеет:</i> выбирать оборудование для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов; рассчитывать параметры и режимы работы основного и вспомогательного оборудования сверхкритических технологий. <i>Владеет:</i> основами процессов получения и обработки материалов с использованием технологий сверхкритических флюидов; основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов.	Оценка на зачёте с оценкой
Раздел 4. Ёмкостные аппараты высокого давления для сверхкритических технологий	<i>Знает:</i> основные типы, конструкции и характеристики технологического оборудования для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов. <i>Умеет:</i> выбирать оборудование для проведения процессов с использованием технологий сверхкритических флюидов; рассчитывать параметры и режимы работы основного и вспомогательного оборудования сверхкритических технологий. <i>Владеет:</i> современным инструментарием разработки и создания оборудования сверхкритических технологий; основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов.	Оценка за контрольную работу №1 Оценка на зачёте с оценкой

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 5. Контрольно-измерительные приборы для процессов, протекающих при высоких и сверхвысоких давлениях	<i>Знает:</i> типы, конструкции и особенности вспомогательного технологического оборудования и контрольно-измерительных приборов для систем, работающих под высоким и сверхвысоким давлением. <i>Умеет:</i> проводить исследования фазовых равновесий систем различной природы при высоких давлениях; комплектовать установки, работающие при высоких давлениях, запорно-регулирующей арматурой и контрольно-измерительными приборами. <i>Владеет:</i> основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов.	Оценка на зачёте с оценкой
Раздел 6. Вспомогательное оборудование и детали установок сверхкритических технологий	<i>Знает:</i> типы, конструкции и особенности вспомогательного технологического оборудования и контрольно-измерительных приборов для систем, работающих под высоким и сверхвысоким давлением. <i>Умеет:</i> рассчитывать параметры и режимы работы основного и вспомогательного оборудования сверхкритических технологий. <i>Владеет:</i> основными навыками проектирования производств, использующих технологии сверхкритических флюидов.	Оценка на зачёте с оценкой
Раздел 7. Аналитические методы исследования систем при высоких давлениях	<i>Знает:</i> методики исследования фазовых равновесий при высоких давлениях в системах различной природы. <i>Умеет:</i> проводить исследования фазовых равновесий систем различной природы при высоких давлениях; использовать современные аналитические методы для исследования свойств сверхкритических флюидов. <i>Владеет:</i> современными знаниями в области сверхкритических флюидов и смесей на их основе.	Оценка на зачёте с оценкой
Раздел 8. Инструменты и методы моделирования	<i>Знает:</i> методы и подходы к моделированию процессов и	Оценка за лабораторные

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
процессов и аппаратов сверхкритических технологий	аппаратов сверхкритических технологий. <i>Умеет:</i> выбирать наиболее подходящие методы и инструменты для моделирования процессов и аппаратов сверхкритических технологий. <i>Владеет:</i> современным инструментарием разработки и создания оборудования сверхкритических технологий.	работы №3-4 Оценка за контрольную работу №2 Оценка на зачёте с оценкой

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Сверхкритические технологии в промышленности»
основной образовательной программы – программа магистратуры
по направлению подготовки 28.04.02 Наноинженерия,
магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»
Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДЕНО»

на заседании Ученого совета
протокол № 1 от «29» августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Хеометрика наносистем»**

Направление подготовки 28.04.02 Наноинженерия

**Магистерская программа – «Функциональные и композиционные
наноматериалы, изделия из них»**

Квалификация «магистр»

Москва 2024

Программа составлена профессором кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, д.т.н., доцентом Гордиенко М.Г.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химического и фармацевтического инжиниринга РХТУ им. Д.И. Менделеева «29» августа 2024 г., протокол №12.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.02 Нанотехнологии** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Химического и фармацевтического инжиниринга** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Хемометрия наносистем»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 «Дисциплины (модули)» учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области «Математика», «Аналитическая химия и физико-химические методы анализа», «Основы кибернетики и системного анализа химико-технологических процессов».

Цель дисциплины «Хемометрия наносистем» – овладение магистрантами структурными методами и алгоритмами обработки больших массивов экспериментальных данных, в том числе многомерного статистического анализа, оптимизации аналитической информации в области нанотехнологий для химической, химико-фармацевтической и биотехнологических отраслей промышленности и медицины.

Задачи дисциплины:

- освоение магистрантами специфики методов обработки многомерных данных, поступающих с современного аналитического оборудования, применяемого при создании нанообъектов и их целевом использовании;
- приобретение практических навыков выбора адекватных методов анализа и обработки экспериментальной информации, поступающей в результате эксплуатации современного оборудования и приборов, используемых для определения свойств нанообъектов.

Дисциплина **«Хемометрия наносистем»** преподается в 1 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового, теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации.	– Химическое, химико-технологическое производство – Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	ПК-1 Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области реализации энерго- и ресурсосбережения и решать их.	ПК-1.3 Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	Профессиональный стандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)
Выполнение фундаментальных и прикладных работ поискового,	- Химическое, химико-технологическое производство	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и	ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований	40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
теоретического и экспериментального характера с целью определения технических характеристик новой техники, а также комплекса работ по разработке технологической документации	- Сквозные виды профессиональной деятельности в промышленности (в сфере организации и проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химического и химико-технологического производства).	свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении	в области материалов наноинженерии	приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 04.03.2014 № 121 н, Обобщенная трудовая функция С. Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок. С /01.6. Осуществление научного руководства проведением исследований по отдельным задачам (уровень квалификации – 6)

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- предмет и метод хемометрики;
- основы теории и методы измерений;
- методы обнаружения и обработки сигналов;
- смысл операции градуирования и применяемые методы;
- основные свойства корреляционной матрицы,
- структурные методы регрессионного анализа;
- назначение стохастического факторного анализа, устойчивость статистического оценивания;
- методы разложения сложных сигналов на простые;
- методы распознавания образов, кластерного анализа.

Уметь:

- интерпретировать результаты измерений, оценивать их погрешность, формировать матрицы данных;
- выполнять статистическую обработку информации;
- выбирать адекватный метод градуирования и применять калибровочные кривые в химическом анализе;
- разрабатывать и практически применять алгоритмы обработки информации;
- разрабатывать и практически применять алгоритмы различных вариантов факторного анализа;
- определять сложность сигналов и выполнять их разрешение;
- разрабатывать и применять алгоритмы автоматической классификации.

Владеть:

- методами эксплуатации современного информационного оборудования для обработки многомодальных (многомерных) данных;
- практикой применения пакетов прикладных программ по изученной дисциплине.

3. ОБЪЁМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Виды учебной работы	Объём дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,88	68	51
в том числе в форме практической подготовки:	0,11	4	3
Лекции	0,47	17	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,47	17	12,75
Лабораторные работы (ЛР)	0,94	34	25,5
в том числе в форме практической подготовки:	0,11	4	3
Самостоятельная работа (СР):	2,12	76	57
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№	Раздел дисциплины	Акад. часов				
		Всего	Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
	Введение	3	0,5	0,5	2	–
1.	Раздел 1. Обнаружение и обработка сигналов. Проекционные методы анализа данных.	27,5	2,75	2,75	4	18
1.1	Обнаружение аналитических сигналов	7,5	0,75	0,75	–	6
1.2	Обработка сигналов	8	1	1	–	6
1.3	Проекционные методы анализа данных: МГК и МПЛС	12	1	1	4	6
2.	Раздел 2. Градуирование (калибровка).	41	5,5	5,5	10	20
2.1	Постановка задачи градуирования и подготовка данных	7	1	1	–	5
2.2	Классическая калибровка	12	1,5	1,5	4	5
2.3	Обратная калибровка	12	1,5	1,5	4	5
2.4	Калибровка на латентных переменных	10	1,5	1,5	2	5
3.	Раздел 3. Классификация.	33,5	3,75	3,75	8	18
3.1	Постановка задачи классификации и подготовка данных	5,5	0,75	0,75	–	4
3.2	Классификация с учителем	14	1,5	1,5	4	7
3.3	Классификация без учителя	14	1,5	1,5	4	7
4.	Раздел 4. Разрешение многомерных кривых.	39	4,5	4,5	10	20
4.1	Постановка задачи, условия разрешимости, особенности хроматографических и кинетических типов данных	9,5	0,75	0,75	2	6

№	Раздел дисциплины	Акад. часов				
		Всего	Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Самостоятельная работа
4.2	Факторный анализ	14,5	1,75	1,75	4	7
4.3	Итерационные методы	14,5	1,75	1,75	4	7
	ИТОГО	144	17	17	34	76

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Предмет и методы хемометрики в рамках аналитических методов, используемых в химической технологии, биотехнологии и нефтехимии. Цели и задачи курса. Методические рекомендации студентам.

Раздел 1. Обнаружение и обработка сигналов. Проекционные методы анализа данных.

1.1 Обнаружение аналитических сигналов. Связь аналитического сигнала с измеряемой физической характеристикой нанообъектов. Обнаружение сигналов аналита и фона. Предел обнаружения. Точечное и интервальное оценивание предела обнаружения сигнала. Проверка гипотез об отличии сигнала аппарата от сигнала фона. Определение погрешности обнаружения сигнала аналита по неравенству Чебышева. Непараметрические критерии. Критерий Вилкоксона.

1.2 Обработка сигналов. Регрессионный анализ как основной метод обработки сигналов. Методы наименьших квадратов и максимального правдоподобия. Методы увеличения отношения «сигнал/шум»: фильтрация и модуляция сигналов. Спектральный анализ: быстрое преобразование Фурье, преобразование Адамара.

1.3 Проекционные методы анализа данных: МГК и МПЛС. Изучение проекционных методов анализа: метод главных компонент (МГК) и метод проекции на латентные структуры (МПЛС). Матрицы счетов, нагрузок и остатков. Требования к матрице исходных данных. Алгоритм МГК и МПЛС. Анализ результатов, полученных проекционными методами.

Раздел 2. Градуирование (калибровка).

2.1 Постановка задачи градуирования и подготовка данных. Постановка задачи градуировки при определении характеристик промышленных нанообъектов. Линейная и нелинейная градуировка. Калибровка и проверка, критерии оценки качества калибровки. Неопределенность, точность и воспроизводимость. Проблемы недооценки и переоценки. Проблема с мультиколлинеарностью при многомерной калибровке. Требования к анализируемым данным.

2.2 Классическая калибровка. Калибровка по одному каналу (однофакторная). Метод Фирордта на примере анализа спектров. Непрямая калибровка.

2.3 Обратная калибровка. Метод множественной линейной регрессии. Метод пошаговой калибровки как способ снижения переоценки.

2.4 Калибровка на латентных переменных. Применение проекционных методов, как инструмента градуирования. Определение эффективной размерности многомерных данных. Анализ взаимоотношений образцов, содержащих нанообъекты. Исследование роли переменных. Регрессия на латентных переменных и ее практическое применение. Регрессия на главные компоненты.

Раздел 3. Классификация.

3.1 Постановка задачи классификации и подготовка данных. Постановка задачи классификации: обучение с учителем и без. Ошибка классификации. Рост сложности задачи с ростом числа переменных. Подготовка данных.

3.2 Классификация с учителем. Методы классификации с учителем: линейный дискриминантный анализ, квадратичный дискриминантный анализ, метод PLS дискриминации, формальное независимое моделирование аналогий классов, метод k ближайших соседей.

3.3 Классификация без учителя. Применение метода главных компонент для классификации образцов. Кластеризация с помощью K-средних.

Раздел 4. Разрешение многомерных кривых.

4.1 Постановка задачи, условия разрешимости, особенности хроматографических и кинетических типов данных. Постановка задачи разрешения многомерных кривых. Проблема неоднозначности решения и условия разрешимости. Особенности данных различного типа. Применение метода главных компонент для

оценки числа химических компонентов для поиска решения задачи разрешения кривых и для создания основы для факторного анализа.

4.2 Факторный анализ. Шкалирующие и вращающие преобразования. Прокрустов анализ. Эволюционный факторный анализ. Оконный факторный анализ.

4.3 Итерационные методы. Итерационный целевой факторный анализ. Метод чередующихся наименьших квадратов. Кинетическое моделирование спектральных данных.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	<i>Знать:</i>				
1	предмет и методы хемометрики	+	+	+	+
2	основы теории и методы измерений	+			
3	методы обнаружения и обработки сигналов	+	+		+
4	смысл операции градуирования и применяемые методы		+		
5	основные свойства корреляционной матрицы		+		
6	структурные методы регрессионного анализа		+		
7	назначение стохастического факторного анализа, устойчивость статистического оценивания				+
8	методы разложения сложных сигналов на простые				+
9	методы распознавания образов, кластерного анализа			+	
	<i>Уметь:</i>				
10	интерпретировать результаты измерений, оценивать их погрешность, формировать матрицы данных	+	+	+	+
11	выполнять статистическую обработку информации	+	+	+	+
12	выбирать адекватный метод градуирования и применять калибровочные кривые в химическом анализе		+	+	+
13	разрабатывать и практически применять алгоритмы обработки информации		+	+	+
14	разрабатывать и практически применять алгоритмы различных вариантов факторного анализа				+
15	определять сложность сигналов и выполнять их разрешение			+	
16	разрабатывать и применять алгоритмы автоматической классификации	+	+	+	+
	<i>Владеть:</i>				
17	методами эксплуатации современного информационного оборудования для обработки многомодальных (многомерных) данных		+	+	+
18	практикой применения пакетов прикладных программ по изученной дисциплине	+	+	+	+

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК				
19	ПК-1 Способен формулировать научно-исследовательские задачи в области реализации энерго- и ресурсосбережения и решать их.	ПК-1.3 Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации и представления результатов эксперимента, навыками подготовки научно-технических отчетов.	+	+	+	+
20	ПК-2. Способен проводить теоретические и аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов, осуществлять измерения и контроль параметров процессов при их получении.	ПК-2.3 Владеет навыками анализа результатов аналитических и теоретических исследований в области материалов нанотехнологии.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1 Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Подготовка данных. Вычислительные алгоритмы для проекционных методов (МГК, МПЛС)	3,25
2	2	Вычислительные алгоритмы для решения задач градуирования. Критерии для проверки моделей	5,5
3	3	Подготовка данных. Вычислительные алгоритмы для решения задач классификации с учителем и без	3,75
4	4	Вычислительные алгоритмы для реализации методов разрешения многомерных кривых	4,5

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине *«Хеометрика наносистем»*, а также способствует приобретению практических навыков в области масштабирования и трансфера технологий.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 10 баллов (максимально 1,25 балла за каждую работу). Количество работ и баллов за каждую работу может быть изменено в зависимости от их трудоемкости.

№	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1	Введение. Знакомство с программным обеспечением (возможно использование следующего ПО: MS Excel, Mathlab, Octave, Ststistica). Реализация операций матричных вычислений, статистических функций, специальных функций в зависимости от используемого в процессе обучения ПО	2
2	1	Реализация проекционных методов анализа данных с использованием ПО на тестовом примере	4
3	2	Реализация методов классической и обратной калибровки данных с использованием ПО на тестовом примере	4
4	2	Реализация метода калибровки регрессией на главные компоненты и на латентных переменных с использованием ПО на тестовом примере	6
5	3	Реализация методов классификации с учителем с использованием ПО на тестовом примере	4
6	3	Реализация методов классификации с (продолжение) и без учителя с использованием ПО на тестовом примере	4
7	4	Реализация методов факторного анализа для разрешения многомерных кривых с использованием ПО на тестовом примере	6
8	4	Реализация итерационных методов факторного анализа для разрешения многомерных кривых с использованием ПО на тестовом примере	4

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины «*Хеометрика наносистем*» предусмотрена самостоятельная работа студента магистратуры в объеме 76 акад. ч. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче зачета с оценкой (1 семестр) и лабораторного практикума (1 семестр) по дисциплине «*Хеометрика наносистем*».

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

(РАЗДЕЛ ВЫПОЛНЕН В АВТОРСКОЙ РЕДАКЦИИ)

8.1 Примерная тематика реферативно-аналитической работы

Дисциплиной «*Хеометрика наносистем*» не предусмотрено выполнение реферативно-аналитической работы.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Текущий контроль приобретения практических навыков при выполнении лабораторных работ проверяется путем выдачи заданий для самостоятельной работы. Предусмотрено 5 самостоятельных работ. Работы выполняются во время аудиторных занятий каждым студентом индивидуально. За каждую работу студент может максимально получить 8 баллов. Варианты работы 1 отличаются только выдаваемыми в электронном виде исходными данными. Варианты работы 2-5 отличаются как исходными данными, так и используемыми методами хеометрического анализа данных. В этом случае варианты распределяются в случайном порядке.

Пример самостоятельной работы №1

1. Считать данные из файла.
2. Отобразить данные на boxplot диаграмме, сохранить диаграмму как рисунок, вставить в текстовый редактор и добавить выводы о данных.
3. Провести нормирование данных и отобразить нормированные данные на boxplot диаграмме; сохранить диаграмму как рисунок, вставить в текстовый редактор и добавить выводы о данных.
4. Произвести обработку данных, используя метод главных компонент.
5. Вставить в текстовый редактор таблицу с коэффициентами и проанализировать первые 4-е компоненты на предмет того, какие именно факторы вносят

наибольший вклад в компоненты; подтвердить выводы графиками счетов, выделив на них группы.

6. Построить проекции факторных нагрузок в пространстве:

- 1-2 компонент;
- 2-3 компонент;
- 1 и 3 компонент;
- 1-3 компонент.

и провести анализ полученных графиков, а именно, указать наличие и отсутствие прямых и обратных зависимостей между рассматриваемыми значениями; результаты и выводы внести в текстовый файл.

Факторы на графиках должны быть подписаны!

7. Построить диаграмму Парето и по ней сделать вывод о том, сколько компонент достаточно для описания 50 %, 80 % и 90 % дисперсии.

8. Отправьте отчет преподавателю на указанный электронный адрес.

Примеры самостоятельной работы №2

Вариант 1

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
 - ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)
 - ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)
 - lambda – вектор, содержащий длины волн
 - PureA – чистый спектр для вещества А
 - PureB – чистый спектр для вещества Б
 - SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
 - SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
2. Постройте график чистых спектров для веществ А и Б
3. Используя метод одноканальной калибровки определите коэффициенты уравнений калибровки отдельно для вещества А и отдельно для вещества Б:
где Y – спектр; X – концентрация. Возьмите для вещества А канал 30; для вещества Б – канал 90. Используйте для расчета в матлаб функцию polyfit. Сохраните значения констант в файл отчета.
4. Рассчитайте прогнозируемые значения интенсивности (спектра) для каналов 30 и 90, используя в матлаб функцию polyval. Отобразите графики «измерено-предсказано» для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.
5. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций используя выражение:
Отобразите графики «измерено-предсказано» для значений концентрация для двух веществ для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.
6. Рассчитайте критерии (используйте значения концентраций) и сохраните их в файл отчета: полную дисперсию остатков, объясненную дисперсию остатков, стандартную ошибку и коэффициент корреляции для значений концентраций.
7. В файле отчета сделайте вывод о полученных результатах. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 2

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
 - ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)

- ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: C_A и C_B)
 - lambda – вектор, содержащий длины волн
 - PureA – чистый спектр для вещества А
 - PureB – чистый спектр для вещества Б
 - SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
 - SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
2. Постройте график чистых спектров для веществ А и Б
 3. Используя метод Фирарда определите коэффициенты уравнения калибровки:
где Y – значения спектров, X – значения концентраций.
При расчетах используйте следующие каналы: 30 для вещества А и 90 для вещества Б. Полученные значения внесите в файл отчета.
 4. Рассчитайте прогнозируемые значения интенсивности (спектра) для каналов 30 и 90 для обучающих и тестовых выборок, используя выражение:
Отобразите графики «измерено-предсказано» для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.
 5. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для обучающих и тестовых выборок, используя выражение:
Отобразите графики «измерено-предсказано» для значений концентрация для двух веществ для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.
 6. Рассчитайте критерии (используйте значения концентраций) и сохраните их в файл отчета: полную дисперсию остатков, объясненную дисперсию остатков, среднеквадратичные остатки калибровки, величины смещения, стандартную ошибку и коэффициент корреляции для значений концентраций.
 7. В файле отчета сделайте вывод о полученных результатах. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 3

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
 - ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: C_A и C_B)
 - ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: C_A и C_B)
 - lambda – вектор, содержащий длины волн
 - PureA – чистый спектр для вещества А
 - PureB – чистый спектр для вещества Б
 - SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
 - SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
2. Постройте график чистых спектров для веществ А и Б
3. Используя метод не прямой калибровки, определите коэффициенты уравнения калибровки: где Y – значения спектров, X – значения концентраций. Полученные значения внесите в файл отчета.
4. Рассчитайте прогнозируемые значения спектра для обучающих и тестовых выборок, используя выражение:
Отобразите графики экспериментальных и рассчитанных спектров для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.

5. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для обучающих и тестовых выборок, используя выражение:

Отобразите графики «измерено-предсказано» для значений концентрация для двух веществ для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.

6. Рассчитайте критерии (используйте значения концентраций) и сохраните их в файл отчета: полную дисперсию остатков, объясненную дисперсию остатков, среднеквадратичные остатки калибровки, величины смещения, стандартную ошибку и коэффициент корреляции для значений концентраций.

7. В файле отчета сделайте вывод о полученных результатах. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 4

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
 - ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)
 - ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)
 - lambda – вектор, содержащий длины волн
 - PureA – чистый спектр для вещества А
 - PureB – чистый спектр для вещества Б
 - SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
 - SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
2. Постройте график чистых спектров для веществ А и Б
3. Используя метод множественной линейной регрессии, определите коэффициенты уравнения калибровки: где Y – значения концентраций, X – значения спектров.

Перед расчетом определите число каналов. Возьмите требуемое количество каналов, начиная с 15 с шагом 10. Полученные значения внесите в файл отчета.

4. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для обучающих и тестовых выборок, используя выражение:

Отобразите графики экспериментальных и рассчитанных спектров для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.

5. Рассчитайте критерии (используйте значения концентраций) и сохраните их в файл отчета: полную дисперсию остатков, объясненную дисперсию остатков, среднеквадратичные остатки калибровки, величины смещения, стандартную ошибку и коэффициент корреляции для значений концентраций.

6. В файле отчета сделайте вывод о полученных результатах. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 5

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
 - ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)
 - ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)
 - lambda – вектор, содержащий длины волн
 - PureA – чистый спектр для вещества А
 - PureB – чистый спектр для вещества Б
 - SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)

- SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
- 2. Постройте график чистых спектров для веществ А и Б
- 3. Используя пошаговый метод множественной калибровки определите коэффициенты для уравнения калибровки для вещества А: где Y – концентрация вещества А; X – значение интенсивности (спектра) для выбранного(ых) канала(ов).

Возьмите для вещества А следующие варианты каналов (всего 5 расчетов):

- a. 24
- b. 24 и 86
- c. 24, 86, 11
- d. 24, 86, 11, 30
- e. 24, 86, 11, 30, 55

Внесите в файл отчета полученные значения коэффициентов.

4. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для 5 вариантов из п.3 по обучающей выборке и тестовой выборке, используя в матлаб функцию `polyval`. Внесите полученные значения в файл отчета.

5. Рассчитайте среднеквадратичные остатки для обучающей и тестовой выборки (используйте значения концентраций). Отобразите зависимости среднеквадратичных остатков для обучающей и тестовой выборок от числа взятых каналов. Сохраните график в файл отчета. Добавьте вывод о том, сколько каналов необходимо использовать для калибровки.

6. Для выбранного числа каналов отобразить графики «измерено-предсказано» по значениям концентраций для обучающей и тестовой выборок.

7. В файле отчета сделайте вывод о полученных результатах. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. В теме письма укажите ФИО, группу.

Примеры самостоятельной работы №3

Вариант 1

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
 - ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: C_a и C_b)
 - ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: C_a и C_b)
 - λ – вектор, содержащий длины волн
 - PureA – чистый спектр для вещества А
 - PureB – чистый спектр для вещества Б
 - SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
 - SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)
2. Найдите главные компоненты, используя обучающую выборку, и отобразите результаты на графиках счетов и нагрузок. Сохраните графики в файл отчета. Проанализируйте их.
3. Используя метод проекции на главные компоненты постройте по обучающей выборке уравнение калибровки для вещества А. Ограничьтесь первыми 4 главными компонентами.
4. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для обучающей и тестовой выборок. Отобразите графики «измерено-предсказано» для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.
5. Рассчитайте критерий среднеквадратичного отклонения для всех 4-х вариантов из обучающей выборки и из тестовой выборки. Отобразите результаты в форме гистограмм (команда `bar`). Сохраните графики в файл отчета.

6. Сделайте выводы по полученным данным. Сколько главных компонент необходимо использовать для калибровки? Обоснуйте ответ. На какой из выборок точность прогноза выше? Обоснуйте.

7. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 2

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
– ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)

– ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)

– lambda – вектор, содержащий длины волн

– PureA – чистый спектр для вещества А

– PureB – чистый спектр для вещества Б

– SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)

– SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)

2. Постройте проекции на латентные структуры по ВАРИАНТУ 1 (отдельно для вещества А), используя обучающую выборку, и отобразите результаты на графиках счетов и нагрузок. Сохраните графики в файл отчета. Проанализируйте их.

3. Постройте по обучающей выборке уравнение калибровки для вещества А. Ограничьтесь первыми 4 главными компонентами.

4. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для обучающей и тестовой выборок. Отобразите графики «измерено-предсказано» для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.

5. Рассчитайте критерий среднеквадратичного отклонения для всех 4-х вариантов из обучающей выборки и из тестовой выборки. Отобразите результаты в форме гистограмм (команда bar). Сохраните графики в файл отчета.

6. Сделайте выводы по полученным данным. Сколько главных компонент необходимо использовать для калибровки? Обоснуйте ответ. На какой из выборок точность прогноза выше? Обоснуйте.

7. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 3

1. Загрузите данные в матлаб из файла GradWork1. Ознакомьтесь с данными:
– ConcSpectrStudy – значение концентраций для образцов из обучающей выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)

– ConcSpectrTest – значение концентраций для образцов из тестовой выборки (каждая строка содержит две концентрации: Ca и Cб)

– lambda – вектор, содержащий длины волн

– PureA – чистый спектр для вещества А

– PureB – чистый спектр для вещества Б

– SpectrStudy – значения спектров для образцов из обучающей выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)

– SpectrTest – значения спектров для образцов из тестовой выборки (каждый столбец соответствует спектру 1 смеси)

2. Постройте проекции на латентные структуры по ВАРИАНТУ 2 (используйте данные и для вещества А и для вещества Б одновременно), используя

обучающую выборку, и отобразите результаты на графиках счетов и нагрузок. Сохраните графики в файл отчета. Проанализируйте их.

3. Постройте по обучающей выборке уравнения калибровки для веществ А и Б. Ограничьтесь первыми 4 главными компонентами.

4. Рассчитайте прогнозируемые значения концентраций для обучающей и тестовой выборок. Отобразите графики «измерено-предсказано» для обучающей и тестовой выборок. Сохраните графики в файл отчета.

5. Рассчитайте критерий среднеквадратичного отклонения для всех 4-х вариантов из обучающей выборки и из тестовой выборки. Отобразите результаты в форме гистограмм (команда bar). Сохраните графики в файл отчета.

6. Сделайте выводы по полученным данным. Сколько главных компонент необходимо использовать для калибровки? Обоснуйте ответ. На какой из выборок точность прогноза выше? Обоснуйте.

7. Отправьте отчет на электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Примеры самостоятельной работы № 4

Вариант 1

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work2. Ознакомьтесь с данными:
 - X – значение признаков объектов
 - Cl – перечень классов, к которому относится тот или иной объект
2. Проведите классификацию, используя метод k-средних. Рассчитайте 8 циклов. Отобразите полученные на каждом шаге классы и центроиды на графиках в координатах

«Признак 1 – Признак 2» и «Признак 3- Признак 4». Полученные диаграммы сохраните в отчет, дайте пояснения.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 2

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work1. Ознакомьтесь с данными:
 - Xs и Xt – значение признаков объектов из обучающей и тестовой выборки соответственно;
 - Cls b Clt – номера классов, к которым принадлежат объекты из обучающей и тестовой выборок соответственно.

Внимание: обучающая выборка содержит по 38 объектов каждого класса, тестовая выборка содержит по 9 объектов каждого класса.

2. Классификацию проведите, используя метод k-ближайших соседей. Число соседей примите равное 5. Отобразите в отчете в табличной форме данные к какому классу были отнесены образцы из тестовой выборки и к какому классу они принадлежат на самом деле. Сделайте выводы из работы.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 3

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work1. Ознакомьтесь с данными:
 - Xs и Xt – значение признаков объектов из обучающей и тестовой выборки соответственно;
 - Cls b Clt – номера классов, к которым принадлежат объекты из обучающей и тестовой выборок соответственно.

Внимание: обучающая выборка содержит по 38 объектов каждого класса, тестовая выборка содержит по 9 объектов каждого класса.

2. Классификацию проведите для класса 2, используя метод SIMCA. Примите точность равной 0,95. Отобразите в отчете в табличной форме данные к какому классу были отнесены образцы из тестовой выборки и к какому классу они принадлежат на самом деле. Сделайте выводы из работы.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 4

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work1. Ознакомьтесь с данными:
– X_s и X_t – значение признаков объектов из обучающей и тестовой выборки соответственно;

– Cl_s и Cl_t – номера классов, к которым принадлежат объекты из обучающей и тестовой выборок соответственно.

Внимание: обучающая выборка содержит по 38 объектов каждого класса, тестовая выборка содержит по 9 объектов каждого класса.

2. Классификацию проведите для класса 3, используя метод SIMCA. Примите точность равной 0,95. Отобразите в отчете в табличной форме данные к какому классу были отнесены образцы из тестовой выборки и к какому классу они принадлежат на самом деле. Сделайте выводы из работы.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 5

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work1. Ознакомьтесь с данными:
– X_s и X_t – значение признаков объектов из обучающей и тестовой выборки соответственно;

– Cl_s и Cl_t – номера классов, к которым принадлежат объекты из обучающей и тестовой выборок соответственно.

Внимание: обучающая выборка содержит по 38 объектов каждого класса, тестовая выборка содержит по 9 объектов каждого класса.

2. Классификацию проведите, используя метод PLS-DA. Результаты разделения на классы обучающей и тестовой выборки отобразите графически. Включите диаграммы в отчет. Проанализируйте, правильно ли были отнесены данные из обучающей и тестовой выборок к классам. Сделайте выводы из работы.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 6

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work1. Ознакомьтесь с данными:
– X_s и X_t – значение признаков объектов из обучающей и тестовой выборки соответственно;

– Cl_s и Cl_t – номера классов, к которым принадлежат объекты из обучающей и тестовой выборок соответственно.

Внимание: обучающая выборка содержит по 38 объектов каждого класса, тестовая выборка содержит по 9 объектов каждого класса.

2. Классификацию проведите, используя метод QDA. Результаты разделения на классы обучающей и тестовой выборки отобразите графически. Включите диаграммы в отчет. Проанализируйте, правильно ли были отнесены данные из обучающей и тестовой выборок к классам. Сделайте выводы из работы.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 7

1. Загрузите данные в матлаб из файла Work1. Ознакомьтесь с данными:
 - X_s и X_t – значения признаков объектов из обучающей и тестовой выборки соответственно;
 - Cls и Clt – номера классов, к которым принадлежат объекты из обучающей и тестовой выборок соответственно.

Внимание: обучающая выборка содержит по 38 объектов каждого класса, тестовая выборка содержит по 9 объектов каждого класса.

2. Классификацию проведите, используя метод LDA. Предварительно переведите данные в пространство главных компонент. В дальнейших расчетах используйте первые 2 компонента. Отобразите в отчете в табличной форме данные к какому классу были отнесены образцы из тестовой выборки и к какому классу они принадлежат на самом деле. Проанализируйте, правильно ли были отнесены данные из обучающей и тестовой выборок к классам. Сделайте выводы из работы.

3. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Примеры самостоятельной работы № 5

Вариант 1

1. Загрузите данные в матлаб из файла WorkMCR. Ознакомьтесь с данными:
 - A_t , B_t – концентрационные кривые для чистых веществ, $time$ – вектор времени
 - A_s , B_s – спектры чистых веществ, $lambda$ – вектор длин волн
 - X – данные о смеси
2. Примените к данным метод МГК, рассчитайте сингулярные значения для разного числа компонент. Отобразите график HELP и график сингулярных значений. Сделайте и обоснуйте вывод о количестве чистых веществ в анализируемой смеси.
3. Используя прокрустов анализ проведите разрешение многомерных данных. Отобразите графически полученные концентрационные зависимости чистых веществ и чистых спектров относительно имеющихся истинных данных.
4. Оформите отчет. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 2

1. Загрузите данные в матлаб из файла WorkMCR. Ознакомьтесь с данными:
 - A_t , B_t – концентрационные кривые для чистых веществ, $time$ – вектор времени
 - A_s , B_s – спектры чистых веществ, $lambda$ – вектор длин волн
 - X – данные о смеси
2. Методом эволюционного факторного анализа определите концентрационные окна.
3. Используя оконный факторный анализ проведите разрешение многомерных данных. Отобразите графически полученные концентрационные зависимости чистых веществ и чистых спектров относительно имеющихся истинных данных.
4. Оформите отчет. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 3

1. Загрузите данные в матлаб из файла WorkMCR. Ознакомьтесь с данными:
 - A_t , B_t – концентрационные кривые для чистых веществ, $time$ – вектор времени
 - A_s , B_s – спектры чистых веществ, $lambda$ – вектор длин волн
 - X – данные о смеси
2. Методом эволюционного факторного анализа определите концентрационные окна.
3. Используя итерационный целевой факторный анализ проведите разрешение многомерных данных. Отобразите графически полученные концентрационные зависимости чистых веществ и чистых спектров относительно имеющихся истинных данных.
4. Оформите отчет. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

Вариант 4

1. Загрузите данные в матлаб из файла WorkMCR. Ознакомьтесь с данными:
 - A_t , B_t – концентрационные кривые для чистых веществ, $time$ – вектор времени
 - A_s , B_s – спектры чистых веществ, $lambda$ – вектор длин волн
 - X – данные о смеси
2. Методом эволюционного факторного анализа определите концентрационные окна.
3. Используя метод чередующихся наименьших квадратов проведите разрешение многомерных данных. Отобразите графически полученные концентрационные зависимости чистых веществ и чистых спектров относительно имеющихся истинных данных.
4. Оформите отчет. Отправьте отчет на указанный электронный адрес. Приложите программный код в формате скрипта. В теме письма укажите ФИО, группу.

8.3 Структура и пример билетов для зачета с оценкой (1 семестр)

Зачет с оценкой по дисциплине «Хеометрика наносистем» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачета с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам дисциплины. Максимальная оценка за зачет с оценкой 40 баллов.

8.3.1 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – зачёт с оценкой)

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40 баллов

1. Хеометрика, как научная дисциплина. Цели и задачи хеометрики. Практическое применение.
2. Стадии аналитического процесса и присущие им погрешности.
3. Метод контролируемого обучения в многомерном анализе данных.
4. Способы уменьшения суммарной дисперсии (погрешности) пробоотбора и анализа.
5. Определение необходимого и достаточного объема обучающей выборки в контролируемом обучении.
6. Способы достижения репрезентативности пробы при пробоотборе.
7. Меры сходства и расстояния, применяемые в кластерном анализе.
8. Процедура подготовки пробы к анализу. Роль концентрирования аналита.
9. Виды и источники погрешности результатов измерения и обработки данных анализа. Способы увеличения отношения «сигнал/шум».

10. Определение дискриминирующего отношения в многомерном анализе данных.
11. Методы обнаружения сигналов. Различие сигналов аналита и фона.
12. Нормирование и центрирование данных в многомерном анализе.
13. Определение предела обнаружения аналита в пробе. Точное оценивание предела обнаружения.
14. Естественное нормирование данных и нормирование сравнением. Мера их информативности.
15. Установление и проверка гипотез о наличии (или отсутствии) аналита в пробе.
16. Определение необходимого и достаточного объема выборки для достижения заданной точности по неравенству Чебышева.
17. Линейная калибровка приборов. Калибровка по эталону.
18. Определение необходимого и достаточного объема выборки для достижения заданной точности.
19. Линейная регрессия в хемометрике. Сравнительный анализ метода наименьших квадратов и метода максимального правдоподобия.
20. Многомерный подход к анализу данных. Ковариантность измерений.
21. Какой физический смысл и в какой ситуации могут иметь коэффициенты уравнения структурной регрессии.
22. Наложение недостающих и избыточных данных в результатах измерения. Изменение положения данных относительно осей координат.
23. Модель факторного анализа. Смысл условия:
25. Масштабное и автомасштабное преобразование данных.
26. Метод вращения собственного вектора. Алгоритм определения собственных чисел и собственных векторов матрицы.
27. Методы и алгоритмы сжатия априорной информации.
28. Почему уравнение регрессии не содержит априорной информации? Каким образом выбирают базисные функции в методе линейной регрессии.
29. Каковы условия, позволяющие отличить сигнал аналита от сигнала фона.
30. Каковы причины появления корреляции переменных при выполнении операций нормирования и центрирования над векторами матрицы данных.
31. Как определить, можно ли принять выборочные параметры нормального распределения в качестве оценок генеральной совокупности.
32. Проекционные методы: проекция на латентные структуры.
33. Обнаружение аналитических сигналов. Неопределенность. Изменение расстояния между средними при уменьшении концентрации аналита. Правило 3
34. Калибровка. Проблема мультиколлинеарности. Подготовка данных.
35. Точечное оценивание предела обнаружения сигнала. Вероятность ошибки при сближении сигналов.
36. Классические методы калибровки: калибровка по одному каналу, метод Фирорда, непрямая калибровка.
37. Ошибки обнаружения аналита I и II рода. Кайзеровский предел обнаружения сигнала.
38. Обратная калибровка: множественная линейная регрессия, пошаговая калибровка.
39. Точечное оценивание предела обнаружения t-тестом.
40. Регрессия на латентные структуры (два варианта, отличия).
41. Критерий Вилкоксона. Точность предела обнаружения.
42. Классификация. Постановка задачи. Основные методы. Проверка гипотез.
43. Сглаживание данных. Методы блочного усреднения, движущегося окна и полиномиального сглаживания данных.

44. Проскутов анализ.
 45. Регрессионный анализ. Метод наименьших квадратов.
 46. Линейный дискриминантный анализ.
 47. Регрессионный анализ. Метод максимального правдоподобия.
 48. Итерационный целевой факторный анализ.
 49. Проекционные методы: метод главных компонент.
 50. Чередующиеся наименьшие квадраты.
 51. Калибровка (градуирование): определение и решаемые практические задачи.
- Математическая постановка задачи калибровки.
52. Формальное независимое моделирование аналогий классов.
 53. Линейные и нелинейные методы калибровки: области применения.
- Проверка моделей.
54. Метод k-ближайших соседей.
 55. Оценка качества моделей в хемометрике. Основные применяемые оценки, что они отражают.
 56. Оконный факторный анализ.
 57. Калибровка: неопределенность, точность, воспроизводимость. Недооценка и переоценка параметров: Н-принцип.
 58. Кластеризация с помощью k-средних.
 59. Классификация. Подготовка данных. Ошибки. Обучение и проверка.
- Проклятие размерности.
60. Эволюционный факторный анализ.
 61. Постановка задачи разрешения многомерных кривых. Неопределенность.
 62. Квадратичный дискриминантный анализ.
 63. Методы разрешения многомерных кривых. PLS-дискриминация.

8.4 Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (1 семестр)

Зачёт с оценкой по дисциплине «Хемометрика» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по всем разделам рабочей программы дисциплины. Билет для зачёта с оценкой состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы зачёта с оценкой оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 15 баллов, второй – 25 баллов.

Пример билета для зачёта с оценкой:

<i>«Утверждаю» зав. кафедрой ХФИ</i> _____ Н.В. Меньшутина (Подпись) (И.О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева Кафедра химического и фармацевтического инжиниринга 28.04.02 Наноинженерия Магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»
--	---

Дисциплина «Хемометрика наносистем»

Билет № 1

1. Линейная регрессия в хемометрике. Сравнительный анализ метода наименьших квадратов и метода максимального правдоподобия.
2. Многомерный подход к анализу данных. Ковариантность измерений.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1 Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Шачнева, Е. Ю. Хемометрика. Базовые понятия : учебное пособие / Е. Ю. Шачнева. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 160 с. — ISBN 978-5-8114-2301-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/212495> (дата обращения: 27.05.2023). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Гордиенко М.Г. Основы работы и программирования в среде MATLAB: учеб. пособие // М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева. – 2015. – 79 с., ISBN 978-5-7237-1259-1.

Б. Дополнительная литература

1. Шараф М.А. Хемометрика./ М.А. Шараф, Д.Л. Иллмэн, Б.Р. Ковальски. – Л.: Химия. 1989. – 272 с.

9.2 Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.
- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- «Журнал аналитической химии», ISSN 0044-4502;
- «Химическая технология», ISSN 1684-5811;
- «Контроль качества продукции», ISSN 2541-9900;
- «Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика», ISSN 2073-0004;
- «Программные продукты и системы», ISSN 2311-2735.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- Ресурсы ELSEVIER: www.sciencedirect.com.
- Платформа Springer Link: <https://rd.springer.com>.

9.3 Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

1. Программное обеспечение:
 - Пакет прикладных программ Octave (свободно распространяемое ПО);
 - Пакет прикладных программ MATLAB (лицензия РХТУ);
 - ПО Excel из пакета Microsoft Office (лицензия РХТУ).
2. Электронные конспекты лекций, теоретические положения и примеры выполнения лабораторных работ, задания по лабораторным работам.

Подготовлены варианты заданий для выполнения лабораторных работ, направленных на приобретение студентами навыков обработки информации с применением методов хемометрики.

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. При этом первый пункт списка дополняется или заменяется на:

- доступ к групповым чатам (WhatsApp), к вебинарам или онлайн-конференции (webinar.ru, zoom.us), к каналам, содержащим видео-презентации.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2024 г. составляет 1 559 436 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

Электронные информационные ресурсы, используемые в процессе обучения

№	Электронный ресурс	Реквизиты договора (номер, дата заключения, срок действия), ссылка на сайт ЭБС, сумма договора, количество ключей	Характеристика библиотечного фонда, доступ к которому предоставляется договором
---	--------------------	---	---

1	Электронно-библиотечная система (ЭБС) «ЛАНЬ»	ООО «Издательство «Лань», Реквизиты договора – Договор № 33.02-Р-2.7-8599/2024 от 13.11.2024 г. г. Сумма договора – 315208-51 С 01.10.2024 г. по 31.12.2024 г. Ссылка на сайт ЭБС – http://e.lanbook.com Количество ключей - доступ для зарегистрированных пользователей РХТУ с любого компьютера. Удаленный доступ после персональной регистрации на сайте ЭБС.	Доступ к коллекции «Единая профессиональная база знаний для технических вузов – ЭБС ЛАНЬ, а также отдельные издания из других коллекций издательства «ЛАНЬ» в соответствии с Договором. Доступ к коллекциям: «Химия» - изд-ва Лаборатория знаний, «Химия»-КНИТУ (Казанский национальный исследовательский технологический университет), «Химия» - изд-ва ФИЗМАТЛИТ», «Информатика»-Национальный Открытый Университет «ИНТУИТ».
2	Электронно - библиотечная система ИБЦ РХТУ им. Д.И.Менделеева (на базе АИБС «Ирбис»)	Принадлежность – собственная РХТУ. Ссылка на сайт ЭБС – http://lib.muctr.ru/ Доступ для пользователей РХТУ с любого компьютера	Электронные версии учебных и научных изданий авторов РХТУ по всем ООП.
3	Информационно-справочная система «ТЕХЭКСПЕРТ» «Нормы, правила, стандарты России».	Принадлежность сторонняя. Реквизиты контракта – ООО «ИНФОРМПРОЕКТ-Центр», Контракт № 183-234ЭА/2023 от 15.01.2024 г. Сумма договора – 1 124 880 руб. 00 коп. С «01» января 2024 г. по «31» декабря 2024 г. Ссылка на сайт ЭБС – http://reforma.kodeks.ru/reforma/ Количество ключей – 10 лицензий + локальный доступ с компьютеров ИБЦ.	Электронная библиотека нормативно-технических изданий. Содержит более 45000 национальных стандартов и др. НТД

4	Научно-электронная библиотека «eLibrary.ru»	Реквизиты договора – ООО Научная электронная библиотека, Договор № SU-364/2023/33.03-Л-3.1-7490/2024 от 31.01.2024 г.. Сумма договора – 897 350-00 С 31.01.2024 г. по 31.12.2024 г. Ссылка на сайт – http://elibrary.ru Количество ключей – доступ для пользователей РХТУ по IP-адресам неограничен. Удаленный доступ после персональной регистрации на сайте НЭБ.	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU – это крупнейший российский информационно-аналитический портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 29 млн научных статей и публикаций, в том числе электронные версии более 5600 российских научно-технических журналов.
5	Электронно-библиотечная система издательства «ЮРАЙТ»	Принадлежность – сторонняя Образовательная платформа ЮРАЙТ» Договор № № 33.02-Л-3.1-7818/2024 от 27.04.2024.г. Сумма договора –589 175.00 С 27.04.2024 г. по 26.04.2025 г.. Ссылка на сайт https://biblio-online.ru/ Количество ключей – доступ для зарегистрированных пользователей РХТУ с любого компьютера. Удаленный доступ после персональной регистрации на сайте ЭБС.	Электронная библиотека включает более 5000 наименований учебников и учебных пособий по всем отраслям знаний для всех уровней профессионального образования от ведущих научных школ с соблюдением требований новых ФГОСов.
6	Электронно-библиотечная система «Консультант студента»	Принадлежность – сторонняя ООО «Консультант студента» Договор № 818 КС/01-2023-33.02-Л-3.1-7787/2024 от 23.04.2023 г. Сумма договора – 347 256-00 С 23.04.2024 г. по 22.04.2025 г. Ссылка на сайт –	Комплект изданий, входящих в базу данных «Электронная библиотека технического ВУЗа».

		http://www.studentlibrary.ru Количество ключей – доступ для зарегистрированных пользователей РХТУ с любого компьютера. Удаленный доступ после персональной регистрации на сайте ЭБС.	
7	Электронно-библиотечная система «ZNANIUM.COM»	Принадлежность – сторонняя ООО «ЗНАНИУМ» Договор № 769 эбс/33.02-Р-3.1-7807/2024 от 16.04.2024 г. Сумма договора – 420 000-00-00 С 25.04.2024 г. по 25.04.2025 г. Ссылка на сайт – https://znanium.com/ Количество ключей - доступ для зарегистрированных пользователей РХТУ с любого компьютера. Удаленный доступ после персональной регистрации на сайте ЭБС	Коллекция изданий учебников и учебных пособий по различным отраслям знаний для всех уровней профессионального образования. Коллекция издательства «Профессия»
8	QUESTEL ORBIT	Принадлежность – сторонняя Национальная подписка (Минобрнауки+ РФФИ) Информационное письмо РФФИ от 15.03.2024 г. № 243 С 01.01.2024 г. по 30.06.2024 г.. Информационное письмо РФФИ от 16.07..2024 г. № 698 С 01.07.2024 г. по 31.12.2024 г.. Ссылка на сайт – https://orbit.com Количество ключей – доступ для пользователей РХТУ по IP-адресам неограничен. Инструкция по настройке	ORBIT является глобальным оперативно обновляемым патентным порталом, позволяющим осуществлять поиск в перечне заявок на патенты, полученных, приблизительно, 80-патентными учреждениями в различных странах мира и предоставленных грантов.

		удаленного доступа(ссылка)	
--	--	--	--

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Хеометрика наносистем*» проводятся в форме лекций, лабораторных и практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1 Оборудование, необходимое в образовательном процессе

Для изучения дисциплины «*Хеометрика наносистем*» имеется лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для магистрантов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2 Учебно-наглядные пособия

По дисциплине «*Хеометрика наносистем*» доступны учебные материалы. Реализованы лекции по учебным разделам в соответствии с программой дисциплины в виде презентаций. Доступны комплексы лабораторных работ и требования к отчетам, варианты заданий, руководство по работе с оборудованием, электронный раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3 Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами, проекторы, экраны; аудитории со стационарными комплексами отображения информации с любого электронного носителя; WEB-камеры; цифровой фотоаппарат; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4 Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений, программы; методические рекомендации к практическим занятиям; каталоги типов и видов продукции из неметаллических материалов; каталоги продукции промышленных предприятий; раздаточный материал к лекционным курсам; учебные фильмы по процессам технологии и способам производства отдельных видов изделий; электронные учебные издания по дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений, научно-популярные электронные издания.

Обеспеченность современными учебными пособиями, выпущенными преподавателями кафедры химического и фармацевтического инжиниринга для магистрантов, довольно высокая. Ко всем научным изданиям и учебным пособиям, выпущенным через РИО РХТУ им. Д.И. Менделеева, имеется доступ через фонды информационно-библиотечного фонда. Кроме того, большинство дисциплин, преподаваемых на кафедре, имеют развернутую информационно-образовательную и информационно-методическую поддержку, к ресурсам в сети Интернет.

11.5 Перечень лицензионного программного обеспечения

№	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	Microsoft Windows 8.1 Professional Get Genuine	Контракт № 62-64ЭА/2013, Microsoft Open License, Номер лицензии 62795478	24	Бессрочно
2.	Micosoft Office Standard 2013	Контракт № 62-64ЭА/2013, MicrosoftOpenLicense Номер лицензии 47837477	24	Бессрочно
3.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition	Контракт №72-99ЭА/2022 от 29.08.2022,
4.	MATLAB Academic new Product Group Licenses (per License)	Контракт № 143-164ЭА/2010 от 14.12.10	3 лицензий для активации на рабочих станциях	бессрочная
5.	MATLAB Classroom Suite new Product From 25 to 49 Concurrent Licenses (per License)	Контракт № 143-164ЭА/2010 от 14.12.10	25 лицензий для активации на рабочих станциях	бессрочная

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Обнаружение и обработка сигналов. Проекционные методы анализа данных.	<i>Знает:</i> предмет и методы хемометрики; основы теории и методы измерений; методы обнаружения и обработки сигналов. <i>Умеет:</i> интерпретировать результаты измерений, оценивать их погрешность, формировать матрицы данных; выполнять статистическую обработку информации. <i>Владеть:</i> практикой применения пакетов прикладных программ по изученной дисциплине.	Оценка за лабораторные работы №1- 2 Оценка за самостоятельную работу №1 Оценка за домашнюю работу №1 Оценка на зачет с оценкой
Раздел 2. Градуирование	<i>Знает:</i> предмет и методы хемометрики; методы обнаружения и обработки сигналов;	Оценка за лабораторны

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
(калибровка)	смысл операции градуирования и применяемые методы; основные свойства корреляционной матрицы; структурные методы регрессионного анализа <i>Умеет:</i> интерпретировать результаты измерений, оценивать их погрешность, формировать матрицы данных; выполнять статистическую обработку информации; выбирать адекватный метод градуирования и применять калибровочные кривые в химическом анализе; разрабатывать и практически применять алгоритмы обработки информации. <i>Владеть:</i> методами эксплуатации современного информационного оборудования для обработки многомерных (многомерных) данных; практикой применения пакетов прикладных программ по изученной дисциплине.	работы №3-4 Оценка за Самостоятельные работы №2-3 Оценка за зачет с оценкой
Раздел 3. Классификация	<i>Знает:</i> предмет и методы хемометрики; методы распознавания образов, кластерного анализа. <i>Умеет:</i> интерпретировать результаты измерений, оценивать их погрешность, формировать матрицы данных; выполнять статистическую обработку информации; выбирать адекватный метод градуирования и применять калибровочные кривые в химическом анализе; разрабатывать и практически применять алгоритмы обработки информации; разрабатывать и применять алгоритмы автоматической классификации. <i>Владеть:</i> методами эксплуатации современного информационного оборудования для обработки многомерных (многомерных) данных; практикой применения пакетов прикладных программ по изученной дисциплине.	Оценка за лабораторные работы №5- 6 Оценка за самостоятельную работу №4 Оценка на зачет с оценкой

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 4. Разрешение многомерных кривых	<i>Знает:</i> предмет и методы хемометрики; методы обнаружения и обработки сигналов; назначение стохастического факторного анализа, устойчивость статистического оценивания; методы разложения сложных сигналов на простые. <i>Умеет:</i> интерпретировать результаты измерений, оценивать их погрешность, формировать матрицы данных; выполнять статистическую обработку информации; выбирать адекватный метод градуирования и применять калибровочные кривые в химическом анализе; разрабатывать и практически применять алгоритмы обработки информации; разрабатывать и практически применять алгоритмы различных вариантов факторного анализа; определять сложность сигналов и выполнять их разрешение. <i>Владеет:</i> методами эксплуатации современного информационного оборудования для обработки многомерных (многомерных) данных; практикой применения пакетов прикладных программ по изученной дисциплине.	Оценка за лабораторные работы №7-8 Оценка за самостоятельную работу №5 Оценка за домашнюю работу №2 Оценка на зачет с оценкой

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06.04.2021 № 245);
- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 28.12.2022, протокол № 5;
- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«Хеометрика наносистем»
основной образовательной программы – программа магистратуры
по направлению подготовки 28.04.02 Наноинженерия
магистерская программа – «Функциональные и композиционные наноматериалы,
изделия из них»
Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания кафедры № _____ от « ____ » _____ 20__ г.



РХТУ им. Д.И. Менделеева
 ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ПРОСТОЙ
 ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Владелец: *Комарницкая Елена Анатольевна*
 Проректор по образованию,
 Ректорат

Подписан: 02:07:2025 13:51:40