



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Кафедра физической и коллоидной химии

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета, доц.
А.И. Вильмс
«9» июня 2023 г.



Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.01.02

Наименование дисциплины **МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

Программа подготовки: **Научно-технологическая**

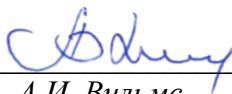
Квалификация выпускника – **МАГИСТР**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК_химического
факультета

Протокол № 5 от «9» июня 2023 г.

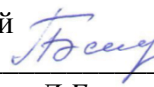
Председатель


А.И. Вильмс.

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 6 «8» июня 2023 г.

И.о. зав. кафедрой


Бельх Л.Б.

Иркутск 2023 г..

Содержание

	стр.
1. Цели и задачи дисциплины (модуля)	3
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП.	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)	3
4. Содержание и структура дисциплины (модуля)	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	7
4.3 Содержание учебного материала	9
5. Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов	10
6. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)	
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	12
а) основная литература;	
б) дополнительная литература;	
в) программное обеспечение;	
г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	14
9. Образовательные технологии	14
10. Оценочные средства (ОС)	15

1. Цели и задачи дисциплины (модуля):

Цели:

подготовка магистров к участию в исследования химических процессов, проводимых в лабораторных условиях, выявление общих закономерностей их протекания и возможности управления ими. Основная цель - дать студентам-химикам представления о новейших достижениях последних двух десятилетий, полученных на стыке трех наук - химии, физики и математики.

Задачи:

- - усвоение углубленных знаний основополагающих принципов математического моделирования;
- - овладение способами применения компьютерных (численных) и качественных методов исследования равновесных и динамических систем к задачам химической термодинамики и кинетики;
- - ознакомление студентов с основными понятиями термодинамики необратимых процессов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ АОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Математические методы в химии» относится к дисциплинам по выбору вариативной части профессионального цикла (Б1.В.ДВ.01.02).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами (на предыдущем уровне образования в бакалавриате), а именно:

«Математика» (Б1.О.10), «Информатика и вычислительная техника» (Б1.О.23), «Физическая химия. Химическая термодинамика» (Б1.О.24), «Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ» (Б1.О.25), «Строение вещества» (Б1.О.28).

Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной: «Научно-исследовательская работа» (Б2.В.03(Н)), выполнения выпускных квалификационных работ и формирования профессиональных компетенций.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по направлению подготовки 04.04.01 «Химия», программа: научно-технологическая

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю),
соотнесенных с индикаторами достижения компетенций**

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
<p align="center"><i>ПК-4</i> Способен проводить экспериментальные и расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p align="center"><i>ИДК_{ПК4.2}</i> Умеет проводить расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - стандартные математические методы обработки результатов эксперимента; - методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - применять математические методы при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты с использованием информационных ресурсов, научной, опытно-экспериментальной и приборной базы; <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретическими представлениями в области применения математических методов для решения различных задач химической термодинамики и кинетики; - навыками сбора и обработки научной и научно-технической информации, необходимой для решения исследовательских задач; - навыками формулирования выводов по итогам проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений

4. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Объем дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа,
в том числе 0.5 зачетных единиц, 18 часов на экзамен
Из них 36 часов – практическая подготовка

Форма промежуточной аттестации: экзамен

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/тема	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточно й аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
					Лекции и	Семинарские/ практические/ лабораторные занятия	КСР консультации КО		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Введение	1	2	0	2	0	-	0	
2	Стационарность. Термодинамические аспекты стационарных химических процессов	1	18	0	6	0	1	10	УО, ПЗ
3	Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов	1	34	14	4	14	4	14	УО, ПЗ
4	Нестационарные кинетические модели	1	20	6	2	6	2	12	УО, ПЗ

5	Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики	1	20	8	2	8	4	13	УО, ПЗ
6	Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	1	20	8	2	8	2	10	УО, ПЗ
Итого часов			126	36	18	36	13	59	(Экзамен)

Примечание: УО – устный опрос, ПЗ – практические задания

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
1	Стационарность. Термодинамические аспекты стационарного состояния	Работа с литературой. Подготовка к тесту по входному контролю и практическим занятиям		4	УО	№№ 1,2 в списке основной литературы
1	Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарного состояния. Применение для различных систем	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		6	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
1	Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы. Многомаршрутность каталитических реакций.	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		4	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы, № 4 в списке дополнительной литературы

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
1	Стационарные модели каталитических процессов	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		6	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы, № 4 в списке дополнительной литературы
1	Качественная теория дифференциальных уравнений	Работа с литературой.		4	УО, ПЗ	№ 2 в списке основной литературы
1	Моделирование нестационарных эффектов	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		12	УО, ПЗ	№ 2 в списке основной литературы
1	Современные методы математического программирования. Линейное и нелинейное программирование.	Работа с литературой.		2	УО	№ 2 в списке основной литературы
1	Обратная кинетическая задача. Интегральные и дифференциальные методы. Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов.	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		4	УО, ПЗ	№ 2,3 в списке основной литературы; № 4 в списке дополнительной литературы
1	Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции	Работа с литературой. Выполнение практических заданий		7	УО, ПЗ	№ 2,3 в списке основной литературы; № 4 в списке дополнительной литературы

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
1	Понятие нейронных сетей. Принципы построения и функционирования. Задачи классификации и регрессии. Обучение нейронных сетей с применением методов нелинейного программирования	Работа с литературой. Выполнение практических заданий на компьютере.		10	УО, ПЗ	№ 7 в списке дополнительной литературы
Общий объем самостоятельной работы по дисциплине (час)				59		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				59		

Контактная работа может быть аудиторной, внеаудиторной, а также проводится в электронной информационно-образовательной среде.

Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплинам (модулям) включает в себя:

занятия лекционного типа (лекции и иные учебные занятия, предусматривающие преимущественную передачу учебной информации педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, обучающимся),

занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия),

групповые консультации,

индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях (в том числе индивидуальные консультации);

иную контактную работу (при необходимости), предусматривающую групповую или индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, определяемую организацией самостоятельно.

4.3 Содержание учебного материала

Введение (2 ч.)

Цель и задачи курса. Основные понятия математического моделирования. Типы математических моделей. Термодинамические аспекты стационарных химических процессов.

1. Стационарность. Термодинамические аспекты стационарного состояния (6 ч.)

Применение второго закона термодинамики к открытым системам. Изменение энтропии в открытых системах. Значение термодинамики необратимых процессов, разрешение противоречий классической термодинамики. Сопряжение процессов. Соотношения Онзагера. Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарного состояния. Термодинамика систем, находящихся вдали от равновесия. Применение критерия устойчивости стационарных состояний для систем находящихся в равновесии, вблизи равновесия, вдали от равновесия. Термодинамическая и нетермодинамическая ветви состояний. Диссипативная функция от флуктуационного отклонения, как выражение принципа Пригожина (минимума производства энтропии). Термодинамический анализ кинетических уравнений.

2. Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов (4 ч)

Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы. Многомаршрутность каталитических реакций. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути. Стационарные модели некоторых каталитических процессов (в том числе модели с формированием и дезактивацией катализатора, модели ферментативного катализа, топохимических реакций).

3. Нестационарные кинетические модели (2 ч.)

Нестационарные модели. Качественные методы исследования систем дифференциальных уравнений (качественная теория дифференциальных уравнений). Моделирование нестационарных эффектов (химических колебаний, триггеров).

4. Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики (2 ч)

4.1. Современные методы математического программирования. Линейное и нелинейное программирование. Исследование выпуклостей характеристических термодинамических функций и энтропии. Особенности уравнений закона действия масс. Математическая интерпретация правила фаз Гиббса. Использование моделей неравновесной термодинамики для анализа химических технологий. Термодинамический анализ некоторых химических процессов.

4.2. Обратная кинетическая задача. Постановка, единственность решения. Интегральные и дифференциальные методы. Преимущества и недостатки. Простые примеры. Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов. Численные методы решения обратной задачи. Методы интегрирования систем дифференциальных уравнений. Стохастические модели и метод "Монте-Карло". Проблема жесткости уравнений, описывающих каталитические реакции, варианты ее решения. Нелинейные методы наименьших квадратов. Примеры градиентных и неградиентных методов поиска констант скоростей элементарных стадий. Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции.

5. Нейронные сети в решении задач регрессии классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей (2 ч)

Понятие нейронных сетей. Принципы построения и функционирования. классификации и регрессии. Архитектура нейронных сетей. Функции активации.

Обучение нейронных сетей с применением методов нелинейного программирования. Прогнозирование числовых данных (регрессионные методы). Кластеризация. Классификация нейронной сетью.

5. 5.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/н	№ Раздела и темы	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции (индикаторы)*
			Всего часов	Из них практическая подготовка		
1	2	3	4	5	6	7
1	2. Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов	Термодинамический анализ кинетических уравнений	4	4	ПЗ	ПК-4
		Термодинамический анализ некоторых химических процессов	4	4	ПЗ	ПК-4
		Вывод кинетических уравнений многомаршрутных каталитических реакций с применением теории графов (по Боденштейну-Семенову, Волькенштейну-Гольдштейну, Темкину-Хориути)	6	6	ПЗ	ПК-4
2	3. Нестационарные кинетические модели	Анализ моделей с нестационарными эффектами (химические колебания, триггеры)	6	6	ПЗ	ПК-4
3	4. Линейное и нелинейное математическое программирование	Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы	2	2	ПЗ	ПК-4

	рование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики	наименьших квадратов Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции	6	6	ПЗ	ПК-4
	5. Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	Создание и обучение нейронной сети экспериментальным закономерностям каталитической активности, выходов продуктов, стабильности катализатора. Классификация экспериментальных данных о каталитической активности, выходах продуктов, стабильности катализатора.	4	4	ПЗ	ПК-4
			4	4	ПЗ	ПК-4

5.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	Термодинамические аспекты стационарных химических процессов	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля, УО № 1). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>
2	Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля, УО № 2). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>
3	Нестационарные кинетические модели	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля, УО № 3).	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>

		Выполнение практических заданий.		
4	Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля, УО № 4). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>
5	Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля, УО № 5). Выполнение практических заданий.	ПК-4	<i>ИДК ПК-4.2</i>

5.3. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения задач проводится во внеаудиторное время

Организация самостоятельной работы студента представлена в методических рекомендациях по организации самостоятельной работы студента, подготовленных преподавателями кафедры и размещенных в ЭИОС ИГУ.

Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях и задачаниках по физической химии:

Шмидт, А.Ф. Компьютерное моделирование кинетики сложных химических реакций [Текст] : учеб.-метод. пособие / А. Ф. Шмидт, А. А. Курохтина ; рец.: Л. Б. Белых, В. В. Смирнов ; Иркут. гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2016. - 79 с. ; 20 см. - ISBN 978-5-9624-1378-5.

6. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии) _____

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

1. Самойлов, Н. А. "Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов"" [Электронный ресурс] / Н. А. Самойлов. - Москва : Лань, 2013. - Адрес доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=37359. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1553-3 :
2. Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций [Электронный ресурс] / Ю. Г. Марков. - Москва : Лань, 2013. - Адрес доступа:

- http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=30200. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1483-3 :
3. Шмидт, А.Ф. Компьютерное моделирование кинетики сложных химических реакций [Текст] : учеб.-метод. пособие / А. Ф. Шмидт, А. А. Курохтина ; рец.: Л. Б. Белых, В. В. Смирнов ; Иркут. гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2016. - 79 с. ; 20 см. - ISBN 978-5-9624-1378-5 : 11 экз.
 4. Флах, П. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных / П. Флах. — Москва : ДМК Пресс, 2015. — 400 с. — ISBN 978-5-97060-273-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — Адрес доступа: <https://e.lanbook.com/book/69955> — Режим доступа: для авториз. пользователей.

б)дополнительная литература

1. Темкин, О. Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О. Н. Темкин. - М. : Академкнига, 2008. - 918 с. : ил. ; 24 см. - Библиогр. в конце глав. - ISBN 978-5-94628-336-6. 1 экз.
2. Курохтина, А.А. Метод конкурирующих реакций в исследованиях механизмов каталитических процессов: традиционные и новые способы применения [Текст] : учеб. пособие / А. А. Курохтина, А. Ф. Шмидт ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2012. - 93 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 83-93. - ISBN 978-5-9624-0667-1 : 13 экз.
3. Марков, Ю.Г. Математические модели химических реакций [Текст] : учебник / Ю. Г. Марков, И. В. Маркова. - СПб. : Лань, 2013. - 183 с. ; 21 см. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Библиогр.: с. 179-181. - ISBN 978-5-8114-1483-3 : 1 экз.
4. Новаковский, А.Б. EXSTATR – расширение Excel для статистической обработки данных в экологии / А.Б. Новаковский, И.В. Новаковская // Цианопрокариоты/цианобактерии: систематика, экология, распространение: Материалы докладов II Международной научной школы-конференции, 16–21 сентября 2019 г. – Сыктывкар: ИБ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, 2019. – 304 с. DOI: 10.31140/book-2019-03 [электронный ресурс: открытый доступ].



в) периодическая литература:

1. S. Hoops, R. Gauges, C. Lee, J. Pahle, N. Simus, M.Singhal, L. Xu, P. Mendes, U. Kummer, COPASI - A COmplex PAthway SIMulator. *Bioinformatics* 2006, 22 (24), 3067–3074. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btl485>.
2. N. H. Angello, V. Rathore, W. Beker, A. Wołos, E. R. Jira, R. Roszak, T. C. Wu, C. M. Schroeder, A. Aspuru-Guzik, B. A.; Grzybowski, et al. Closed-Loop Optimization of General Reaction Conditions for Heteroaryl Suzuki-Miyaura Coupling, *Science* 378 (2022) 399–405. DOI: [10.1126/science.adc8743](https://doi.org/10.1126/science.adc8743). [электронный ресурс: открытый доступ].
3. N.I. Rinehart, R.K. Saunthwal, J. Wellauer, A.F. Zahrt, L. Schlemper, A.S. Shved, et al. Development and Validation of a Chemoinformatic Workflow for Predicting Reaction Yield for Pd-Catalyzed C-N Couplings with Substrate Generalizability. *ChemRxiv*. Cambridge: Cambridge Open Engage (2022). DOI: 10.26434/chemrxiv-2022-hspwv. [электронный ресурс: открытый доступ].

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые систем

1. <http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/674.html>

Данный ресурс содержит материалы по математическому моделированию и оптимизации в химической технологии.

2. <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/1923.html>

Данный ресурс содержит справочные материалы по математическому описанию кинетики сложных каталитических процессов.

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

8.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и лабораторных занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, приборной базой и реактивами, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 303, 402, 426); ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.

- компьютерный класс кафедры физической и коллоидной химии (ауд. 303). Общее количество единиц вычислительной техники – 5: Pentium IV – 1 шт.; Pentium III – 1 шт.; Pentium I – 3 шт. Имеется локальная сеть.

8.2 Программное обеспечение

1. Программа “COPASI” (предназначена для решения прямых и обратных кинетических задач, распространяется свободно, разработчик P. Mendes);
2. Программа «Neural Excel» версия 6.2.6 от 29.08.2020 (надстройка к стандартному пакету Microsoft Excel, предназначена для создания и обучения нейронных сетей в среде Excel, распространяется свободно);
3. Программа «ExStatR» (надстройка к стандартному пакету Microsoft Excel, предназначена проводить ординацию и кластерный анализ данных, разработчики: Новаковский А.Б., Сабитов Д.А, распространяется свободно).

6.3. Технические и электронные средства обучения:

9. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины «Математические методы в химии» читаются лекции, проводятся практические занятия, на которых проводят выполнение практических заданий.

Активные формы обучения. На практических занятиях, которые составляют около половины от контактной работы, каждый студент самостоятельно решает задачи на различные темы, участвует в дискуссионном разборе конкретных ситуаций. Такой вид организации обучения способствует закреплению практических навыков применения различных видов математических методов для термодинамического анализа кинетических уравнений, вывода кинетических уравнений сложных многомаршрутных (в том числе каталитических) процессов, а также поиска с их помощью наиболее вероятного механизма реакции.

10. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенции ПК 4.2.

8.1. Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Выполнение практических заданий. УО.	Стационарность. Термодинамические аспекты стационарных химических процессов	ПК 4
2	Выполнение практических заданий. УО.	Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов	ПК 4
3	Выполнение практических заданий. УО.	Нестационарные кинетические модели	ПК 4
4	Выполнение практических заданий. УО.	Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики	ПК 4
5	Выполнение практических заданий. УО.	Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	ПК 4

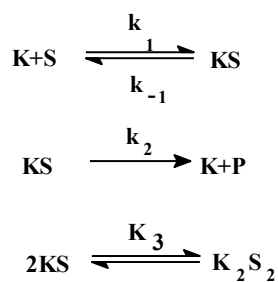
ПРИМЕРЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАНИЙ

1. Термодинамические аспекты стационарных химических процессов

Проанализируйте с помощью критерия устойчивости состояние системы на примере уравнений Лоттки.

2. Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов

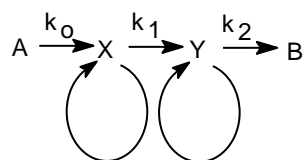
Механизм каталитической реакции имеет вид:



Используя метод квазистационарных концентраций для веществ [K] и [KS] в приближении квазиравновесия третьей стадии и предположении, что равновесие данной стадии практически полностью смещено в сторону продукта [K₂S₂] (т.е. K₃ → ∞), получите выражение для скорости образования продукта реакции [P]. На основании полученного уравнения скорости определите какой эффективный порядок по суммарной концентрации катализатора [K]₀ следует ожидать для данной реакции?

3. Нестационарные кинетические модели

Постройте фазовый портрет, определите характер и тип устойчивости особых точек реакций формирования и отравления каталитически активных комплексов.

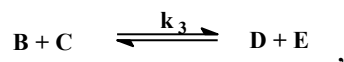
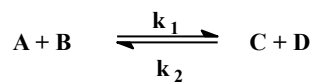


Реакцию превращения X в Y считать автокаталитической.

4. Решение обратной задачи химической кинетики

Для реакции гидролиза сложного эфира написать систему дифференциальных уравнений и с помощью программы “COPASI” получить интегральные кинетические кривые компонентов. Найти условия, при которых зависимость концентрации исходного эфира от времени проходит через минимум.

Механизм реакции



где A = C₂H₅OOCCOOC₂H₅; B = H₂O; C = HOCCOOC₂H₅; D = C₂H₅OH.

5. Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации

Провести кластерный анализ для следующей совокупности экспериментальных данных о влиянии концентрации реагирующих веществ на параметры каталитической реакции:

[Растворитель 1], М,	[Растворитель 2], М	[основание], М	[Пре-курсор 1], М	[Пре-курсор 2], М	[Субстрат 1], М	[Субстрат 2], М	[Добавка 1], М	Максимальный выход продукта, %	Максимальная концентрация продукта, М	Максимальная скорость, М*мин ⁻¹	Период индукции, мин	Время работы катализатора, мин
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	1	0.08	0	30	0.0236	0.0058	1.5833	6.5833
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	1	0.15	0	22	0.0336	0.0063	0.7500	7.2500
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	1	0.25	0	19	0.0477	0.0076	1.8333	12.5000
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	0.5	0.08	0	17	0.0138	0.0028	1.0000	6.4000
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	0.75	0.08	0	24	0.0192	0.0044	1.2500	6.0833
9.6	22.2	0.24	0.0016	0	1	0.08	0	19	0.0156	0.0046	1.2833	6.3833
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	1.5	0.08	0	31	0.0248	0.0066	1.2500	6.2500
9.6	22.2	0.08	0.0016	0	1	0.08	0	36	0.0290	0.0052	0.0000	10.0000
9.6	22.2	0.16	0.0016	0	1	0.08	0	30	0.0240	0.0090	2.3833	4.6667
9.6	22.2	0.2	0.0016	0	1	0.08	0	32	0.0259	0.0060	0.8333	8.0000
9.6	22.2	0.24	0.0016	0	1	0.08	0	29	0.0234	0.0050	0.8667	7.6000
9.6	22.2	0.32	0.0016	0	1	0.08	0	37	0.0293	0.0058	0.8333	7.5000
9.6	22.2	0.65	0.0032	0	1	0.08	0	39	0.0313	0.0073	1.6167	5.4667
9.6	22.2	0.104	0.0016	0	1	0.08	0	41	0.0330	0.0060	1.7833	6.3833
9.6	22.2	0.65	0.004	0	1	0.08	0	43	0.0341	0.0108	1.2333	4.9333
9.6	22.2	0.104	0.0016	0	1	0.08	0.01664	44	0.0350	0.0040	1.8333	20.1667
9.6	22.2	0.104	0.0016	0	1	0.08	0.032	39	0.0311	0.0059	1.3833	62.2833
9.6	22.2	0.65	0.008	0	1	0.08	0	79	0.0635	0.0179	1.2833	4.7667
9.6	22.2	0.65	0.016	0	1	0.08	0	88	0.0703	0.0333	1.2167	4.4500
9.6	22.2	0.16	0.016	0	1	0.08	0	82	0.0658	0.0283	1.0000	4.0000
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	1	0.03	0	68	0.0204	0.0067	2.1667	2.5833
9.6	22.2	0.65	0.032	0	1	0.08	0	69	0.0554	0.0290	1.2500	3.0000
9.6	22.2	0.65	0	0.016	1	0.08	0	72	0.0577	0.0148	1.6167	11.3833
14.4	5.56	0.65	0	0.0016	1	0.08	0	80	0.0638			
14.4	5.56	0.65	0	0.0032	1	0.08	0	73	0.0580	0.0010	5.0000	100.0000
14.4	5.56	0.65	0	0.0032	1	0.16	0	81	0.1290	0.0029	5.1500	61.8500
14.4	5.56	0.65	0	0.0032	1	0.25	0	67	0.1665	0.0049	5.0000	55.0000
14.4	5.56	0.65	0	0.0032	1	0.5	0	36	0.1785	0.0064	2.1667	60.8333
9.6	22.2	0.65	0.0016	0	1	0.5	0	10	0.0477	0.0078	0.7833	11.6500
9.6	22.2	0.104	0.0008	0	1	0.08	0	9	0.0074	0.0029	0.0000	4.0000

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Вопросы для УО №1. Стационарность. Термодинамические аспекты стационарного состояния

1. Понятие стационарности
2. Термодинамические аспекты стационарного состояния.
3. Применение второго закона термодинамики к открытым системам. Изменение энтропии в открытых системах.
4. Значение термодинамики необратимых процессов, разрешение противоречий классической термодинамики.
5. Сопряжение процессов.
6. Соотношения Онзагера.
7. Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарного состояния.
8. Термодинамика систем, находящихся вдали от равновесия.
9. Применение критерия устойчивости стационарных состояний для систем находящихся в равновесии, вблизи равновесия, вдали от равновесия.
10. Термодинамическая и нетермодинамическая ветви состояний.
11. Диссипативная функция от флуктуационного отклонения, как выражение принципа Пригожина (минимума производства энтропии).
12. Термодинамический анализ кинетических уравнений.

Вопросы для УО №2. Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов

1. Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы.
2. Понятие многомаршрутности каталитических реакций.
3. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути.
4. Стационарные модели каталитических процессов.

Вопросы для УО №3. Нестационарные кинетические модели

1. Нестационарные модели.
2. Качественная теория дифференциальных уравнений.
3. Моделирование нестационарных эффектов.

Вопросы для УО №4. Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики

1. Современные методы математического программирования.
2. Линейное и нелинейное программирование.
3. Особенности уравнений закона действия масс.
4. Математическая интерпретация правила фаз Гиббса.
5. Использование математических моделей неравновесной термодинамики для анализа химических технологий.
6. Постановка и единственность решения обратной кинетической задачи.

**Вопросы для УО №5. Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации.
Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей**

1. Архитектура нейронных сетей.
2. Понятие функции активации. Примеры функций активации
3. Обучение нейронных сетей с применением методов нелинейного программирования
4. Кластеризация. Классификация нейронной сетью.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЭКЗАМЕНУ

1. Примеры простейших моделей физических и химических процессов. Понятие "Математическая модель". Виды моделей. Общие принципы описания равновесных и динамических систем.
2. Математическое описание сложной химической реакции.
3. Решение систем алгебраических уравнений при расчетах равновесных составов сложных реакций.
4. Стационарность. Термодинамические аспекты стационарного состояния.
5. Применение второго закона термодинамики к открытым системам. Изменение энтропии в открытых системах.
6. Сопряженные процессы. Соотношения Онзагера.
7. Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарного состояния.
8. Термодинамика систем, находящихся вдали от равновесия. Применение критерия устойчивости стационарных состояний $\left(\frac{d(\sigma^2 S)}{dt} \geq 0 \right)$ для систем, находящихся в равновесии, вблизи равновесия, вдали от равновесия.
9. Термодинамическая и нетермодинамическая ветви состояний. Диссипативная функция от флуктуационного отклонения $(\beta [\delta S])$, как выражение принципа Пригожина (минимума производства энтропии).
10. Многомаршрутность каталитических реакций. Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути.
11. Стационарные модели некоторых каталитических процессов (в том числе модели с формированием и дезактивацией катализатора, модели ферментативного катализа, топохимических реакций).
12. Качественные методы исследования систем дифференциальных уравнений (качественная теория дифференциальных уравнений). Моделирование нестационарных эффектов (химических колебаний, триггеров).
13. Понятие о линейном и нелинейном программировании. Исследование выпуклостей характеристических термодинамических функций и энтропии.
14. Особенности уравнений закона действия масс. Математическая интерпретация правила фаз Гиббса.
15. Использование моделей неравновесной термодинамики для анализа химических технологий. Термодинамический анализ некоторых химических процессов.
16. Обратная кинетическая задача. Постановка, единственность решения.

17. Интегральные и дифференциальные методы. Преимущества и недостатки. Простые примеры.
18. Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов.
19. Методы интегрирования систем дифференциальных уравнений. Стохастические модели и метод "Монте-Карло".
20. Проблема жесткости уравнений, описывающих каталитические реакции, варианты ее решения.
21. Нелинейные методы наименьших квадратов. Примеры градиентных и неградиентных методов поиска констант скоростей элементарных стадий.
22. Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции.
23. Архитектура нейронных сетей.
24. Понятие функции активации. Примеры функций активации
25. Обучение нейронных сетей с применением методов нелинейного программирования
26. Кластеризация. Классификация нейронной сетью.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
<p style="text-align: center;"><i>ИДК ПК-4,2</i></p> Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знает: стандартные математические методы обработки результатов эксперимента; методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований	Собеседование в форме устного опроса.
	Умеет: применять математические методы при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты с использованием информационных ресурсов, научной, опытно-экспериментальной и приборной базы.	Выполнение практических заданий.
	Владеет: теоретическими представлениями в области применения математических методов для решения различных задач химической термодинамики и кинетики; навыками сбора и обработки научной и научно-технической информации, необходимой для решения исследовательских	Собеседование в форме устного опроса. Выполнение практических заданий.

	задач; - навыками формулирования выводов по итогам проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений	
--	--	--

Программа оценивания контролируемых компетенций:

Тема или раздел дисциплины ¹	Код индикатора компетенции	Планируемый результат	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС ²	
					ТК ³	ПА ⁴
1. Стационарность. Термодинамические аспекты стационарного состояния	ИДК_{ПК-4.2} Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знать: термодинамические аспекты стационарного состояния; Владеть: навыками термодинамического анализа кинетических уравнений	Знает термодинамические аспекты стационарного состояния, принципы применения второго закона термодинамики к открытым системам; Владеет навыками термодинамического анализа кинетических уравнений	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 1. Допустил не более 1 ошибки при выполнении практического задания по теме «Термодинамические аспекты стационарного состояния»	УО, ПЗ	Экзамен
2. Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов	ИДК_{ПК-4.2} Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знать: основные типы стационарных моделей каталитических процессов и методы вывода кинетических уравнений многомаршрутных	Знает основные типы стационарных моделей каталитических процессов и методы вывода кинетических уравнений многомаршрутных	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 2. Допустил не более 1 ошибки при выполнении практического	УО, ПЗ	

		<p>процессов;</p> <p>Владеть: навыками вывода кинетических уравнений многомаршрутных каталитических реакций</p>	<p>каталитических реакций;</p> <p>Владеет Владеет навыками вывода кинетических уравнений многомаршрутных каталитических реакций с применением теории графов (по Боденштейну-Семенову, Волькенштейну-Гольдштейну, Темкину-Хориути)</p>	<p>задания по теме «Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов»</p>		
<p>3. Нестационарные кинетические модели</p>	<p>ИДК_{ПК}-4.2</p> <p>Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии</p>	<p>Знать: примеры нестационарных кинетических моделей и основные понятия качественной теории дифференциальных уравнений;</p> <p>Владеть: навыками моделирования нестационарных эффектов</p>	<p>Знает примеры нестационарных кинетических моделей</p> <p>Владеет навыками моделирования нестационарных эффектов в каталитических процессах</p>	<p>Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 3.</p> <p>Допустил не более 1 ошибки при выполнении практического задания по теме «Нестационарные кинетические модели»</p>	УО, ПЗ	

<p>4. Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики</p>	<p>ИДК_{ПК}-4.2 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии</p>	<p>Знать: методы решения обратной кинетической задачи; Уметь: использовать интегральные и дифференциальные методы решения обратной кинетической задачи; Владеть: представлениями о современных методах линейного и нелинейного математического программирования. навыками использования моделей неравновесной термодинамики для анализа некоторых химических процессов; навыками применения интегральных и дифференциальных</p>	<p>Знает интегральные и дифференциальные методы решения обратной кинетической задачи; Умеет использовать интегральные и дифференциальные методы решения обратной кинетической задачи; Владет представлениями о современных методах линейного и нелинейного математического программирования; навыками использования моделей неравновесной термодинамики для анализа некоторых химических процессов; навыками применения</p>	<p>Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 4. Допустил не более двух ошибок при решении обратной кинетической задачи по теме «Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики»</p>	<p>УО, ПЗ</p>	
--	--	--	--	--	-------------------	--

		методов решения обратной кинетической задачи	интегральных и дифференциальных методов решения обратной кинетической задачи			
5. Нейронные сети в решении задач регрессии классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	ИДК_{ПК}-4.2 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданной теме в выбранной области химии	Знать: круг задач, решаемых с использованием нейросетей и принципы обучения нейросетей для их решения; Уметь: использовать нейросети для осуществления кластерного анализа	Знает основные этапы при построении и обучении нейросетей для решения химических задач; Умеет проводить кластерный анализ набора экспериментальных данных химической реакции	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», УО № 5. Допустил не более двух ошибок при выполнении практического задания по теме «Нейронные сети в решении задач регрессии классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей»	УО, ПЗ	

УО – устный опрос, ПЗ – практическое задание.

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:

Оценка «отлично»:

Знает теоретические основы и принципы математических методов, применяемых в физической химии. Способен описать принцип работы программ, применяемых в физической химии, в которых реализованы различные математические методы, и с их помощью решить задачи исследования механизмов сложных химических процессов с помощью применения математических методов, а также проанализировать полученный результат решения

Оценка «хорошо»:

В целом, знает теоретические основы математических методов, применяемых в физической химии, и владеет представлениями о пакетах программ, используемых при физико-химических исследованиях, проводимых с помощью математических методов. Допускает не принципиальные ошибки в установлении наиболее вероятного механизма каталитического процесса с помощью выбранного математического метода.

Оценка «удовлетворительно»:

Несистематизированные знания предмета (имеет представление о математических методах, применяемых в физической химии и некоторых видах программ, применяемых в физико-химических исследованиях, но допускает неточности в формулировках и выводах), частично сформированные умения и навыки применения математических методов при решении задач установления наиболее вероятного механизма каталитического процесса (может объяснить порядок действий при исследовании механизмов сложных химических процессов с помощью применения математических методов).

Оценка «неудовлетворительно»:

Фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении задач базового уровня.

Разработчик:



(подпись)

профессор

(занимаемая должность)

Шмидт А.Ф.

(Ф.И.О.)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии «8» июня 2023 г.

Протокол № 6

И.о. зав. кафедрой  /Л.Б. Белых/

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.