



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



2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Наименование дисциплины **Б1.В.ДВ.04.01 Математические методы в химии**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

Направленность подготовки **Научно-технологическая**

Квалификация выпускника - **магистр**

Форма обучения **Очная**

Согласовано с УМК химического
факультета

Протокол № 6 от «26» мая 2022 г.

Председатель

А.И. Вильмс.

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 7 от «26» мая 2022 г.

И.о. зав. кафедрой

Бельх Л.Б.

Иркутск 2022 г.

Содержание

	стр.
I. Цели и задачи дисциплины (модуля)	3
II. Место дисциплины (модуля) в структуре АОПОП.	3
III. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)	3
IV. Содержание и структура дисциплины (модуля)	
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	
4.3 Содержание учебного материала	
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов	
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	
V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	15
а) перечень литературы	
б) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	
VI. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	17
6.1. Учебно-лабораторное оборудование:	
6.2. Программное обеспечение:	
6.3. Технические и электронные средства обучения:	
VII. Образовательные технологии	17
VIII. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	17

I. Цели и задачи дисциплины:

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.

II. 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.04.01).

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).

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.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и АОП 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-4.2</i> <i>Проводит</i> <i>расчетно-теоретические</i> <i>исследования по заданной</i> <i>теме в выбранной</i> <i>области химии</i></p>	<p align="center"><i>ИДК_{ПК4.2}</i> <i>Умеет</i> <i>проводить расчетно-</i> <i>теоретические</i> <i>исследования по заданной</i> <i>теме в выбранной</i> <i>области химии</i></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

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

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

Форма промежуточной аттестации: экзамен

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

№ п/н	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 промежуточн ой аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа+КО	
					Лекции	Семинарские/ практические/ лабораторные занятия	Консультации + КСР		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Введение	3	2	0	2	0	-	0	УО, ПЗ
2	Термодинамические аспекты стационарных химических процессов	3	18	0	6	0		13	УО, ПЗ
3	Методы построения кинетических уравнений стационарных процессов	3	34	14	4	14	1	18	УО, ПЗ

4	Нестационарные кинетические модели	3	20	6	2	6	-	18	УО, ПЗ
5	Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики	3	20	8	2	8	1	10	УО, ПЗ
6	Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	3	20	8	2	8	1	10	УО, ПЗ
ИТОГО			126	36	18	36	3	69	18 (Экзамен)

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.)		
3	Стационарность. Термодинамические аспекты стационарного состояния	Работа с литературой. Подготовка к тесту по входному контролю и практическим занятиям		6	УО	№№ 1,2 в списке основной литературы
3	Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарного состояния. Применение для различных систем	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		7	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы
3	Стационарные, нестационарные и квазиравновесные процессы. Многомаршрутность каталитических реакций.	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		8	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.)		
3	Стационарные модели каталитических процессов	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		10	УО, ПЗ	№№ 1,2 в списке основной литературы, № 4 в списке дополнительной литературы
3	Качественная теория дифференциальных уравнений	Работа с литературой.		8	УО, ПЗ	№ 2 в списке основной литературы
3	Моделирование нестационарных эффектов	Работа с литературой. Выполнение практических заданий.		10	УО, ПЗ	№ 2 в списке основной литературы
3	Современные методы математического программирования. Линейное и нелинейное программирование.	Работа с литературой.		2	УО	№ 2 в списке основной литературы
3	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
3	Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции	Работа с литературой. Выполнение практических заданий		4	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.)		
3	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)				69		

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, топахимических 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.

4.3.1. 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-4.2 Знает методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; Владеет теоретическими представлениями и в области применения математических методов для решения различных задач химической кинетики
		Термодинамический анализ некоторых химических процессов	4	4	ПЗ	ПК-4.2 Знает методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; Умеет анализировать полученные результаты с использованием научной базы; Владеет навыками

						формулирование выводов по итогам проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений
		Вывод кинетических уравнений многомаршрутных каталитических реакций с применением теории графов (по Боденштейну-Семенову, Волькенштейну-Гольдштейну, Темкину-Хориути)	6	6	ПЗ	ПК-4.2 Знает стандартные математические методы обработки результатов эксперимента; методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; Умеет применять математические методы при описании термодинамических свойств химических систем; Владеет теоретическими представлениями и в области применения математических методов для решения различных задач химической кинетики
2	3. Нестационарные кинетические модели	Анализ моделей с нестационарным и эффектами (химические колебания, триггеры)	6	6	ПЗ	ПК-4.2 Знает методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; Умеет анализировать полученные

						результаты с использованием научной базы; Владеет навыками формулирования выводов по итогам проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений
3	4. Линейное и нелинейное математическое программирование и его применение для поиска равновесия и решения обратной задачи химической кинетики	Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов	2	2	ПЗ	ПК-4.2 Знает стандартные математические методы обработки результатов эксперимента; методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; Умеет применять математические методы при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать Владеет теоретическими представлениями и в области применения математических методов для решения различных задач химической кинетики;
		Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма	6	6	ПЗ	ПК-4.2 Знает стандартные математические методы обработки

		реакции				<p>результатов эксперимента; методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований;</p> <p>Умеет применять математические методы при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты с использованием информационных ресурсов, научной, опытно-экспериментальной и приборной базы;</p> <p>Владеет теоретическими представлениями и 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</p>
--	--	---------	--	--	--	--

						итогах проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений
4	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.	8	8	ПЗ	ПК-4.2 Знает стандартные математические методы обработки результатов эксперимента; методы и способы решения исследовательских задач по тематике проводимых исследований; Умеет применять математические методы при описании термодинамических свойств химических систем; анализировать полученные результаты с использованием информационных ресурсов, научной, опытно-экспериментальной и приборной базы; Владеет навыками сбора и обработки научной и научно-технической информации, необходимой для решения исследовательских задач; навыками формулировани

						я выводов по итогам проведенных исследований, экспериментов, наблюдений, измерений
--	--	--	--	--	--	--

4.4. 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.

Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях и задачах 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.

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

а) перечень литературы

основная литература

1. Самойлов, Н. А. "Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов" [Электронный ресурс] / Н. А. Самойлов. - Москва : Лань", 2013. - Режим 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. - Режим 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.

дополнительная литература

5. 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.
6. 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.
 7. 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.
 8. 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].



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].
5. 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].

6.

список авторских методических разработок:

в ЭИОС ИГУ размещены методические указания к организации самостоятельной работы студентов

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.

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. 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.

6.2. 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:

VII. 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.

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

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. Оценочные материалы (ОМ):

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Выполнение практических заданий. УО.	Термодинамические критерии достижения и устойчивости стационарного состояния. Термодинамический анализ кинетических уравнений.	ПК 4.2
2	Выполнение практических заданий. УО.	Теория многомаршрутных реакций Темкина-Хориути. Стационарные модели некоторых каталитических процессов.	ПК 4.2
3	Выполнение практических заданий. УО.	Моделирование нестационарных эффектов.	ПК 4.2
4	Выполнение практических заданий. УО.	Термодинамический анализ некоторых химических процессов. Обратная кинетическая задача. Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции.	ПК 4.2
5	Выполнение практических заданий. УО.	Нейронные сети в решении задач регрессии и классификации. Применение нелинейного программирования для решения задач обучения нейронных сетей	ПК 4.2

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Вопросы для УО №1. Термодинамические аспекты стационарных химических процессов

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. Сопряженные процессы.
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.
7. Интегральные и дифференциальные методы решения обратной кинетической задачи, их преимущества и недостатки.
8. Линеаризация кинетических уравнений. Линейные методы наименьших квадратов.
9. Численные методы решения обратной задачи. Методы интегрирования систем дифференциальных уравнений. Стохастические модели и метод "Монте-Карло".
10. Проблема жесткости уравнений, описывающих каталитические реакции, варианты ее решения.
11. Нелинейные методы наименьших квадратов.
12. Примеры градиентных и неградиентных методов поиска констант скоростей элементарных стадий.
13. Применение математических методов при поиске наиболее вероятного механизма реакции.

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. Сопряжение процессов. 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.

Разработчик



(подпись)

профессор

(занимаемая должность)

Шмидт А.Ф.

(Ф.И.О.)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.04.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии «26» мая 2022 г.

Протокол № 7

И.о. зав. кафедрой



(Л.Б. Белых)

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