

Приложение 4
к ОПОП ВО 18.03.01 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ,
профиль Химическая технология новых материалов

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные методы в физической химии

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

18.03.01 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Профиль

Химическая технология новых материалов

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

5 ЗЕТ

Часов по учебному плану

180

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 8

аудиторные занятия

48

самостоятельная работа

132

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	8 (4.2)		Итого	
Неделя	12			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	24	24	24	24
Практические	24	24	24	24
Итого ауд.	48	48	48	48
Контактная работа	48	48	48	48
Сам. работа	132	132	132	132
Итого	180	180	180	180

Программу составил(и):

д.ф.-м.н., проф., Капуткина Н.Е.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные методы в физической химии

Разработана в соответствии с ОС ВО НИТУ МИСИС

по направлению подготовки 18.03.01 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

18.03.01 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ, 18.03.01-БХТ-25-1.plx профиль Химическая технология новых материалов, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 30.05.2024, протокол № 4-24

Утверждена в составе ОПОП ВО:

18.03.01 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ, профиль Химическая технология новых материалов, утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 30.05.2024, протокол № 4-24

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра физической химии

Протокол от 14.05.2024 г., №11-23/24

Руководитель подразделения Салимон А.И.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ	
1.1	Научить компьютерным методам решения реальных задач физики и физической химии, принципам алгоритмизации задач, написанию программ для ЭВМ и их реализации

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ	
Блок ОП: Б1.В.ДВ.04	
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
2.1.1	Методы исследования структуры и свойства композиционных материалов
2.1.2	Методы обработки статистических данных (анализ данных)
2.1.3	Оформление результатов научной деятельности
2.1.4	Теория химической связи
2.1.5	Технологии получения композиционных материалов
2.1.6	Физико-химия конденсированного состояния
2.1.7	Физические свойства твердых тел
2.1.8	Коллоидная химия
2.1.9	Композиционные материалы: структура, свойства, применение
2.1.10	Методы исследования материалов
2.1.11	Методы контроля и анализа веществ
2.1.12	Метрология, стандартизация и технические измерения
2.1.13	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности
2.1.14	Физико-химия полимеров
2.1.15	Аналитическая химия
2.1.16	Кристаллография
2.1.17	Математическая статистика и анализ данных
2.1.18	Методы математической физики
2.1.19	Теоретическая механика и основы теории упругости.
2.1.20	Физика
2.1.21	Физическая химия
2.1.22	Электротехника
2.1.23	Математика
2.1.24	Химия
2.1.25	Информатика и основы искусственного интеллекта
2.1.26	Инженерная и компьютерная графика
2.1.27	Процессы и аппараты химической технологии
2.1.28	Процессы получения и обработки материалов
2.1.29	Аналитическая геометрия
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ	
ОПК-2: Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы, применять знания фундаментальных наук для решения задач профессиональной деятельности	
Знать:	
ОПК-2-31 математические, физические, физико-химические, химические методы	
ПК-3: Способен осуществлять проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований	
Знать:	
ПК-3-31 численные методы при решении прикладных задач по своему профилю подготовки	
ПК-1: Способен проводить лабораторные и фундаментальные исследования полимерных и композиционных материалов	
Знать:	
ПК-1-31 методику фундаментальных исследований полимерных и композиционных материалов	
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области	
Знать:	
ОПК-1-31 механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах	
ПК-1: Способен проводить лабораторные и фундаментальные исследования полимерных и композиционных материалов	
Уметь:	
ПК-1-У1 проводить фундаментальные исследования полимерных и композиционных материалов	

ОПК-2: Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы, применять знания фундаментальных наук для решения задач профессиональной деятельности								
Уметь:								
ОПК-2-У1 использовать математические, физические, физико-химические, химические методы,								
ПК-3: Способен осуществлять проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований								
Уметь:								
ПК-3-У1 интегрировать дифференциальные уравнения компьютерными методами								
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области								
Уметь:								
ОПК-1-У1 использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах для моделирования, анализа исследований								
ПК-3: Способен осуществлять проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований								
Владеть:								
ПК-3-В1 навыками расчета кинетики в сложных реагирующих системах с обратной связью								
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области								
Владеть:								
ОПК-1-В1 механизмами химических реакций, происходящих в технологических процессах								
ОПК-2: Способен использовать математические, физические, физико-химические, химические методы, применять знания фундаментальных наук для решения задач профессиональной деятельности								
Владеть:								
ОПК-2-В1 знаниями фундаментальных наук для решения задач профессиональной деятельности								
ПК-1: Способен проводить лабораторные и фундаментальные исследования полимерных и композиционных материалов								
Владеть:								
ПК-1-В1 методикой проведения лабораторных исследований								

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ								
Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	Раздел 1. Вычисление интегралов методами Симпсона и Монте-Карло							
1.1	Применения компьютерных методов в физике и физической химии. Основные задачи, требующие применения компьютерных методов. Динамические, вариационные, стохастические методы решения задач. /Лек/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-1-31 ОПК-2-В1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.2	Вычисление интегралов методами Симпсона и Монте-Карло /Пр/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-1-31 ОПК-2-В1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.3	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	8	16	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-1-31 ОПК-2-В1 ОПК-1-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			

				ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1				
1.4	Численные методы интегрирования. Аппроксимация функций. Вычисление одно- и многомерных интегралов методами Симпсона и Монте-Карло. Аппроксимация данных эксперимента методом наименьших квадратов. Разложение по набору базисных функций. Ошибка эксперимента и ошибка аппроксимации. Структура программы для ЭВМ. /Лек/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-1-31 ОПК-2-В1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.5	Аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов /Пр/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-1-31 ОПК-2-В1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2		КМ1	Р1
1.6	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	8	20	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.7	Интегрирование дифференциальных уравнений. Метод конечных разностей. Запись производных. Метод Эйлера. Другие алгоритмы. Уравнения механики. Алгоритм Верле. Рассеяние частицы в центральном поле. /Лек/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.8	Задача о странствующем коммивояжере /Пр/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.9	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	8	20	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
	Раздел 2. Построение двухкомпонентной фазовой диаграммы по известным энергиям Гиббса конкурирующих фаз							

2.1	Компьютерное построение двухкомпонентных фазовых диаграмм. Построение двухкомпонентной фазовой диаграммы по известным энергиям Гиббса конкурирующих фаз. Прямая и обратная задачи. Основные алгоритмы расчета. Организация вычислений на ЭВМ. /Лек/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.2	Построение фазовой диаграммы двойной системы по заданным энергиям Гиббса конкурирующих фаз (по выбору) /Пр/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.3	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	8	20	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.4	Химическое равновесие в многокомпонентных системах. Моделирование химического равновесия в многокомпонентной системе. Принцип минимума энергии Гиббса. Выбор химических уравнений. Итерационная процедура расчета. Регулировка шага реакции. Структура программы для ЭВМ. /Лек/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.5	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	8	20	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.6	Расчет химического равновесия в многокомпонентной системе (по выбору) /Пр/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2		КМ1	Р1
2.7	Кинетика реакций в многокомпонентных системах. Кинетические уравнения химических реакций в многокомпонентных системах. Монотонные и периодические решения. Обратная связь. Задача Лотка. Брюсселятор. «Химические часы». Структура программы для	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			

	ЭВМ. /Лек/							
2.8	Расчет кинетики многокомпонентной системы с несколькими одновременно протекающими реакциями при наличии автокаталитического этапа (по выбору) /Пр/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
2.9	Подготовка к зачету с оценкой /Ср/	8	32	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
	Раздел 3. Подготовка к контрольным мероприятиям и выполняемым работам							
3.1	/Ср/	8	4	ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-3-31 ПК-3-У1 ПК-3-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1 Э2			

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ			
5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки			
Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Расчетно-графическое задание	ОПК-2-31;ОПК-2-У1;ОПК-2-В1;ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-1-31;ПК-1-У1;ПК-1-В1;ПК-3-31;ПК-3-У1;ПК-3-В1	Вычисление интегралов методами Симпсона и Монте-Карло Аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов Задача о странствующем коммивояжере Построение фазовой диаграммы двойной системы по заданным энергиям Гиббса конкурирующих фаз (по выбору) Расчет химического равновесия в многокомпонентной системе (по выбору) Расчет кинетики многокомпонентной системы с несколькими одновременно протекающими реакциями при наличии автокаталитического этапа (по выбору)
5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
Р1	Расчетно-графическое задание		Выполнение расчетного задания с использованием компьютерных программ
5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (билеты, тесты и т.п.)			
Дать описание основных приемов, используемых при: Аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов Задача о странствующем коммивояжере Построение фазовой диаграммы двойной системы по заданным энергиям Гиббса конкурирующих фаз (по выбору) Расчет химического равновесия в многокомпонентной системе (по выбору) Расчет кинетики многокомпонентной системы с несколькими одновременно протекающими реакциями при наличии автокаталитического этапа (по выбору)			
5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)			
Оценка «отлично» - обучающийся показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно действует по применению полученных знаний на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу.			

Оценка «хорошо» - обучающийся показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильно действует по применению знаний на практике, четко излагает материал.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляемыми после дополнительных и наводящих вопросов, правильно действует по применению знаний на практике;

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания на практике, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «неявка» – обучающийся на экзамен не явился.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ				
6.1. Рекомендуемая литература				
6.1.1. Основная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Белашенко Д. К.	Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2005
Л1.2	Белашенко Давид Кириллович	Компьютерные методы в физике и физической химии: лаб. практикум	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2012
6.1.2. Дополнительная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Аронин А. С., Гончаров В. А., Суворов Э. В., др., Суворов Э. В.	Физико-химия и технология аморфных и микрокристаллических сплавов: Лаб. практикум для студ. спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1988
6.1.3. Методические разработки				
	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Диков А. В., Степанова С. В., Сугробов Г. В.	Математическое моделирование и численные методы: учебное пособие	Электронная библиотека	Пенза: Пензенский государственный педагогический университет (ППГУ), 2000
6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»				
Э1	Федеральный портал «Российское образование»		http://edu.ru;	
Э2	Российская государственная библиотека		http://www.rsl.ru;	
6.3 Перечень программного обеспечения				
П.1	Физическая химия			
П.2	Microsoft Office			
П.3	MATCAD			
П.4	Moodle			
П.5	Лицензии ПО Windows Server CAL ALNG LicSAPk MVL DvcCAL, ПО WinEDUA3 ALNG SubsVL MVL PerUsr и PerUsr			
П.6	ESET NOD32 Antivirus			
6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных				
И.1	Научная электронная библиотека eLIBRARY https://elibrary.ru/			

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ		
Ауд.	Назначение	Оснащение
Б-316	Компьютерный класс	комплект учебной мебели, экран проекционный, проектор, стационарные компьютеры 20 шт. Лицензионное ПО: LabVIEW 2009 , Electronic WorkBench; MULTISIM 10.1
Б-734	Лекционная аудитория	комплект учебной мебели на 140 мест для обучающихся, рабочее место преподавателя, мультимедийное оборудование, ноутбук с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Moodle, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus и технические средства обучения, служащие для предоставления информации большой аудитории.

Читальный зал электронных изданий	Аудитория для самостоятельной работы	комплект учебной мебели на 55 мест для обучающихся, 50 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Moodle
Читальный зал № 3 (Б)	Аудитория для самостоятельной работы	комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Moodle

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Лекционные занятия проводятся с использованием мультимедийных средств. Практические занятия проводятся с использованием компьютерных программ математического и имитационного моделирования. Для обработки экспериментальных данных и их визуализации используются электронные таблицы MS Excel.