

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



«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

С.Н. Филатов

» 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Компьютерные и информационные технологии
в разработке наноматериалов»**

Направление подготовки 28.04.03 Наноматериалы

Магистерская программа «Химическая технология наноматериалов»

Квалификация «магистр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

На заседании Методической комиссии

Ученого совета

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« 25 » мая 2021 г.

Председатель

Н.А. Макаров

Москва 2021

Программа составлена:

старшим преподавателем кафедры наноматериалов и нанотехнологии Шарапаевым А.И.
и.о. заведующего кафедрой наноматериалов и нанотехнологии д.х.н. проф. Королевой
М.Ю.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры наноматериалов и
нанотехнологии «28» апреля 2021 г., протокол №11.

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки **28.04.03 «Наноматериалы»**, рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой наноматериалов и нанотехнологии РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение 1 семестра.

Дисциплина **«Компьютерные и информационные технологии в разработке наноматериалов»** относится к блоку обязательных дисциплин учебного плана, части, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области статистического анализа результатов экспериментальных исследований.

Цель дисциплины – формирование компетенций в области теории и практики использования компьютерных и информационных технологий для разработки и исследования новых наноматериалов, приобретение знаний и умений в области анализа и представления литературной и экспериментальной научно-технической информации.

Задачи дисциплины: формирование у обучающихся навыков работы с современными компьютерными и информационными средствами для улучшения и облегчения процесса разработки новых материалов и процессов, представлений о важности статистического анализа получаемых экспериментальных результатов и способов повышения их точности и воспроизводимости.

Дисциплина **«Компьютерные и информационные технологии в разработке наноматериалов»** преподается в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

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

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Системное и критическое мышление	УК-1. Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1. Осуществляет выбор информационных ресурсов для поиска информации в соответствии с поставленной учебной задачей; УК-1.2. Систематизирует информацию, полученную из разных источников, в соответствии с требованиями выполнения учебного задания

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
<p>– анализ и обобщение результатов научно-исследовательских работ, поиск и анализ научной и технической информации в области нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок;</p> <p>– составление аналитических обзоров, самостоятельная подготовка публикаций в отечественных и зарубежных изданиях;</p> <p>– способность к составлению методических документов при проведении научно-исследовательских и лабораторных работ;</p> <p>участие в экспериментальной и технико-проектной оптимизации существующих</p>	<p>– основные типы наноматериалов: различной размерности (0, 1, 2, 3-мерные, фрактальные кластеры), природы (неорганические, органические, смешанные) агрегатного состояния (жидкие, твердые, смешанного типа (гели, суспензии и пр.));</p> <p>– компьютерное программное обеспечение для обработки экспериментальных данных по исследованию наноматериалов и наносистем;</p> <p>– отчеты по научной работе, научные публикации в российских и зарубежных изданиях;</p> <p>– аналитические</p>	<p>ПК-3 Способен самостоятельно проводить научно-исследовательские работы по созданию, исследованию и применению наносистем и наноматериалов</p>	<p>ПК-3.2 Умеет выбирать методы и средства проведения исследований и разработок</p> <p>ПК-3.3 Владеет навыками решения научных и технических задач в области работ по созданию, исследованию и применению наносистем и наноматериалов</p>	<p>Анализ требований к профессиональным компетенциям, предъявляемым к выпускникам направления подготовки на рынке труда, обобщение зарубежного опыта, проведения консультаций с ведущими работодателями, объединениями работодателей отрасли, в которой востребованы выпускники в рамках направления подготовки.</p> <p>Профессиональный стандарт «26.006 Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от «8» сентября 2015 г. № 604н Д Управление методами и средствами проведения исследований и разработок наноструктурированных композиционных материалов (уровень квалификации – 7) Профессиональный стандарт</p>

<p>наукоемких методик создания наносистем и наноматериалов для успешной конкуренции на рынке идей и технологий.</p>	<p>обзоры в области производства и исследования наноматериалов.</p>			<p>«40.011 Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от «4» марта 2014 г. № 121н. D Осуществление научного руководства в соответствующей области знаний (уровень квалификации – 7)</p>
<p>– анализ и обобщение результатов научно-исследовательских работ, поиск и анализ научной и технической информации в области нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок; – составление аналитических обзоров, самостоятельная подготовка публикаций в отечественных и зарубежных изданиях; – способность к составлению методических документов при проведении</p>	<p>– основные типы наноматериалов: различной размерности (0, 1, 2, 3-мерные, фрактальные кластеры), природы (неорганические, органические, смешанные); агрегатного состояния (жидкие, твердые, смешанного типа (гели, суспензии и пр.)); – отчеты по научной работе, научные публикации в российских и зарубежных изданиях; – аналитические обзоры в области производства и</p>	<p>ПК-4 Способен к анализу и обобщению результатов научно-исследовательских работ, поиску и анализу научной и технической информации в области нанотехнологии и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых исследований, к самостоятельной подготовке публикаций в</p>	<p>ПК-4.1 Знает методы сбора, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации в области нанотехнологии и смежных дисциплин ПК-4.2 Умеет разрабатывать программы выполнения научных исследований, обрабатывать и анализировать их результаты ПК-4.3 Владеет навыками подготовки результатов научно-</p>	<p>Анализ требований к профессиональным компетенциям, предъявляемым к выпускникам направления подготовки на рынке труда, обобщение зарубежного опыта, проведения консультаций с ведущими работодателями, объединениями работодателей отрасли, в которой востребованы выпускники в рамках направления подготовки. Профессиональный стандарт «26.006 Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от «8» сентября 2015 г. № 604н С Организация аналитического</p>

<p>научно-исследовательских и лабораторных работ; участие в экспериментальной и технико-проектной оптимизации существующих наукоемких методик создания наносистем и наноматериалов для успешной конкуренции на рынке идей и технологий.</p>	<p>исследования наноматериалов.</p>	<p>отечественных и зарубежных изданиях</p>	<p>исследовательских работ для публикации в периодической печати</p>	<p>контроля этапов разработки наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами (уровень квалификации – 7) D Управление методами и средствами проведения исследований и разработок наноструктурированных композиционных материалов (уровень квалификации – 7) Профессиональный стандарт «40.011 Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от «4» марта 2014 г. № 121н. D Осуществление научного руководства в соответствующей области знаний (уровень квалификации – 7) Анализ опыта</p>
---	-------------------------------------	--	--	---

В результате изучения дисциплины студент магистратуры должен:

Знать:

- современное состояние и перспективные применения компьютерных и информационных технологий в наноиндустрии;
- основные системы организации и хранения научно-технической информации;
- способы планирования эксперимента;
- статистические инструменты планирования эксперимента и обработки экспериментальных данных;
- способы и инструменты обработки и представления экспериментальных данных;
- подходы к моделированию наносистем.

Уметь:

- осуществлять поиск и анализ научной-технической информации в доступных источниках;
- производить отбор экспериментальных факторов и построение планов эксперимента в области создания и исследования наноматериалов;
- проводить анализ результатов экспериментальных исследований;
- представлять результаты экспериментальных исследований;
- выявлять значимость факторов эксперимента;
- производить критический анализ опубликованных данных;
- проводить моделирование процессов движения и агрегации;
- применять полученные знания для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в области науки о наноматериалах и нанотехнологии.

Владеть:

- навыками работы с научно-технической, справочной литературой и электронными ресурсами, затрагивающими фундаментальные и практические аспекты разработки и применения наноматериалов;
- навыками использования компьютерных программ для планирования и анализа эксперимента;
- методологическими подходами и навыками представления экспериментальных данных, в том числе, результатов многофакторных экспериментов;
- навыками освоения и применения новых компьютерных и информационных инструментов при разработке и исследовании наноматериалов.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,88	68	51
в том числе в форме практической подготовки	0,22	8	6
Лекции	0,47	17	13
Практические занятия (ПЗ)	1,19	43	32
Лабораторные работы (ЛР)	0,22	8	6
в том числе в форме практической подготовки	0,22	8	6
Самостоятельная работа	2,12	76	57
Контактная самостоятельная работа	2,12	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		75,6	56,7
Вид итогового контроля:	Зачет с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг.	Лекции	в т.ч. в форме пр. подг.	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг.	Лаб. работы	в т.ч. в форме пр. подг.	Сам. работа
1	Основы теории планирования эксперимента	46	-	6	-	15	-	-	-	25
1.1	Наноиндустрия и компьютерные технологии	6	-	1	-	-	-	-	-	5
1.2	Рандомизация и планирование эксперимента	20	-	3	-	7	-	-	-	10
1.3	Планирование многофакторных экспериментов	20	-	2	-	8	-	-	-	10
2	Обработка информации в области наук о наноматериалах	47	-	6	-	16	-	-	-	25
2.1	Обработка экспериментальных данных	20	-	2	-	6	-	-	-	12
2.2	Возможности программных продуктов и их применение в технологии наноматериалов	17	-	2	-	6	-	-	-	9
2.3	Поиск и анализ научно-технической информации	10	-	2	-	4	-	-	-	4
3	Моделирование и визуализация наносистем	51	8	5	-	12	-	8	8	26
	ИТОГО	144	8	17	-	43	-	8	8	76

4.2. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1 - Основы теории планирования эксперимента

Наноиндустрия и компьютерные технологии. Актуальные возможности и перспективы использования компьютерных и информационных технологий в наноиндустрии. Исторический обзор применения компьютерных и информационных технологий в области химической технологии, материаловедения и разработки наноматериалов.

Рандомизация и планирование эксперимента. Основные идеи, построение сложных планов, ковариационный анализ. Анализ контрастов и множественные сравнения. Многомерный дисперсионный и ковариационный анализ, предположения и следствия их нарушения.

Планирование многофакторных экспериментов. Дробно-факторные план с различным числом уровней, смешанные планы, центральные композиционные планы. Построение экспериментальных планов и анализ результатов эксперимента, методы робастного планирования Тагучи, планы для смесей и других поверхностей с ограничениями, построение D- и A-оптимальных планов. Анализ повторяемости и воспроизводимости. Оценка эффективности экспериментальных планов, способы повышения эффективности плана, эволюционное планирование. Программные средства для статистического анализа и планирования эксперимента.

Раздел 2 - Обработка информации в области наук о наноматериалах

Обработка экспериментальных данных. Основные задачи обработки информации в практике научных исследований в области наноматериалов. Обработка экспериментальных данных на примере типичных исследований в области разработки наноматериалов. Практическое применение фильтрации и технического анализа для обработки экспериментальных данных. Использование программных продуктов для планирования эксперимента, анализа и представления экспериментальных данных.

Возможности программных продуктов и их применение в технологии наноматериалов. Системы компьютерной алгебры, табличные редакторы, языки программирования на примере MSExcel, Matlab, Maxima, Mathcad, Scilab, R, Python. Основы использования Python для анализа научных данных. Научная экосистема языка Python: пакеты Numpy, Scipy, Matplotlib. Статистическая обработка с использованием R и Python. Обработка и анализ изображений – применение пакетов Numpy и Scipy, модуль Scikit-image. Использование библиотеки Matplotlib для визуализации данных и построения высококачественных диаграмм.

Поиск и анализ научно-технической информации. Источники научно-технической информации. Системы организации и хранения научно-технической информации. Методы поиска. Критерии эффективности (полнота, точность) поиска и способы их повышения. Анализ и представление выявленной научно-технической информации.

Раздел 3 - Моделирование и визуализация наносистем

Моделирование процессов движения и агрегации наночастиц. Методы молекулярной динамики. Броуновская динамика и динамика Ланжевена, методы Монте-Карло. Комбинированные и усовершенствованные методы моделирования динамики частиц. Моделирование взаимодействий частиц: расчёт столкновений между частицами, моделирование движения агрегатов с учётом связей между частицами, парное и множественное взаимодействие частиц. Программные продукты для визуализации и представления результатов моделирования наносистем.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– современное состояние и перспективные применения компьютерных и информационных технологий в наноиндустрии;	+	+	+
2	– основные системы организации и хранения научно-технической информации;		+	
3	– способы планирования эксперимента;	+	+	
4	– статистические инструменты планирования эксперимента и обработки экспериментальных данных;	+	+	+
5	– способы и инструменты обработки и представления экспериментальных данных;		+	+
6	– подходы к моделированию наносистем.			+
	Уметь:			
7	– осуществлять поиск и анализ научной-технической информации в доступных источниках;	+	+	+
8	– производить отбор экспериментальных факторов и построение планов эксперимента в области создания и исследования наноматериалов;	+	+	
9	– проводить анализ результатов экспериментальных исследований;		+	+
10	– представлять результаты экспериментальных исследований;		+	
11	– выявлять значимость факторов эксперимента;	+	+	
12	– производить критический анализ опубликованных данных;	+	+	+
13	– проводить моделирование процессов движения и агрегации;		+	+
14	– применять полученные знания для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в области науки о наноматериалах и нанотехнологии.	+	+	+

Владеть:					
15	– навыками работы с научно-технической, справочной литературой и электронными ресурсами, затрагивающими фундаментальные и практические аспекты разработки и применения наноматериалов;		+	+	+
16	– навыками использования компьютерных программ для планирования и анализа эксперимента;		+	+	
17	– методологическими подходами и навыками представления экспериментальных данных, в том числе, результатов многофакторных экспериментов;			+	+
18	– навыками освоения и применения новых компьютерных и информационных инструментов при разработке и исследовании наноматериалов.		+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие универсальные компетенции и индикаторы их достижения:					
19	– УК-1. Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1. Осуществляет выбор информационных ресурсов для поиска информации в соответствии с поставленной учебной задачей	+	+	+
20		УК-1.2. Систематизирует информацию, полученную из разных источников, в соответствии с требованиями выполнения учебного задания	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
21	– ПК-3 Способен самостоятельно проводить научно-исследовательские работы по созданию, исследованию и применению наносистем и наноматериалов	ПК-3.2 Умеет выбирать методы и средства проведения исследований и разработок	+	+	+
22		ПК-3.3 Владеет навыками решения научных и технических задач в области работ по созданию, исследованию и применению наносистем и наноматериалов	+	+	+
23	– ПК-4 Способен к анализу и обобщению результатов научно-исследовательских работ, поиску и	ПК-4.1 Знает методы сбора, обработки, анализа и систематизации научно-технической информации в области нанотехнологии и смежных дисциплин	+	+	+

24	анализу научной и технической информации в области нанотехнологии и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых исследований, к самостоятельной подготовке публикаций в отечественных и зарубежных изданиях	ПК-4.2 Умеет разрабатывать программы выполнения научных исследований, обрабатывать и анализировать их результаты	+	+	+
25		ПК-4.3 Владеет навыками подготовки результатов научно-исследовательских работ для публикации в периодической печати	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине

№	Раздел	Темы практических занятий	Часы
1	Раздел 1	Рандомизация и планирование эксперимента	7
		Планирование многофакторных экспериментов	8
2	Раздел 2	Обработка экспериментальных данных	6
		Возможности программных продуктов и их применение в технологии наноматериалов	6
		Поиск и анализ научно-технической информации	4
3	Раздел 3	Моделирование процессов движения и агрегации наночастиц;	4
		Моделирование взаимодействий частиц;	4
		Разработка технического задания для моделирования наносистем.	4

6.2. Лабораторные занятия

Лабораторные занятия проводятся под руководством преподавателя и направлены на углубление теоретических знаний и приобретение навыков применения теоретических знаний в практической работе. Максимальная оценка за выполнение каждой лабораторной работы – 4 балла.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№	Раздел	Темы лабораторных занятий	Часы
1	Раздел 3	Броуновская динамика	4
		Моделирование системы методом Монте-Карло	4

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

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

- регулярную проработку пройденного на практических занятиях учебного материала;
- подготовку к контрольным работам по материалу дисциплины;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок, семинаров и конференций;
- участие в семинарах РХТУ им. Д.И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к сдаче зачета с оценкой по дисциплине.

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

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 52 балла), лабораторного практикума (максимальная оценка 8 баллов) и итогового контроля в форме зачета с оценкой.

8.1. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы № 1 и №2 составляет 20 баллов. Максимальная оценка за контрольную работу № 3 составляет 12 баллов.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 7 баллов за вопросы 1 и 2 и 6 баллов за вопрос 3.

1. Мак Элхо и Коннер (1986) использовали инструмент под названием «Визиплюм» для измерения ультрафиолетового излучения. Путём сравнения поглощения ультрафиолетового излучения чистым и загрязнённым воздухом может быть оценена концентрация SO_2 . Мы желаем сравнить результаты, получаемые данным методом, с результатами, получаемыми стандартным методом. Измеренным откликом является отношение значения, полученного с использованием прибора «Визиплюм», и значения, полученного стандартным методом агентства по охране окружающей среды США. Имеется шесть наблюдений, полученных на теплоэлектростанции №2: 0,950, 0,978, 0,762, 0,733, 0,823 и 1,011. Используя методы рандомизации проверьте нулевую гипотезу, что методы определения концентрации SO_2 эквивалентны. Определите р-значение.
2. Предполагается что нейропептид Y (NPY) участвует в регуляции питания и базальном метаболизме. При введении NPY в мозг крыс, у крыс резко увеличивается потребление пищи в следующие 24 ч. Налоксон (NLX) может потенциально блокировать действие NPY. Если это так, это может быть важным направлением исследований в области ожирения. Мы желаем проверить эффект четырех воздействия, действия фактор-уровневых комбинаций введения в мозг NPY или физиологического раствора (контроль) и подкожного введения NLX или физиологического раствора (контроль) на потребление пищи после воздействия в течение 24 часов. Доступно 32 практически одинаковых крыс мужского пола. Кратко опишите план экспериментов, подходящий для описанной ситуации.
3. Опишите основные преимущества и недостатки фактор-уровневых планов экспериментов.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, вопрос 1 оценивается, исходя из 6 баллов, вопросы 2 и 3 – из 7 каждый.

1. В каких случаях при разработке и исследовании наноматериалов для анализа данных предпочтительно использование электронных таблиц?
2. Опишите структуру языка R. Какие типы данных используются в языке R? Как соотносятся типы данных в R и данные, получаемые в ходе разработки и исследования наноматериалов?

3. Возможности и трудности использования библиотеки Matplotlib для визуализации результатов исследования наноматериалов. Типы диаграмм, реализуемых при помощи библиотеки Matplotlib.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 12 баллов. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 4 балла за каждый из вопросов.

1. Классический метод молекулярной динамики. Опишите основные принципы построения уравнений движения.
2. Опишите основные положения метода Монте-Карло. Что такое канонический ансамбль?
3. В чем заключается и какие цели преследует обезразмеривание уравнений и начальных параметров при моделировании с использованием методов молекулярной динамики?

8.2. Оценка лабораторных работ

Сдача лабораторной работы заключается в устном объяснении полученных результатов. Максимальная оценка за каждую лабораторную работу - 4 балла.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (Зачет с оценкой)

Максимальное количество баллов за *зачет с оценкой* – 40 баллов. Билет для зачета с оценкой содержит 3 вопроса.

1 вопрос – 10 баллов, вопрос 2 – 15 баллов, вопрос 3 – 15 баллов.

Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (зачет с оценкой):

1. Возможности применения компьютерных и информационных технологий в области химической технологии, материаловедения и разработки наноматериалов в частности;
2. Рандомизация и планирование эксперимента;
3. Дисперсионный анализ;
4. Построение планов эксперимента; ковариационный анализ.
5. Анализ контрастов и множественные сравнения;
6. Многомерный дисперсионный и ковариационный анализ, предположения и следствия их нарушения;
7. Дисперсионный анализ случайных эффектов;
8. Множественные сравнения;
9. Полнофакторные планы – построение, преимущества и недостатки;
10. Дробно-факторные план - преимущества и недостатки;
11. Блочные, смешанные планы, центральные композиционные планы;
12. Планы для смесей и других поверхностей с ограничениями;
13. Эффективность экспериментальных планов;
14. Фильтрация спектральных данных;
15. Статистическая обработка с использованием R и Python.
16. Обработка и анализ изображений – применение пакетов Numpy и Scipy, модуль Scikit-image.
17. Использование библиотеки Matplotlib для визуализации данных и построения высококачественных диаграмм.
18. Источники научно-технической информации. Системы организации и хранения научно-технической информации;

19. Критерии эффективности (полнота, точность) поиска и способы их повышения;
20. Методы молекулярной динамики;
21. Броуновская динамика и динамика Ланжевена, методы Монте-Карло;
22. Моделирование взаимодействий частиц.

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

8.4. Структура и примеры билетов для зачета с оценкой

Зачет по дисциплине «Компьютерные и информационные технологии в разработке наноматериалов» включает контрольные вопросы по всем разделам учебной программы дисциплины. Билет для зачета состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы зачета оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 10 баллов, второй – 15 баллов, третий вопросы – 15 баллов.

Пример билета для зачета с оценкой:

<p>«Утверждаю» Руководитель магистерской программы</p> <p>_____ (Подпись) _____ (И. О. Фамилия)</p> <p>«__» _____ 20__ г.</p>	<p>Министерство науки и высшего образования РФ</p>
	<p>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева</p>
	<p>Кафедра наноматериалов и нанотехнологии</p>
	<p>28.04.03 «Наноматериалы» Магистерская программа – «Химическая технология наноматериалов»</p>
<p>Компьютерные и информационные технологии в разработке наноматериалов</p>	
<p>Билет № 1</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Полнофакторные планы – построение, преимущества и недостатки. 2. Статистическая обработка с использованием R и Python 3. Броуновская динамика и динамика Ланжевена, методы Монте-Карло. 	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Сузи, Р.А. Язык программирования Python [Электронный ресурс] : учебное пособие / Р.А. Сузи. — Электрон. дан. — Москва : , 2016. — 350 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/100546>.

2. Писаренко, Е. В. Теория планирования эксперимента: учебное пособие / Е. В. Писаренко, В. Н. Писаренко. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 71 с.

Б. Дополнительная литература

1. Северенс, Ч. Введение в программирование на Python [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ч. Северенс. — Электрон. дан. — Москва : , 2016. — 231 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/100703>.
2. Ахназарова, С. Л. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов с неполной информацией о механизме: учебное пособие / С. Л. Ахназарова, Л. С. Гордеев, М. Б. Глебов. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2010. (эл. копия доступна лишь в компьютерном зале ИБЦ)
3. Гордиенко, М. Г. Основы работы и программирования в среде MATLAB: учебное пособие / М. Г. Гордиенко. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015. - 78 с. – 30 экз
4. Измерения. Статистическая обработка результатов пассивного и активного экспериментов в биотехнологии: учебное пособие / М. Г. Гордиенко. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2015.
5. Вознесенский, Э.Ф. Компьютерная визуализация нанообъектов [Электронный ресурс] : учебное пособие / Э.Ф. Вознесенский, И.В. Красина. — Электрон. дан. — Казань : КНИТУ, 2016. — 84 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/102068>.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

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

Научно-технические журналы:

1. Журнал «Computers & Chemical Engineering», ISSN 0098-1354;
2. Журнал «Computers in Industry», ISSN 0166-3615;
3. Журнал «Computational Statistics and Data Analysis», ISSN 0167-9473;
4. Журнал «Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Statistical Methodology)», ISSN 1467-9868;
5. Журнал «Journal of the Royal Statistical Society, Series C (Applied Statistics)», ISSN 1467-9876;
6. Журнал «Journal of Scientific Computing», ISSN 0885-7474;

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://sciencedirect.com>
- <http://scopus.com>
- <http://elibrary.ru>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации дисциплины подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций и семинаров – 9, (общее число слайдов – более 200);
- банк заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – более 25);
- банк заданий для итогового контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – более 25).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

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

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

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

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

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Компьютерные и информационные технологии в разработке наноматериалов»* проводятся в форме лекций, практических занятий, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.

Рабочие места, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Иллюстрации к разделам лекционного курса и практическим занятиям.

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

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

№ п.п.	Наименование программного продукта	Реквизиты договора поставки	Количество лицензий	Срок окончания действия лицензии
1.	Calculate Linux Desktop	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
2.	LibreOffice	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
3.	ABBYY FineReader	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
4.	7-Zip	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
5.	Google Chrome	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
6.	VLC Media Player	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
7.	Discord	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
8.	Autodesk AutoCAD	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
9.	IntelliJ IDEA	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
10.	FreeCAD	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
11.	SMath Studio	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
12.	Corel Academic Site Standard	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	Лицензия для активации на рабочих станциях, покрывает все рабочие места в университете	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)
13.	Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition.	Контракт № 90-133ЭА/2021 от 07.09.2021	500 лицензий	12 месяцев (ежегодное продление подписки с правом перехода на обновлённую версию продукта)

14.	GIMP	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно
15.	OBS (Open Broadcaster Software) Studio	Свободно распространяемое ПО	Не ограничено	Бессрочно

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование раздела	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Основы теории планирования эксперимента	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> – способы планирования эксперимента; – статистические инструменты планирования эксперимента и обработки экспериментальных данных; <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – производить отбор экспериментальных факторов и построение планов эксперимента в области создания и исследования наноматериалов; – проводить анализ результатов экспериментальных исследований; – выявлять значимость факторов эксперимента; – производить критический анализ опубликованных данных; – применять полученные знания для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в области науки о наноматериалах и нанотехнологии. <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – навыками работы с научно-технической, справочной литературой и электронными ресурсами, затрагивающими фундаментальные и практические аспекты разработки и применения наноматериалов; <p>навыками использования компьютерных программ для планирования и анализа эксперимента.</p>	<p>Оценка за контрольную работу № 1.</p> <p>Оценка на зачёте.</p>
Раздел 2. Обработка информации в области наук о наноматериалах	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> – современное состояние и перспективные применения компьютерных и информационных технологий в nanoиндустрии; – основные системы организации и хранения научно-технической информации; – способы и инструменты обработки и представления экспериментальных данных. <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – проводить анализ результатов 	<p>Оценка за контрольную работу № 2.</p> <p>Оценка на зачёте.</p>

	<p>экспериментальных исследований;</p> <ul style="list-style-type: none"> – представлять результаты экспериментальных исследований; – производить критический анализ опубликованных данных; – применять полученные знания для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в области науки о наноматериалах и нанотехнологии. <p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – навыками работы с научно-технической, справочной литературой и электронными ресурсами, затрагивающими фундаментальные и практические аспекты разработки и применения наноматериалов; – навыками использования компьютерных программ для планирования и анализа эксперимента; – методологическими подходами и навыками представления экспериментальных данных, в том числе, результатов многофакторных экспериментов; <p>навыками освоения и применения новых компьютерных и информационных инструментов при разработке и исследовании наноматериалов.</p>	
<p>Раздел 3. Моделирование и визуализация наносистем</p>	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> – подходы к моделированию наносистем – способы и инструменты обработки и представления экспериментальных данных; – статистические инструменты планирования эксперимента и обработки экспериментальных данных; – современное состояние и перспективные применения компьютерных и информационных технологий в nanoиндустрии. <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – применять полученные знания для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в области науки о наноматериалах и нанотехнологии – проводить моделирование процессов движения и агрегации; – представлять результаты экспериментальных исследований; – проводить анализ результатов экспериментальных исследований; 	<p>Оценка за контрольную работу № 3.</p> <p>Оценка за лабораторные работы.</p> <p>Оценка на зачёте.</p>

	<p>– осуществлять поиск и анализ научной-технической информации в доступных источниках.</p> <p>Владеет:</p> <p>– навыками освоения и применения новых компьютерных и информационных инструментов при разработке и исследовании наноматериалов.</p> <p>– навыками использования компьютерных программ для планирования и анализа эксперимента;</p> <p>навыками работы с научно-технической, справочной литературой и электронными ресурсами, затрагивающими фундаментальные и практические аспекты разработки и применения наноматериалов.</p>	
--	--	--

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

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

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

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

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ
«Компьютерные и информационные технологии в разработке наноматериалов»**

основной образовательной программы

28.04.03 Наноматериалы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«Химическая технология наноматериалов»

наименование ООП

Форма обучения: очная

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