Количество зачетных единиц 2

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073369] Математическая логика и теория алгоритмов

Преподавательский состав

Старший преподаватель Андреев Юрий Александрович

Структура и краткое содержание курса

В рамках курса будут даны основые понятия математической логики, определены несколько моделей вычислений и их взаимосвязь. Будет дана формальная постановка задачи алгоритмизации, обсуждена проблема разрешимости и критерии сложности алгоритмов. Будут рассмотрены ключевые алгоритмы над структурами данных (алгоритмы сортировки, поиска, построения и модификации структур данных и пр.), оценки их сложности, примеры их реализации и применения.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Дисциплина является базовой. В широком смысле, дисциплина способствует развитию логического мышления. В данной учебной программе дисциплина находит непосредственное применение в последующих курсах. В частности, в курсах связанных с программированием, математическим моделированием и машинным обучением.

Аттестация экзамен устно

Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 2

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073370] Операционные системы

Преподавательский состав

Старший преподаватель Андреев Юрий Александрович

Структура и краткое содержание курса

В рамках курса будет дан обзор современных операционных систем (ОС), их отличия и области применимости. Будет рассмотрена архитектура, процесс установки, загрузки и взаимодействия ОС с пользователем или прикладным программным обеспечением (ПО). Больше внимания будет уделено ОС с открытым исходным кодом на базе ядра linux. Для взаимодействия с ОС в процессе обучения будет использоваться командная строка и язык командной оболочки (bash, zsh). С помощью интерпретатора командной строки будут объяснены и выполнены основные задачи по администрированию ОС и использованию средств ОС для прикладных целей.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Обучающиеся будут обладать пониманием общего устройства ОС и обладать знаниями соответствующей терминологии, что позволит ориентироваться в руководствах и справочной литературе. Будут знакомы с процессом установки и взаимодействия с ОС. Обучающиеся смогут применить полученные знания в процессе использования ОС для своих прикладных задач: при администрировании ОС, установке и конфигурировании необходимого прикладного ПО, удаленной работе, использовании средств ОС в прикладных целях.

Аттестация зачет устно

Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 2

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[064654] Учебная (ознакомительная) практика по работе с мировыми научными информационными ресурсами

Преподавательский состав

д.х.н., проф., Тенникова Татьяна Борисовна, t.tennikova@spbu.ru; д.х.н., проф., Грачёва Елена Валерьевна (координатор) e.grachova@spbu.ru; к.х.н., доц., Мельникова Наталья Анатольевна, n.melnikova@spbu.ru; д.х.н., проф., Кирсанов Дмитрий Олегович, d.kirsanov@spbu.ru; к.ф.-м.н., ст. преп., Тупикина Елена Юрьевна, e.tupikina@spbu.ru; д.х.н., доц., Ростовский Николай Витальев

Структура и краткое содержание курса

Цель курса – обучение навыкам осмысленного чтения научной литературы, определения текущих научных приоритетов, анализа научной информации, а также подготовки аннотаций/тезисов и презентаций докладов, выступлений перед профессиональной аудиторией и ведения научных дискуссий для формирования навыков работы с научной литературой и взаимодействия с аудиторией.
В ходе освоения дисциплины обучающиеся должны овладеть навыками поиска научной литературы в поисковых базах, способностью самостоятельно приобретать и использовать новые знания, в том числе в новых областях; приобрести умение работать с научными публикациями на английском языке, а также навыками структурирования научной информации.
Курс включает как индивидуальную подготовку, так и получение навыков работы в команде.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Осмысленное чтение научной литературы, включающее определение текущих научных приоритетов, поиск и организацию информации, в том числе, в незнакомых областях химической науки. Подготовки аннотаций, тезисов и презентаций докладов. Навыки выступлений перед профессиональной аудиторией и ведения научных дискуссий.

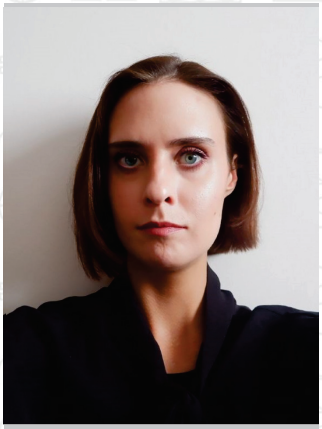
Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 3

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073371] Практическая квантовая биохимия



Преподавательский состав

к.ф.-м.н., старший преподаватель, Тупикина Елена Юрьевна
e.tupikina@spbu.ru,
каб. 2123

Структура и краткое содержание курса

Цель курса – освоение теоретических и практических знаний в области методов исследования электронного строения молекул и молекулярных комплексов.
Задачи курса – ознакомление с актуальными квантово-химическими методами анализа физико-химических свойств атомов, молекул и их комплексов для понимания особенностей их электронной структуры и строения, освоение необходимого программного обеспечения.
В рамках этого курса будут изучены актуальные вычислительные методы моделирования молекул и молекулярных комплексов, описания их электронной структуры на примере биологических систем с целью изучения их физико-химических свойств и понимания особенностей их структуры и строения. Основной акцент курса сделан на быстрое вовлечение обучающихся, не имеющих практического опыта проведения квантово-химических расчётов, в решение реальных практических задач для получения информации о геометрии, электронной структуре биомолекул, а также изучения реакционной способности, включая термодинамику реакций.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Студенты, успешно прошедшие курс:
• будут знать методы расчета зарядов на атомах, фундаментальные принципы построения функций, связанных с понятием электронной структуры – электронной плотности, электростатический потенциал, функция локализации электронов;
• будут уметь подбирать расчетную схему для расчетов зарядов на атомах, визуализировать особенности электронных оболочек молекул и молекулярных систем;
• будут знать основные методы моделирования термодинамики биохимических реакций;
• будут уметь интерпретировать результаты квантово-химических расчетов.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 2

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073368]
Деловое общение

Преподавательский состав

Осмоловская Ольга Михайловна
к.х.н., доцент
o.osmolovskaya@spbu.ru
офис 3166

Структура и краткое содержание курса

Курс направлен на приобретение обучающимися практических навыков основных форм делового общения.

Тема 0. Понятие делового общения. Психология делового общения. Деловой этикет. Виды и формы делового общения. Личное общение и общение с помощью коммуникативных средств. Причины, виды и способы разрешения деловых конфликтов.
Тема 1. Что такое самопрезентация и зачем она нужна? Виды и формы самопрезентации. Особенности самопрезентации в зависимости от её цели. Понятие личного бренда.
Тема 2. Что такое резюме и зачем оно нужно? Форматы составления резюме. Резюме и CV. Правила составления эффективного резюме. Основные ошибки при составлении резюме.
Тема 3. Деловые встречи: особенности участия, планирования и проведения. Виды, структура и этапы деловой беседы. Подготовка к деловой беседе. Презентация как элемент деловых коммуникаций. Особенности оформления презентаций и подготовки устного выступления.
Тема 4. Письменные виды делового общения. Деловое письмо. Виды и цели деловых писем. Правила оформления деловых писем и особенности деловой переписки. Деловое общение по почте, по электронной почте и в месседжерах.
Тема 5. Устные виды делового общения. Индивидуальное и групповое общение. Формы коммуникации при деловом общении. Особенности телефонных переговоров, видеоконференций и видеозвонков.

При прохождении курса обучающиеся выполняют 9 практических заданий по темам 1-5.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После окончания курса обучающиеся должны:
— иметь навык подготовки презентации своего профессионального уровня на основании доклада о выполненных научных работах
— уметь проводить телефонные переговоры
— иметь навык самопрезентации в видеоформате
— уметь составлять резюме или CV
— уметь планировать рабочий процесс таким образом, чтобы он занимал определенное время
— иметь навык ведения деловой переписке по различным тематикам

Полученные знания и навыки будут использоваться обучающимися в различных аспектах профессиональной деятельности, связанных со взаимодействием с деловыми партнерами.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 4

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073376] Программирование на Python 3

Преподавательский состав

Домнин Антон Владимирович, ассистент, a.domnin@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

В рамках данного курса студенты освоят синтаксис языка Python, изучат стандартные типы данных и конструкции, научаться писать собственные функции и классы. Помимо этого, студентам предстоит освоить высокопроизводительные библиотеки для научных вычислений, такие как NumPy, Pandas, SciPy. Полученные навыки позволят студенту решать прикладные задачи в области научных вычислений, обработке и визуализации данных.
Цель освоения курса – ознакомление с основами программирования и возможностями языка программирования Python 3. Обучающийся должен научиться решать базовые прикладные задачи на компьютере из области обработки текстовых и численных данных, научиться автоматизировать этот процесс, а также получить понимание о том, как можно применять язык Python для решения научных задач.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Данный курс позволит студентам получить понимание основных концепций программирования. Материалы курса, могут стать основой для дальнейшего изучения языков программирования и написания сложных программ. Курс предполагает расширение кругозора в области информационных технологий и получение новых знаний, которые могут пригодиться в работе. В контексте химических наук, прохождение курса "Программирование на Python3" может помочь студентам в автоматизации рутинных задач, обработке и анализе данных, моделировании и прогнозировании различных процессов и явлений, что может значительно ускорить и упростить работу.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 4

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073375] Основы физической химии и промышленно-значимые органические реакции

Преподавательский состав

Приходько Игорь Владимирович, к.х.н., доцент кафедры химической термодинамики и кинетики, e-mail – i.prikhodko@spbu.ru (модератор) каб.2148
Сорокоумов Виктор Николаевич, к.х.н., доцент кафедры органической химии, e-mail – v.sorokoumov@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Цель модульного курса – дать обучающимся магистратуры ООП «Цифровые технологии в химии» знания о подходах, используемых при описании физических явлений, сопровождающих химические реакции. В частности, будут изложены некоторые аспекты термодинамики гетерогенных равновесий, химической термодинамики.
Будут также даны базовые понятия органической химии, и рассмотрены механизмы протекания промышленно-значимых органических реакций.
Задачи курса – ознакомить обучающихся с термодинамическими основами и приложением этих основ к решению практических физико-химических проблем с помощью аппаратов феноменологической и статистической термодинамики, учения о химическом равновесии.
Кроме этого, в задачу курса входит ознакомление обучающихся с основами органической химии, важными органическими реакциями, которые встречаются в химической промышленности, механизмами их протекания.
В рамках освоения дисциплины предусмотрены семинарские занятия.

Для успешного освоения курса обучающиеся должны быть знакомы со школьными знаниями по химии (общей, неорганической и органической), успешно владеть материалами курсов «Высшая математика», «Общая физика», «Общая термодинамика» или «Термодинамика», «Статистическая термодинамика» или «Статистическая физика».

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Обучающиеся в рамках модуля "Основы физической химии" будут знакомы с фундаментальными и прикладными основами физической химии объемных фаз и современных методов изучения их строения и физико-химических свойств; у них будут сформированы знания в области физической химии и выработка практических навыков применения этих знаний. Будет создана фундаментальная база для самостоятельного выбора методов решения широкого круга физико-химических задач.

В рамках модуля "Промышленно-значимые органические реакции" обучающиеся познакомятся с основами органической химии, важными органическими реакциями, которые встречаются в химической промышленности и механизмами их протекания.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 4

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073374] Основы химии / Fundamentals of Chemistry

Преподавательский состав

Критченков Илья Сергеевич, к.х.н., доцент, i.s.kritchenkov@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Дисциплина предназначена дать обучающимся, не изучавшим химию в высшей школе, но имеющих подготовку в области физики и математики, знания по общей и неорганической химии. В рамках курса обучающиеся смогут сформировать систематические знания об электронном строении атомов и молекул, Периодическом законе Д.И. Менделеева, химической связи и межмолекулярных взаимодействиях; знания об описании химических процессов с точки зрения термодинамики и кинетики; знания о химических процессах в растворах, основах неорганической и координационной химии.
Курс включает 11 лекций, посвященных изложению теоретических основ изучаемой дисциплины и 11 семинаров, посвященных решению задач и разбору примеров.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Многие разделы химии пересекаются с физикой, в химии широко используется математический аппарат. Основная особенность химии заключается в отличном от других естественнонаучных дисциплин взгляде на природу вещей и используемой терминологии. После прохождения курса, обучающиеся освоят необходимую точку зрения, познакомятся с химическими формулировками основных законов и систематизируют знания по общей и неорганической химии. Содержание курса является необходимой основой для освоения специальных дисциплин, позволит принимать участие в научно-исследовательских проектах по направлению химия. В дальнейшем полученные знания могут быть использованы при работе на химических и фармакологических производствах, где существенно облегчат понимание протекающих технологических процессов и методов синтеза.

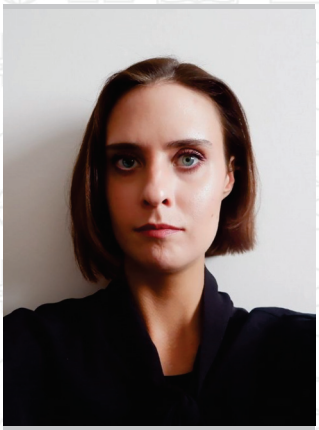
Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 4

1 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073373] Математические и физические методы для решения прикладных химических задач



Преподавательский состав

к.ф.-м.н., старший преподаватель, Тупикина Елена Юрьевна
e.tupikina@spbu.ru,
каб. 2123

Структура и краткое содержание курса

Цель курса – освоение обучающимися аппарата математики и физики, необходимого для моделирования физико-химических процессов.
Задача курса – дополнить знания, полученные в бакалавриате в рамках математических и физических дисциплин с акцентом на аспекты их прикладного применения.
Цель дисциплины – дать обучающимся, владеющим знаниями по химии, углубленные знания по математике и физике, необходимые для понимания математических принципов, лежащих в основе программирования, статистической обработке данных, и необходимые для понимания подходов к моделированию физических процессов и явлений, описания процессов химической технологии.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После прохождения курса студенты будут более уверенно владеть математическим и физическим аппаратом для решения практических физико-химических задач, что облегчит дальнейшее восприятие углубленных предметов. А также будут способны самостоятельно и грамотно создавать физико-химические модели различных процессов.

Аттестация экзамен устно

Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[064654] Учебная (ознакомительная) практика по работе с мировыми научными информационными ресурсами

Преподавательский состав

д.х.н., проф., Тенникова Татьяна Борисовна, t.tennikova@spbu.ru; д.х.н., проф., Грачёва Елена Валерьевна (координатор) e.grachova@spbu.ru; к.х.н., доц., Мельникова Наталья Анатольевна, n.melnikova@spbu.ru; д.х.н., проф., Кирсанов Дмитрий Олегович, d.kirsanov@spbu.ru; к.ф.-м.н., ст. преп., Тупикина Елена Юрьевна, e.tupikina@spbu.ru; д.х.н., доц., Ростовский Николай Витальев

Структура и краткое содержание курса

Цель курса – обучение навыкам осмысленного чтения научной литературы, определения текущих научных приоритетов, анализа научной информации, а также подготовки аннотаций/тезисов и презентаций докладов, выступлений перед профессиональной аудиторией и ведения научных дискуссий для формирования навыков работы с научной литературой и взаимодействия с аудиторией.
В ходе освоения дисциплины обучающиеся должны овладеть навыками поиска научной литературы в поисковых базах, способностью самостоятельно приобретать и использовать новые знания, в том числе в новых областях; приобрести умение работать с научными публикациями на английском языке, а также навыками структурирования научной информации.
Курс включает как индивидуальную подготовку, так и получение навыков работы в команде.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Осмысленное чтение научной литературы, включающее определение текущих научных приоритетов, поиск и организацию информации, в том числе, в незнакомых областях химической науки. Подготовки аннотаций, тезисов и презентаций докладов. Навыки выступлений перед профессиональной аудиторией и ведения научных дискуссий.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[0733781] Основные процессы химической технологии

Преподавательский состав

к.х.н., доцент, Зиновьев Алексей Леонидович

Структура и краткое содержание курса

Изучение основных процессов химической технологии обязательно для понимания сути происходящего на химическом производстве. Само по себе химическое производство – это не только контролируемые химические превращения, протекающие в специальных аппаратах, но и комплекс мероприятий, направленных на подготовку сырья и придание товарного качества получаемой продукции.
Первая тема данного курсе посвящена иерархии, классификации и равновесии процессов на химических производствах. Так же в рамках тематики рассматривается кинетика химических приращений, способов контролирования скорости реакции и влиянию катализа на кинетические характеристики процесса.
Вторая тема посвящена сердцу любого химического производства – химическим реакторам. Здесь раскрываются идеальные модели, классификация реакторов, влияния катализатора на выбор типа реактора. И нельзя не затронуть аспект связанный с проведением химической реакции в реальном, а не модельном реакторе. Третья тема посвящена энергетическим аспектам химического производства и критериям оценки эффективности производства. Четвертая тема посвящена самому началу любого производства, выпускающему товары, а именно сырью из которого производится сам товар. От сырьевой базы зависит себестоимость выпускаемой продукции, по этой причине нельзя не затронуть и логистические аспекты размещения химических производств. Пятая тема посвящена рассмотрению конкретных реально существующих производств химических товаров. Шестая тема рассматривает вопросы переработки углеводородных теплоносителей не только в энергию, но и в ценные химические продукты. В рамках седьмой темы рассматриваются возможные сбросы, выбросы и отходы химических производств, а также способам обращения с ними.

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После успешного освоения курса студенты приобретут основные знания по организации химических производств и ключевым принципам их организации. Позволяющие беспроблемно ориентироваться в новых разработках из области химической технологии, проводя их анализ формирующий понимание возможности внедрения их на проектируемых и уже существующих предприятиях химической отрасли.
Не маловажным знанием, приобретаемом в процессе обучения, является изучение структуры (иерархии) процессов на химическом производстве. Что позволяет выявлять общие закономерности и принципы устройства производства.
С целью планирования операций, проводимых на химико-технологическом производстве, в процессе обучения у учащихся формируются навыки необходимые для проведения расчетов химико-технологических процессов.
Для контроля эффективности химических процессов, обучающие приобретут знания и навыки составления и расчета материальных и энергетических балансов протекающих процессов.

Аттестация экзамен | письменно

Лабораторные / Практические работы да

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

073381 - Методы компьютерного молекулярного моделирования в разработке лекарственных молекул

Преподавательский состав

Гуреев Максим Александрович, к.х.н., научный сотрудник ПМГМУ им. И.М. Сеченова, gureev_m_a@staff.sechenov.ru

Структура и краткое содержание курса

Основная задача курса - формирование у обучающихся компетенций в области методов компьютерного моделирования применяемых для поиска и дизайна малых молекул, актуальных в качестве базы для лекарственных препаратов новых поколений. В ходе курса, учащиеся узнают о том, как программно интерпретируется химическая структура, как хранятся данные о ней в памяти устройства. Учащиеся ознакомятся со спектром вычислительных методов, позволяющих производить приоритезацию химического пространства в свете дизайна мишень-ориентированных малых молекул, в рамках концепции "золотой пули". Также в рамках курса запланировано знакомство с методами молекулярного моделирования биологических объектов: белков, нуклеиновых кислот а также полноценных элементов биологических систем. Рассматриваемая учебная программа относится к типу мультидисциплинарных, так как затрагивает широкий спектр следующих дисциплин: химия, биохимия, физика, математика, информатика, медицинская химия, фармакология, программирование.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

При успешном прохождении курса, учащиеся ознакомятся с наиболее актуальными методами молекулярного моделирования, приобретут навыки пользования соответствующим программным обеспечением, получат практические навыки, необходимые для выполнения задач, связанных с разработкой лекарственных молекул.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073380] Python для описания молекул и химических процессов

Преподавательский состав

Ассистент, Домнин Антон Владимирович.
a.domnin@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Данный курс направлен на то, чтобы познакомить обучающихся методами моделирования задач по химии и хемоинформатики с помощью мощного и популярного языка программирования Python 3.
В рамках данного курса, обучающийся должен научиться решать прикладные задачи из области химии и хемоинформатики, научиться автоматизировать этот процесс, а также получить понимание о том, как можно применять язык Python 3 для решения научных задач, таких как:
1. Анализ результатов моделирования, (траектории молекулярной динамики, кластеризация и т.д.)
2. Научатся работать с молекулярными дескрипторами.
3. Освоят более продвинутые навыки программирования, которые необходимы при создании эффиктивынх вычислительных систем.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

В рамках этого курса студенты познакомятся с основными типами дескрипторов (описательных метрик) для характеризации различных свойств молекул и химических процессов. Научатся использовать ряд библиотек Python3 и стороннего ПО для получения необходимых метрик. Освоят ключевые подходы к генерации датасета молекулярных признаков, и анализу признаков на предмет корреляционных зависимостей, выбросов, кластеров данных. Научатся проводить декомпозицию матрицы признаков, оценивать ее адекватность. Используя ключевые алгоритмы машинного обучения, научатся оценивать их релевантность и воспроизводимость при обработке химических данных, получат представление об основных ограничениях. Научатся выделять метрики, ключевые в работе конкретного алгоритма, оценивать их валидность.

Аттестация зачет устно

Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073383] Методы математического моделирования в решении химических задач

Преподавательский состав

кандидат физико-математических наук, старший преподаватель физического факультета СПбГУ, Елисеев Степан Иванович
s.i.eliseev@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Программные пакеты численного моделирования стали неотъемлемым инструментом прикладных разработок и фундаментальных исследований в области химии. Их широкое распространение обусловлено тем, что они не требуют от пользователя существенных познаний в области численного анализа. С одной стороны, это позволяет быстро и эффективно решать типовые задачи, однако с другой стороны существенно ограничивает спектр возможностей, доступный для неподготовленного пользователя.
В рамках "Методы математического моделирования в решении химических задач" Вы познакомитесь с теоретическими основами методов численного моделирования и сможете на практике самостоятельно реализовать алгоритмы численного решения базовых задач прикладной химии, химической кинетики, электрохимии, плазмохимии и т. д. Как результат, вы сможете с уверенностью использовать современные инструменты численного моделирования, а также создавать свои программы для решения узкоспециализированных задач.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Освоение курса "Методы математического моделирования в решении химических задач " позволит Вам приобрести общие знания в области численных методов решения дифференциальных уравнений, познакомиться с современными методами численного моделирования, выработать навыков работы с современными программными средами численного моделирования, а также приобрести опыт реализации численных алгоритмов на примере решения конкретных физико-химических задач. Как результат, Вы сможете с уверенностью использовать современные инструменты численного моделирования, а также создавать свои решения для узкоспециализированных задач.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073385] Обработка многомерных химических данных на языке R

Преподавательский состав

д.х.н., профессор кафедры аналитической химии Института химии СПбГУ
Кирсанов Дмитрий Олегович

Структура и краткое содержание курса

Применение методов машинного обучения для решения химических задач имеет ряд специфических особенностей, связанных с природой химических данных. Курс посвящен изучению этой специфики, на множестве примеров реальных данных обучающиеся научатся пользоваться методами многомерной классификация и регрессии для решения задач аналитической, физической химии и химического материаловедения.
В ходе курса мы познакомимся с матричным представлением химических данных, основами работы в среде статистических вычислений R, подробно изучим метод главных компонент, научимся реализации метода штатными средствами R, интерпретации графиков счетов и нагрузок в этом метода. Мы изучим основные методы многомерной классификации и дискриминации, применяемые к химическим данным: метод ближайших соседей, метод SIMCA, научимся проводить анализ данных этими алгоритмами в библиотеках R. Мы также познакомимся с алгоритмами, применяемыми для количественного анализа химических данных и численного прогнозирования различных химических параметров: методом множественной линейной регрессии, методом регрессии по главным компонентам, методом проекций на латентные структуры.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После прохождения курса вы будете знать важнейшие методы многомерной обработки химических данных, используемые в современной химии, овладеете основами применения среды статистических вычислений R для решения химических задач, сможете применять методы хемометрики для проведения разведочного анализа данных, многомерной классификации и дискриминации, многомерного регрессионного моделирования.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073384] Молекулярная динамика для решения прикладных задач

Преподавательский состав

Петров Андрей Витальевич, инженер-исследователь
a.petrov@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Метод молекулярной динамики позволяет рассчитывать физико-химические свойства материалов на основе атомно-молекулярного подхода. Характер межмолекулярных взаимодействий выбирается на основе квантово-химического или эмпирического подходов. Осуществление выбора параметров силового поля производится в соответствии с процедурами фиттинга по заявленным экспериментальным данным. В рамках пакета Materials studio производится конструирование изучаемой системы и её моделирование в программе Forcite. Анализ результатов расчётов по среднеквадратичным смещениям частиц показывает диффузионные характеристики, а радиальные функции распределения дают информацию о структурных факторах в изучаемой системе. Практические расчёты будут производиться в режиме высокопроизводительных вычислений с применением суперкомпьютерных ресурсов РЦ ВЦ СПбГУ.

Метод молекулярной динамики успешно применяется для компьютерного моделирования жидкостей, растворов, кристаллов, стеклообразного состояния, полимеров, биологических структур, поиска новых материалов, изучения механизмов межатомного и межмолекулярного взаимодействий. К особенностям метода относится важный для практического примененния анализ поведения атомов и молекул в моделируемых системах при различных температурах и давлениях.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После прохождения курса студент умеет создать силовое поле для поставленной задачи и выбранных соединений. На основе созданного силового поля проверяется его соответствие экспериментальным данным для изучаемых соединений. В дальнейшем, адекватное силовое поле применяется для содания модельной системы, включающей в себя изучаемое соединение и его взаимодействия с другими компонентами системы. На основе анализа молекулярно-динамических расчётов проводится оценка диффузионных характеристик процессов и структурных особенностей изучаемого материала.

Аттестация зачет | балльно-рейтинговая

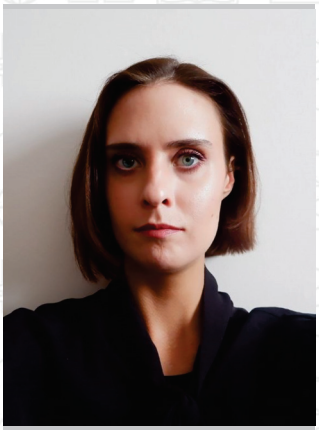
Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 2

2 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073386] Полуэмпирические методы в химическом расчетном эксперименте



Преподавательский состав

к.ф.-м.н., старший преподаватель, Тупикина Елена Юрьевна
e.tupikina@spbu.ru,
каб. 2123

Структура и краткое содержание курса

Основной целью курса является ознакомление обучающихся с возможностями полуэмпирических методов в современной квантовой химии. Задачами курса являются обоснование модельных полуэмпирических теорий, обсуждение границ их применимости, а также самостоятельная работа обучающихся над реальными примерами использования освоенных методов.
Курс предназначен для ознакомления с методами расчётов применимых для относительно крупных молекулярных систем (> 100 атомов) с использованием скромных вычислительных ресурсов (обычный ПК). В рамках курса студенты познакомятся с теми приближениями, которые лежат в основе теории полуэмпирических методов, а также пройдут блок практических занятий на реальных производственных примерах. После освоения курса студенты смогут самостоятельно проводить предсказательные расчёты in silico перед синтезом интересных соединений с точки зрения синтетических или фармакологических свойств.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Студенты, успешно освоившие материал курса:
• получат навык самостоятельного проведения расчетов электронной структуры молекулярных систем с использованием современных полуэмпирических методов;
• будут уметь использовать основные современные полуэмпирические методы расчетов электронной структуры;
• уметь критично оценивать полученные результаты и демонстрировать понимание границ применимости методов полуэмпирической квантовой химии;
• смогут самостоятельно подбирать подходящий метод для решения поставленной расчетной задачи.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 4

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073389]
Управление проектами

Преподавательский состав

Осмоловская Ольга Михайловна
к.х.н., доцент
o.osmolovskaya@spbu.ru
офис 3166

Структура и краткое содержание курса

БАЗОВЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель учебной дисциплины - обеспечить приобретение обучающимися базовых теоретических и практических навыков в области управления проектами.
Задачи курса заключаются:
— в получении представлений о проектном менеджменте и методах управления проектами,
— в получении практических навыков работы в команде и выполнения совместного проекта.

Часть 1. Менеджмент в управлении организацией.
Часть 2. Что такое проект и проектная деятельность.
Часть 3. Популярные методы управления проектами, их достоинства и недостатки.
Часть 4. Организационные структуры управления проектами, их достоинства и недостатки.
Часть 5. Программное обеспечение для управления проектами – описание функционала, преимущества и недостатки.

После окончания лекционного курса обучающиеся проходят тестирование по основным освоенным темам и получают допуск к проектной деятельности (проводится в команде от 4 до 6 человек; посвящена решению кейса, предложенного работодателями, сотрудниками или студентами СПбГУ; включает составление плана внедрения предложенного решения).
Аттестация проводится на основании оценки преподавателем дневника рефлексии, который заполняется обучающимся в ходе участия в проектной деятельности.

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После окончания курса обучающиеся будут:
— знать основные принципы и методы управления проектами
— иметь навык планирования и реализации командного проекта
— иметь практический опыт реализации командных проектов
— уметь планировать свой график и самообучаться для успешного выполнения поставленных для реализации проекта целей

Полученные знания и навыки будут широко использоваться обучающимися в различных аспектах профессиональной деятельности, в том числе для повышения личной эффективности; освоение курса поможет в организации и выполнении работ по различным проектам таким образом, чтобы наилучшим образом достичь поставленных целей и задач.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 2

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073404] Refactoring. Code Development Practice

Преподавательский состав

Ассистент, Домнин Антон Владимирович.
a.domnin@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Рефакторинг — это процесс изменения уже написанного компьютерного кода без изменения его внешнего поведения. Рефакторинг позволяет значительно улучшить исходный код программы, удешевив дальнейшее обслуживание. Рефакторинг проводится уже после написания кода, поэтому процесс должен быть контролируемым и тщательно обдуманным. Чтобы применять рефакторинг, нужно хорошо знать плюсы и минусы всех способов.
Цель этого курса — научить обучающихся создавать более простую, чистую или более выразительную внутреннюю архитектуру для повышения читаемости и уменьшения сложности исходного кода программ.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Курс предназначен для студентов которые часто сталкиваются с необходимостью написания собственных программ, и участвовать в поддержке и адаптации старых решений для новых условий. Курс направлен на понимание сути рефакторинга, чтобы сам процесс не был самоцелью, крайне важно определить правильный момент для рефакторинга и как он внедряется в процесс каждодневной разработки.

Аттестация зачет устно **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 2

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073398] Компьютерное моделирование для поиска лекарств (на английском языке) / Computational Modeling in Drug Discovery (in English)

Преподавательский состав

Гуреев Максим Александрович, к.х.н., научный сотрудник ПМГМУ им. И.М. Сеченова, gureev_m_a@staff.sechenov.ru

Структура и краткое содержание курса

Основная задача курса - знакомство обучающихся с методами компьютерного моделирования применяемых для поиска и дизайна малых молекул, актуальных в качестве базы для лекарственных препаратов новых поколений. Учащиеся ознакомятся со спектром вычислительных методов, позволяющих производить приоритезацию химического пространства в свете дизайна мишень-ориентированных малых молекул, в рамках концепции "золотой пули". В рамках курса запланировано знакомство с методами молекулярного моделирования биологических объектов: белков, нуклеиновых кислот а также полноценных элементов биологических систем.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

При успешном прохождении курса, учащиеся ознакомятся с наиболее актуальными методами молекулярного моделирования и соответствующим программным обеспечением, получат практические навыки применения английской терминологии, используемые для описания задач и результатов, связанных с разработкой лекарственных молекул.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 2

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073404] Refactoring. Code Development Practice

Преподавательский состав

Ассистент, Домнин Антон Владимирович.
a.domnin@spbu.ru

Структура и краткое содержание курса

Рефакторинг — это процесс изменения уже написанного компьютерного кода без изменения его внешнего поведения. Рефакторинг позволяет значительно улучшить исходный код программы, удешевив дальнейшее обслуживание. Рефакторинг проводится уже после написания кода, поэтому процесс должен быть контролируемым и тщательно обдуманным. Чтобы применять рефакторинг, нужно хорошо знать плюсы и минусы всех способов.
Цель этого курса — научить обучающихся создавать более простую, чистую или более выразительную внутреннюю архитектуру для повышения читаемости и уменьшения сложности исходного кода программ.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Курс предназначен для студентов которые часто сталкиваются с необходимостью написания собственных программ, и участвовать в поддержке и адаптации старых решений для новых условий. Курс направлен на понимание сути рефакторинга, чтобы сам процесс не был самоцелью, крайне важно определить правильный момент для рефакторинга и как он внедряется в процесс каждодневной разработки.

Аттестация зачет устно **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 2

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073399] Компьютерное моделирование химических систем и процессов

Преподавательский состав

Рязанцев Михаил Николаевич, д.х.н., m.ryazantsev@spbu.ru
доцент Института Химии СПбГУ

Структура и краткое содержание курса

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

В рамках данного курса изучаются методы квантовой химии, используемые для расчета свойств химических веществ и моделирования химических реакций. Основная особенность курса заключается в том, что знакомство со всеми методами происходит естественным образом путем выполнения практических заданий. Теоретические знания излагаются в минимальном объеме, необходимом для осмысленного использования методов квантовой химии. Изложение начинается с самых основ и доводится до уровня, который позволяет обучающимся использовать методы моделирования в научной и практической деятельности.

Структура курса.
Раздел 1. Основные понятия и методы квантовой химии. Атомные и молекулярные орбитали, основные подходы к решению уравнений квантовой механики. Основы работы с программами для проведения квантово-химических расчетов.
Раздел 2.Основные ab initio методы квантовой химии и методы функционала плотности.
Раздел 3. Поверхность потенциальной энергии. Оптимизация геометрии молекулярных систем.
Раздел 4. Моделирование колебательных спектров. Расчет термодинамических характеристик молекулярных систем.
Раздел 5. Теория переходного состояния. Реакционные координаты. Методы поиска переходных состояний в химических реакциях. Моделирование механизмов химических реакций.

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

В рамках курса обучающиеся научатся использовать методы квантовой химии, включая ab initio методы и методы функционала плотности, для расчета свойств химических веществ и моделирования химических реакций. Полученные после прохождения курса знания позволят обучающимся проводить полноценные исследования с использованием методов квантовой химии, начиная от постановки практической задачи и заканчивая анализом данных и интерпретацией результатов.

Аттестация зачет балльно-рейтинговая **Лабораторные / Практические работы** нет

Количество зачетных единиц 2

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073397] Каталитические антитела: история, применимость и ограничения абзимов (на английском языке) Catalytic Antibodies: History, Applicability, and Limitations of Abzymes (in English)

Преподавательский состав

Соловьев Ярослав Владимирович,
младший научный сотрудник, Институт биоорганической химии РАН

Структура и краткое содержание курса

В рамках курса обучающиеся познакомятся с основными классами антител млекопитающих, строением их белковых глобул, ролями в организме, а также с молекулярными механизмами гипервариабельности антител и основными механизмами природной и промышленной селекции антител.
в рамках данного курса, будут затронуты темы:
1) Анализ ключевых стадий цикла работы ферментов как наиболее эффективных биокатализаторов на примерах основных классов энзимов
2) Обсуждение теории переходного состояния Л. Поллинга, обсуждение концепта молекулы - аналога переходного состояния на примере конкретных реакций
3) Анализ существующих каталитических антител, структурный анализ их каталитических центров
4) Обзор базовых подходов к разработке новых каталитических тел методами вычислительной и квантовой химии, разбор ограничений, накладываемых средой и белковой матрицей на типы возможных реакций

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Основной целью данного курса является знакомство слушателей с концепцией каталитического антитела, как одной из наиболее совершенных платформ для создания новых гетерогенных катализаторов на основе белковых матриц. Обучающиеся познакомятся с основными in silico и in vitro подходами создания каталитических антител, их преимуществами и недостатками относительно «классических» ферментов. Пройдя настоящий курс обучающиеся, опираясь на знания по методам компьютерного моделирования молекулярных систем и процессов, полученных в рамках других курсов, смогут участвовать в разработке новых каталитических антител путем выполнения компьютерного моделирования.

Аттестация зачет устно

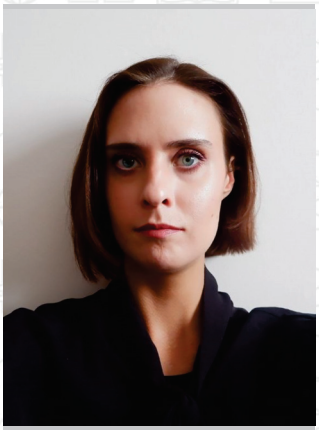
Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 2

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073403] Machine learning in chemistry
Машинное обучение в химии (на английском языке)



Преподавательский состав

к.ф.-м.н., старший преподаватель, Тупикина Елена Юрьевна
e.tupikina@spbu.ru,
каб. 2123

Структура и краткое содержание курса

Целью данного курса является ознакомление студентов с возможностями современного машинного обучения в решении прикладных химических задач. Задачей курса будет базовый обзор типов алгоритмов и их технических особенностей, необходимых для дальнейшей самостоятельной работы с ними. Данный курс посвящен исследованию границ применимости машинного обучения для решения химических задач. В частности, студенты узнают, как искусственный интеллект применялся исследователями в области химии и биологии в последние годы, как правильно сформулировать задачу для машинного обучения, и какое будущее ждет искусственный интеллект в естественных науках. В рамках курса планируется совместно обсуждать литературу на тему машинного обучения, в частности работы современных исследователей.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Студенты будут ориентироваться в англоязычной литературе на тему машинного обучения, будут знать возможности современных методов машинного обучения, уметь выбирать алгоритм машинного обучения для конкретной задачи, а также понимать границы применимости полученных результатов.

Аттестация зачет устно

Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 4

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073396] Цифровые двойники – от простейших моделей к интеграционным решениям / Digital Twins - from Simple Models to Integration Solutions

Преподавательский состав

Вознесенский Михаил Андреевич, к.ф.-м.н., доцент, m.voznesenskiy@spbu.ru, каб. 2124;

Структура и краткое содержание курса

Курс ориентирован на знакомство обучающих с понятием цифрового двойника, принципами его создания, этапами внедрения и принципами использования. В широком смысле слова, цифровой двойник - это копия объекта в виртуальной среде. Цифровой двойник с высокой точностью воспроизводит процессы и операции на предприятии, в установке или системе и позволяет решать широкий спектр бизнес-задач. Цифровые двойники позволяют производить анализ производственных и технологических процессов, оптимизировать их, повышая эффективность.

В рамках курса будут рассмотрены основные этапы: обследование, разработка, валидация и эксплуатация начиная от простых химических процессов.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Курс позволит сформировать представление о разработке цифровых двойников в химическом производстве. Курс позволит обучающимся принимать участие в разработке и реализации стратегий цифровой трансформации, ориентироваться в изменении бизнес-процессов и бизнес-моделей в ходе цифровизации.

Аттестация экзамен устно

Лабораторные / Практические работы нет

Количество зачетных единиц 4

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073393] Прикладное программирование на C++ / Applied Programming in C++

Преподавательский состав

Вознесенский Михаил Андреевич, к.ф.-м.н., доцент, m.voznesenskiy@spbu.ru, каб. 2124;

Структура и краткое содержание курса

Курс направлен, во-первых, на знакомство с широко применяемым в программировании языке C++, во-вторых, на изучение особенностей программирования микроконтроллеров.
Язык C++ является относительно старым многофункциональным языком программирования высокого уровня, подобным таким более современным языкам как Python, но в отличие от последнего он имеет возможность работы с командами низкого уровня, подобно языку ассемблера. Программу на языке C++ можно скомпилировать в машинный код практически для любого известного микропроцессора, в том числе и для микроконтроллеров. Популярность использования (особенно для начинающих) язык Си++ обогнал превышает доминировавший ранее язык ассемблера ввиду наглядности и неизменности стандартов.
Особенностями программирование микроконтроллеров связано со спецификой управления реальными объектами. Программа микроконтроллера не должна никогда заканчиваться, представляя собой бесконечный цикл, во-вторых, в программировании микроконтроллеров используются практические не встречающиеся в классическом программировании побитовые операции, когда необходимо взаимодействовать с одним битом регистра, игнорируя другие.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

После освоения курса, обучающиеся получат базовые знания о языке программирования C++, что, с учетом знаний по иным языкам программирования, полученным в рамках других курсов, позволит им читать и писать программы на языке C++. Обучающиеся познакомятся с основами программирования микроконтроллеров, основными принципами использования побитовых операций и структуры программ для микроконтроллеров.
Помимо прочего язык C++ является широко используемым при разработке операционных систем семейства Linux.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 4

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073394] Системы управления химико-технологическими процессами / Control systems for chemical processes

Преподавательский состав

к.т.н., доцент, Рудакова Ирина Викторовна
rudakova@technolog.edu.ru
к.т.н., доцент, Ремизова Ольга Александровна
remizova-oa@technolog.edu.ru

Структура и краткое содержание курса

Семинары в объеме 20 часов проводятся в активной и интерактивной форме в группах численностью не более 15 человек. Включают занятия по теме моделирование объекта управления с построением аналитической и экспериментальной моделей; изучение про-цедуры структурного и параметрического синтеза одноканатных систем регулирования; изучение методик расчета метрологических оценок результатов измерения, полученных при различных способах организации измерительных цепей; занятие по изучению норма-тивной базы для разработке схемы автоматизации, как одного их основных элементов проектной документации.
Работы под руководством преподавателя в объеме 18 часов проводятся в активной форме в группах численностью не более 15 человек. Включают изучение компьютерных симу-ляторов при изучении базы технологического программирования логических контролле-ров и основ создания интерфейсов, сценариев в SCADA-системе; занятия по получению практических навыков в разработке схемы автоматизации технологических объектов не-прерывного и периодического действия.
Работы в присутствии преподавателя в объеме 20 часов проводятся в интерактивной форме в группах численностью не более 15 человек. Включают работу в группах по про-ектированию АСУ небольшого технологического узла с разработкой системы автомати-зации, подбором технического обеспечения АСУ и разработкой программного обеспече-ния для программируемого логического контроллера и SCADA-системы.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

Обучающийся знает:основы проектирования интегрированных систем управления на уровне АСУ ТП с учетом использования цифровых технологий;типовые законы регулирования, основы формирования алгоритмов систем логического управления, и блокировки, владеет основами технологического программирования промышленных логических контроллеров и имеет знания по разработке систем диспетчеризации в определенной SCADA-системе; номенклатуру и области применения современных технических средств автоматизации, способы формирования измерительных цепей и цепей управления преимущественно на базе цифровых технологий.
Обучающийся владеет навыками формирования математических моделей простых технологических объектов, способен выделять свойства объектов, знает задачи, решаемые на уровне АСУТП, где требуется наличие математического описания объекта.
Обучающийся умеет обоснованно выбрать структуру системы регулирования, способен провести синтез системы регулирования с применением системы инженерного проектирования.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** да

Количество зачетных единиц 4

3 СЕМЕСТР

Код и название дисциплины

[073392] Моделирование физико-химических процессов и проведение инженерных расчетов в COMSOL

Преподавательский состав

Ph.D. СПбГУ (Физика), доцент, Чирков Владимир Александрович
v.chirkov@spbu.ru, ул. Ульяновская, д. 1, Л-533

Структура и краткое содержание курса

Цель дисциплины — расширение возможностей студентов по моделированию физических и физико-химических процессов и решению инженерных задач за счёт инициализации применения современных программных пакетов и улучшение умозрительных представлений о характерных физико-химических явлениях при помощи анализа численных решений. В задачи курса входит: развить навыки использования программного комплекса COMSOL Multiphysics; научиться моделировать научные и инженерные задачи, основанные на различных физических и физико-химических явлениях; научиться проводить глубокий анализ результатов полученного решения и оценивать степень достоверности результатов расчёта.
Курс состоит из лекционных и практических занятий. На лекциях обучающимся показывается, как создавать модели в COMSOL Multiphysics, включая построение геометрии, создание конечно-элементной сетки, выбор системы математических уравнений, задание граничных условий и настройка решателя. На практических занятиях проводится закрепление теоретического материала при решении физико-химических задач. Примерами рассматриваемых задач являются: задачи электростатики и токопрохождения (в 2D и 3D постановках), гидродинамика в стационарном и переходном случаях, теплофизические расчёты, перенос частиц в слабых электролитах и диффузионные процессы. После подготовки отчётов по каждой задаче обучающиеся делают доклад и обсуждают получившиеся результаты. Оценивается как качество изложения материала и надёжность результатов, полученных докладчиком, так и навыки проведения дикуссии со стороны слушателей.

ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ

Навыки после прохождения курса / Как можно применить полученные знания

По результатам прохождения курса слушатели получают навыки численного моделирования физико-химических процессов; умеют настраивать общие технические параметры численной модели, такие как точность, масштабы расчётных переменных, размеры конечно-элементной сетки; умеют выбирать систему математических уравнений, позволяющую создать цифровую копию изучаемого процесса; способны автоматизировать процесс изменения параметров для поиска оптимального решения поставленной задачи.
Полученные знания и навыки нужны для моделирования работы физико-химического оборудования, оценки его параметров на этапе проектирования и определения способов улучшения его характеристик. Также слушатели могут применять полученные умения для создания наглядных моделей различных изучаемых процессов, что способствует улучшению понимания их особенностей. Кроме прочего, создание моделей физико-химических процессов позволяет численно проверять степень влияния на итоговый результат каждого параметра в отдельности, что не всегда возможно сделать экспериментально.

Аттестация экзамен устно **Лабораторные / Практические работы** да