

Государственное автономное образовательное учреждение
дополнительного образования «Региональный центр выявления, поддержки
и развития способностей и талантов у детей и молодежи
Республики Башкортостан «Аврора»

«РАССМОТРЕНО»

На заседании экспертного совета

Протокол № 33

От 22.02.2023

«УТВЕРЖДЕНО»

Директор

ГАОУ ДО ЦРТ «Аврора»

О. А. Саргаев

приказ № 23 от 22.02.2023



**ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ
ПРОГРАММА**
**«Цифровой практикум для подготовки к очному финалу Национальной
технологической олимпиады по профилю «Новые материалы»»**

Срок реализации: 27 февраля-11 марта 2023 г.

Объем программы: 40 часов

Уфа – 2023

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Курс «Цифровой практикум для подготовки к очному финалу Национальной технологической олимпиады по профилю «Новые материалы» представляет собой серию занятий длительностью 45 минут каждый. Занятия подразделяются на лекционные, практические, выполнение лабораторных работ и индивидуальные консультации.

1.1 Цель цифрового практикума

Целями освоения цифрового практикума «Методы цифровой электрохимии» являются:

формирование у учащихся современных представлений об основных методах и уровне научных достижений в области электрометрии и хеометрики - (электрохеометрии), о их практической роли в контроле производственных процессов, инструментальном анализе и мониторинге различных физико-химических процессов, классификации многокомпонентных растворов.

1.2 Задачи цифрового практикума

1. Дать представления о методах и актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной технологии электроаналитической химии в рамках концепции бигдата и цифровой экономики.
2. Обучить методами анализа вольтамперных временных рядов при решении задач мониторинга электрохимических процессов, синтеза новых сенсорных материалов, задач классификации и распознавания образов и аналитического контроля производственных процессов с использованием электрометрии.

Перечень планируемых результатов обучения по цифровому практикуму.

Таблица 1 – Результаты обучения по цифровому практикуму.

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной	Планируемые результаты обучения по цифровому практикуму, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
код компетенции	наименование компетенции		
ПК-3	Способен использовать программные средства для компьютерного моделирования оборудования, технологических процессов химических производств используя методы цифровой электрохимии	ПК-3.1 Знает основные методы программных средств для компьютерного моделирования оборудования, технологических процессов химических производств, используя методы цифровой электрохимии	Знать основные методы хемометрики для первичного анализа многомерных данных и временных рядов – метод главных компонент и проекцию на латентные структуры; методики на их основе для решения задач классификации, распознавания образов, регрессионного анализа на примере электрохимических данных; методы анализа временных рядов (искусственные нейронные сети, фрактальная теория, теория перколяции)
		ПК-3.2 Умеет и владеет программными средствами компьютерного моделирования оборудования, технологических процессов химических производств с использованием методов цифровой электрохимии	Уметь использовать современное программное обеспечение для преобразования данных в матричный вид и моделирования с использованием проекционных методов МГК и ПЛС при решении задач аналитического контроля технологических процессов химических и электрохимических производств, в том числе органического синтеза; алгоритмы, реализующие искусственные нейронные сети, метод фрактального

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной	Планируемые результаты обучения по цифровому практикуму, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
код компетенции	наименование компетенции		
			анализа временных рядов, дискретного геометрического инварианта, обобщенного метода главных компонент с структурированием вольтамперометрических данных.

ПК-профессиональная компетенция

Таблица 2 – Содержание цифрового практикума, структурированное по темам (разделам).

№ п/п	Раздел (тема) цифрового практикума	Содержание	Объем, час
1	2	3	
1	Основы мультисенсорного электрохимического анализа	Развитие одно и мультieleктродных сенсорных систем, оценка аналитических характеристик, области применения. Основные блоки мультисенсорных систем, функционирующих в рамках концепции больших данных. Достоинства и недостатки. Классификация.	6
2	Мультисенсорные системы типа «электронный язык»	Классификация мультисенсорных систем анализа многокомпонентных растворов по типу электродных реакций, по природе аналита, по виду аналитических сигналов. Научные группы РФ, развивающие подходы к анализу с использованием потенциометрии, кондуктометрии, вольтамперометрии, импедансометрии. Сравнительный анализ возможностей и аналитических характеристик различных «электронных языков»	6
3	Практическое приложение мультисенсорных систем. Коммерческие продукты: обзор возможностей, аналитические характеристики	Литературный обзор аналитических задач и путей их решения мировыми научными группами в области мультисенсорного электрохимического анализа, задачи распознавания, классификации, определения веществ в сырье, промежуточных продуктах, товарах конечного потребления в сфере пищевой, фармацевтической, нефтяной, автомобильной, авиационной промышленности и др.	6
4	Хеометрические подходы к исследованию кинетики и термодинамики процессов с использованием вольтамперометрии	Методы анализа многомерных данных в термодинамическом и кинетическом анализе физико-химических процессов (электродных и НЕэлектродных), определение энтропийного и энтальпийного факторов, способы кинетического анализа веществ с использованием принципов хеометрики	6
5	Тенденции развития электрохимии в условиях цифровой трансформации	Бигдата вольтамперных временных рядов: новаторские подходы к исследованию эволюции электродных систем, подходы к распознаванию многокомпонентных растворов с использованием темпорального подхода	6
ИТОГО			30

Практические работы.

Таблица 3 – Практические работы.

№	Наименование практической работы	Объем, час.
1	Основы мультисенсорного электрохимического анализа	2
2	Мультисенсорные системы типа «электронный язык»	1
3	Практическое приложение мультисенсорных систем. Коммерческие продукты: обзор возможностей, аналитические характеристики	1
4	Современные подходы к аналитическому контролю производственных процессов, оценка качества сырья, продуктов с использованием цифровых методов электрометрии	1
5	Виртуальная задача распознавания многокомпонентного раствора с использованием метода МГК (промежуточный итог)	1
6	Методы фрактального анализа вольтамперных временных рядов	1
7	Хеометрические подходы к исследованию кинетики и термодинамики процессов с использованием вольтамперометрии	1
8	Виртуальная задача мониторинга электрохимического процесса с использованием методов МГК и ПЛС(итоговый контроль практики)	2
ИТОГО		10

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по цифровому практикуму

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по данной цифровому практикуму организуется:

Медиатекой профиля «Новые материалы»:

- библиотечный фонд укомплектован учебной, методической, научной, периодической, справочной литературой;
- имеется доступ к основным информационным образовательным ресурсам, информационной базе данных реальных электрохимических экспериментов, в том числе библиографической, возможность выхода в Интернет.
- путем обеспечения доступности всего необходимого учебно-методического и справочного материала;
- путем предоставления сведений о наличии учебно-методической литературы, современных программных средств с использованием удаленных рабочих столов – виртуально лаборатории моделирования.

Образовательные технологии.

Реализация компетентностного подхода предусматривает широкое использование в образовательном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования универсальных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций обучающихся.

Таблица 4 – Интерактивные образовательные технологии, используемые при проведении онлайн занятий

№	Наименование раздела (темы лекции, практического или лабораторного занятия)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Объем, час.
1	2	3	
1	Методы анализа многомерных данных в термодинамическом и кинетическом анализе физико-химических процессов	Виртуальная лаборатория моделирования по хемометрике	1
2	Решение контрольных модельных задач	Цифровой практикум на базе Trello	5
Итого:			6

Практическая подготовка обучающихся при реализации цифрового практикума осуществляется путем проведения практических занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с финальной задачей Олимпиады и направленных на формирование, закрепление, развитие практических навыков и компетенций по электрометрии и хемометрике.

Содержание цифрового практикума обладает значительным воспитательным

потенциалом, поскольку в нем аккумулирован исторический и современный научный опыт научных групп в области аналитической химии, информатики, хемометрики, электрохимии. Реализация воспитательного потенциала цифрового практикума осуществляется в рамках единого образовательного и воспитательного процесса и способствует непрерывному развитию личности каждого обучающегося. Цифровой практикум вносит значимый вклад в формирование профессиональной культуры обучающихся. Содержание цифрового практикума способствует гражданскому, патриотическому, экономическому, профессионально-трудовому, экологическому воспитанию обучающихся.

Реализация воспитательного потенциала цифрового практикума подразумевает:

- целенаправленный отбор преподавателем и включение в лекционный материал, материал для практических и лабораторных занятий содержания, демонстрирующего обучающимся образцы настоящего научного подвижничества создателей и представителей данной отрасли науки (производства, экономики, культуры), высокого профессионализма ученых (представителей производства, деятелей культуры), их ответственности за результаты и последствия деятельности для природы, человека и общества; примеры подлинной нравственности людей, причастных к развитию науки, культуры, экономики и производства, а также примеры высокой духовной культуры, патриотизма, гражданственности, гуманизма, творческого мышления;
- применение технологий, форм и методов преподавания цифрового практикума, имеющих высокий воспитательный эффект за счет создания условий для взаимодействия обучающихся с преподавателем, другими обучающимися, представителями работодателей (командная работа, проектное обучение, деловые игры, разбор конкретных ситуаций, решение кейсов, мастер-классы и др.);
- личный пример преподавателя, демонстрацию им в образовательной деятельности и общении с обучающимися за рамками образовательного процесса высокой общей и профессиональной культуры.

Реализация воспитательного потенциала цифрового практикума на учебных занятиях направлена на поддержание в команде финалистов НТО единой развивающей образовательной и воспитательной среды. Реализация воспитательного потенциала цифрового практикума в ходе самостоятельной работы обучающихся способствует развитию в них целеустремленности, инициативности, креативности, ответственности за результаты своей работы – качеств, необходимых для успешного решения финальной задачи НТО, и, в целом - профессионального становления.

Примерные тематики виртуальных практических и лабораторных работ без частного обозначения объекта исследования.

1. Новые подходы к вольтамперометрическому исследованию "старения" углерод и металл содержащих материалов с использованием методов вольтамперометрии и PLS темпорального подхода.
2. Анализ вольтамперных временных рядов электропроводящих материалов при перколяции в их поверхностные слои органических компонентов нефтяных фракций.
3. Вольтамперометрическая мультисенсорная система типа "электронный нос" на основе перколяционных кластеров с сорбентом и электропроводящим модификатором для контроля состава газов.
4. Распознавание техногенных загрязнителей воздуха и их смесей в продуктах испарения/десорбции/разложения компонентов различных твердых материалов, используемых в промышленности и быту, с использованием электрохимии и хемометрии.
5. Исследование электрохимического «старения» screen-printed электродов в различных электролитах.
6. Оценка специфичности и чувствительности темпоральных сенсоров на основе углерод содержащих электродов.
7. Новый подход к определению вольтамперометрических фазовых портретов динамических сенсорных систем.
8. PLS-t метод вольтамперометрического исследования кинетики адсорбционных процессов с участием ПАВ.
9. Композитный электрохимический сенсор на основе анилина и его аналогов для определения качества/распознавания спиртных напитков.
10. Оценка степени загрязнения воды с использованием screen-printed электродов и искусственных нейронных сетей.
11. Сравнительный анализ чувствительности и специфичности распознавания многокомпонентных растворов, на примере солей неорганических ионов, по методам SIMCA, PLS-DA и ИНС в условиях хроноамперометрии.
12. Исследование вольтамперометрического поведения перколяционных электродов на основе пасты Carborack в водных средах.

13. Вольтамперометрия моторных масел в угольных пастовых электродах с Carborack в темпоральных условиях функционирования электрохимической системы.
14. Перколяционные пастовые электроды и их сенсорные системы на основе углерода и металлсодержащих композитов.
15. Оценка специфичности и чувствительности темпоральных сенсоров на основе металл содержащих электродов.
16. Электрохимический сенсор на основе индикаторной полимеризации анилина для определения качества продукта питания.
17. Электрохимический сенсор на основе индикаторной полимеризации анилина для определения качества меда.
18. «Вольтамперометрическая сенсорная система типа «электронный нос» на основе перколяционных углеродных электродов».
19. Вольтамперометрическая мультисенсорная система типа «электронный язык» для распознавания прекурсоров НС и ПВ.
20. Мониторинг электрохимического оксидирования металлических сплавов по методу главных компонент.
21. Темпоральный метод оценки коррозионной активности слабых электролитов и их смесей.
22. Онлайн-мониторинг электрохимической регенерации поверхности металлов.
23. Новый подход к исследованию вольтамперометрического поведения электроактивных компонентов по методу дифференциальных временных рядов.
24. Сравнительный анализ метрологических характеристик электрохеометрических методик определения качества антикоррозионных покрытий.
25. Совершенствование темпоральных способов мониторинга электрохимических процессов с переносом электронов.
26. Характеризация вольтамперных временных рядов ёмкостных токов и их количественное описание по методу проекций на латентные структуры.
27. Количественное описание дифференциальных временных рядов токов с использованием вейвлет-преобразования.

28. Мультиэлектродные сенсорные системы на основе электроактивных маркеров - производных анилина.

29. Импедансометрическое поведение ионогенных ПАВ в потенциодинамическом режиме регистрации спектров и их распознавание по методу главных компонент.

30. Сравнительный анализ темпоральных свойств электродных систем с твердыми электродами в условиях циклической вольтамперометрии.
Финалисты при выполнении практических заданий в части математического моделирования экспериментальных данных используют технологию удаленного рабочего стола – авторскую виртуальную лабораторию моделирования по хемометрики со специализированным программным обеспечением.

При решении модельных инженерных задач каждый обучающийся получает в лаборатории уникальную базу данных вольтамперных временных рядов и проводит МГК, ПЛС-моделирование по следующим этапам.

1. Преобразование данных в матричный вид
2. Экспорт в ПО The Unscrambler
3. Моделирование по методу главных компонент – построение графиков счетов и нагрузок. Выявление промахов.
4. Поиск основных стадий «старения» электрохимической системы.
5. Транспонирование матрицы данных и моделирование по методу проекции на латентные структуры.
6. Структурирование вольтамперограмм.
7. Оценка темпоральных параметров электрохимической системы.

Обсуждение результатов проводится на виртуальной платформе цифрового практикума на базе Трелло и на вебинарах.

УТВЕРЖДАЮ
 _____ / Саргаев О.А.
 «___» _____ 2023 г.

Расписание образовательной программы «Цифровой практикум для подготовки к очному финалу Национальной технологической олимпиады по профилю «Новые материалы»

№	Тип занятия	Тема занятия	Количество часов	Преподаватель	Дата и время
1.	Лекционное занятие	Основы мультисенсорного электрохимического анализа	6	А.В. Сидельников	27.02.2023 (15.00-19.00), 28. 02.2023 (15.00-17.00)
2.	Практическое занятие	Основы мультисенсорного электрохимического анализа	2	А.В. Сидельников	28.02.2023 (17.00-19.00)
3.	Лекционное занятие	Мультисенсорные системы типа «электронный язык»	6	А.В. Сидельников	01.03.2023 (15.00-19.00), 02. 03. 2023 (15.00-17.00)
4.	Практическое занятие	Мультисенсорные системы типа «электронный язык»	1	А.В. Сидельников	02. 03. 2023 (17.00-18.00)
5.	Лекционное занятие	Практическое приложение мультисенсорных систем. Коммерческие продукты: обзор возможностей, аналитические характеристики	6	А.В. Сидельников	03.03.2023 (15.00-19.00), 06. 03. 2023 (15.00-17.00)
6.	Практическое занятие	Практическое приложение мультисенсорных систем. Коммерческие продукты: обзор возможностей, аналитические характеристики	1	А.В. Сидельников	06. 03. 2023 (17.00-18.00)
7.	Лекционное занятие	Хемометрические подходы к исследованию кинетики и термодинамики процессов с использованием вольтамперометрии	6	А.В. Сидельников	07.03.2023 (15.00-19.00), 08. 03. 2023 (15.00-17.00)

8.	Практическое занятие	Современные подходы к аналитическому контролю производственных процессов, оценка качества сырья, продуктов с использованием цифровых методов электрометрии	1	А.В. Сидельников	08. 03. 2023 (17.00-18.00)
9.	Лекционное занятие	Тенденции развития электрохимии в условиях цифровой трансформации	6	А.В. Сидельников	09.03.2023 (15.00-19.00), 10. 03. 2023 (15.00-17.00)
10.	Практическое занятие	Виртуальная задача распознавания многокомпонентного раствора с использованием метода МГК (промежуточный итог)	1	А.В. Сидельников	10. 03. 2023 (17.00-18.00)
11.	Практическое занятие	Методы фрактального анализа вольтамперных временных рядов	1	А.В. Сидельников	10. 03. 2023 (18.00-19.00)
12.	Практическое занятие	Хемометрические подходы к исследованию кинетики и термодинамики процессов с использованием вольтамперометрии	1	А.В. Сидельников	11.03.2023 (10.00-11.00)
13.	Практическое занятие	Виртуальная задача мониторинга электрохимического процесса с использованием методов МГК и ПЛС(итоговый контроль практики)	2	А.В. Сидельников	11.03.2023 (12.00-14.00)
ИТОГО			40		

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения цифрового практикума.

Основная учебная литература.

1. Основы аналитической химии: В 2-х книгах / Под ред. Ю.А. Золотова. М.: Высшая школа 2004.
2. Будников Г.К., Майстренко В.Н., Вяселев М.Р. Основы современного электрохимического анализа. М.: БИНОМ, 2011. 592 с.
3. Померанцев А.Л. Хемометрика в Excel: учебное пособие, Томск, Из-во ТПУ, 2014, 434 стр. (ISBN 978-5-4387-0374-7)
4. 2. R.G. Brereton. Applied Chemometrics for Scientists. Wiley, Chichester, UK, 2007
5. Будникова Ю.Г. Современный органический электросинтез. Принципы, методы исследования и практические приложения. НИЦ ИНФРА-М, 2016 440 с.

Дополнительная учебная литература.

1. Органическая электрохимия кн.1. Перевод с английского Гириной Г.П., Кокорекиной В.А., Мендковича А.С., под ред. Петросяна В.А., Феоктистова Л.Г. М.: Химия, 1988. – 472 с.
2. Дёрффель К. Статистика в аналитической химии. М.: Мир, 1994. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. Л.: Химия, 1984.
3. ГОСТ Р ИСО 5725-2002. Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. М.: Госстандарт России.

Приступая к изучению цифрового практикума, финалисту необходимо внимательно

ознакомиться с тематическим планом занятий, списком рекомендованной учебно-методической литературы, ознакомиться в медиатеке с рекомендованными учебниками, учебно-методическими пособиями, завести новую тетрадь для конспектирования лекций и выполнения практических заданий.

В ходе видеолекций вести конспектирование учебного материала.

Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.

Самостоятельная работа обучающихся предполагает работу с научной и учебной литературой. В ходе подготовки к лабораторно-практическим занятиям следует изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях. При этом учесть рекомендации

преподавателя и требования учебной программы. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем и предусмотренной учебной программой.

Другие учебно-методические материалы.

1. Андреев И.Н. Введение в электрохимические технологии. Лекционный курс – Казань: КГТУ, 2006. – 78 с.
2. Органическая электрохимия кн.1. Перевод с английского Гириной Г.П., Кокорекиной В.А., Мендковича А.С., под ред. Петросяна В.А., Феоктистова Л.Г. М.: Химия, 1988. – 472 с.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения цифрового практикума.

1. Авторская виртуальная лаборатория математического моделирования по хемометрике.
2. Наименование ресурса сети «Интернет» Электронный адрес ресурса
3. «Российское образование» - федеральный портал <https://www.edu.ru/>
4. Научная электронная библиотека <https://elibrary.ru/defaultx.asp?>
5. Национальная исследовательская компьютерная
6. сеть России
7. <https://niks.su/>
8. Информационная система «Единое окно доступа к
9. образовательным ресурсам»
10. <http://window.edu.ru/>
11. Электронная библиотека ВГУИТ <http://biblos.vsuet.ru/megapro/web>
12. Сайт Министерства науки и высшего образования РФ <https://minobrnauki.gov.ru/>
13. Портал открытого on-line образования <https://npoad.ru/>
14. Электронная информационно-образовательная среда
15. ФГБОУ ВО «ВГУИТ
16. <https://education.vsuet.ru/>

Методические указания для обучающихся по освоению цифрового практикума.

Основными видами аудиторной работы обучающегося при изучении цифрового практикума «Методы цифровой электрохимии» являются видео лекции и практические занятия на компьютерах.

На лекциях излагаются и разъясняются основные понятия темы, связанные с ней теоретические и практические проблемы, даются рекомендации для самостоятельной работы. В ходе лекции обучающийся должен внимательно слушать и конспектировать материал.

Изучение наиболее важных тем или разделов цифрового практикума