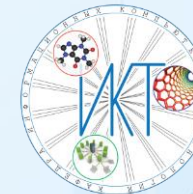


ФГБОУ ВО Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева



Отчет по учебно-методической и научной работе

Кафедры информационных компьютерных технологий за 2020 – 2023 гг.

Докладчик: Заведующий кафедрой, проф. Кольцова Э.М.

26 октября 2023 г.

Кадровый состав кафедры (на 2023 г.)

Профессорско-преподавательский состав:

• Профессора, доктора наук	– 2
• Доценты, кандидаты наук	– 11
• Старшие преподаватели	– 3
• Ассистенты, кандидаты наук	– 2
• Ассистенты	– 12
ВСЕГО:	– 30 (15,35 ст.)
Средний возраст ППС	– 41,0 лет
Кандидатов наук – до 35 лет	– 3
Средний рейтинг преподавателей	– 4,5586
Аспирантов	– 12
Учебно-вспомогательный персонал	– 8 (3,1 ст.)

Профориентационная работа

- Руководство школьными исследовательскими работами в рамках конкурсов проектов и прикладных исследований школьников и студентов на основе реальных задач работодателей, организованных при поддержке Департаментов образования и информационных технологий г. Москвы: **«Школа реальных дел»**
- Дистанционное проведение занятий и виртуальных лабораторных работ для школьников по общей и неорганической химии
- Участие в организации и проведении **«Университетских суббот»**
- Участие в организации и проведении **«Фестиваля науки»**
- Экскурсионное посещение кафедры школьниками г. Москвы и Московской области 2020 – 2023 гг. (более 200 чел.)
- Контекстная интернет-реклама кафедры (2020 – 2023 гг.):
 - **на сайте www.yandex.ru**
 - **на сайте <https://www.ucheba.ru/> (~ 500 000 р.)**
 - **социальная сеть ВКонтакте**

Профориентационная работа

7-й год кафедра ИКТ выигрывает и организует проект «Университетские субботы» Департамента образования и науки города Москвы, в рамках которого преподаватели РХТУ им. Д.И. Менделеева проводят лекции и практические занятия для московских школьников, а также студентов колледжей, техникумов.

Стоимость проекта 2 000 000 руб.

Преподаватели кафедры ИКТ участвовали в проекте «Университетские субботы» со следующими мероприятиями:

- Мастер-класс «Изучаем химию в виртуальной лаборатории и сами создаем лабораторную посуду»
- Лекция «Углеродные нанотрубки. Современные области применения»

На 2023 год запланированы:

- Лекция «Каталитические химические реакции»
- Лекция «О равновесии в химии и химической технологии»
- Мастер-класс «Строим трёхмерную модель молекулы в Avogadro»
- Мастер-класс «Химическая реакция на компьютере: изучаем, рассчитываем, смотрим»



Практикум по общей и неорганической химии

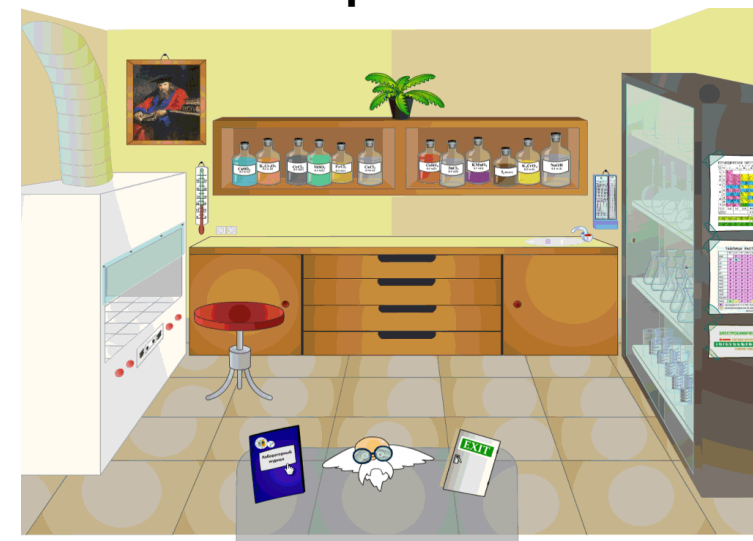
Размещён на Учебном портале РХТУ в свободном доступе:

<https://moodle.muctr.ru/course/view.php?id=144>

Практикум ОиНХ - Вся деятельность (все роли)



Практикум содержит
172 лабораторных
работ



Получено два авторских свидетельства:

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020616566. Химическая лаборатория в виртуальной реальности / Литвиненко А.А., Васецкий А.М., Кольцова Э.М., Василенко Е.А., Дикая Н.Н., Филиппова Е.Б., заявка №2020612578 от 06.03.2020, регистрация от 18.06.2020, дата публикации: 18.06.2020.

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020616424. Программный комплекс по общей и неорганической химии для лабораторного практикума в виртуальной реальности. Раздел «Щелочные и щелочноземельные металлы» / Василенко Е.А., Литвиненко А.А., Дикая Н.Н., Филиппова Е.Б., Васецкий А.М., Миронова Е.А., Кольцова Э.М., заявка №2020612577 от 06.03.2020, регистрация от 17.06.2020, дата публикации: 17.06.2020.

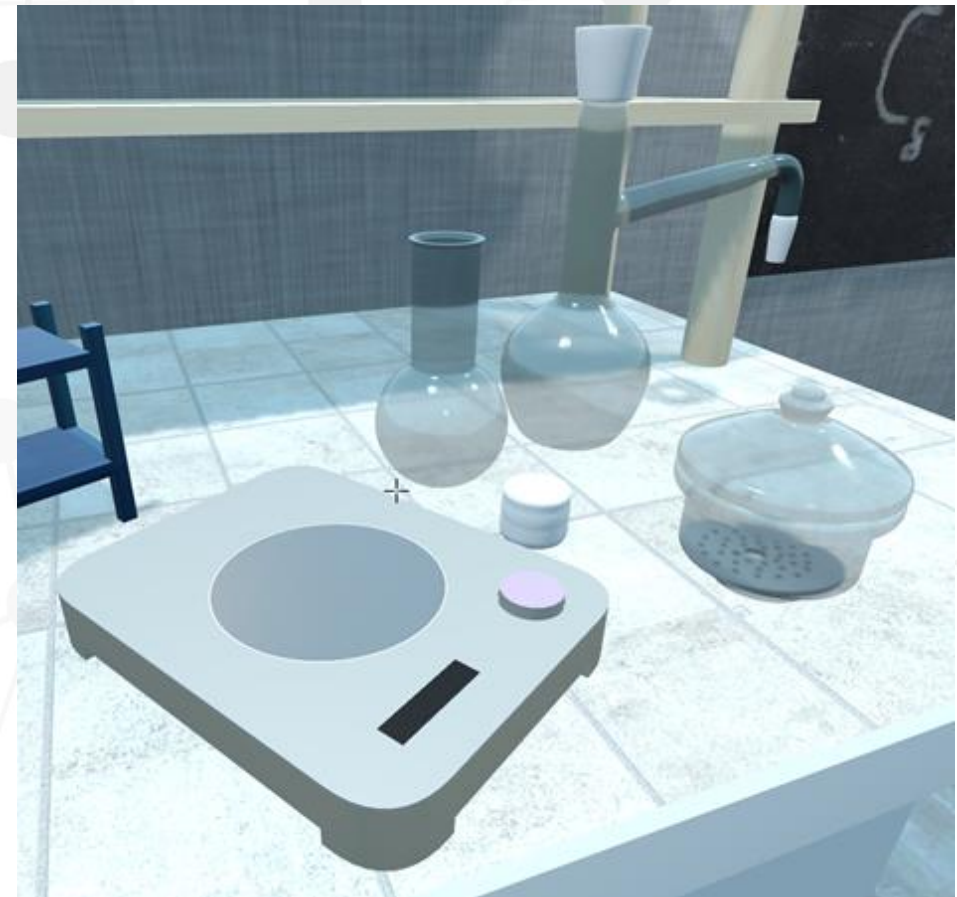
Виртуальный лабораторный практикум по общей и неорганической химии

Содержит **92** лабораторные работы

Вид виртуальной химической 3D-лаборатории в Unity3D



Фрагмент виртуальной лабораторной работы

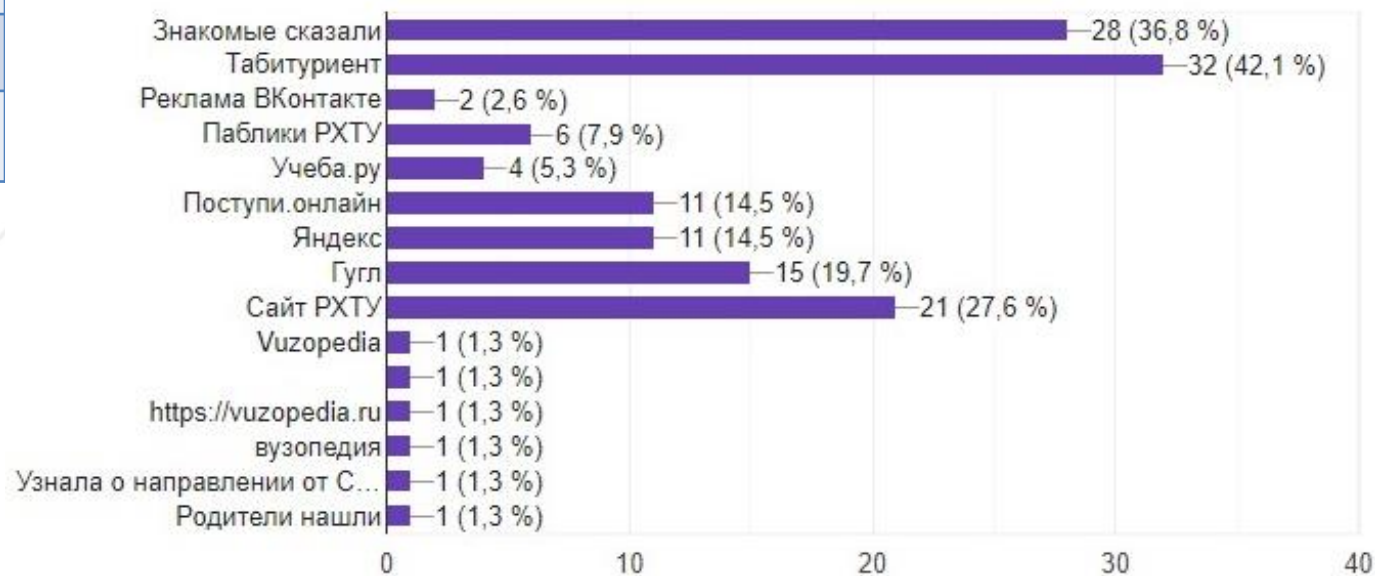


Набор бакалавриата по УГСН 09.03.00

Год поступления	Численность набора	Год окончания
2017	43	2021
2018	44	2022
2019	45	2023
2020	114	2024
2021	80	2025
2022	100	2026
2023	105	2027

Данные по набору абитуриентов (2021 – 2023 гг.)

Год	Направление подготовки	План приема	Подано заявлений	Конкурс по заявлениям	Проходной балл
2021	09.03.01 бакалавриат	80	570	7,13	217
	09.03.02 бакалавриат				
2022	09.03.00 бакалавриат	100	591	5,91	229
2023	09.03.00 бакалавриат	105	464	4,42	207
2021	09.04.02 магистратура	25	25		
2022	09.04.02 магистратура	21	32		
2023	09.04.02 магистратура	ИСТ - 9	43		
		ИИ - 8	40		



Профессионально-общественная аккредитация



Федеральный Интернет-экзамен

Год	Направление	Результаты
2021	09.03.01	1 золотой сертификат 2 серебряных сертификата 2 бронзовых сертификата
	09.03.02	2 серебряных сертификата 2 бронзовых сертификата
2022	09.03.01	3 серебряных сертификата 4 бронзовых сертификата
	09.03.02	4 золотых сертификата 3 серебряных сертификата 3 бронзовых сертификата



Учебная работа

Количество дисциплин, преподаваемых по направлениям бакалавриата	
09.03.01 «Информатика и вычислительная техника»	30
09.03.02 «Информационные системы и технологии», профиль «Информационные системы и технологии»	34
09.03.02 «Информационные системы и технологии», профиль «Искусственный интеллект»	32
Количество дисциплин, преподаваемых по направлению магистратуры	
09.04.02 «Информационные системы и технологии»	
магистерская программа «Информационные технологии для цифрового проектирования»	17
магистерская программа «Искусственный интеллект»	17
Количество групп студентов РХТУ по общим дисциплинам, преподаваемым по направлениям бакалавриата, магистратуры, специалитета, аспирантуры университета	> 30

Участие студентов в хакатонах



Команда «Акулята» - победители хакатона Microsoft Ai for Good 2021 с проектом Gorilla Gest - интерпретатор натуральной речи на жестовый язык.

Команда «E(co)²de» - победители хакатона Microsoft Ai for Good компании Aware IT от партнера компании Microsoft с проектом «Нейромусорка» (2022 г.)

Команда «Беременный трамвайчик» заняла 3 место на хакатоне Microsoft Ai for Good. Ребята применили Power Apps, Lobe AI для создания приложения, мотивирующего детей к занятиям спортом (2022 г.)

Команда «KOD в мешке» заняла 3 место среди 57 команд на хакатоне «Лидеры цифровой трансформации (ЛЦТ)», проводимым Департаментом предпринимательства и инновационного развития г. Москвы, с работой «Рекомендательный сервис по размещению социальной инфраструктуры по г. Москва (на примере МФЦ)» (2021 г.)

MendelevTeam - заняла 4 место среди 63 команд на хакатоне ЛЦТ 2022 в треке «Рекомендательный сервис по размещению постаматов в рамках проекта Московский постамат».

Команда E(co)²de победители кейс-чемпионата «Катализатор роста» организованный Акселератором Mendelev совместно с компанией «Уралхим» (2022 г.)

zero_gravity.RED - заняла 5 место среди 97 команд на хакатоне ЛЦТ 2023 в треке ХК «Северсталь» «Модель раннего обнаружения неисправностей промышленного оборудования» (2023 г.)



ДЕПАРТАМЕНТ
ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА
И ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ
ГОРОДА МОСКВЫ



The background features a light blue gradient with a central white horizontal band. On the left and right sides, there are vertical decorative borders. These borders consist of a repeating pattern of light blue hexagons and molecular structures. The molecular structures are composed of small blue and grey spheres connected by thin lines, resembling a network or a complex molecule. The overall aesthetic is clean, modern, and scientific.

Учебно-методическая работа кафедры

Учебная работа кафедры (электронные ресурсы)

Информационно-образовательные ресурсы, представленные на учебном портале РХТУ им. Д.И. Менделеева <http://moodle.muctr.ru/>

1. Программирование с использованием графических ускорителей
2. Администрирование ОС Linux
3. Многомасштабное компьютерное моделирование
4. Основы параллельного программирования
5. Инструментальные средства технологического проектирования
6. Базы данных
7. Защита интеллектуальной собственности
8. Защита информации
9. Инженерия информационных систем
10. Информационные технологии в химии
11. Компьютерное моделирование химико-технологических процессов
12. Корпоративные сети и системы
13. Виртуализация и облачные вычисления
14. Математическое и программное обеспечение расчета химических реакторов
15. Методы и средства проектирования информационных систем и технологий
16. Моделирование в AutoCad
17. Общая и неорганическая химия
18. Операционные системы
19. Инфокоммуникационные системы и сети
20. Теория информационных процессов и систем
21. Технологии обработки информации
22. Численные методы в среде MATLAB
23. Численные методы решения уравнений математической физики и химии
24. Язык программирования C++
25. Web-программирование
26. Дипломникам
27. НИР
28. Практика студентов

Учебно-методическая работа кафедры

2020	1	Кольцова Э.М., Митричев И.И. Многомасштабное компьютерное моделирование
	2	Васецкий А.М. Библиотеки в программировании на языке PYTHON
	3	Васецкий А.М. Программирование на языке Python. Лабораторный практикум
	4	Дударов С.П., Дементиенко А.В. Исследование нечетких множеств и нечетко-логических операций
	5	Митричев И.И., Семенов Г.Н. Язык программирования C++
2022	6	Василенко В.А. Двумерное проектирование в AutoCAD

Готовятся к изданию пособия:

Шанева А.С., Миронова Е.А., Скичко Е.А. Информационные технологии в образовании

Филиппова Е.Б. Инструментальные средства компьютерного моделирования ХТС

Книги в издательстве Юрайт



1. Численные методы решения уравнений математической физики и химии: учебное пособие для академического бакалавриата / Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса. - 2-е изд., испр. и доп. - М.: Издательство Юрайт, 2021. - 220 с.
2. Системный анализ процессов химической технологии: массовая кристаллизация: монография / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов, Э. М. Кольцова ; отв. ред. Н. М. Жаворонков. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Издательство Юрайт, 2021. - 368 с.
3. Системный анализ процессов химической технологии: методы неравновесной термодинамики: монография / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов, Э. М. Кольцова ; отв. ред. Н. М. Жаворонков. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Издательство Юрайт, 2021. - 367 с.
4. Синергетика в химии и химической технологии: учебное пособие для академического бакалавриата / Э. М. Кольцова, Л. С. Гордеев. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Издательство Юрайт, 2021. - 295 с.
5. Термодинамика необратимых процессов и нелинейная динамика: учебное пособие для вузов / Э. М. Кольцова, Л. С. Гордеев, Ю. Д. Третьяков, А. А. Вертегел. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва: Издательство Юрайт, 2021. - 430 с.

Дополнительные профессиональные программы

на цифровой кафедре РХТУ им. Д.И. Менделеева
руководитель кафедры – доцент кафедры ИКТ Красильников И.В.

Программа «Информационные технологии и инструменты цифровизации химических производств»

Название дисциплины	Ведущий преподаватель
«Язык программирования Python»	ассистент Крашенинников Р.С.
«Основы теории алгоритмов»	доцент Красильников И.В.
«Инструменты разработки и внутренней оптимизации веб-сайтов»	доцент Папаев П.Л.
«Управление данными в организациях химической отрасли»	ассистент Дементиенко А.В.

Программа «Прикладные методы, средства и технологии искусственного интеллекта»

Название дисциплины	Ведущий преподаватель
«Искусственные нейронные сети»	доцент Дударов С.П.
«Основные подходы и принципы разработки программных продуктов в организациях химической отрасли»	ассистент Иванов С.И.
«Структура и интерпретация компьютерных программ»	доцент Красильников И.В.
«Библиотеки языка Python для компьютерных вычислений и моделирования»	ассистент Лобанов А.В.
«Управление данными в организациях химической отрасли»	ассистент Дементиенко А.В.

Выпускники кафедры (2021-2023 гг.)

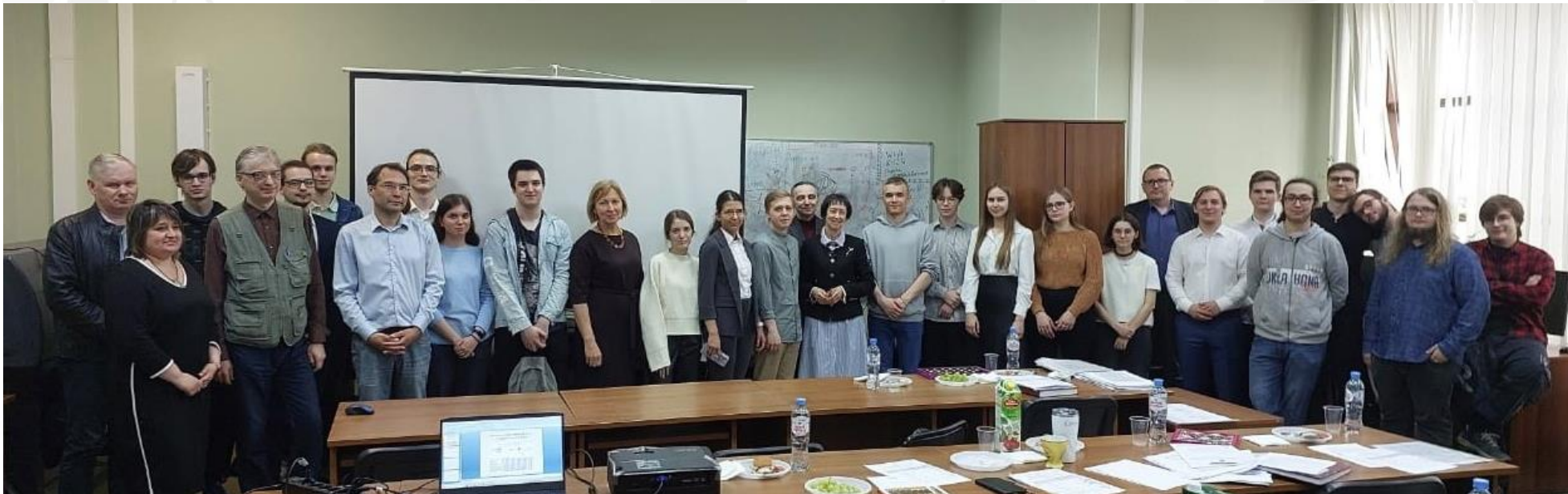
Общее количество выпускников – **176** человек, в том числе:

Бакалавры – **122** человека

Магистры – **54** человека

	2020	2021	2022	2023
% дипломных работ, оцененных ГЭК на «отлично»,	80,0	73,53	69,23	84,30
из них с красным дипломом, чел.	6	3	6	16

Выпуск 2023 г.



Трудоустройство выпускников

Кем работать	Где работать
<ul style="list-style-type: none">➤ IT-специалист➤ Web-программист➤ Программист на различных языках➤ Инженер по сопровождению программного обеспечения➤ Архитектор информационных систем обработки данных➤ Специалист по анализу больших данных➤ Системный администратор➤ Проектировщик➤ Специалист по работе с САПР➤ Разработчик интеллектуальных систем и баз данных➤ Руководитель IT проектов, направлений, IT директор	<ul style="list-style-type: none">➤ Российские IT-компании➤ Заводы и предприятия различных отраслей➤ Проектно-конструкторские компании и институты➤ Фирмы, занимающиеся автоматизацией, САПР и моделированием➤ Научно-исследовательские институты и учреждения➤ Госучреждения

Рейтинг 30 лучших ВУЗов России по IT-специальностям

Года	2020	2021	2022
Рейтинг IT-специалист, по данным сайта Superjob.ru	19	17	20
Средняя зарплата наших выпускников-разработчиков, руб.	82 000	95 000	100 000

Курсы повышения квалификации преподавателей

Другие организации		
1.	«Подготовка учащихся с помощью цифровых моделей нефтегазовых производств», ООО «РТСИМ» (2022 г.)	1
2.	«Цифровой дизайн в программах дисциплин», АНО ВО «Университет Иннополис» (2022 г.)	1
3.	«Реализация индивидуальных образовательных траекторий в масштабах всего университета с помощью цифровых технологий», Тюменский государственный университет (2021 г.)	1
4.	«Преподаватель в области искусственного интеллекта», Национальный исследовательский университет ИТМО (2023 г.)	7
5.	«Язык программирования Java (Java SE10)», МГТУ им. Н.Э. Баумана (2020 г.)	1
6.	«Технологии Microsoft Azure для образования. Современные технологии для подготовки поколения будущего», АНО ПО «ИТ ХАБ» (2021 г.)	3
7.	«Большие данные и цифровой образовательный инжиниринг», Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (2021 г.)	1

За 2020 – 2023 гг. сотрудники кафедры ИКТ прослушали **21** курс

Направления научной деятельности кафедры

№	Направления	Руководитель
1	Разработка математического описания и программного обеспечения для решения прикладных задач в нанотехнологиях, водородной энергетике, биоинформатике, нефтехимии и химической технологии	Кольцова Э.М.
2	Создание и оптимизации современных электрохимических устройств и технологий, на их основе подготовка инструментария для отрасли водородной энергетике	Ананьев М.В.
3	Разработка методов расчета кинетических параметров каталитических реакций (от атомарного уровня до макроуровня) (с привлечением квантовохимических расчетов)	Митричев И.И.
4	Разработка программного обеспечения в области создания катализаторов нового поколения	Женса А.В.
5	Моделирование и оптимизация топливных элементов: с полимерной мембраной, биотопливных, микробных	Василенко В.А.
6	Методы искусственного интеллекта и интеллектуальные информационные системы для решения задач экологической безопасности химических производств	Дударов С.П.
7	Проектирование цифровых двойников и фабрик будущего	Кольцова Э.М.

Финансирование НИР (тыс. руб.)

Заказчик	2020	2021	2022	2023	ИТОГО:
Минобрнауки (госконтракты по ФЦП)	500				500
Гранты РФФИ	1 950	1 750	1 183		4 883
Программа Приоритет 2030	–	–	–	3 900	3 900
ИТОГО:	2 450	1 750	1 183	3 900	9 283

Гранты кафедры ИКТ за 2020-2023 года

Программа Приоритет 2030

приоритет2030[^]
лидерами становятся

Проект V.2 ЦТВЭ Цифровые технологии для водородной энергетики


Руководитель работ: Кольцова Элеонора Моисеевна, заведующий кафедрой ИКТ, д.т.н., профессор

Гранты РФФИ

- Исследование фундаментальных закономерностей, математическое моделирование и оптимизация процесса консолидации композитной порошковой шихты ультрарастойких композитов на основе карбида кремния, модифицированного субмикронными частицами диоксида циркония, грант РФФИ **№ 19-37-90149**
- Предсказательное моделирование агрегативной устойчивости гидрозолей смешанных оксидов $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$, грант РФФИ **№ 20-07-00886**
- Изучение магнитных свойств серебряных и медных хиральных нанотрубок, грант РФФИ **№ 20-33-90215**

Научные публикации сотрудников кафедры

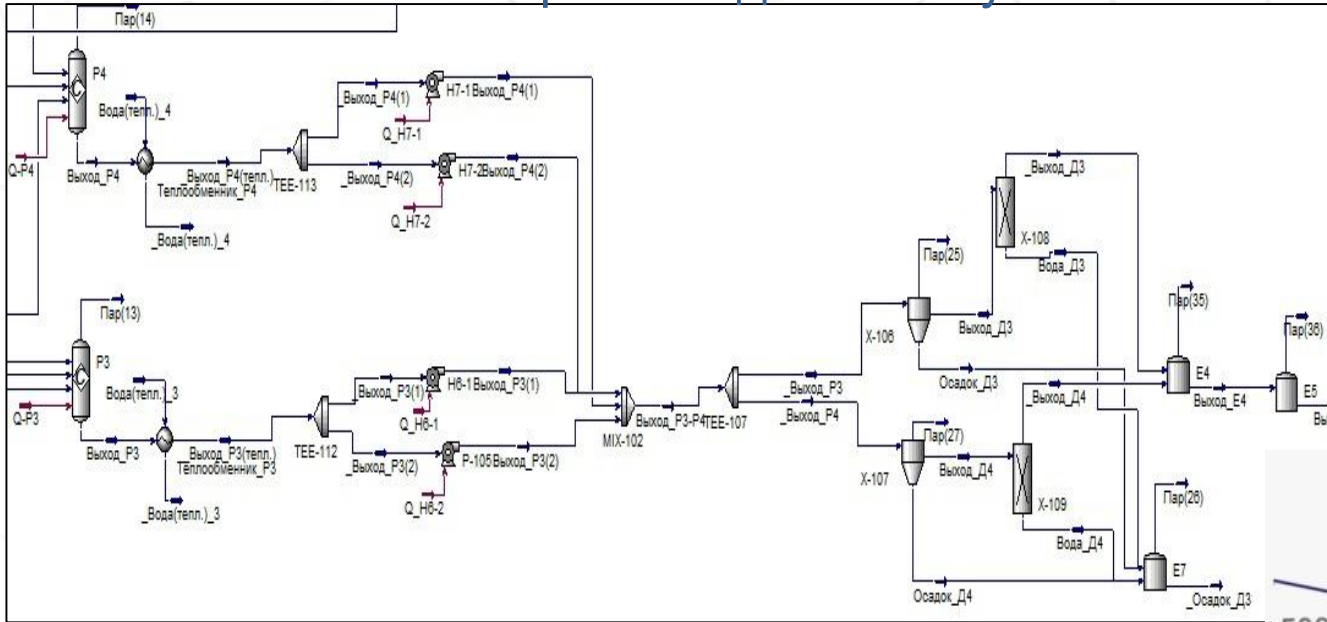
	2021	2022	2023	ИТОГО
Количество статей:				
ВАК	3	8	2	13
РИНЦ	16	36	25	77
Web of Science и Scopus	6	4	2	12
Тезисы докладов российских и международных конференций	17	22	19	58
Патенты, авторские свидетельства	6	2	3	11
ИТОГО	48	72	51	171

The background features a light blue gradient with a central vertical band. This band is decorated with a pattern of semi-transparent hexagons and molecular structures. The molecular structures consist of small grey and blue spheres connected by thin lines, resembling a network or a complex molecule. The hexagons are arranged in a honeycomb-like pattern, some overlapping the molecular structures.

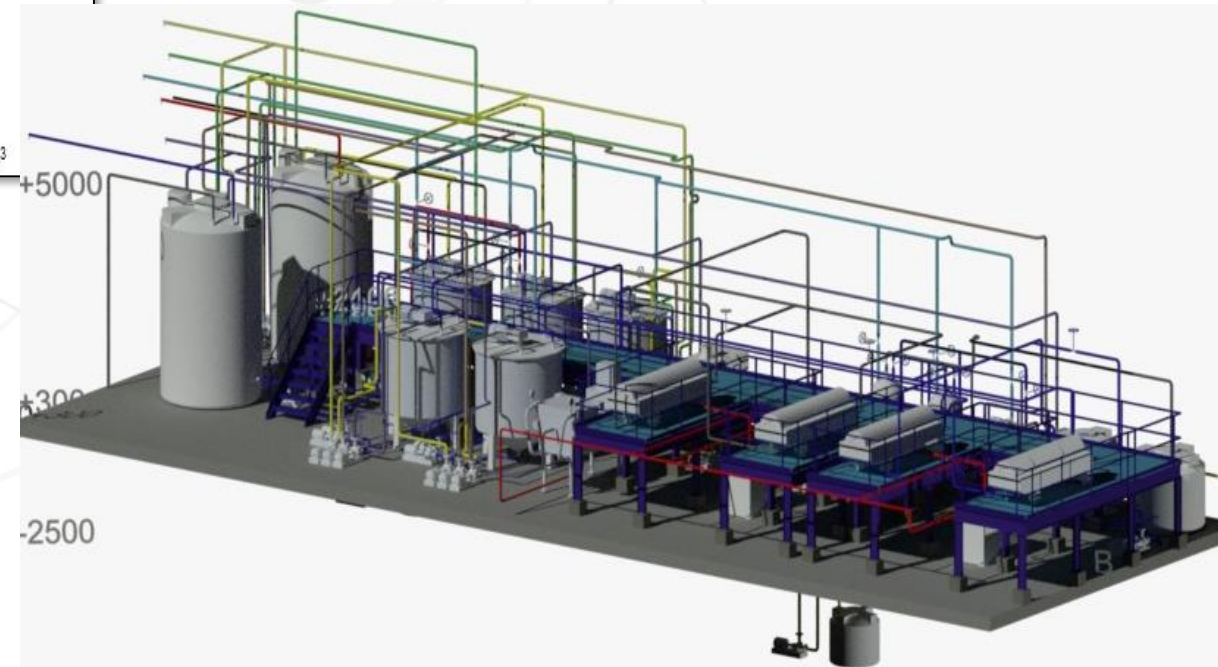
3-D проектирование для очистки особо опасных отходов

Линия очистки кислотно-щелочных отходов

Компьютерная модель. II степень.



Трехмерная визуализация

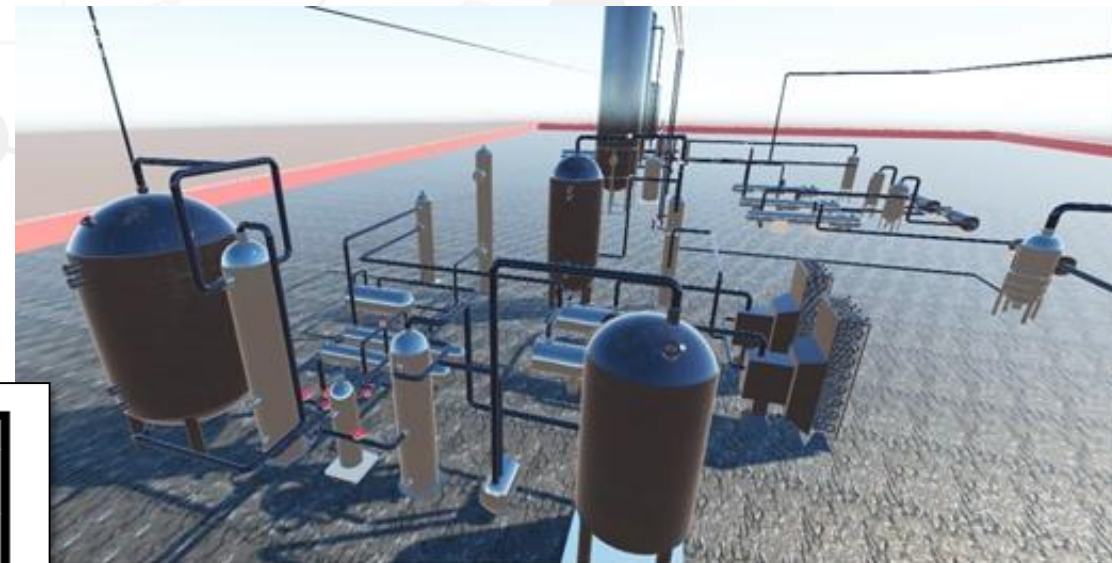


Цифровой двойник промышленного производства метанола

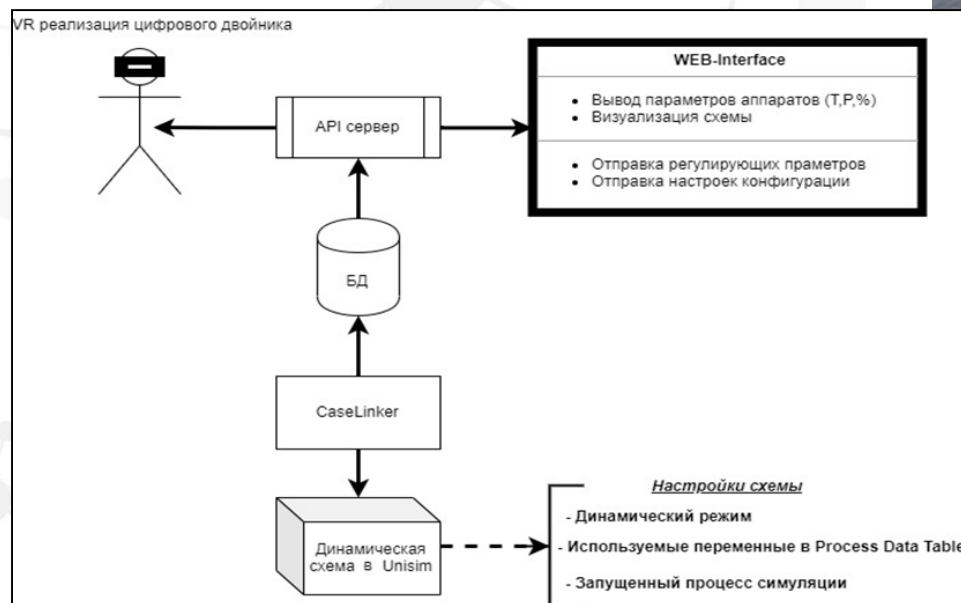
Это цифровой двойник реального предприятия «Щекино-Азот».
Совместная разработка с компанией «Хоневелл».
Основная часть сделана в РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Цифровой двойник включает:

- базу данных всех аппаратов производства
- тренажер производства
- виртуальное представление
- систему управления
- сценарии аварий



Архитектура цифрового двойника



Математические модели для топливных элементов: водородо-воздушного, биотопливного, микробного

Математические модели:

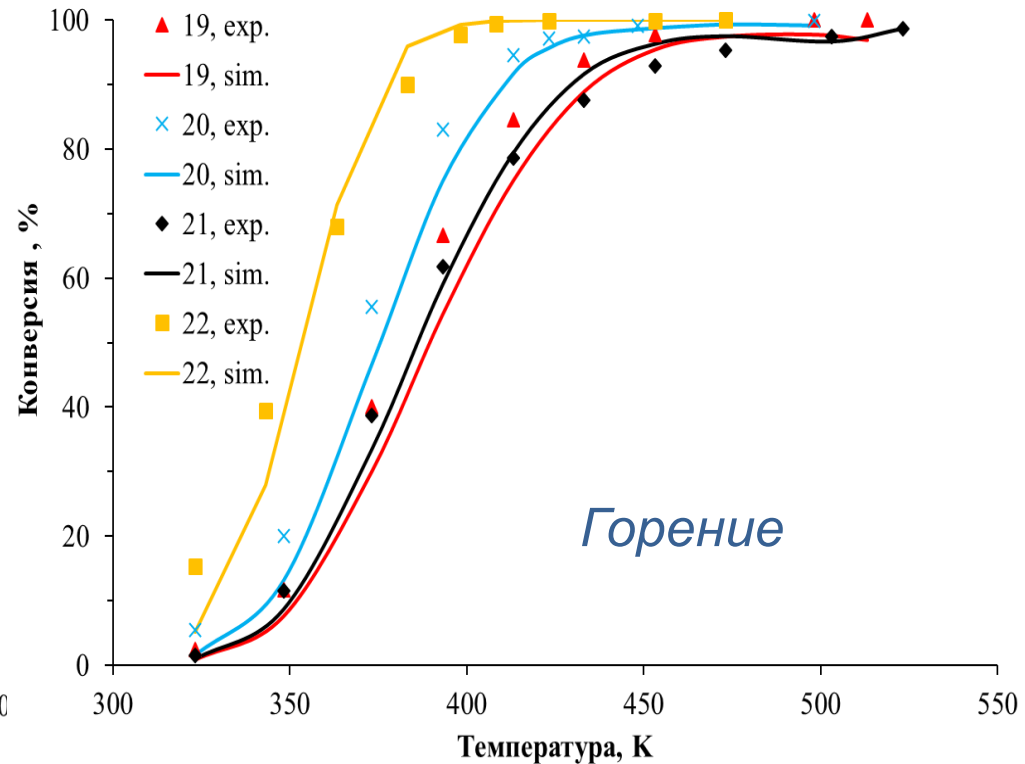
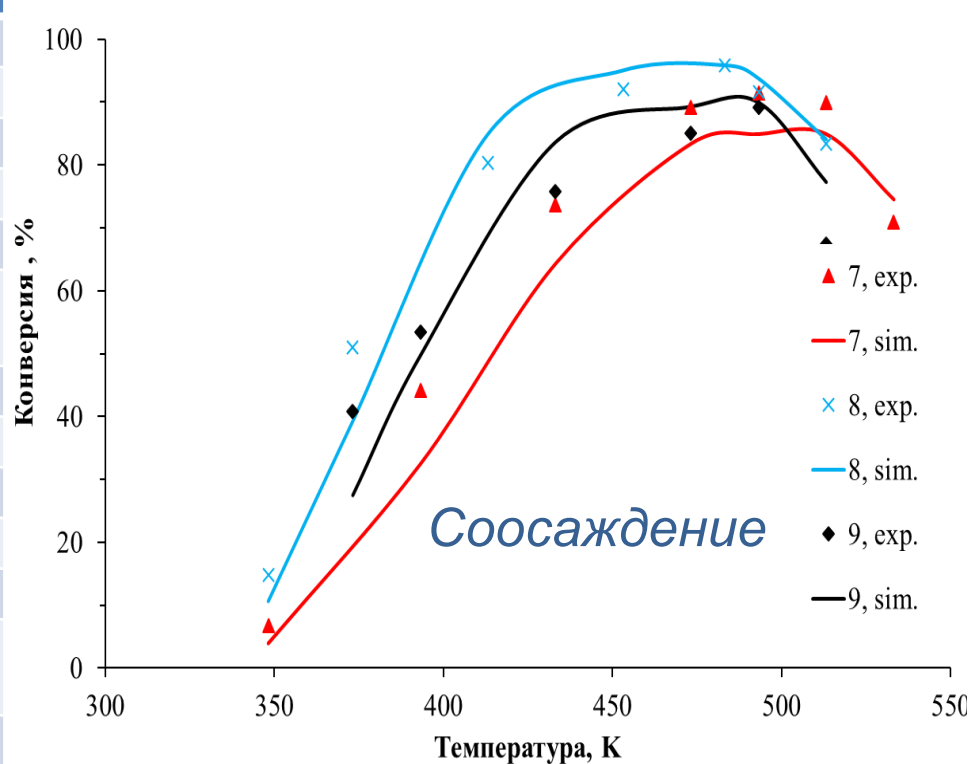
- ✓ описывают явления, протекающие в топливных элементах различного типа
- ✓ прогнозируют рабочий ресурс топливного элемента
- ✓ учитывают механизм деградации (старения) катализатора
- ✓ позволяют:
 - получить значения кинетических параметров
 - провести оптимизацию состава катализатора, расхода топлива, конструктивных особенностей
 - спроектировать систему управления

Области применения топливных элементов:

- ✓ аэрокосмическая техника (в том числе в беспилотных летательных аппаратах)
- ✓ наземный транспорт
- ✓ робототехника (роботы-саперы, роботы разведчики, роботы для применения на зараженных территориях)
- ✓ электростанции малой мощности
- ✓ обеспечение резервного электропитания

Селективное окисление CO на CuO-CeO₂

№	Реакция
1	$OZ^{2+}O + CO \rightleftharpoons OZ^{2+}OCO$
2	$OZ^{2+}OCO \rightleftharpoons OZ^{+}CO_2$
3	$OZ^{+}CO_2 \rightleftharpoons OZ^{+} + CO_2$
4	$OZ^{+} + CO \rightleftharpoons OZ^{+}CO$
5	$OZ^{+}CO_2 \rightleftharpoons Z^{2+}CO_3$
6	$OZ^{+}CO + 2 CeO_2 \rightleftharpoons OZ^{2+}OCO + Ce_2O_3$
7	$OZ^{+} + 2 CeO_2 \rightleftharpoons OZ^{2+}O + Ce_2O_3$
8	$Z^0 + 2 CeO_2 \rightleftharpoons OZ^{+} + Ce_2O_3$
9	$2 Ce_2O_3 + O_2 \rightleftharpoons 4 CeO_2$
10	$OZ^{+} + H_2 \rightleftharpoons Z^{+}OHH$
11	$OZ^{2+}O + H_2 \rightleftharpoons OHZ^{2+}OH$
12	$Z^{+}OHH + 2 CeO_2 \rightleftharpoons OHZ^{2+}OH + Ce_2O_3$
13	$Z^{+}OHH \rightleftharpoons Z^0H_2O$

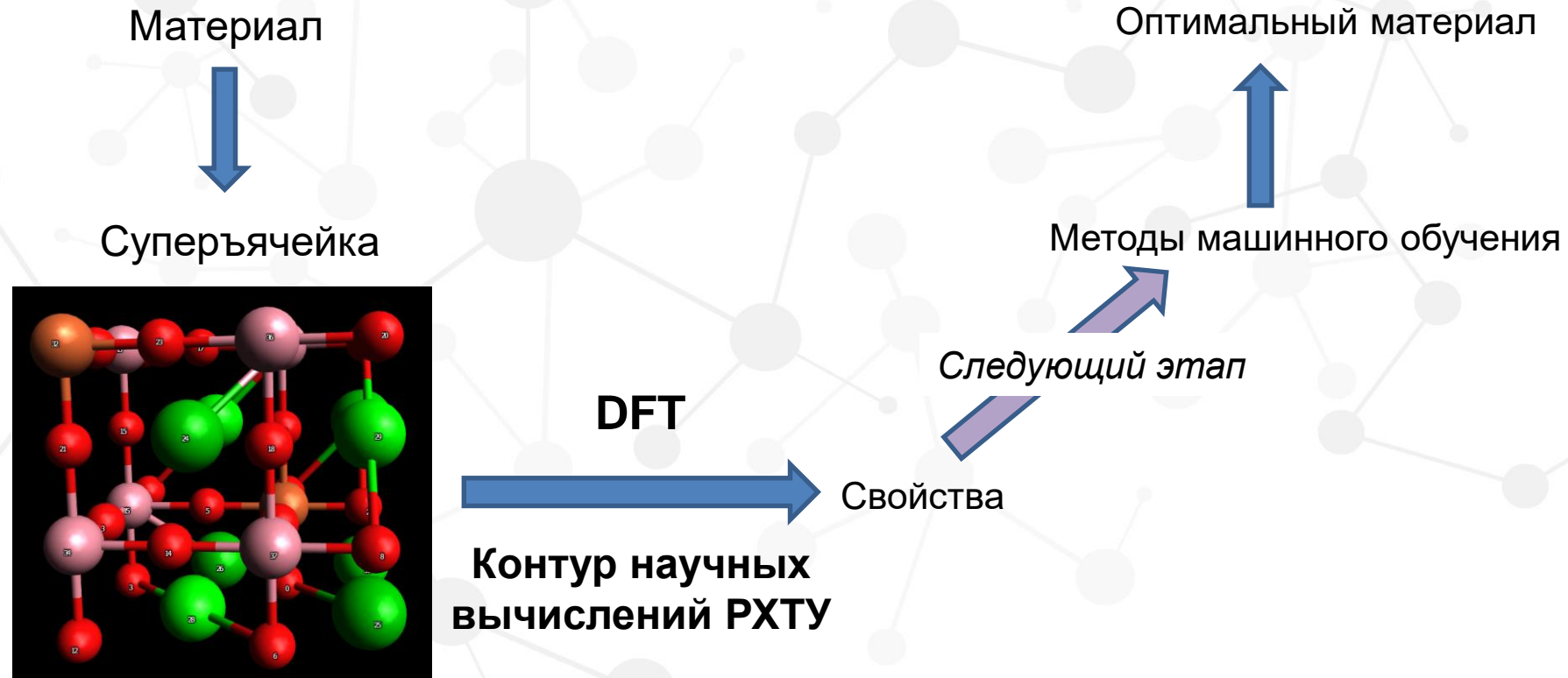


1 об. % CO, 1.25 об. % O₂, **50 об. % H₂** в He

Создана кинетическая модель низкотемпературного и селективного окисления CO на катализаторах CuO-CeO₂-ZrO₂ с различным содержанием меди (2-20% масс.) и оксида циркония (0-40% мол.). Средняя абсолютная ошибка модели по конверсии CO и кислорода составляет 5%.

Квантовохимическое моделирование структуры и свойств материалов перовскитной структуры

Под руководством проф. Ананьева М.В. начаты работы по исследованию свойств и поиску новых материалов перовскитной структуры для электродов электрохимических устройств



Нейросетевой перцептронный комплекс для спекания керамического композита Al_2O_3 -УНТ в вакууме

Нейросетевая модель

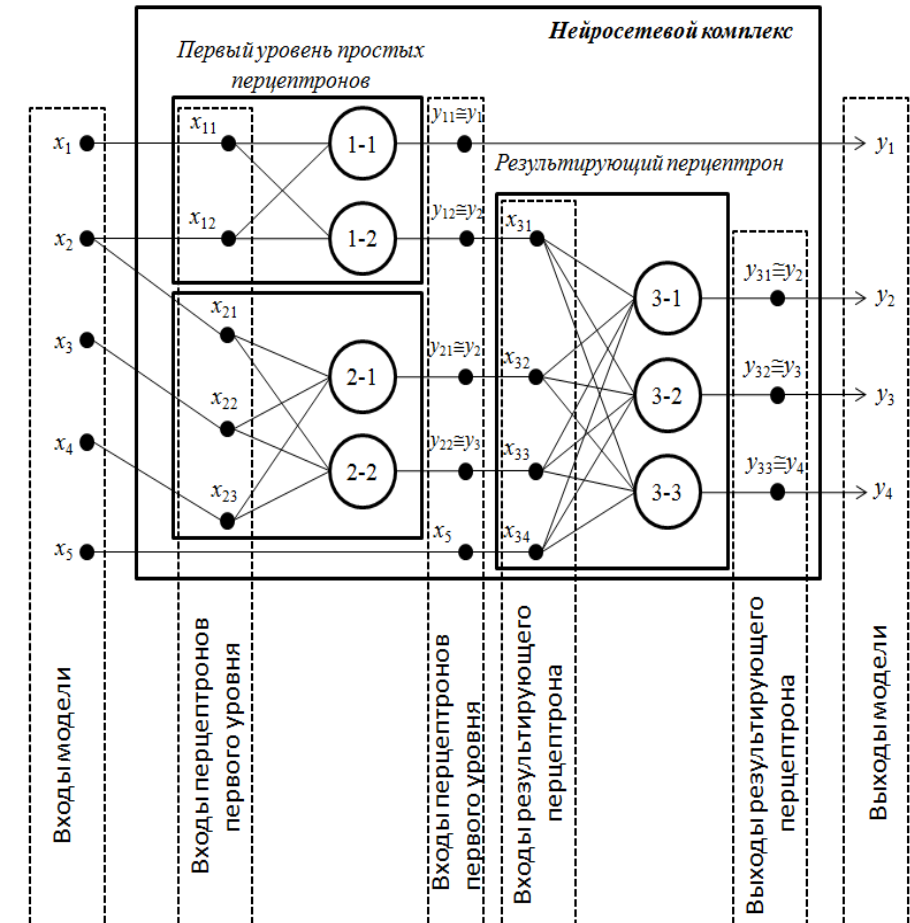
Входные переменные модели

- доля углеродных нанотрубок, %
- интервал увеличения мощности нагрева на 1 кВт, мин
- максимальная мощность печи, кВт
- общее время нагрева порошковой прессовки, ч
- количество температурных выдержек, шт
- общее время промежуточных выдержек, ч

Выходные переменные модели

- линейная усадка, %
- водопоглощение, %
- открытая пористость, %
- плотность, г/см³
- прочность на изгиб, МПа

Общая структура нейросетевого комплекса

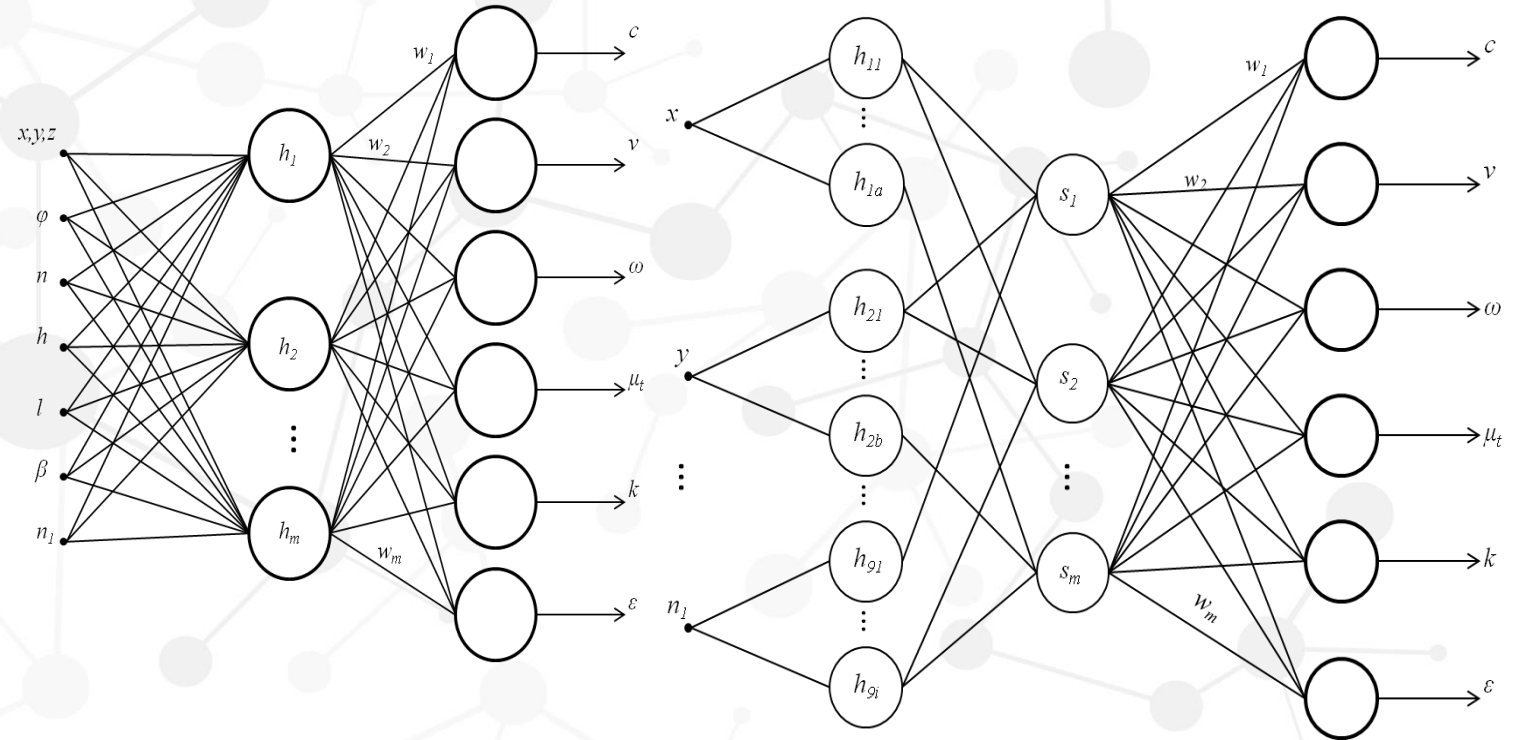


Моделирование процессов в реакторе смешения с использованием нейронных сетей радиальнобазисных функций (РБФ)

Нейросетевая модель

Количество примеров обучающей выборки	6100
Количество примеров расчетной выборки	от 21000 до 32000
Входные параметры	x, y, z, φ
Выходные параметры	c, v, ω, ε, k, μ _t
Количество нейронов (центров РБФ)	65
Способ генерации центров	Равноудаленные примеры из обучающей выборки
Радиально-базисная функция	Функция Гаусса
Параметр насыщения	0,06173
Погрешность обучения	1,77%
Время обучения	3,7 с
Время расчета	14 с

Архитектура РБФ-сети



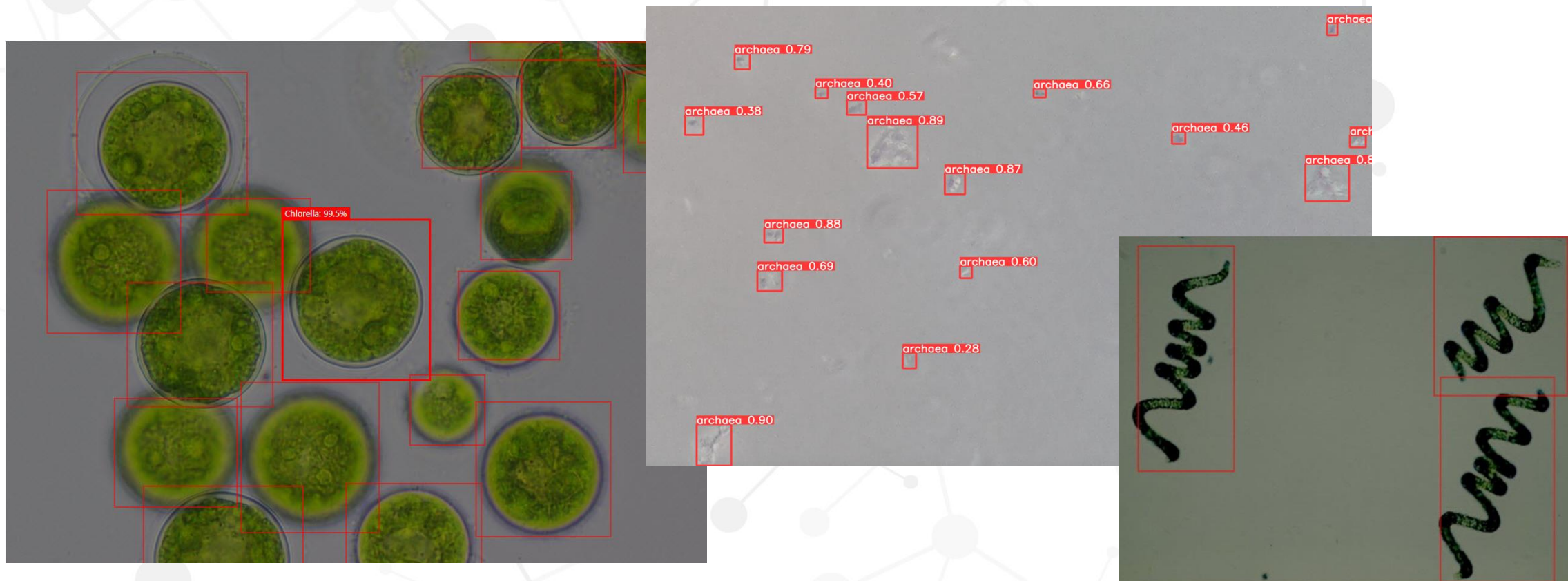
Выражение для расчета весовых коэффициентов

$$\overline{W} = (\overline{H}^T \times \overline{H})^{-1} \times \overline{H}^T \times \overline{Y}$$

Суммирующая функция второго скрытого слоя

$$s_i = \frac{(h_{1x} + h_{2y} + \dots + h_{np})^n}{n^n}$$

Применение машинного зрения для распознавания микроорганизмов и подсчёта их количества на фотографии



Разработан сервис на базе платформы Yandex.Cloud, который выделяет на фотографии известные ему микроорганизмы, отдельно отмечает – пока неизвестные. Доступ к нему возможен как через браузер, так и через мобильное приложение.

Спекание керамических композитов методом ИПС

Свойства керамических композитов, полученных методом искрового плазменного спекания

Свойство	Al ₂ O ₃	Al ₂ O ₃ -УНТ (20%об.)	Al ₂ O ₃ -УНТ (30%об.)	Al ₂ O ₃ -УНТ (50%об.)	Al ₂ O ₃ - ZrO ₂ (Y ₂ O ₃)- УНТ(1%об.)	SiC-MgAl ₂ O ₄ - УНТ(2%об.)	SiC-B (8 %)
Пористость, %	< 0,1	< 0,1	< 0,1	0,26	≤ 0,1	0,26	1,00
Прочность на изгиб, МПа	430	520	550	640	988	515	230
Трещиностойкость, МПа·м ^{1/2}	3,2	6,2	6,9	7,2	7,3	7,2	5,1
Микротвердость, ГПа	21,1	19,6	19,6	19,4	17,7	27	26,4
Жаростойкость, % (при 1500 °С)	-	-	-	-	-	-	0,19

Уравнение баланса
числа пор по размерам

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial f \eta}{\partial l} = 0$$

Уравнение баланса
числа кристаллов
(зерен) по размерам

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi \beta}{\partial l} = 0$$

Защиты и предзащиты диссертаций

Защита 2023 год

➤ **Ассистент Шанева А.С., к.т.н.**

«Исследование, моделирование и оптимизация процессов получения нанокompозитов на основе бескислородных и кислородных матриц»,
руководитель зав. каф. ИКТ Кольцова Э.М.

➤ **Соискатель Аркадьева И.В.**

«Математическое моделирование и оптимизация процессов, протекающих в биотопливном элементе», руководитель – доцент кафедры ИКТ Василенко В.А., научный консультант Богдановская В.А. (защита планируется в ноябре 2023 г.)

Предзащиты

➤ **Ст. преподаватель Скичко Е.А.** «Моделирование синтеза углеродных нанотрубок, нановолокон каталитическим пиролизом углеводородных смесей переменного состава», руководитель – зав. кафедрой ИКТ Кольцова Э.М.

➤ **Ассистент Пысин М.Д.** «Разработка программного комплекса построения цифрового двойника завода», руководитель – зав. кафедрой ИКТ Кольцова Э.М.

➤ **Соискатель Краснов Д.О.** «Квантохимическое моделирование электронно-механических свойств нанотрубок», руководитель – зав. кафедрой ИКТ Кольцова Э.М., научный консультант Дьячков П.Н.

Награды студентов (2020 – 2023 г.г.)

Вид награды	Количество
Персональная стипендия имени Г.А. Ягодина	1
Диплом победителя по программе «УМНИК»	2
Дипломы в конкурсе докладов II и III научных конференций обучающихся студентов магистратуры факультета информационных технологий и управления	4
Дипломы в 8-м конкурсе разработчиков информационно-программного обеспечения среди обучающихся в РХТУ им. Д.И. Менделеева	5
Дипломы Менделеевского конкурса научных исследований молодых ученых по химии и химической технологии МКХТ	3
Дипломы по Олимпиаде по Информатике среди студентов первого курса бакалавриата РХТУ им. Д.И. Менделеева	8
Дипломы победителя и призеров Ежегодного конкурса на соискание премий Мэра Москвы по созданию цифровых сервисов и продуктов для города «Лидеры цифровой трансформации»	5
Дипломы победителя Хакатона «Pharma-Tech Хакатон»	2
Дипломы победителя мероприятия компании Microsoft «Cloud Hack 2021»	15
Диплом победителя конкурса Future Tech	1
ИТОГО	46

Публикации в СМИ о разработках кафедры

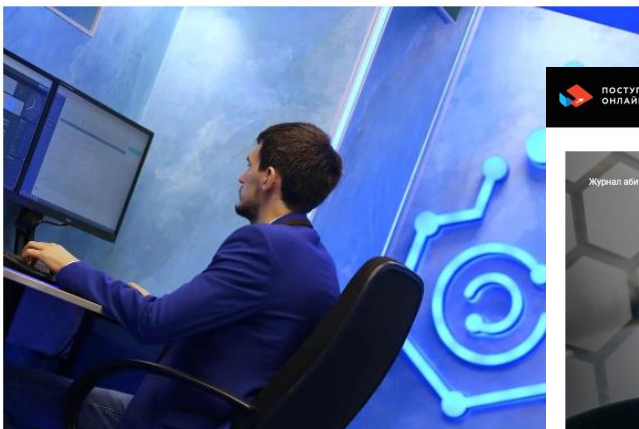
РХТУ имени Д.И. Менделеева
142 подписчика

Подписаться

ИИ, большие данные и химия: профессор Элеонора Кольцова рассказала о перспективных IT-специальностях в химпроме

22 сентября

Выпускники кафедры информационных компьютерных технологий (ИКТ) РХТУ им. Д.И. Менделеева интересны крупным концернам и компаниям химической отрасли, в которых развиты цифровые платформы. О багаже, с которым начинают карьеру выпускники кафедры, о развитии международных проектов в современных реалиях, о необычных и полезных коллаборациях математиков в современных реалиях, о необычных и полезных коллаборациях математиков РХТУ рассказала д.т.н., заведующая кафедрой ИКТ профессор Элеонора Моисеевна Кольцова.



Главная > Авиация Общего Назначения

Журнал «Крылья Родины»
в социальных сетях



Цифровая трансформация химпрома: как вывести российские заводы на новый уровень эффективности

В РХТУ имени Д.И. Менделеева активно исследуются вопросы цифровизации химической промышленности и цифровой трансформации организаций химического комплекса. Кроме того, университет вошел в число создателей концепции цифровой трансформации отраслей химического комплекса государств-участников СНГ, а также задействован в плане первоочередных участников ее реализации наряду с РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина, МГТУ имени Баумана и другими университетами. Эксперты РХТУ рассказали об основных технологиях, необходимых для цифровой трансформации химической промышленности, а также назвали самые сложные вызовы.

«Для того, чтобы в России появлялись «умные» предприятия химической промышленности, необходимы не только современные технологии и программное обеспечение: прежде всего важно наладить новые способы взаимодействия между университетами, сильными научными группами и, собственно, химическими производствами. Только синхронизация усилий позволит организовать системную подготовку кадров, которые смогут адекватно решать конкретные задачи цифровой трансформации предприятий», – считает Илья Воротынцева, и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева.

По словам декана Факультета цифровых технологий и химического инжиниринга РХТУ имени Д.И. Менделеева, позволяет сделать их более экономически выгодными, сократить издержки. «Все это время или осложняет отсутствием достаточного объема данных – исследователи модели позволяют быстро определить целесообразность и возможные последствия отдельных эффектов внедрения инновационных решений, их экономическую эффективность».

Заведующая кафедрой информационных компьютерных технологий Менделеевского аспекта цифровизации химического производства. Это:

- цифровизация бизнес-процессов, связанных с управлением персоналом, управлением производством;
- цифровизация реально существующих химических объектов, позволяющая анализ систем при помощи Интернет-вещей, быстро принимать меры для предотвращения аварийных ситуаций, связанных с нарушением технологических параметров.

www.szaorussia.ru Москва, Северо-Запад
#10 апрель 2023

подробности 7

Весь завод — как на ладони

Молодые учёные из района Северное Тушино создали цифровую модель химического предприятия

Цифровую модель химического завода создали аспиранты кафедры информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева, один из корпусов которого находится в Северном Тушино, Максим Пысин, Роман Крашениников и Алексей Лобанов под руководством зав. кафедрой профессора Элеоноры Кольцовой. Теперь, надев на себя шлем виртуальной реальности, студенты могут изучать предприятие.

— Это виртуальная модель реального химического предприятия «Щелканино» в Тульской области – отечественного гиганта по производству минеральных удобрений, химикатов, чистящих и мощных средств. Прежде чем приступить к работе, мы на нём побывали,

Чтобы попасть в цех, достаточно надеть шлем виртуальной реальности

— Это система, которую физически сложно обойти. Теперь студенты могут сделать это не сходя с места, — объясняет учёный.

Виталий ЛЕСНИЧИЙ



Алексей Лобанов (слева) и Роман Крашениников вывели для нас изображение предприятия на экран компьютера

Журнал абитуриентам Москвы > Новости вузов в Москве >

новости вузов

Элеонора Кольцова: «сегодня ценится тот программист, который не только хорошо программирует, но и понимает суть технологической разработки»

12.07.2023

ПЕРСОНАЛЬНАЯ КОНСУЛЬТАЦИЯ

Твои ответы на главные вопросы 2023 года поступления

Куда поступать? Как повысить шансы? Какие ЕГЭ?

поступи онлайн

УЗНАЙ

Оборудование и программное обеспечение

Список оборудования и программного обеспечения,
приобретенного кафедрой ИКТ за 2020-2023 г.г.

Название	Ед.	Сумма, руб.
Программное обеспечение Comsol	1	920 400
Рабочие станции «РС – Mid V2» Intel Core i5-8400	10	1 100 000
ИТОГО:		2 020 400

Структура кафедры ИКТ и стратегия развития

Кафедра ИКТ

Бакалавриат

Лаборатория цифровых технологий в области водородной энергетики (партнер АО «Гиредмет»)

Научно-образовательный центр «Цифровая химия»

Группа для чтения дисциплин в магистратуре, аспирантуре, цифровой кафедре

Информационные системы и технологии

Информатика и вычислительная техника

Информационные системы и технологии

Искусственный интеллект

Информатика и вычислительная техника

Магистратура Искусственный интеллект

Магистратура Информационные технологии для цифрового проектирования

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша

Центр стратегических разработок «Северо-Запад»

Индустриальный центр компетенций «Химия»

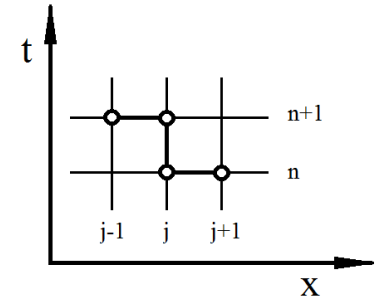
АО «Моделирование и цифровые двойники»

Личные достижения профессора Э.М. Кольцовой

Уравнение баланса числа частиц
$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial f \eta}{\partial l} = 0$$

Разностная схема («Z-схема»)
$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{f_{j+1}^{n+1} \eta_{j+1}^{n+1} - f_j^{n+1} \eta_j^{n+1}}{\Delta l} + \frac{f_j^n \eta_j^n - f_{j-1}^n \eta_{j-1}^n}{\Delta l} \right) = 0$$

Порядок аппроксимации $O(\Delta t^2, \Delta l^2)$



Сеточный шаблон разностной схемы «Z-схема»

Цитируется в журналах:

1. Математическое моделирование; 2. Mathematical Models and Computer Simulations; 3. Компьютерные исследования и моделирование; 4. Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. Серия: Физико-математические и технические науки (РИНЦ); 5. Сборник: Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики. сборник трудов международной научно-технической конференции; 6. Сборник: Наука в современном обществе: закономерности и тенденции развития. Сборник статей Всероссийской научно-практической конференции.

Уравнение баланса числа частиц

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial \varphi \eta_1}{\partial l} + \frac{\partial \varphi \eta_2}{\partial l} = D_{Pt} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \int_0^{\frac{l}{2^{1/3}}} K(\mu, \sqrt[3]{l^3 - \mu^3}) \varphi(\mu) \varphi(\sqrt[3]{l^3 - \mu^3}) d\mu - \varphi(l) \int_0^L K(\mu, l) \varphi(\mu) d\mu$$

Meshalkin V. P., Koltsova E. M., Vasilenko V. A., Shcherbakov A. I., Bogdanovskaya V. A., Radina M. V. The ecologically safe energy-efficient hydrogen-air fuel cells operation resource experimental-mathematical prediction // Energies. – 2023. – V. 16. (в печати).

Переиздание монографий:

1. Системный анализ процессов химической технологии: методы неравновесной термодинамики: монография / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов, Э. М. Кольцова ; отв. ред. Н. М. Жаворонков. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Издательство Юрайт, 2021. — 367 с.
2. Системный анализ процессов химической технологии: массовая кристаллизация: монография / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов, Э. М. Кольцова ; отв. ред. Н. М. Жаворонков. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Издательство Юрайт, 2021. — 368 с..

Принцип минимума производства энтропии (для агрегативной устойчивости)

1. Развитие теории ДЛФО

$$U_2 - U_1 = 0 \quad \frac{\partial U_1}{\partial h} = 0 \quad U_1 = U_m + U_l + U_s \quad U_s = \pi a K_s l^2 \exp(-h/l)$$

Данные для системы $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$

	CeO_2	9/1	4/1	1/1	1/4	ZrO_2
$K_s \cdot 10^{-6}, \text{Н/м}^2$	4,21	4,45	6,08	4,71	5,65	4,06
$l, \text{нм}$	1,2	1,4	1,8	1,8	1,85	2,3

2. Кинетика агрегации

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \int_0^{l/2^{1/3}} K(\mu, \sqrt[3]{l^3 - \mu^3}) f(\sqrt[3]{l^3 - \mu^3}) f(\mu) d\mu - f(l) \int_0^L K(\mu, l) f(\mu) d\mu$$

$$K = L \frac{kT}{U_1} \quad \text{— константа агрегации}$$



Принцип минимума производства энтропии (для процессов измельчения)

$$J_{\partial p} = 0 \quad \frac{\partial X_{\partial p}}{\partial d} = 0$$

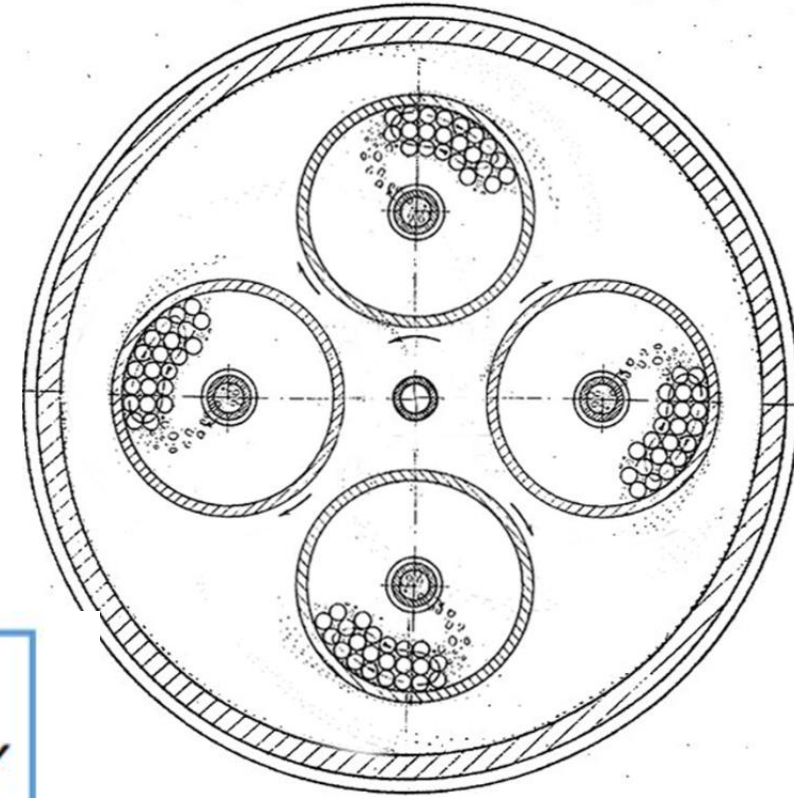
Диаметр частицы, устойчивой к дроблению

$$d_u = \frac{[6(2\Sigma_{z1} - \Sigma_{zz})]^{3/5}}{\rho_2^{0.3/5} \varepsilon^{2/5}}$$

Кинетика процесса измельчения

$$\frac{\partial f}{\partial r} = -f(r)A(r) + \int_r^R f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)d\gamma$$

$$A(r) = L \frac{\rho_2^0 d^{5/3} \varepsilon^{2/3}}{\Sigma} \quad B(r, \gamma) = P \frac{30}{\gamma} \left(\frac{r}{\gamma}\right)^2 \left(1 - \frac{r}{\gamma}\right)^2$$



Моделирование распространения эпидемии Covid-19

Дискретное логистическое уравнение

$$y_{n+1} = \lambda y_n (1 - y_n/N), \quad y_1 = y_0$$

λ – коэффициент скорости роста популяции, N – емкость системы

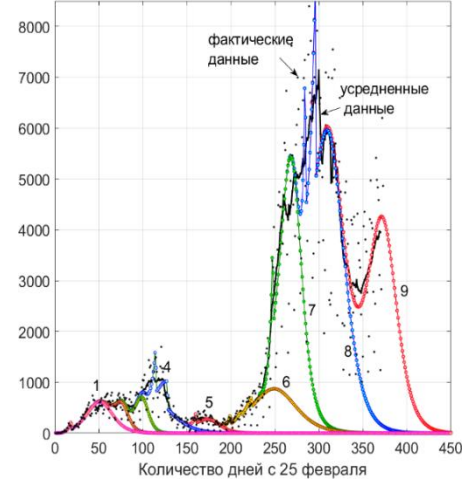
Логистический рост при $1 < \lambda < 2$

Аналитическое решение $y(t) \rightarrow \bar{y} = \left(\frac{\lambda - 1}{\lambda}\right) \cdot N$

Подбор параметров

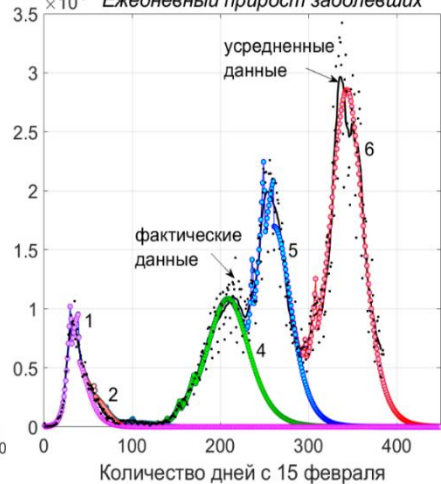
$\frac{x_{n+1}}{x_n} = \lambda(1 - x_n) \approx \lambda$ - на стадии экспоненциального роста

Ежедневный прирост заболевших в Швеции



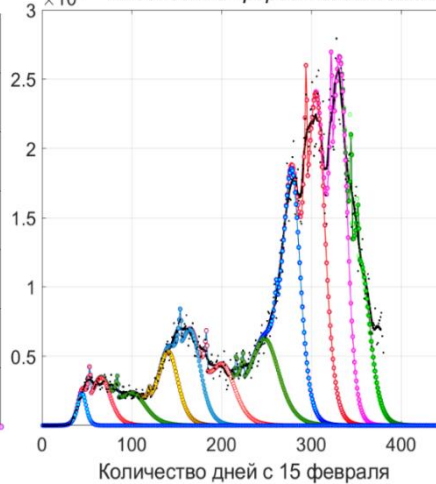
Динамика распространения эпидемии коронавируса в Швеции между 25.02.2020 и 03.03.2021.

Ежедневный прирост заболевших $\times 10^4$

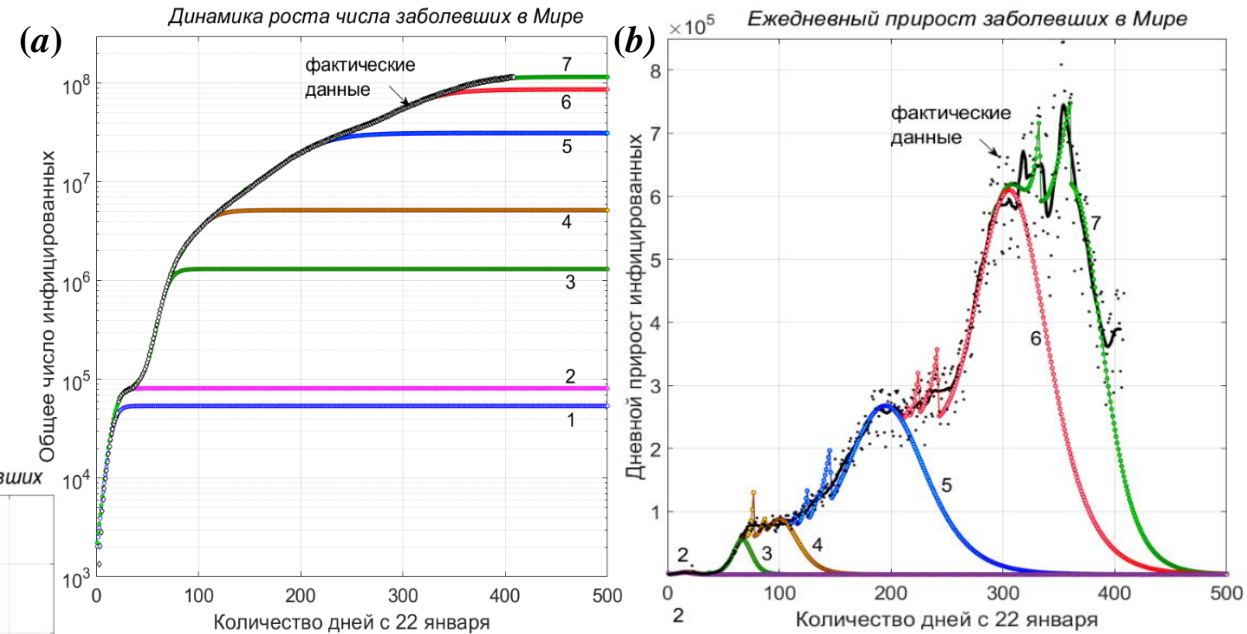


Динамика распространения эпидемии коронавируса в Испании между 15.02.2020 и 03.03.2021.

Ежедневный прирост заболевших $\times 10^5$



Динамика распространения эпидемии коронавируса в США между 15.02.2020 и 01.03.2021.



Динамика распространения эпидемии коронавируса в Мире между 22.01.2020 и 03.03.2021.

Фактические данные и результаты моделирования.

a – логарифмическая шкала, b – линейная шкала

1. Кольцова, Э. М. Математическое моделирование распространения эпидемии коронавируса в мире и странах, с наибольшим количеством инфицированных в первой половине 2020 г / Э. М. Кольцова, Е. С. Куркина, А. М. Васецкий // Проблемы экономики и юридической практики. – 2020. – Т. 16, № 3. – С. 61-68.
2. Кольцова, Э. М. Математическое моделирование распространения эпидемии коронавируса COVID-19 в ряде европейских, азиатских стран, Израиле и России / Э. М. Кольцова, Е. С. Куркина, А. М. Васецкий // Проблемы экономики и юридической практики. – 2020. – Т. 16, № 2. – С. 154-165.
3. Кольцова, Э. М. Математическое моделирование распространения эпидемии коронавируса COVID-19 в Москве / Э. М. Кольцова, Е. С. Куркина, А. М. Васецкий // Computational Nanotechnology. – 2020. – Т. 7, № 1. – С. 99-105.
4. Куркина, Е. С. Математическое моделирование и прогнозирование распространения эпидемии коронавируса COVID-19 / Е. С. Куркина, Э. М. Кольцова // Проектирование будущего. Проблемы цифровой реальности. – 2021. – № 1(4). – С. 178-192.
5. Зинченко, Д. И. Компьютерное моделирование распространения эпидемии COVID-19 на примере Германии / Д. И. Зинченко, Е. С. Куркина // Успехи в химии и химической технологии. – 2021. – Т. 35, № 10(245). – С. 72-75.
6. Kurkina, E. S. Mathematical Modeling of the Propagation of Covid-19 Pandemic Waves in the World / E. S. Kurkina, E. M. Koltsova // Computational Mathematics and Modeling. – 2021. – Vol. 32, No. 2. – P. 147-170.
7. Куркина, Е. С. Математическое моделирование распространения волн эпидемии коронавируса COVID-19 в разных странах мира / Е. С. Куркина, Э. М. Кольцова // Прикладная математика и информатика. – Москва : ООО "МАКС Пресс", 2021. – С. 46-79.
8. Куркина, Е. С. Математическое моделирование и прогнозирование распространения COVID-19: многоволновая модель развития эпидемии в Великобритании / Е. С. Куркина, Д. И. Зинченко, Э. М. Кольцова // Проектирование будущего. Проблемы цифровой реальности. – 2022. – № 1(5). – С. 182-192.

Спасибо за внимание!