

**Табела 5.1.** Спецификација предмета на студијском програму докторских студија

|   |                      |                      |
|---|----------------------|----------------------|
| <b>Назив предмета:</b> Моделирање и симулација сложених процеса   |                      |                      |
| <b>Наставници:</b> Љиљана Колар-Анић, Жељко Чупић   |                      |                      |
| <b>Статус предмета:</b> Изборни   |                      |                      |
| <b>Број ЕСПБ:</b> 10  |                      |                      |
| <b>Услов:</b> Нема услова   |                      |                      |
| <b>Циљ предмета</b><br>Упознавање студента са поступком моделирања механизма сложеног процеса и његове симулације на бази постављеног модела уз оптимизацију кинетичких параметара.   |                      |                      |
| <b>Исход предмета</b><br>Предвиђање понашања сложених процеса у времену и простору.   |                      |                      |
| <b>Садржај предмета</b><br><i>Теоријска настава</i><br>Постављање механизма сложеног процеса. Дефинисање реакционих врста, простих и сложених реакција, као и целокупног процеса. Дефинисање кинетичких величина, контролних параметара и кинетичких једначина. Избор кинетички значајних реакција и процеса. Моделирање механизма сложеног процеса. Стехиометријски, односно реакциони модели хомогених и хетерогених хемијских реакција. Термокинетички модели хемијских реакција. Популациони процеси. Стехиометријска мрежна анализа. Реакциони путеви. Анализа конзистентности модела. Анализа стабилности. Бифуркациона анализа. Симулација хомогених и хетерогених процеса, укључујући и реакционо-дифузионе системе. Упоредна анализа експерименталних и симулираних резултата и оптимизација кинетичких параметара. Аналитичко и нумеричко испитивање сложених периодичних и аperiodичних динамичких структура. Путеви уласка система у детерминистички хаос. Испитивање сложених динамичких структура различитим методама као што су Поенкареова анализа временске еволуције система у фазном простору и једнодимензионалне мапе.<br><i>Практична настава</i><br>Постављање реакционог модела. Нумеричка симулација процеса. Анализа стехиометријских мрежа реакционих модела. Одређивање реакционих путева. Конструисање бифуркационог дијаграма на бази нумеричких симулација. Модел системи су осцилаторне хемијске реакције и осцилаторни физиолошки процеси (на пример, неуроендокрини хипоталамо-хипофизо-адренални систем одговоран за стрес). Примена моделирања у персонализованој медицини. |                      |                      |
| <b>Препоручена литература</b>   |                      |                      |
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Ljiljana Kolar-Anić, Željko Čupić, Vladana Vukojević, Slobodan Anić, Dinamika nelinearnih procesa, Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu, Beograd 2011.</li> <li>2. Lj. Kolar-Anić, S. Anić, Ž. Čupić, A. Ivanović-Šašić, N. Pejić, S. Blagojević, V. Vukojević, Chapter 23 <i>Oscillating Reactions</i>, in <i>Encyclopedia of Physical Organic Chemistry</i>, 6 Volume Set, Zerong Wang (Editor), Uta Wille (Associate Editor), Eusebio Juaristi (Associate Editor), ISBN: 978-1-118-47045-9, Volume 2, Part 2 <i>Organic Reactions and Mechanisms</i>, p.p. 1127-1222.</li> <li>3. D. Kuzmanović, N. Vasović, S. Kostić, S. Simić, I. Franović, I. Grozdanović, K. Todorović-Vasović, B. Ranković Plazinić, <i>Uvod u teoriju haosa</i>, Univerzitet u Beogradu - Saobraćajni fakultet, Beograd 2013.</li> <li>4. B.L.Clarke, Stability of complex reaction networks, in I. Prigogine, S. A. Rice (Eds.), <i>Advances in Chemical Physics</i>, 43 (1980) 1-200.</li> <li>5. Ljiljana Kolar-Anić and Željko Čupić, Stoichiometric Network Analysis of Reaction Systems, <i>Advances in Nonlinear Sciences</i>, Editors M. S. Dimitrijević, D. M. Davidović, South Slavic Academy of Nonlinear Sciences, Belgrade, Vol. 4, 2016, 121-199, ISBN 978-86-905633-2-6</li> <li>6. Peter Gray, Stephen K. Scott, <i>Chemical Oscillations and Instabilities</i>, Clarendon Press – Oxford, 1990.</li> <li>7. Robert C. Hilborn, <i>Chaos and Nonlinear Dynamics</i>, Oxford University Press, 2004.</li> </ol>  |                      |                      |
| Број часова активне наставе   | Теоријска настава: 5 | Практична настава: 2 |
| <b>Методe извођења наставе</b><br>Предавања, консултације, рачунске вежбе.  |                      |                      |
| <b>Оцена знања (максимални број поена 100):</b><br>Активност у току предавања: 10 поена; Практична настава: 20 поена, Семинари: 30 поена; Усмени испит: 40 поена  |                      |                      |