

# АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

## Математическое моделирование

Направление подготовки 04.04.01 – Химия

2 семестр

### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Математическое моделирование» являются формирование математического подхода к описанию важнейших процессов, равновесных и стационарных состояний систем в физической химии и химической технологии на основе составления математических моделей; освоение студентами основных вычислительных методов математической физики для решения конкретных задач химии, химической технологии, обработки эксперимента; умение профессионально выбрать из нескольких однотипных тот или иной метод для решения конкретной задачи; умение составить алгоритм метода и реализовать его в виде программы; если же программные средства уже имеются, – правильно подобрать программу и уметь оптимизировать её или модернизировать применительно к своей задаче.

### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина относится к вариативной части ОПОП.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Математическое моделирование». 1. Математика. 2. Информатика. 3. Обработка результатов химического эксперимента. 4. Численные методы в химии. 5. Системное моделирование химических процессов. 6. Общая и неорганическая химия. 7. Аналитическая химия. 8. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента). Освоение дисциплины «Математическое моделирование» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин: 1. Современные методы исследования в химии. 2. Квантовая химия. 3. Физико-химическая механика.

### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ОПК-2).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

#### 1) Знать:

- Основные методы построения математических моделей состояний и процессов химии, физической химии и химической технологии (ОПК-2).
- Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений для задач Коши и краевой (ОПК-2).
- Методы численного решения уравнений в частных производных различных типов, встречающихся в химии и химической технологии (ОПК-2).

#### 2) Уметь:

- Профессионально подобрать наиболее подходящий из имеющихся численных методов для решения конкретной прикладной задачи химии, физической химии или химической технологии (ОПК-2).
- Составить программу на языке DELPHI для реализации решения указанной задачи с организацией ввода исходных данных и выводом результатов в удобной форме (ОПК-2).
- Разбираться в уже готовых компьютерных программах специальных математических

пакетов, таких как MathCad, MathLab, с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии (ОПК-2).

### 3) Владеть:

- Языком высокого уровня DELPHI в той его части, которая необходима для проведения расчётов при решении прикладных задач химии (ОПК-2).
- Основами методик построения математических моделей в химии, физической химии и химической технологии (ОПК-2).
- Основными численными методами решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии, сводящихся к дифференциальным уравнениям (ОПК-2).

## 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона. Смешанная задача для уравнений гиперболического типа. Смешанная задача для уравнений параболического типа. Теоретические аспекты метода конечных разностей. Классификация и области применения дифференциальных уравнений в частных производных.

## 5. ВИД АТТЕСТАЦИИ

Вид аттестации: экзамен.

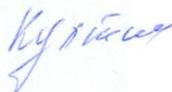
## 6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 часов.

Составитель: доцент кафедры химии Лобко В.Н.



Заведующий кафедрой химии Кухтин Б.А.



Председатель учебно-методической комиссии

направления 04.03.01 – “Химия” Кухтин Б.А.



Директор ИБЭ Ильина М.Н.



Дата:

16.04.15

Печать института

