

2019

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
 высшего образования
 «Владимирский государственный университет
 имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
 (ВлГУ)



Проректор
 по образовательной деятельности
 А.А. Панфилов
 « 03 » 09 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Направление подготовки – 04.04.01 – Химия

Профиль/программа подготовки – Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность

Уровень высшего образования: магистратура

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточной аттестации (экзамен/зачет/зачет с оценкой)
1	4/144	18	36		63	Экзамен (27)
Итого	4/144	18	36		63	Экзамен (27)

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Математическое моделирование»: 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.

Задачи: в результате изучения данного курса студент должен научиться описывать химические процессы и состояния физико-химических систем дифференциальными уравнениями с последующим их решением численными методами. Лабораторный практикум построен на использовании конкретного языка высокого уровня – Pascal (или Delphi), что позволяет студентам более профессионально решать математические задачи в химии, чем при использовании готовых математических пакетов – MATLAB, MATCAD, Mathematica и др. С другой стороны, студент, владеющий языком высокого уровня, без труда может быстро освоить эти или какие-то другие, новые пакеты, если в этом возникнет необходимость. В прикладных задачах физической химии и химии в целом часто встречаются обыкновенные дифференциальные уравнения. Рассмотрено решение задачи Коши и краевой задачи. Рассмотрены основы метода конечных разностей – одного из главных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных. Для описания равновесных и стационарных состояний физико-химических систем рассмотрены модели на основе уравнений эллиптического типа. Для описания колебательных реакций Белоусова-Жаботинского рассмотрены уравнения гиперболического типа. Важнейшие физико-химические процессы – теплопроводности и диффузии описываются моделями на основе уравнений параболического типа.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Математическое моделирование» изучается в базовой части учебного плана.

Пререквизиты 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).

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП

Код формируемых компетенций	Уровень освоения компетенции ¹	Планируемые результаты обучения по дисциплине характеризующие этапы формирования компетенций (показатели освоения компетенции)
1	2	3
ОПК-1, ОПК-3, ПК-1 ПК-3	частичное	<p><i>Знать:</i> основные методы построения математических моделей состояний и процессов химии, физической химии и химической технологии; численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений для задач Коши и краевой; методы численного решения уравнений в частных производных различных типов, встречающихся в химии и химической технологии.</p> <p><i>Уметь:</i> профессионально подобрать наиболее подходящий из имеющихся численных методов для решения конкретной прикладной задачи химии, физической химии или химической технологии; составить программу на языке DELPHI для реализации решения указанной задачи с организацией ввода исходных данных и выводом результатов в удобной форме; 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.</p> <p><i>Владеть:</i> языком высокого уровня DELPHI в той его части, которая необходима для проведения расчётов при решении прикладных задач химии; основами методик построения математических моделей в химии, физической химии и химической технологии; основными численными методами решения прикладных задач химии, физической химии и</p>

		химической технологии, сводящихся к дифференциальным уравнениям.
--	--	--

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётных единиц, 144 часов.

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Вид учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах).				Объем учебной работы с применением интерактивных методов (в часах/%)	Формы текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	СРС		
1	Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений..	1	1-3	2	4		10	2/33	
2	Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка.	1	4-8	4	10		12	4/29	Рейтинг-контроль № 1
3	Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона.	1	9-11	2	6		10	2/25	
4	Смешанная задача для уравнений гиперболического типа.	1	12	2	4		10	2/33	Рейтинг-контроль. № 2
5	Смешанная задача для уравнений параболического типа.	1	13-16	6	12		20	6/33	
6	Теоретические аспекты метода конечных разностей	1	17	1			1	1/100	
7	Классификация и области применения дифференциальных уравнений в частных производных.	1	18	1				1/100	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 1 семестр:				18	36		63	18/33	Экзамен (27)
Наличие в дисциплине КП/КР									
Итого по дисциплине				18	36		63	18/33	Экзамен (27)

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел I. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

Тема 1. Классификация задач математической физики

Содержание темы. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных в химии и химической технологии. Задача Коши и краевая задача. Понятие о методе сеток.

Тема 2. Задача Коши

Содержание темы. Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Метод Эйлера. Метод Рунге-Кутты. Распространение методов на уравнения второго порядка и системы дифференциальных уравнений. Математическая модель реактора идеального вытеснения.

Тема 3. Краевая задача

Содержание темы. Метод конечных разностей. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. Математическая модель тарельчатой ректификационной колонны. Решение задач химической кинетики.

Раздел II. Решение уравнений в частных производных второго порядка методом конечных разностей

Тема 4. Теоретические аспекты

Содержание темы. Классификация уравнений в частных производных второго порядка. Метод конечных разностей. Аппроксимация, сходимость, устойчивость разностных схем. Шаблоны.

Тема 5. Уравнения эллиптического типа

Содержание темы. Уравнения эллиптического типа. Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона. Моделирование равновесных и стационарных состояний физико-химических систем. Расчет стационарных полей плотности, концентрации, температуры.

Тема 6. Уравнения гиперболического типа

Содержание темы. Смешанная задача для уравнений гиперболического типа. Моделирование реакций Белоусова-Жаботинского.

Тема 7. Уравнения параболического типа

Содержание темы. Смешанная задача для уравнений параболического типа. Расчет меняющихся во времени температурных полей. Решение задач диффузии. Разностные схемы для квазилинейного параболического уравнения.

Содержание практических занятий по дисциплине

1. Задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.
2. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения.
3. Рейтинг-контроль № 1.
4. Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона.
5. Смешанная задача для уравнений гиперболического типа.
6. Рейтинг-контроль № 2.
7. Смешанная задача для уравнений параболического типа.
8. Рейтинг-контроль № 3 (итоговый).

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В преподавании дисциплины «Математическое моделирование» используются разнообразные образовательные технологии как традиционные, так и с применением активных и интерактивных методов обучения.

Активные и интерактивные методы обучения:

- *Интерактивная лекция (тема № 1, 4);*
- *Групповая дискуссия (тема № 4, 7);*
- *Анализ ситуаций (тема № 2, 3, 7);*
- *Разбор конкретных ситуаций (тема № 2, 3, 7).*

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

Текущий контроль успеваемости приводится по результатам рейтинг-контроля по следующим контрольным вопросам:

Рейтинг-контроль №1

1. Общая постановка задачи Коши.
2. Что является решением задачи Коши? Каков его геометрический смысл?
3. В чём состоит численное решение задачи Коши?
4. Метод Эйлера (алгоритм, геометрическая интерпретация, программа).
5. Метод Рунге-Кутты второго порядка (алгоритм, геометрическая интерпретация, программа).
6. Метод Эйлера-Коши (алгоритм, геометрическая интерпретация, программа).

Рейтинг-контроль №2

1. Классификация дифференциальных уравнений в частных производных.
2. Начальные условия. Типы граничных условий.
3. Конечно-разностные аппроксимации производных первого и второго порядка.
4. Построение разностных схем для уравнений с частными производными. Шаблоны.
5. Явная разностная схема для решения одномерного уравнения диффузии – теплопроводности.
6. Понятие устойчивости вычислительной схемы.
7. Неявная разностная схема для решения одномерного уравнения диффузии – теплопроводности

Рейтинг-контроль №3

1. Что называется уравнением в частных производных? Приведите примеры уравнений с частными производными.
2. Дайте определение краевых (граничных) условий. Физический смысл начальных условий. Приведите примеры.
3. Запишите конечно-разностные соотношения для следующих непрерывных производных:
4. Расскажите о методе сеток. Приведите примеры сеток на отрезке и на плоскости.

5. Представьте непрерывную функцию $f(x) = x^2 + 2x$ в виде сеточной функции на отрезке $[a, b]$.
6. Представьте непрерывную функцию $f(x,y) = x^2 + y^2$ в виде сеточной функции $x \in [0,1]$, $y \in [0,1]$, $h_x = h_y = 0,1$.
7. Составьте явную разностную схему для уравнения:
8. Составьте неявную разностную схему для уравнения:
9. Сравните решения уравнения теплопроводности для тонкого однородного стержня, используя явную разностную схему, для двух значений параметра.
10. Начальное распределение температуры во всех точках стержня постоянно и равно 25°C .
Граничные условия изменяются по синусоидальному закону.
11. Решите задачу пункта 9, используя неявную разностную схему.

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины.

Экзаменационные вопросы

1. Особенности численных решений дифференциальных уравнений. Метод сеток. Сеточные функции.
2. Основные положения метода конечных разностей. Разностные производные.
3. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Задача Коши и краевая задача. Особенности их решения численными методами. Решение дифференциальных уравнений в частных производных. Смешанная задача.
4. Решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка методом Рунге-Кутты. Математическая модель реактора идеального вытеснения.
5. Решение задачи Коши для уравнения второго порядка и системы дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты. Решение задач химической кинетики.
6. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. Первая, вторая и третья краевая задача.
7. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. Моделирование задач стационарной теплопроводности и диффузии.
8. Классификация уравнений в частных производных второго порядка. Метод конечных разностей. Аппроксимация, сходимость, устойчивость разностных схем. Шаблоны.
9. Уравнения эллиптического типа. Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона. Моделирование равновесных и стационарных состояний физико-химических систем.
10. Уравнения эллиптического типа. Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона. Расчет стационарных полей плотности, концентрации, температуры.

11. Смешанная задача для уравнений гиперболического типа. Моделирование реакций Белоусова-Жаботинского.
12. Смешанная задача для уравнений параболического типа. Явная и неявная схемы. Сравнительный анализ.
13. Смешанная задача для уравнений параболического типа. Расчет меняющихся во времени температурных полей.
14. Смешанная задача для уравнений параболического типа. Решение задач диффузии.
15. Смешанная задача для уравнений параболического типа. Разностные схемы для квазилинейного параболического уравнения.

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы студентов

1. Классификация задач математической физики.
2. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных в химии и химической технологии.
3. Задача Коши и краевая задача.
4. Понятие о методе сеток.
5. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений
6. Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка.
7. Метод Эйлера.
8. Метод Рунге-Кутты.
9. Распространение методов на уравнения второго порядка и системы дифференциальных уравнений.
10. Математическая модель реактора идеального вытеснения.
11. Метод конечных разностей.
12. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка.
13. Математическая модель тарельчатой ректификационной колонны.
14. Решение уравнений в частных производных второго порядка методом конечных разностей/
15. Классификация уравнений в частных производных второго порядка.
16. Метод конечных разностей. Аппроксимация, сходимость, устойчивость разностных схем. Шаблоны.
17. Уравнения эллиптического типа.
18. Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона.
19. Расчет стационарных полей плотности, концентрации, температуры.
20. Смешанная задача для уравнений гиперболического типа.

21. Смешанная задача для уравнений параболического типа.
22. Расчет меняющихся во времени температурных полей.
23. Решение задач диффузии.

Для успешного выполнения самостоятельной работы студентам рекомендуется следующая литература:

Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. Численные методы. 8-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2015.

Фонд оценочных средств для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ	
		Количество экземпляров изданий в библиотеке ВлГУ в соответствии с ФГОС ВО	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3	4
Основная литература*			
1. Голубева Н. В. Математическое моделирование систем и процессов. Изд.: Лань. 1-е изд. 2013.	2013		http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=4862
2. Р. Темам, А. Миранвиль. Математическое моделирование в механике сплошных сред. Пер. с англ. 2-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014.	2014		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323128.html
3. А.Л. Королёв. Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум. 2-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.	2013	2	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html
4. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Основы программирования вычислительных задач. Учебное пособие. Владимир 2018	2018	10	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/7426
Дополнительная литература			
1. Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. Емельянов. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: КолосС. 2008.	2008	1	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953206310.html
2. Маликов Р.Ф. Основы математического моделирования. Изд.: Горячая линия-Телеком. 2010.	2010		http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=5169
3. Саваторова В.Л., Белый А.А. - М. Математическое моделирование процессов кондуктивной теплопередачи в гетерогенных средах с периодической структурой: Отдельные статьи Горного информационно-аналитического бюллетеня (научно-технического журнала): Горная книга. 2010.	2010		http://www.studentlibrary.ru/book/0236-1493.html

7.2. Периодические издания:

1, Информатика и программирование.

7.3. Интернет-ресурсы.

1. Язык программирования Pascal.
2. Интегрированная среда разработки программ Borland Delphi.
3. <http://www.y10k.ru/books/> 4. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
5. <http://www.sciencedirect.com>
6. <http://chemteq.ru/lib/book>
7. <http://www.chem.msu.su/rus>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий лабораторного типа, занятий практического типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Лабораторные работы проводятся в лаборатории 422-2, 423-2.

При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор.

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения: Windows 10, Lazarus, Microsoft Office 2010, Power Point, Adobe Reader,

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент
(представитель работодателя)

АО «РМ НАНОТЕХ», начальник аналитического отдела центральной заводской лаборатории
к.х.н.

А.В. Третьяков

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Заведующий кафедрой

Б.А.Кухтин

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 04.03.01 – «Химия»

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Председатель комиссии

Б.А.Кухтин

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

в рабочую программу дисциплины

НАИМЕНОВАНИЕ

образовательной программы направления подготовки код и наименование ОП, направленность:
наименование (указать уровень подготовки)

Номер изменения	Внесены изменения в части/разделы рабочей программы	Исполнитель ФИО	Основание (номер и дата протокола заседания кафедры)
1			
2			

Зав. кафедрой _____ / _____
Подпись *ФИО*