

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

«УТВЕРЖДАЮ»
 Проректор
 По учебно-методической работе
 А.А. Панфилов
 «28» 10 2015 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Математическое моделирование

Направление подготовки – 04.04.01 – Химия

Программа подготовки – Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность

Уровень высшего образования: магистратура

Форма обучения – очная

| Семестр | Трудоём- кость зач. ед. (час.) | Лекций, час. | Практич. занятий, час. | Лаборат. работ, час. | СРС, час. | Форма промежуточного контроля (экз./зачёт) |
|---------|---|-----------------|------------------------------|----------------------------|--------------|---|
| 2 | 5 (180) | 18 | - | 36 | 90 | Экзамен (36) |
| Итого | 5 (180) | 18 | - | 36 | 90 | Экзамен (36) |

Владимир, 2015

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.

Задачи курса. 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 вариативной части учебного плана.

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 (МОДУЛЯ)

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. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зачётных единиц, 180 часов.

| № п/п | Раздел 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 контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам) |
|-------|--|---------|-----------------|--|----------------------|----------------------|--------------------|-----|-------|--|--|
| | | | | Лекции | Практические занятия | Лабораторные работы. | Контрольные работы | СРС | КП/КР | | |
| 1 | Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений. | 2 | 1-3 | 2 | | 4 | | 10 | | 2/33 | |
| 2 | Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. | 2 | 4-8 | 4 | | 10 | | 20 | | 4/29 | Рейтинг-контроль № 1 |
| 3 | Задача Дирихле для уравнений Лапласа и Пуассона. | 2 | 9-11 | 2 | | 6 | | 10 | | 2/25 | |
| 4 | Смешанная задача для уравнений гиперболического типа. | 2 | 12 | 2 | | 4 | | 10 | | 2/33 | Рейтинг-контроль № 2 |
| 5 | Смешанная задача для уравнений параболического типа. | 2 | 13-16 | 6 | | 12 | | 30 | | 6/33 | |
| 6 | Теоретические аспекты метода конечных разностей. | 2 | 17 | 1 | | - | | 5 | | 1/100 | |
| 7 | Классификация и области применения дифференциальных уравнений в частных производных. | 2 | 18 | 1 | | - | | 5 | | 1/100 | Рейтинг-контроль № 3 |
| | Всего | | | 18 | | 36 | | 90 | | 18/33 | Экзамен (36) |

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА

Часть I. Классификация задач математической физики.

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

Часть II. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

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.

Метод конечных разностей. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка. Математическая модель тарельчатой ректификационной колонны.

Решение задач химической кинетики.

Часть III. Решение уравнений в частных производных второго порядка методом конечных разностей

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

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

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

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

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ

1. Решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты.
2. Краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка.
3. Рейтинг-контроль № 1.
4. Задача Дирихле для уравнений Лапласа.
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

Изложение теоретического материала осуществляется с применением электронных средств обучения.

Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Используются активные и интерактивные формы обучения: компьютерные симуляции вычислительных алгоритмов, разбор конкретных примеров для рассматриваемых алгоритмов. При чтении лекций могут применяться экспромтные психологические этюды.

Для оценки освоения теоретического материала студентами используются письменные контрольные работы и устный опрос.

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

Задания к рейтинг-контролю:

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.

Вопросы 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.

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.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основная литература:

1. Голубева Н. В. Математическое моделирование систем и процессов. Изд.: Лань. 1-е изд. 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. (эл.). - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323128.html>.
3. Королёв А.Л. Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум. 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html>.

Дополнительная литература:

1. Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. Емельянов. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: КолосС, 2008. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953206310.html>.
2. Москалев П.В., Шитов В.В. Математическое моделирование пористых структур. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2007. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922108188.html>.
3. Саваторова В.Л., Белый А.А. Математическое моделирование процессов кондуктивной теплопередачи в гетерогенных средах с периодической структурой: Отдельные статьи Горного информационно-аналитического бюллетеня - М. : Горная книга, 2010. <http://www.studentlibrary.ru/book/0236-1493.html>.
4. А.В. Пантелеев, Т.А. Летова. Методы оптимизации. Практический курс: учебное пособие с мультимедиа сопровождением. М.: Логос, 2011. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785987045404.html>.

Программное обеспечение и 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 (МОДУЛЯ)

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

На лабораторных занятиях используются компьютеры и соответствующее программное обеспечение.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки – 04.03.01 – “Химия” (бакалавриат)

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент

Научный сотрудник ООО «ВМТ»
Третьяков А.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 7/1 от 14.04. 2015 г.

Заведующий кафедрой Кухтин

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 04.03.01 – “Химия”

Протокол № 7/1 от 16.04. 2015 г.

Председатель комиссии Кухтин

Программа переутверждена:

на 2015/2016 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.15 года

Зав. кафедрой Кухтин

на 2016/2017 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1/1 от 5.09.16 года

Зав. кафедрой Кухтин

на 2017/2018 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.17 года

Зав. кафедрой Кухтин

на 2018-19 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 7.09.18 года

Зав. кафедрой Кухтин

на 2019-20 учебный год. Протокол заседания кафедры № 11 от 3.07.19 года

Зав. кафедрой Кухтин