

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Косенок Сергей Михайлович
 Должность: ректор
 Дата подписания: 01.07.2025 15:08:02
 Уникальный программный ключ:
 e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdfcf836

Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Вычислительные методы в химии

04.04.01 ХИМИЯ

Код, направление
подготовки

Направленность
(профиль)

Химия нефти

Форма обучения

Очная

Кафедра-разработчик

Экспериментальной физики

Выпускающая кафедра

Химии

Типовые задания для контрольной работы:

1. Пояснить сущность и аспекты системного подхода к построению моделей сложных систем;
2. Дать характеристику операционного подхода к построению моделей сложных систем;
3. Изложить порядок разработки имитационной модели;
4. Дать основные понятия о программной реализации имитационных моделей и современных средах имитационного моделирования.

Типовые вопросы (задания) к экзамену:

1. Вычислительный эксперимент: основные понятия, определения;
2. Модель. Моделирование. Симуляция. Вычислительный эксперимент в физике и математике;
3. Основные этапы постановки и проведения вычислительного эксперимента;
4. Сферы применения вычислительного эксперимента. Ситуации, в которых вычислительный эксперимент может быть единственным инструментом исследования. Примеры;
5. Математическое моделирование как основной инструмент вычислительного эксперимента. Основные понятия математического моделирования. Элементарные математические модели;
6. Основные принципы математического моделирования. Принцип информационной достаточности. Принцип осуществимости. Принцип множественности моделей. Принцип агрегирования. Принцип параметризации;
7. Понятие математической модели. Схематичное представление объекта моделирования. Векторы входных координат, варьируемых параметров и выходных координат объекта. Вектор параметров математической модели. Система определяющих уравнений. Начальные данные и граничные условия;
8. Классификация математических моделей и методов моделирования. Динамические и статистические модели. Модели с распределенными и сосредоточенными параметрами. Модели детерминированные и стохастические. Модели стационарные, квазистационарные и нестационарные Модели непрерывные и дискретные;

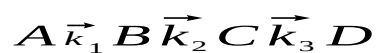
9. Адекватность математической модели. Методы проверки адекватности модели. Понятие верификации и валидации математической модели. Примеры;
10. Три подхода к разработке математических моделей: теоретический, эмпирический и комбинированный, три класса методов. Примеры разработки математических моделей с помощью этих подходов и сравнительный анализ, достоинства и недостатки;
11. Разработка математических моделей на основе законов сохранения. Пример разработки математической модели молекулярной диффузии. Теория конвективной диффузии В.Г. Левича;
12. Разработка математических моделей на основе законов сохранения. Пример разработки математической модели теплопроводности (дифференциальное уравнение теплопроводности). Дифференциальное уравнение конвективного переноса тепла;
13. Разработка математических моделей на основе законов сохранения. Пример разработки математической модели гидродинамики;
14. Разработка математических моделей на основе законов сохранения. Пример разработки математической модели деформируемого твердого тела;
15. Построение математических моделей на основе вариационных принципов. Уравнения движения и законы сохранения. Примеры;
16. Инструментальные среды и пакеты прикладных программ для выполнения вычислительных экспериментов;
17. Методы построения и анализа дискретных моделей. Сходимость и устойчивость дискретной модели.
18. Модели биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением. Модели роста популяции. Модель Мальтуса;
19. Классификация экономических моделей. Особенности применения метода математического моделирования в социально-экономических исследованиях.

Пример экзаменационного билета

Экзаменационный билет № 1

1. Математическое моделирование как основной инструмент вычислительного эксперимента. Основные понятия математического моделирования. Элементарные математические модели;
2. Модели биологических систем, описываемые одним дифференциальным уравнением. Модели роста популяции. Модель Мальтуса;
3. Инструментальные среды и пакеты прикладных программ для выполнения вычислительных экспериментов (**Mathcad, Matlab, Maple Mathematica, Simulink**);
4. С использованием пакета прикладных программ **Mathcad** выполнить численное решение

прямой задачи для последовательной реакции, идущей с образованием двух промежуточных продуктов по схеме:



Привести **Mathcad** — документ рассматриваемой задачи. Результаты расчётов представить в табличной и графической формах. (Значения параметров: $k_1 = 0,15 \text{ с}^{-1}$; $k_2 = 0,15 \text{ с}^{-1}$; $k_3 = 0,075 \text{ с}^{-1}$);

5. Используя средства **Mathcad**, составить математическую модель химической реакции типа:

