



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Иркутский государственный университет»  
(ФГБОУ ВО «ИГУ»)  
Факультет химический



**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

Индекс дисциплины по УП: **Б1.В.ДВ.1.2**

Наименование дисциплины (модуля): **Математическое моделирование химических реакций**

Направление подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре  
**04.06.01 - Химические науки**

Направленность программы подготовки кадров высшей квалификации (программы аспирантуры) **Физическая химия**

Форма обучения **очная / заочная**

Согласовано с УМК химического факультета  
протокол № 12 от «17» 06 2019 г.  
Председатель УМК Вильмс А.И.

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии  
«07» 06 2019 г. Протокол № 11  
Зав. кафедрой Шмидт А.Ф.

Иркутск 2019 г.

## Содержание

<b>1.</b>	Цели и задачи дисциплины (модуля)	3
<b>2.</b>	Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП.	4
<b>3.</b>	Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)	4
<b>4.</b>	Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы	5
<b>5.</b>	Содержание дисциплины (модуля)	5
<b>5.1</b>	Содержание разделов и тем дисциплины (модуля)	
<b>5.2</b>	Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)	
<b>5.3</b>	Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий	
<b>5.4</b>	Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ.	
<b>6.</b>	Примерная тематика рефератов (при наличии)	11
<b>7.</b>	Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):	12
	а) основная литература;	
	б) дополнительная литература;	
	в) программное обеспечение;	
	г) интернет-ресурсы, базы данных, информационно-справочные и поисковые системы	
<b>8.</b>	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).	14
<b>9.</b>	Образовательные технологии	14
<b>10.</b>	Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	14
	10.1 Оценочные средства текущего контроля	
	10.2 Оценочные средства для промежуточной аттестации	

### **1. Цели и задачи дисциплины:**

*Цель дисциплины* - Подготовка аспирантов к участию в исследованиях химических процессов проводимых в лабораторных условиях, освоение принципов математического моделирования сложных химических процессов.

*Задачи:*

- дать аспирантам углубленные представления о методах математического моделирования, численных методах решения систем уравнений и интегрирования систем дифференциальных уравнений, познакомить с основными типами химических задач, в которых используются методы математического моделирования;

- сформировать современные представления, обобщающие, полученные на предыдущем этапе обучения сведения о термодинамике и кинетике химических процессов.

### **2. Место дисциплины в структуре ОПОП:**

Дисциплина «Математическое моделирование химических реакций» относится к вариативной части профессионального цикла (Б1.В.ДВ.1.2).

### **3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля):**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

**ОПК-1:** способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;

**УК-3:** готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач;

**ПК-1:** уметь собирать и анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования и самостоятельно составлять план исследования в рамках выбранного направления подготовки;

**ПК-2:** самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; представлять возможности и ограничения методов;

**ПК-3:** использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентации результатов диссертационной работы;

**ПК-4:** знать основные приемы и методы получения веществ, методы их идентификации, определения структуры и свойств с помощью уникального и серийного научного оборудования.

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

***Знать:***

- методы математического моделирования и основные типы химических задач, в решении которых применяются эти методы;
- основные поисковые системы химической информации;
- основные методы определения структуры и свойств веществ с помощью уникального и серийного научного оборудования

***Уметь:***

- самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области математического моделирования химических реакций с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;
- собирать, систематизировать и анализировать научную литературу по заданной теме;
- самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; представлять возможности и ограничения методов.

***Владеть:***

- теоретическими представлениями в области «Математического моделирования химических реакций» и основным понятийным аппаратом;
- навыками целенаправленного сбора литературы и анализа научной литературы, в том числе с использованием современных информационных технологий;
- навыками использования современных специализированных вычислительных комплексов и баз данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентации результатов диссертационной работы.

#### 4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц		Курс				
	очное	заочное	1	2		3	4
				очное	заочное		
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	36/1	24/0.7		36/1	24/0.7		
В том числе:	-			-			
Лекции	18/0.5	12/0.3		18/0.5	12/0.3		
Практические занятия (ПЗ)							
Семинары (С)	18/0.5	12/0.3		18/0.5	12/0.3		
Лабораторные работы (ЛР)							
<b>КСР</b>							
<b>Контактная работа (всего)</b>	36/1	24/0.7		36/1	24/0.7		
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	72/2	84/2.3		72/2	84/2.3		
В том числе:	-			-			
Курсовой проект (работа)							
Расчетно-графические работы							
Вид промежуточной аттестации: зачет	+			+			
Общая трудоемкость	часы	108	108		108	108	
	зачетные единицы	3	3		3	3	

#### 5. Содержание дисциплины

### 5.1. Содержание разделов и тем дисциплины

№	Наименование раздела	Содержание раздела дисциплины
1.	Введение	Цель и задачи курса. Исторический очерк. Численные методы как особый раздел математики. Задачи, требующие численного решения и допускающие численное решение. Область применимости численных методов. Типы решаемых задач. Вычислительные методы: методы аппроксимации, прямые методы, итерационные методы, методы статистических испытаний (методы Монте-Карло). Математическая модели. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Прямая и обратная задачи. Моделирование как способ проверки гипотез. Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования. Погрешности численных методов. Источники ошибок вычислений. Классификация ошибок. Абсолютная и относительная ошибки. Корректность вычислительной задачи. Единственность, устойчивость решения. Численный эксперимент. Тестирование и отладка математической модели
2.	Численные методы решения систем линейных уравнений	<p>2.1 Типы уравнений (линейные, алгебраические, трансцендентные). Численные методы решения уравнений. Метод простой итерации. Метод касательных (Ньютона-Рафсона). Метод дихотомии (половинного деления). Метод хорд (секущих). Матричная форма записи систем линейных уравнений. Влияние погрешности коэффициентов системы уравнений на погрешность результата. Обусловленность систем линейных уравнений.</p> <p>2.2. Точные (прямые) методы решения задачи. Методы Гаусса, Гаусса-Жордана, Крамера. Нахождение обратной матрицы. Примеры химических задач: Методы нахождения стехиометрических уравнений реакций по компонентному составу реакционной смеси; Методы нахождения уравнений материального баланса;</p> <p>2.3. Математическое описание сложной химической реакции; Расчеты равновесных составов сложных реакций; уравнение состояния реального газа; вычисление рН растворов слабых кислот; вычисление рН буферных растворов; обработка спектральных данных</p>
3.	Численные методы решения систем нелинейных	3.1. Метод сопряженных градиентов. Примеры химических задач, сводимых к решению систем линейных уравнений. Регрессионный анализ методом наименьших квадратов

	уравнений	<p>(МНК).</p> <p>3.2 Линейные и нелинейные математические модели. Нелинейные модели, которые можно свести к линейным. Линейный МНК. Нелинейный МНК. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Метод простой итерации. Метод Зейделя. Метод Ньютона. Решение задач оптимизации функции нескольких переменных. Метод наискорейшего спуска. Численные методы решения обратной кинетической задачи.</p>
4.	Методы численного интегрирования	<p>4.1. Методы прямоугольников, трапеций, Симпсона. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Метод Эйлера. Методы Рунге-Кутты 2-го – 4-го порядков. Метод прогноза и коррекции. Примеры химических задач, приводящих к необходимости численного интегрирования: вычисление летучести газа, вычисление теплоемкости твердых тел, моделирование простой перегонки.</p> <p>4.2. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ): решение задачи Коши. Локальная и глобальная ошибки. Понятие устойчивости решения. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера); их устойчивость. "Жесткие" уравнения. Количественный критерий жесткости. Общее представление о принципах построения методов для интегрирования жестких систем ОДУ. Стохастические модели и метод "Монте-Карло".</p> <p>4.3. Примеры химических задач, приводящих к необходимости решения дифференциальных уравнений: интегрирование дифференциальных уравнений формальной кинетики химических реакций, описание явлений переноса (перенос тепла, массы, импульса), системы с автоколебаниями концентраций реагирующих веществ, моделирование нестационарных эффектов (химических колебаний, триггеров)</p>

**5.2. Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)**

№ п/п	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	№ № разделов и тем данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин								
		2.1	2.2	3.1	3.2	4.1	4.2	4.3		
1	Выполнение квалификационной работы									

**5.3. Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий**

№ п/п	Наименование раздела	Наименование темы	Виды занятий в часах			
			Лекц.	Практ. зан.	СРС	Всего
1	Введение		2/1	2/0	6/8	10/9
2	Численные методы решения систем линейных уравнений	Численные методы решения уравнений	2/2	2/1	6/10	10/13
		Методы нахождения стехиометрических уравнений реакций по компонентному составу реакционной смеси; Методы нахождения уравнений материального баланса	2/1	2/2	8/10	12/13
3	Численные методы решения систем нелинейных уравнений	Математическое описание сложной химической реакции	2/2	2/1	8/10	12/13
		Метод сопряженных градиентов. Примеры химических задач, сводимых	3/2	3/2	12/12	18/16



		к решению систем линейных уравнений				
		Линейные и нелинейные математические модели.	2/1	2/2	8/10	12/13
4	Методы численного интегрирования	Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Численные методы решения обратной кинетической задачи	3/2	3/2	12/12	18/16
		Методы численного интегрирования. Примеры химических задач, приводящих к необходимости численного интегрирования	2/1	2/2	12/12	16/15

#### 5.4. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудо-емкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1.	Введение	Численные методы как особый раздел математики.	2/0	Входной контроль в виде	ОПК-1

				тестового задания по химической кинетике с открытыми вопросами.	
2.	Численные методы решения систем линейных уравнений	Численные методы решения уравнений.	2/1	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
		Методы нахождения стехиометрических уравнений реакций по компонентному составу реакционной смеси; Методы нахождения уравнений материального баланса	2/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
3.	Численные методы решения систем нелинейных уравнений	Математическое описание сложной химической реакции	2/1	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-1 ПК-2, ПК-3
		Метод сопряженных градиентов. Примеры химических задач, сводимых к решению систем линейных уравнений.	3/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
		Линейные и нелинейные математические модели.	2/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
4.	Методы численного интегрирования	Решение задач оптимизации функции нескольких переменных. Метод наискорейшего спуска. Численные методы решения обратной	3/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3

	кинетической задачи.			
	Примеры химических задач, приводящих к необходимости решения дифференциальных уравнений: интегрирование дифференциальных уравнений формальной кинетики химических реакций.	2/2	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-1 ПК-2, ПК-3, ПК-4, УК-3

**6. Примерная тематика рефератов, докладов, проектов (при наличии); перечень вопросов к зачетам, экзаменам и т.п.:**

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

### а) основная литература

1. Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций [Электронный ресурс] / Ю. Г. Марков. - Москва : Лань, 2013. - Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=30200](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=30200). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1483-3 :
2. Самойлов, Н. А. "Примеры и задачи по курсу ""Математическое моделирование химико-технологических процессов"" [Электронный ресурс] / Н. А. Самойлов. - Москва : Лань", 2013. - Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=37359](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=37359). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1553-3 :
3. Курохтина, А.А. Метод конкурирующих реакций в исследованиях механизмов каталитических процессов: традиционные и новые способы применения [Текст] : учеб. пособие / А. А. Курохтина, А. Ф. Шмидт ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2012. - 93 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 83-93. - ISBN 978-5-9624-0667-1 : 13 экз.

### б) дополнительная литература:

1. Темкин, О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О. Н. Темкин. - М. : Академкнига, 2008. - 918 с. : ил. ; 24 см. - Библиогр. в конце глав. - ISBN 978-5-94628-336-6 : 1 экз.
2. Практическая химическая кинетика. Химическая кинетика в задачах с решениями : учеб. пособие / ред. М. Я. Мельников. - М. : Изд-во МГУ ; СПб. : Изд-во СПбГУ, 2006. - 591 с. : ил. ; 22 см. - Библиогр. в конце глав. - Библиогр.: с. 591. - ISBN 5-211-05233-1. - ISBN 5-288-04155-5 : 2 экз
3. Самарский, А.А. Введение в численные методы [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. А. Самарский ; Московский гос. ун-т им. М. В. Ломоносова. - 3-е изд., стер. - М. : Лань, 2005. - 288 с. ; 21 см. - (Классический университетский учебник) (Учебники для вузов. Специальная литература). - Библиогр.: с. 281. - Предм. указ.: с. 284-286. - ISBN 5-8114-0602-9 : 3 экз
4. Бахвалов, Н.С. Численные методы. Решения задач и упражнения : Учеб. пособие / Н. С. Бахвалов, А. А. Корнев , Е. В. Чижонков. - М. : Дрофа, 2009. - 394 с. : ил. ; 22 см. - (Высшее образование: Современный учебник). - Библиогр.: с. 393-394. - ISBN

978-5-358-03610-9 : 1 экз.

5. Формалев, В.Ф. Численные методы [Текст] : учеб. пособие для студ. техн. ун-тов / В. Ф. Формалев, Д. Л. Ревизников. - М. : Физматлит, 2004. - 398 с. : ил. ; 22 см. - Библиогр.: с. 391-393. - ISBN 5-9221-0479-9 : 1 экз
6. Турчак, Л. И. Основы численных методов [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов / Л. И. Турчак, П. В. Плотников. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Физматлит, 2005. - 300 с. : ил. - Библиогр.: с. 290-292. - Предм. указ.: с. 293-300. - ISBN 978-5-9221-0153-6 : 1 экз
7. Горлач, Б. А. Исследование операций [Электронный ресурс] / Б. А. Горлач. - Москва : Лань, 2013. - Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?p11\\_cid=25&p11\\_id=4865](http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_cid=25&p11_id=4865). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1430-7 :
8. Демидович, Б. П. Численные методы анализа. Приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Б. П. Демидович, И. А. Марон, Э. З. Шувалова. - Москва : Лань, 2010. - 400 с. : ил. - (Классическая учебная литература по математике) (Лучшие классические учебники). - Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?p11\\_cid=25&p11\\_id=537](http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_cid=25&p11_id=537). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-0799-6 :
9. Волков, Е.А. Численные методы [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Е. А. Волков. - Москва : Лань, 2008. - 256 с. : граф., табл. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?p11\\_cid=25&p11\\_id=54](http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_cid=25&p11_id=54). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-0538-1 :

в) программное обеспечение

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1) <http://www.intuit.ru/department/calculate/intromathmodel/4/>

данный интернет источник – это сайт Интернет Университет, на котором представлена лекция «Численные методы решения нелинейных уравнений».

2) <http://www.intuit.ru/department/calculate/intromathmodel/11/>

данный интернет источник – это сайт Интернет Университет, на котором представлена лекция «Компьютерное моделирование при обработке опытных данных»

3) [http://www.uchites.ru/chislennye\\_metody/posobie](http://www.uchites.ru/chislennye_metody/posobie)

данный интернет источник – это сайт Учитель.ру, на котором представлен учебное пособие «Численные методы».

### **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):**

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием и приборной базой, а именно: аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 402, 426, 303);

### **9. Образовательные технологии:**

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. В частности, в рамках освоения дисциплины «Кинетика многомаршрутных реакций» аспирантами химического факультета предусмотрены

1) лекции с применением

а) технологий объяснительно-иллюстративных объяснений,

б) объяснительно-иллюстративный метода с элементами проблемного изложения;

в) разбора конкретных ситуаций.

2) практические занятия, во время которых проводится решение типовых задач, контрольные и аудиторные самостоятельные работы, обсуждаются вопросы лекций и домашних заданий;

3) самостоятельная работа аспирантов, включающая подготовку к семинарским занятиям в форме изучения теоретического материала лекций, решения задач по различным разделам дисциплины; подготовку к текущему контролю успеваемости;

4) консультирование аспирантов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

## 10. Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

### 10.1 Оценочные средства текущего контроля:

Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность у обучающихся компетенций: ОПК-1, УК-3, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4.

Для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации разработан ФОС, включающий тематику заданий и примерный перечень вопросов к зачету.

### 10.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация (*зачет*) может проводиться в форме устного собеседования или в виде тестовых заданий с открытыми вопросами.

#### Примерный список вопросов к зачету

1. Методы аппроксимации. прямые методы, итерационные методы, методы статистических испытаний (методы Монте-Карло).
2. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Прямая и обратная задачи. Моделирование как способ проверки гипотез.
3. Погрешности численных методов. Источники ошибок вычислений. Классификация ошибок. Абсолютная и относительная ошибки. Корректность вычислительной задачи. Единственность, устойчивость решения. Численный эксперимент.
4. Типы уравнений (линейные, алгебраические, трансцендентные). Численные методы решения уравнений.
5. Методы нахождения стехиометрических уравнений реакций по компонентному составу реакционной смеси
6. Методы нахождения уравнений материального баланса; Математическое описание сложной химической реакции
7. Расчеты равновесных составов сложных реакций; уравнение состояния реального газа; вычисление pH растворов слабых кислот; вычисление pH буферных растворов
8. Обработка спектральных данных.
9. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Примеры химических задач, сводимых к решению систем линейных уравнений.
10. Методы численного интегрирования. Примеры химических задач, приводящих к необходимости численного интегрирования: вычисление летучести газа, вычисление теплоемкости твердых тел, моделирование простой перегонки.
11. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера); их устойчивость. "Жесткие" уравнения.
12. Стохастические модели и метод "Монте-Карло".

Критерии оценивания см. *ФОС УМКД*

Разработчик:  профессор А.Ф. Шмидт

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии «07» 06 2019 г.

Протокол № 14 Зав. кафедрой  /Шмидт А.Ф./