

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Российский химико-технологический университет имени  
Д.И. Менделеева»**

**«УТВЕРЖДАЮ»**

**Проректор по науке  
РХТУ им. Д.И. Менделеева**



*А.А. Щербина*  
**А.А. Щербина**  
«17» *мая* 20 *22* г.

**ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНЫХ ИСПЫТАНИЙ**

**ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

**1.2.2. Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ**

Москва 2022 г

Emil

Программа составлена Кольцовой Э.М., д.т.н., профессором кафедры информационных компьютерных технологий.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры информационных компьютерных технологий «04» апреля 2022 г. протокол №22.

## **Общие положения**

Программа вступительных испытаний по научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ разработана учетом требований к поступающим, определёнными правилами приема.

Цель проведения экзамена - оценка уровня знаний поступающих в области научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ для отбора наиболее подготовленных поступающих для обучения по программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре.

Задачей вступительного испытания в аспирантуру является оценка уровня владения специальной дисциплиной, в том числе способности описывать химико-технологические процессы с помощью математических моделей, знание основных численных методов решения дифференциальных уравнений.

### **Разделы программы**

1. Форма проведения вступительного испытания.
2. Язык проведения вступительного испытания.
3. Содержание вступительного испытания.
4. Структурированное по разделам (областям) содержание вступительного испытания.
5. Шкала оценивания и фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания вступительного испытания
6. Типовые задания, вопросы, иные материалы для проведения вступительного испытания.
7. Рекомендуемая литература для подготовки к вступительному испытанию.

### **1. Форма проведения вступительного испытания.**

Вступительное испытание проводится в устной форме.

### **2. Язык проведения вступительного испытания.**

Язык проведения экзамена – русский.

### **3. Содержание вступительного испытания.**

1. Оценка соответствия содержания ответа вопросу в экзаменационном билете, оценка владения понятийным аппаратом, аргументированность выводов и доказательств, ясность, четкость и логика изложения материала.

2. Применение полученных теоретических знаний к решению практических вопросов химической технологии, способность к аналитической деятельности; системность мышления и систематичность знания, гибкость и самостоятельность мышления.

### **4. Структурированное по разделам (предметным областям) содержание вступительного испытания.**

Основные принципы математического моделирования. Математические модели в механике, химической технологии, гидродинамике. Универсальность математических моделей. Методы построения математических моделей на основе фундаментальных законов природы. Виды математических моделей.

Создание модельных представлений движения потока. Модели идеального смещения и вытеснения. Уравнение Навье-Стокса для описания движения вязкой среды.

Основные задачи вычислительной гидродинамики. Метод конечных объемов. Сеточные методы. Программное обеспечение для решения задач гидрогазодинамики.

Стохастические (случайные) методы вычислений – методы Монте-Карло. Понятие Марковской цепи событий. Кинетический метод Монте-Карло.

Метод молекулярной динамики. Классическая постановка задачи молекулярной динамики.

Математическое моделирование тепло- и массообменных процессов. Уравнение конвективного теплообмена. Описание равновесия в системах пар-жидкость и жидкость-жидкость.

Оптимизация химико-технологических процессов. Задачи нелинейного программирования. Градиентные и безградиентные методы поиска экстремума.

Основные понятия нечёткой логики и теории нечётких множеств. Понятие лингвистической переменной. Степень принадлежности и функция принадлежности. Виды функций принадлежности. Виды, свойства и способы описания нечётких множеств. Нормализация нечёткого множества. Свойства

нечётких множеств. Способы описания нечётких множеств. Операции с нечёткими множествами.

Нейросетевое моделирование. Обучение нейросетевых моделей. Нейросетевые программные пакеты.

Понятие аппроксимации, устойчивости и сходимости разностных схем.

Численные методы решения ОДУ. Постановка задачи численного решения ОДУ 1 порядка. Явный метод Эйлера, неявный метод Эйлера. Метод Рунге-Кутты n-го порядка.

Численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Постановка задачи численного решения. Явная разностная схема, неявная разностная схема. Метод прогонки для решения неявной разностной схемы.

Численные методы решения многомерных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Метод дробных шагов, схема расщепления, схема предиктор-корректор.

Численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных эллиптического типа. Метод установления.

Современные пакеты программ в области вычислительной гидродинамики. Классификация и правила построения расчетных сеток.

Современные пакеты вычислительной математики. Основы работы в MATLAB. Применение пакета MATLAB для реализации методов вычислительной математики при моделировании химико-технологических процессов.

Современные пакеты в области химической технологии. Обзор современных пакетов моделирующих программ. Принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и химических производств.

## 5. Критерии оценки.

Билет состоит из 2 вопросов, каждый из вопросов оценивается в 40 баллов. Ответы на дополнительные вопросы оцениваются в 20 баллов.

Шкала оценивания:

<b>Ответ на вопросы билета</b>	Всестороннее, систематическое и глубокое знание материала,	Систематическое и глубокое знание материала, усвоил взаимосвязь основных понятий	Не систематическое знание материала, не до конца усвоил	Не систематическое знание материала, практически не
--------------------------------	--	--	---	---

	усвоил взаимосвязь основных понятий физической химии	физической химии	взаимосвязь основных понятий физической химии	усвоил взаимосвязь основных понятий физической химии
Количество баллов	40	30	20	10

## 6. Примерный перечень вопросов для экзамена

1. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Основные этапы математического моделирования. Методы построения математических моделей на основе фундаментальных законов природы.[1]
2. Виды математических моделей химико-технологических процессов.[1]
3. Описание структуры потоков в аппарате на основе модельных представлений движения потока. Модели идеального смешения и вытеснения.[1]
4. Вывод уравнения диффузионной модели структуры потоков. Начальные и граничные условия. Оценка параметра модели.[1]
5. Уравнение Навье-Стокса для описания движения вязкой среды.[1,7]
6. Математическое моделирование теплообменных процессов. Уравнение конвективного теплообмена. [1,4]
7. Математическое моделирование массообменных процессов.[1,4]
8. Оптимизация химико-технологических процессов. Градиентные методы поиска экстремума. Метод релаксации, метод градиента, метод наискорейшего спуска. [5]
9. Оптимизация химико-технологических процессов. Безградиентные методы поиска экстремума. Метод золотого сечения, метод с использованием чисел Фибоначчи.[5]
10. Метод конечных объемов для решения задач вычислительной гидродинамики.[7]
11. Классическая постановка задачи молекулярной динамики.[7]
12. Классические методы определения локальных и глобальных экстремумов. [8]
13. Функция Лагранжа. Метод неопределенных множителей Лагранжа.[8]

14. Нейросетевое моделирование. Классификация нейросетевых моделей. Этапы разработки нейросетевых моделей. Нейросетевые программные пакеты. [9]

15. Обучаемые и самообучающиеся нейронные сети. Алгоритмы обучения. Примеры применения искусственных нейронных сетей. [9]

16. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Постановка задачи численного решения ОДУ 1 порядка. Явный метод Эйлера, неявный метод Эйлера. Метод Рунге-Кутты n-го порядка. [2,3]

17. Численные методы решения дифференциальных в частных производных параболического типа. Постановка задачи численного решения. Явная разностная схема, неявная разностная схема. Метод прогонки для решения неявной разностной схемы. [2,3]

18. Численные методы решения многомерных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Метод дробных шагов, схема расщепления, схема предиктор-корректор. [2,3]

19. Метод установления для решения дифференциальных уравнений в частных производных эллиптического типа. [2,3]

20. Понятие устойчивости разностных схем. Метод гармоник для исследования устойчивости разностных схем. [2,3]

21. Современные пакеты вычислительной математики. Основы работы в MATLAB. Основные компоненты MATLAB. Типы данных. Арифметические операции. Задание массивов. Операции над матрицами. [11,12]

22. Применение пакета MATLAB для реализации численных методов вычислительной математики при моделировании химико-технологических процессов. [11,12]

23. Современные пакеты в области химической технологии. Обзор современных пакетов моделирующих программ. Этапы компьютерного моделирования химико-технологических систем. [13,14]

24. Принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и химических производств с помощью прикладных пакетов. [13,14]

25. Современные пакеты программ в области вычислительной гидродинамики. Классификация и правила построения расчетных сеток. [7]



## 7. Список рекомендуемой литературы

1. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учебное пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. - М. : Высшая школа, 1991. - 400с.
2. Кольцова, Э. М. Численные методы решения уравнений математической физики и химии: учебное пособие / Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2009. - 221 с.
3. Численные методы решения уравнений математической физики и химии: сборник задач / сост. Э. М. Кольцова, А. С. Скичко, А. В. Женса. - М. : РХТУ. Издат. центр, 2008. - 40 с.
4. Комиссаров, Ю.А. Химико-технологические процессы: учебное пособие для вузов / Ю.А. Комиссаров, М.Б. Глебов, Л.С. Гордеев, Д.П. Вент. – М. : Юрайт, 2022. – 341 с.
5. Бояринов, А.И. Методы оптимизации в химической технологии: учебное пособие для вузов / А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. – М. : «Химия», 1969. – 565 с.
6. Мешалкин, В.П. Экспертные системы в химической технологии: учебное пособие для вузов / В.П. Мешалкин. – М. : «Химия», 1995. – 382 с.
7. Кольцова, Э.М. Многомасштабное компьютерное моделирование: учебное пособие / Э.М. Кольцова, И.И. Митричев. – М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2020. – 267 с.
8. Гордеев, Л.С. Оптимизация процессов в химической технологии: учебное пособие / Л.С. Гордеев, В.В. Кафаров, А.И. Бояринов. – М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1972.
9. Дударов С. П. Теоретические основы и практическое применение искусственных нейронных сетей: учеб. пособие/ С. П. Дударов, П. Л. Папаев. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2014. – 104 с.
10. Дударов С. П. Алгебра нечеткой логики и анализ нечетких множеств: учеб. пособие/ С. П. Дударов, П. Л. Папаев. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2018. – 84 с.
11. Гартман, Т. Н. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики : учебное пособие / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 404 с. — ISBN 978-5-8114-3900-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная

система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/126905> (дата обращения: 28.02.2022).  
— Режим доступа: для авториз. пользователей.

12. Филиппова, Е.Б. Численные методы в среде Matlab : учебный курс / Филиппова Е.Б. // Moodle : учебный портал РХТУ им. Д.И. Менделеева. – URL: <https://study.muctr.ru/enrol/index.php?id=6> (дата обращения 28.02.2022). – Режим доступа свободный.

13. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учебное пособие / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.

14. Филиппова, Е.Б. Инструментальные средства технологического проектирования: учебный курс / Филиппова Е.Б. // Moodle : учебный портал РХТУ им. Д.И. Менделеева. – URL: <https://study.muctr.ru/enrol/index.php?id=584> (дата обращения 28.02.2022). – Режим доступа свободный.