

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева» (РХТУ им. Д.И. Менделеева)



«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по науке
РХТУ им. Д.И. Менделеева

А.А. Щербина

2023 г.

**ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНЫХ ИСПЫТАНИЙ
ПО ГРУППЕ НАУЧНЫХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ
1.2. КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

Научная специальность:

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Москва 2023 г.

Общие положения

Программа вступительного испытания по группе научных специальностей 1.2. Компьютерные науки и информатика разработана с учетом требований к поступающим, определёнными Правилами приема.

Цель проведения экзамена - оценка уровня знаний поступающих в области группы научных специальностей 1.2. Компьютерные науки и информатика 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 проверка наличия у поступающего необходимых теоретических и практических знаний по выбранному направлению научного исследования.

Поступающий должен показать профессиональное владение теорией и практикой в предметной области, продемонстрировать умение вести научную дискуссию.

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 для оценивания вступительного испытания.
6. Примерный перечень вопросов для экзамена.
7. Рекомендуемая литература для подготовки к вступительному испытанию.

1. Форма проведения вступительного испытания.

Вступительное испытание проводится в устной форме и включает в себя вопросы по научной специальности.

2. Язык проведения вступительного испытания.

Язык проведения экзамена – русский.

3. Содержание вступительного испытания.

Экзаменационный билет состоит из вопросов по научной специальности. На подготовку ответа отводится 20 минут.

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

Раздел 1. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

1.1. 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.

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

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

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

1.5. Метод молекулярной динамики. Классическая постановка задачи молекулярной динамики.

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

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

1.8. 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.

1.9. Нейросетевое моделирование. Обучение нейросетевых моделей. Нейросетевые программные пакеты.

1.10. Понятие аппроксимации, устойчивости и сходимости разностных схем.

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

1.12. 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.

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

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

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

1.16. Современные пакеты вычислительной математики. Основы работы в MATLAB. Применение пакета MATLAB для реализации методов

вычислительной математики при моделировании химико-технологических процессов.

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

5. Критерии оценки.

Вопросы по научной специальности оцениваются в 70 баллов. Ответы на дополнительные вопросы оцениваются в 30 баллов.

Шкала оценивания

Ответ на вопросы билета	Полное соответствие содержания ответа вопросу в экзаменационном билете, присутствует ясность, четкость и логика изложения. Поступающий показывает владение понятийным аппаратом, выводы аргументированы, высокий уровень владения материалом, показывает знание смежных вопросов.	Соответствие содержания ответа вопросу в экзаменационном билете, присутствует ясность, четкость и логика изложения. Поступающий показывает владение понятийным аппаратом, выводы не полностью аргументированы, высокий уровень владения материалом, показывает знание смежных вопросов.	Не полное соответствие содержания ответа вопросу в экзаменационном билете. Поступающий показывает недостаточное владение понятийным аппаратом, выводы частично аргументированы, низкий уровень владения материалом, недостаточно показывает знание смежных вопросов.	Не полное соответствие содержания ответа вопросу в экзаменационном билете, отсутствует ясность, четкость и логика изложения. Поступающий показывает слабое владение понятийным аппаратом, выводы не аргументированы, низкий уровень владения материалом, не показывает знание смежных вопросов.
Количество баллов	61-70	46-60	21-45	0-20
Ответ на дополнительные вопросы	Исчерпывающие и обоснованные ответы на вопросы, абитуриент демонстрирует глубокие теоретические знания, умение сравнивать и оценивать различные научные подходы, пользоваться	Полные, достаточно глубокие и обоснованные ответы на вопросы, поставленный экзаменационной комиссией, абитуриент демонстрирует хорошие знания, умение пользоваться современной	В целом правильные ответы на вопросы, поставленный экзаменационной комиссией, при этом поступающий недостаточно аргументирует ответы	Демонстрирует непонимание основного содержания теоретического материала, поверхностность и слабую аргументацию суждений или допущены значительные ошибки.

	современной научной терминологией	научной терминологией.		
Количество баллов	21-30	11-20	6-10	0-5

6. Примерный перечень вопросов для экзамена (избранные вопросы по специальной дисциплине)

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

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. Рекомендуемая литература для подготовки к вступительному испытанию

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

1. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учебное пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. - М. : Высшая школа, 1991. – 400 с.

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.