

**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*  
*12* января 20*22* г.

**ПРОГРАММА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА  
ПО НАУЧНОЙ СПЕЦИАЛЬНОСТИ**

**1.2.2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ  
МЕТОДЫ И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ**

**Москва 2022 г**

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

## **СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ**

### **1. Численные методы решения дифференциальных уравнений параболического типа и дифференциальных уравнений в частных производных 1-го порядка.**

1.1. Численные методы решения уравнений параболического типа.

2.2. Построение алгоритмов для решения задач теплопроводности и диффузии.

3.3. Численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных 1-го порядка.

4.4. Построение алгоритмов для решения задач, связанных с расчетом уравнений баланса числа частиц в химических реакторах.

### **2. Численные методы решения дифференциальных уравнений эллиптического типа.**

2.1. Численные методы решения дифференциальных уравнений эллиптического типа.

2.2. Сравнительная характеристика методов решения дифференциальных уравнений эллиптического типа.

2.3. Построение алгоритмов для решения задач расчета концентрационных и тепловых профилей в проточных трубчатых реакторах, расчета функции тока для решения задач гидродинамики.

### **3. Большие данные (Big Data).**

3.1. Понятия и области применения Big Data (Большие Данные), Machine Learning (Машинное обучение), Artificial Intelligence (Искусственный Интеллект, ИИ), Deep Learning (глубокое обучение), Data Mining, Text Mining.

3.2. Требования к системам обработки больших данных.

3.3. Недостатки инкрементных архитектур. Лямбда-архитектура.

#### **4. Системы параллельной обработки больших данных.**

4.1. Системы параллельной обработки больших данных (MapReduce).

4.2 Системы обмена сообщениями и диспетчера очередей (Apache Kafka). Системы вычислений в реальном времени (Apache Storm).

#### **5. Квантовохимическое моделирование в Orca.**

5.1. Основы теории функционала электронной плотности.

5.2. Работа с молекулярной геометрией в Avogadro.

5.3. Квантовохимическое моделирование в Orca.

#### **6. Основы моделирования гидрогазодинамических задач в ANSYS FLUENT.**

6.1 Вычислительная гидрогазодинамика, классы решаемых задач и решаемые уравнения.

6.2. Построение сеток в ANSYS Meshing.

6.3. Проведение расчетов трехмерных задач в ANSYS FLUENT.

6.4. Оптимизация параметров реактора в ANSYS Workbench (сквозное проектирование).

### **Вопросы для кандидатского экзамена по научной специальности**

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

1. Классификация и принципы разработки моделей систем: статические, динамические, концептуальные, топологические, формализованные (процедуры формализации моделей систем), информационные, логико-лингвистические, семантические, теоретико-множественные и др.

2. Классификация типов систем: естественные, концептуальные и искусственные, простые и сложные, целенаправленные, целеполагающие, активные и пассивные, стабильные и развивающие системы.

3. Основные методологические принципы системного подхода. Задачи системного анализа. Роль человека и средств ИКТ в решении задач системного анализа.

4. Общая характеристика химико-технологических процессов как сложных физико-химических систем. Общая характеристика и основные

свойства химических производств или сложных химико-технологических систем.

5. Общая характеристика алгоритмов поиска решений неформализуемых задач; генетические алгоритмы, муравьиные алгоритмы; алгоритмы «отжига». Основные понятия многоагентного программирования.

6. Иерархия современных автоматизированных систем управления промышленными производствами, предприятиями и вертикально-интегрированными компаниями: SCADA, CNS, MES, MRP, ERP.

7. Типы данных, типы моделей баз данных.

8. Типы связей “один к одному”, “один ко многим”, “много ко многим”. Примеры информационных систем, их типы, структура.

9. Метод молекулярной динамики. Общая характеристика метода. Алгоритм метода.

10. Уравнения сохранения массы, импульса, энергии сплошных сред.

11. Вывод метода прогонки для решения неявной схемы, аппроксимирующей уравнение параболического типа. Условие для устойчивости прогонки.

12. Примеры неявных схем для решения уравнения параболического типа с первым и вторым порядком аппроксимации по времени (в том числе схема Кранка-Николсона).

13. Явные и неявные схемы для решения уравнений в частных производных 1-го порядка. Метод решения. Выбор схемы в зависимости от знака при производной первого порядка.

14. Доказательство устойчивости разностных схем, аппроксимирующих уравнения в частных производных 1-го порядка.

15. Доказательство абсолютной устойчивости неявной разностной схемы, аппроксимирующей уравнение параболического типа (спектральный метод).

16. Метод установления для решения уравнения эллиптического типа с использованием метода дробных шагов.

17. Метод установления для решения уравнения эллиптического типа с использованием схемы переменных направлений.

18. Решение системы уравнений, состоящей из уравнений в частных производных и обыкновенных дифференциальных уравнений на примере процесса кристаллизации.

19. Приведение системы уравнений к безразмерному виду.

20. Проверка устойчивости разностной схемы с помощью тестовых задач.

21. Понятие “Большие данные”/Big Data, отличительные признаки больших данных.

22. Требования к системам для обработки больших данных. Недостатки инкрементных архитектур.

23. Лямбда-архитектура. Область применения, достоинства, недостатки.
24. Распределённые файловые системы для хранения больших файлов (на примере HDFS). Предпосылки создания, особенности, достоинства, недостатки. Область применения.
25. Место технологий Big Data среди Machine Learning, Artificial Intelligence, Data Mining.
26. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию фурфурола (фурфураль, furfural). Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.
27. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию парабензохинона (p-Benzoquinone). Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.
28. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию анилина. Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.
29. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию бензилового спирта. Провести оптимизацию в Orca геометрической структуры молекулы с использованием обменно-корреляционного функционала BLYP и базисного набора def2-SVP.
30. Построить в Avogadro или загрузить из базы данных исходную геометрию пропиленгликоля. Провести оптимизацию в Orca.
31. Построить прямоугольный параллелепипед 30x30x250 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 30x30. Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение воздуха (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,15 м/с. Задать 300 итераций расчета. Отобразить контурную картину скорости течения в модели.
32. Построить прямоугольный параллелепипед 20x20x250 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 20x20. Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение воздуха (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet 0,1 м/с. Задать критерий сходимости по уравнению неразрывности 1e-04 и достичь этого значения в расчете. Отобразить контурную картину скорости течения в модели.
33. Построить прямоугольный параллелепипед 25x25x300 мм, задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях 25x25.

Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение газа с плотностью  $1,977 \text{ кг/м}^3$  и динамической вязкостью  $8,5\text{e-}05 \text{ Па}\cdot\text{с}$  ( $\text{CO}_2$ ) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet  $0,14 \text{ м/с}$ . Отобразить контурную картину скорости течения в модели.

34. Построить прямоугольный параллелепипед  $30 \times 30 \times 200 \text{ мм}$ , задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях  $30 \times 30$ . Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение воды (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet  $0,02 \text{ м/с}$ . Задать 400 итераций расчета. Отобразить векторную картину скорости течения в модели.

35. Построить прямоугольный параллелепипед  $20 \times 20 \times 250 \text{ мм}$ , задать граничные условия inlet и outlet на противоположных поверхностях  $20 \times 20$ . Создать расчетную сетку на модели. Рассчитать во Fluent стационарное течение аргона (стандартные свойства из Fluent) сквозь этот параллелепипед, скорость на входе inlet  $0,16 \text{ м/с}$ . Задать критерий сходимости по всем уравнениям  $1\text{e-}04$  и достичь этого значения в расчете. Отобразить векторную картину скорости течения в модели.

### Список литературы

1. Кольцова, Э. М., Митричев, И. И. Многомасштабное компьютерное моделирование: учебное пособие / Э.М. Кольцова, И.И. Митричев. – Москва: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – 260 с.

2. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учебное пособие для академического бакалавриата / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 403 с. —URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/441786>

3. Лобанов, А. И. Математическое моделирование нелинейных процессов : учебник для академического бакалавриата / А. И. Лобанов, И. Б. Петров. — Москва: Издательство Юрайт, 2019. — 255 с URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/437003>

4. Рейзлин, В. И. Математическое моделирование : учебное пособие для магистратуры / В. И. Рейзлин. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 126 с. -URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/434020>

5. Кознов, А. В. Математическое моделирование и расчет химико-технологических процессов и систем с использованием DESIGN-II

[Электронный ресурс] : учебное пособие / А. В. Кознов. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. - 91 с. : ил. - Библиогр.: с. 91.