

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«Специальные главы прикладной математики»

Дисциплина «Специальные главы прикладной математики» является частью программы магистратуры «Хемобиодинамика и биоинформатика» по направлению «01.04.02 Прикладная математика и информатика».

Цели и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины «Специальные главы прикладной математики» является формирование у студентов теоретических и практических знаний в области применения современного программного обеспечения, предназначенного для компьютерного моделирования и решения задач физико-химической гидродинамики, микрофлуидики, химического синтеза, молекулярной динамики. Задачи учебной дисциплины: - формирование знаний о методах численного моделирования в области физико-химической гидродинамики, микрофлуидики, вычислительной химии. - формирование умений и навыков работы с системами компьютерного моделирования физических и химических процессов ANSYSFluent, ANSYSCFX, COMSOL Multiphysics, ChemOffice, HyperChem и др..

Изучаемые объекты дисциплины

Программные средства компьютерного моделирования физических, химических, гидродинамических процессов: ANSYSFluent, ANSYSCFX, COMSOL Multiphysics, FlexPDE, ChemOffice, HyperChem и др..

Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		3	
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	36	36	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)	16	16	
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	18	18	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	72	72	
2. Промежуточная аттестация			
Экзамен	36	36	
Дифференцированный зачет			
Зачет			
Курсовой проект (КП)			
Курсовая работа (КР)			
Общая трудоемкость дисциплины	144	144	

Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
3-й семестр				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Раздел 3. Моделирование в компьютерной химии и молекулярной динамике	4	0	4	24
Тема 10. Типовые задачи компьютерной химии: поиск зависимостей типа «структура — свойство»; генерация наборов химических структур, отвечающих заданным параметрам (составу, наличию функциональных групп и т. д.); перечисление всевозможных химических реакций между заданными реагентами (так называемый «компьютерный синтез»). Знакомство с программным пакетом ChemOffice. Химический редактор ChemDraw; запись схемы реакции с указанием реакционных центров. Тема 11. Уравнения молекулярной динамики. Метод списков Верле. Решеточные газы, уравнение Больцмана. Модели LGA и LBE. Химические реакции в решеточных моделях. Моделирование в молекулярной динамике с помощью программы HyperChem. Построение и редактирование молекул. Формирование полипептида. Измерение параметров структур. Создание и редактирование полипептидной цепи. Минимизация энергии системы. Моделирование динамики и состояния равновесия.				
Раздел 1. Моделирование процессов физико-химической гидродинамики	6	0	8	24
Тема 1. CFD-пакет ANSYS CFX (Fluent). Метод конечных объемов. Возможности, особенности и состав пакета ANSYS Academic Student. Основы работы с ANSYS CFX (Fluent). Создание и работа с проектом задачи в ANSYS Workbench. Создание геометрии задачи в ANSYS Design Modeler. Построение сетки в ANSYS Mesh. Этапы описания задачи в ANSYS CFX (Fluent). Тема 2. Моделирование физико-химических процессов в пакете ANSYS CFX (Fluent). Модель химического реактора загрузочного (проточного) типа для реакции нейтрализации. Расчет сложной реакции с привлечением импорта файлов CHEMKIN: гомогенное воспламенение сжатого метана. Моделирование фармацевтических производств: ферментативная реакция с кинетикой Михаэлиса-Ментена. Применение				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>модулей оптимизации: расчет распределения катализатора в реакторе для максимизации общей скорости реакции раствора. Сепарация химических соединений: мембранный диализ, высокоэффективная жидкостная хроматография (HPLC), управляемая диффузия в микроканальной Н-ячейке.</p> <p>Тема 3. Программная среда для решения уравнений в частных производных FlexPDE. Метод конечных элементов. Возможности, особенности и состав МКЭ-пакета FlexPDE. Основы работы с пакетом FlexPDE. Рабочее окно программы, главное меню. Сценарий описания и решения задачи. Разделы и инструкции сценария. Операторы и функции FlexPDE.</p> <p>Тема 4. Моделирование гидродинамических процессов в среде FlexPDE. Модель химического реактора загрузочного (проточного) типа для реакции нейтрализации.</p> <p>Тема 5. Системы имитационного моделирования химико-технологических процессов: Aspen Plus, Aspen Hysys, CHEMCAD, Design II, PRO/II, ProMax, GIBBS .</p>				
Раздел 2. Моделирование в микрофлюидике	6	0	6	24
<p>Тема 6. Универсальная среда численного моделирования в различных областях научных исследований COMSOL Multiphysics. Модули гидродинамики и теплопередачи: вычислительная гидродинамика, микрофлюидика, миксеры, течения в пористых средах, молекулярные течения, теплопередача, течения в трубопроводах. Модули химии: химические реакции, электрохимия, электроосаждение, топливные элементы. Многоцелевые модули: модуль оптимизации, модуль трассировки частиц, библиотека материалов.</p> <p>Тема 7. Микрожидкостное смешивание. Активные смесители: диэлектрофоретический, электрокинетический (периодический электроосмотический миксер), пульсации давления, ультразвуковой акустический, магнитогидродинамический. Конвективные</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>механизмы перемешивания: конвекция двойной диффузии, конвекция Релея-Тейлора. Пассивное смешивание: зигзагообразные каналы, пересекающиеся каналы, встроенные барьеры. Тема 8. Разделение смесей. Диэлектрофоретическое (DEP) разделение частиц с различными размерами, формой и диэлектрическими свойствами в жидком носителе. Расчет установки для отделения эритроцитов от тромбоцитов. Тема 9. Двухфазные течения. Модель капиллярного течения с учетом силы поверхностного натяжения и прилипания стенок: level set – метод, phase field –метод. Система доставки лекарств, растворимых в воде, по капилляру. Электро-настраиваемая линза: мениск, образующийся между двумя несмешивающимися жидкостями (одной проводящей и одной изолирующей), приводится в действие электропроводящим эффектом на диэлектрике (EWOD). Моделирование потока жидкости в струйной дюзе, например, в принтере. Эффект Марангони: разрушение длинной струи жидкости в результате периодического градиента поверхностного натяжения.</p>				
ИТОГО по 3-му семестру	16	0	18	72
ИТОГО по дисциплине	16	0	18	72