

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### «Вычислительная математика»

Дисциплина «Вычислительная математика» является частью программы специалитета «Химическая технология полимерных композиций, порохов и твердых ракетных топлив» по направлению «18.05.01 Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий»

#### **Цели и задачи дисциплины**

Цель учебной дисциплины – формирование у студентов знаний, умений и навыков применения методов вычислительной математики, современных информационных технологий и системного подхода для решения сложных прикладных задач в своей предметной области, совершенствование их логического и алгоритмического мышления. Задачи учебной дисциплины: • изучение основ общей теории моделирования, этапов и особенностей математического моделирования химико-технологических процессов (ХТП); • изучение методов построения формальных математических моделей физико-химических процессов и идентификации свойств многокомпонентных химических продуктов по экспериментальным данным на основе пассивного и активного, оптимально спланированного, эксперимента; • изучение математических моделей и методов моделирования кинетики сложных химических реакций; • изучение основных понятий теории оптимизации и обобщенной математической модели задачи оптимизации химико-технологических процессов; • изучение типов и методов решения задач нелинейного программирования; • формирование умения ставить задачи математического моделирования в своей предметной области и выбирать численный метод их решения; • формирование умения правильно выбирать тип оптимального плана эксперимента в зависимости от требований, предъявляемых к свойствам формальной математической модели; • формирование умения строить кинетическую модель химической реакции в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений по заданной стехиометрической модели и решать прямую задачу химической кинетики с использованием прикладных программ; • формирование умения ставить задачи оптимизации в своей предметной области и выбирать численный метод их решения; • формирование навыков построения формальных моделей физико-химических процессов и моделей свойств многокомпонентных химических продуктов в своей предметной области с использованием прикладных программных систем; • формирование навыков решения задач оптимизации с использованием прикладных программ..

### Изучаемые объекты дисциплины

- основы общей теории моделирования;
- метод математического моделирования, его место и роль в системном анализе при исследовании и оптимизации сложных систем и процессов;
- особенности математического моделирования химико-технологических процессов;
- метод наименьших квадратов и регрессионные математические модели на основе пассивного и активного эксперимента;
- методы оптимального планирования эксперимента;
- математические модели и методы моделирования кинетики химических реакций;
- обобщенная математическая модель задачи оптимизации химико-технологического процесса;
- методы решения задач оптимизации, основанные на классическом математическом анализе;
- методы решения задач нелинейного программирования;
- этапы формализации задач оптимизации;

### Объем и виды учебной работы

| Вид учебной работы   | Всего часов | Распределение по семестрам в часах |     |    |    |    |
|--|-------------|------------------------------------|-----|----|----|----|
|  |             | Номер семестра                     |     |    |    |    |
|  |             | 6                                  | 7   |    |    |    |
| 1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме: | 162         | 90                                 | 72  |    |    |    |
| 1.1. Контактная аудиторная работа, из них:   |             |                                    |     |    |    |    |
| - лекции (Л)   |             |                                    |     | 68 | 34 | 34 |
| - лабораторные работы (ЛР)   |             |                                    |     | 90 | 54 | 36 |
| - практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)        |             |                                    |     |    |    |    |
| - контроль самостоятельной работы (КСР)  |             |                                    |     | 4  | 2  | 2  |
| - контрольная работа   |             |                                    |     |    |    |    |
| 1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)  | 270         | 162                                | 108 |    |    |    |
| 2. Промежуточная аттестация  |             |                                    |     |    |    |    |
| Экзамен  | 36          |                                    | 36  |    |    |    |
| Дифференцированный зачет   | 9           | 9                                  |     |    |    |    |
| Зачет  |             |                                    |     |    |    |    |
| Курсовой проект (КП)   |             |                                    |     |    |    |    |
| Курсовая работа (КР)   |             |                                    |     |    |    |    |
| Общая трудоемкость дисциплины  | 468         | 252                                | 216 |    |    |    |

### 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  |
| 6-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  |
| Математическое моделирование кинетики химических реакций.  | 8   | 18 | 0  | 46   |
| Тема 6. Математические модели химических реакций. Классификация типов химических реакций, их особенности. Стехиометрические и кинетические математические модели простых, сложных и обратимых химических реакций. Тема 7. Методы математического моделирования кинетики химических реакций. Понятие прямой и обратной задачи химической кинетики. Особенности математического моделирования кинетики химических реакций. Алгоритм решения прямой задачи химической кинетики по стехиометрической модели химической реакции и заданным значениям констант скоростей стадий реакции. Этапы и методы построения кинетической модели сложной химической реакции. Пример построения кинетической модели с использованием метода оптимального планирования эксперимента. |   |    |    |  |
| Методы построения формальных математических моделей на основе экспериментальных данных.  | 22  | 36 | 0  | 80   |
| Тема 3. Построение регрессионных математических моделей на основе пассивного эксперимента. Понятие пассивного и активного эксперимента. Основные предпосылки построения регрессионных математических моделей и применения регрессионного анализа. Метод наименьших квадратов (МНК). Уравнение регрессии (УР) и система нормальных уравнений (СНУ) относительно стандартизированных переменных, особенности СНУ. Решение СНУ в матричном виде относительно коэффициентов УР. Статистические критерии проверки гипотез: воспроизводимости эксперимента по критерию Кохрена; значимости коэффициентов УР по критерию Стьюдента; адекватности регрессионной модели по критерию Фишера.   |   |    |    |  |

| 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>Тема 4. Построение регрессионных математических моделей на основе оптимального планирования эксперимента. Смысл методов оптимального планирования эксперимента. Сущность полного факторного эксперимента (ПФЭ). Понятие плана эксперимента и его геометрическая интерпретация. Смысл основных критериев оптимальности планов эксперимента. Обработка результатов и оптимальные свойства ПФЭ. Дробный факторный эксперимент. Принципы построения дробных реплик. Метод центрального композиционного планирования (ЦКП).</p> <p>Принцип композиционности планов эксперимента. Центральные композиционные ортогональный (ЦКОП) и ротатабельный (ЦКРП) планы, их структура, особенности и оптимальные свойства соответствующих им регрессионных моделей. Статистический анализ регрессионных моделей второго порядка, получаемых с помощью ЦКОП и ЦКРП.</p> <p>Тема 5. Методы идентификации свойств многокомпонентных химических продуктов. Особенности оптимального планирования эксперимента при изучении свойств многокомпонентных химических продуктов (МХП). Планирование эксперимента на симплекс-решётках. Понятие о приведённых полиномах Шеффе. Симплекс-решётчатые планы Шеффе. Принципы построения матриц планирования для планов Шеффе. Вычисление коэффициентов полинома Шеффе и способы оценки адекватности модели. Планирование эксперимента при идентификации свойств МХП в локальной области.</p> |   |    |    |  |
| Основы общей теории моделирования и особенности математического моделирования химико-технологических процессов.   | 4   | 0  | 0  | 36   |
| <p>Тема 1. Введение в общую теорию моделирования.</p> <p>Основные направления использования ЭВМ в химии и химической технологии. Технология решения сложных научных и инженерных задач на ЭВМ. Понятие моделирования и модели. Материальные и информационные модели. Классификация материальных</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>моделей и способов моделирования, теоретическая основа физического и аналогового моделирования.</p> <p>Классификация информационных моделей и способов моделирования. Понятие математической модели и метода математического моделирования.</p> <p>Роль математического моделирования и методов идентификации математических моделей в системном анализе при исследовании и оптимизации сложных, в том числе химико-технологических, объектов и процессов.</p> <p>Тема 2. Особенности математического моделирования химико-техно-логических процессов.</p> <p>Классификация математических моделей в химической технологии. Методы построения математических моделей. Этапы математического моделирования химико-технологических процессов (ХТП) и блочный принцип построения математических моделей ХТП. Смысл и критерии оценки адекватности математических моделей. Состав полного математического описания ХТП.</p> |   |    |    |  |
| ИТОГО по 6-му семестру   | 34  | 54 | 0  | 162  |
| 7-й семестр  |   |    |    |  |
| Численные методы поиска экстремума функций.  | 12  | 16 | 0  | 42   |
| <p>Тема 4. Безградиентные методы поиска экстремума функций одной и многих переменных</p> <p>Общая характеристика численных методов оптимизации. Особенности безградиентных методов. Методы поиска экстремума функции одной переменной (сканирования, локализации, «Золотого сечения», чисел Фибоначчи).</p> <p>Методы поиска экстремума функции многих переменных (Гаусса-Зейделя, сканирования, сканирования с переменным шагом, симплексный метод).</p> <p>Тема 5. Градиентные методы поиска экстремума функций многих переменных</p> <p>Характеристика градиентных методов многомерной оптимизации. Методы поиска экстремума функции многих переменных</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  |
| (релаксации, градиента, наискорейшего спуска)<br>. Критерии окончания поиска экстремума.  |   |    |    |  |
| Методы решения задач оптимизации при наличии ограничений. Нелинейное программирование.  | 16  | 16 | 0  | 46   |
| Тема 6. Постановка и типы задач нелинейного программирования<br>Математическая постановка задачи нелинейного программирования (ЗНП). Типы задач нелинейного программирования.<br>Постановка задачи оптимизации свойств полимерного композиционного энергонасыщенного материала.<br>Тема 7. Метод неопределённых множителей Лагранжа<br>Особенности постановки решаемых методом Лагранжа ЗНП. Метод решения ЗНП с ограничениями типа равенств путем сведения её к задаче безусловной оптимизации (без ограничений). Пример решения задачи методом множителей Лагранжа.<br>Тема 8. Метод штрафных функций<br>Общий вид математической постановки ЗНП с ограничениями разного типа. Способы сведения общей ЗНП к задаче оптимизации без ограничений (задаче безусловной оптимизации)<br>. Виды функционалов, используемых в методе штрафных функций для приведения ЗНП общего вида к задаче безусловной оптимизации. Постановка и решение задачи оптимизации состава твердых дисперсных наполнителей полимерных композиционных энергонасыщенных материалов по критерию максимального объемного наполнения.<br>Постановка и решение задачи оптимизации гранулометрического состава твердых дисперсных наполнителей полимерных композиционных материалов при ограничениях на содержание твердых компонентов в составе полимерного композиционного материала. |   |    |    |  |
| Постановка и смысл задач оптимизации.<br>Методы решения задач оптимизации, основанные на классическом математическом анализе.   | 6   | 4  | 0  | 20   |
| Тема 1. Основные понятия и определения  |   |    |    |  |

| 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>Смысл основных терминов теории оптимизации (оптимум, оптимизация, критерий оптимальности, оптимальный вариант системы) . Примеры постановки задач оптимизации в химической технологии на естественном языке. Тема 2. Обобщенная математическая модель задачи оптимизации</p> <p>Представление химико-технологического процесса (ХТП) с кибернетических позиций. Математическая модель обобщенной, абстрактной задачи оптимизации ХТП. Виды и этапы решения задач оптимизации.</p> <p>Тема 3. Методы решения задач оптимизации, основанные на классическом математическом анализе</p> <p>Необходимые и достаточные условия существования экстремума функции одной переменной. Необходимые и достаточные условия существования экстремума функции многих переменных.</p> <p>Оптимизация равновесных экзотермических реакций.</p> |   |    |    |  |
| ИТОГО по 7-му семестру  | 34  | 36 | 0  | 108  |
| ИТОГО по дисциплине   | 68  | 90 | 0  | 270  |