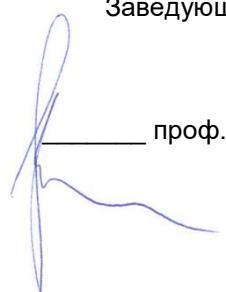


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

МиКМ



prof. A.B. Kovalev
16.06.2021.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.21 Математическое моделирование

1. Шифр и наименование направления подготовки/специальности:
01.03.03 Механика и математическое моделирование

2. Профиль подготовки/специализации: Компьютерный инжиниринг в механике сплошных сред

3. Квалификация (степень) выпускника: Бакалавр

4. Форма обучения: Очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:
Механики и компьютерного моделирования

6. Составители программы:

Бондарева Мария Владимировна, аспирант, факультет ПММ, кафедра МиКМ, Dobrosotskaya_masha@mail.ru

Ковалев Алексей Викторович, доктор физ-мат. наук, профессор, факультет ПММ, кафедра МиКМ, kovalev@amm.vsu.ru

7. Рекомендована: НМС факультета ПММ протокол №10 15.06.2021.

8. Учебный год: 2024 - 2025

Семестр(ы): 7

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- Изучение принципов и методов построения математических моделей для процессов и явлений, изучаемых в естествознании, с учётом физико-химических взаимодействий;

Задачи учебной дисциплины:

-развитие практических навыков для решения современных инженерно-технических задач с учётом физико-химических взаимодействий с помощью компьютерного эксперимента.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина входит в обязательную часть профессионального цикла. Для освоения дисциплины необходимы знания дисциплин: дифференциальные уравнения, уравнения математической физики, численные методы, компьютерные науки, механика сплошной среды. Освоение дисциплины позволит в дальнейшем изучать дисциплины: математические модели в МСС, компьютерные системы и технологии, а также специальные курсы по профилю подготовки.

11. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ОПК-2	Способен разрабатывать и применять новые методы математического моделирования в научно-исследовательской и опытно-конструкторской деятельности	ОПК-2.1	Освоение фундаментальных понятий математического моделирования.	<p>Знать: фундаментальные понятия теории моделирования, быть знакомым с принципами и современными методами построения математических моделей.</p> <p>Уметь: участвовать в коллективной разработке иерархических совокупностей математических моделей для процессов и систем со сложными физико-химическими взаимодействиями в различных разделах естествознания и отраслях техники.</p> <p>Владеть: навыками построения математических моделей различного уровня в разнообразных предметных областях естествознания и инженерно-конструкторской практики с использованием современных программных комплексов при поиске оптимальных режимов функционирования сложных инженерно-технических систем.</p>
		ОПК-2.3	Анализирует задачу, подбирает необходимые методы математического и алгоритмического моделирования для ее решения.	<p>Знать: основные этапы использования компьютерных систем и современных информационных технологий при математическом моделировании сложных систем, современным состоянием и перспективами развития дисциплины.</p> <p>Уметь: ; грамотно применять компьютерное моделирование в инженерно-технических расчетах и прогнозировании поведения сложных систем.</p> <p>Владеть: навыками построения математических моделей различного уровня в разнообразных предметных областях естествознания и инженерно-конструкторской практики с ис-</p>

				пользованием современных программных комплексов при поиске оптимальных режимов функционирования сложных инженерно-технических систем.
--	--	--	--	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 4/144.

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен): экзамен

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость		
	Всего	По семестрам	
		1	2
Контактная работа	48	48	
в том числе:	лекции	16	16
	практические	16	16
	лабораторные	16	16
	курсовая работа		
	др. виды(при наличии)		
Самостоятельная работа	60	60	
Промежуточная аттестация (для экзамена)			Экзамен
Итого:	144	144	

13.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн- курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Основы теории моделирования физико-химических процессов и систем	Моделирование как метод научного познания, теоретического исследования и инженерно - конструкторской практики. Теория познания, общая теория систем и системный анализ. Основные понятия, определения и представления теории моделирования. Принцип многовариантности. Иерархия моделей. Базовая модель. Построение моделей более высокого уровня иерархии с учетом физико-химических взаимодействий.	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»
1.2	Теория математического моделирования с учётом физико-химических взаимодействий	Определение и свойства математической модели. Метод математического моделирования как метод исследования реальных объектов. Основные этапы математического моделирования и компьютерного эксперимента. Подходы при анализе, моделировании и проектировании сложных научных или технических объектов и систем. Фундаментальные законы природы, как основа построения математических моделей в естествознании с учётом физико-химических взаимодействий. Математическое моделирование физических и химических взаимодействий. Замыкание моделей и определяющие уравнения в случае фазовых переходов, гомогенных и гетерогенных реакций. Условия однозначности. Формулировка начальных и граничных условий. Сопряженные	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»

		задачи переноса. Преобразования и исследования математических моделей. Асимптотические модели. Методы регулярных и сингулярных возмущений.	
1.3	Дискретизация математических моделей с помощью МКО	Методы дискретизации математических моделей. Метод контрольных объемов.	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»
1.4	Теоретические основы и технология компьютерного эксперимента	Краткая характеристика пакетов программ для проведения компьютерного эксперимента. Модели функционального наполнения современных пакетов программ. Протокол компьютерного эксперимента. Современные тенденции математического моделирования и компьютерного эксперимента.	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»
2. Практические задания			
2.1	Теория математического моделирования с учётом физико-химических взаимодействий	Построение математических моделей для сорбционных процессов. Исследование построенных математических моделей	
2.2	Дискретизация математических моделей с помощью МКО	Построение дискретных моделей. Разработка вычислительных алгоритмов	
2.3	Теоретические основы и технология компьютерного эксперимента	Формулировка программных, функциональных спецификаций. Определение и разработка структур данных. Создание файлов исходных данных. Проектирование и создание модулей функционального назначения. Тестирование разработанных модулей. Формирование протокола компьютерного эксперимента. Визуализация результатов компьютерного эксперимента.	
3.Лабораторные занятия			
3.1	Теория математического моделирования с учётом физико-химических взаимодействий	Постановка задач моделирования процессов переноса с учётом физико-химических взаимодействий. Построение уравнений баланса и определяющих уравнений. Запись условий однозначности. Приведение математической задачи к безразмерному виду.	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»
3.2	Дискретизация математических моделей с помощью МКО	Применение метода контрольных объемов к построенным и преобразованным математическим моделям.	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»
3.3	Теоретические основы и технология компьютерного эксперимента	Подготовка входных данных для ПО. Создание модулей функционального наполнения, их тестирование и верификация. Проведение компьютерного эксперимента. Визуализация результатов компьютерного эксперимента и формализация выводов.	«Математическое моделирование и компьютерный эксперимент»

13.2 Междисциплинарные связи

№ п/п	Наименование дисциплин учебного плана, с которым организована взаимосвязь дисциплины рабочей программы	№ разделов дисциплины рабочей программы, связанных с указанными дисциплинами
1.	Генераторы сеток	Все разделы
2.	Математическое моделирование	Все разделы
3.	Численные методы	Все разделы

13.3 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1.	Основы теории моделирования физико-химических процессов и систем	8		11	19
2.	Теория математического моделирования с учётом физико-химических взаимодействий	12	10	11	33

3.	Дискретизация математических моделей с помощью МКО	4		11	15
4.	Теоретические основы и технология компьютерного эксперимента	8	22	11	41
	Итого	32	32	44	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студентам, изучающим дисциплину, рекомендуется проведение самостоятельной работы с конспектами лекций, презентационным материалом, методическими указаниями, литературой. При использовании дистанционных образовательных технологий и электронного обучения выполнять все указания преподавателей по работе на LMS-платформе, своевременно подключаться к online-занятиям, соблюдать рекомендации по организации самостоятельной работы.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. – М.: Наука, 2007. – 320 с.
2	Зарубин В.С. Математическое моделирование в технике: учебное пособие. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. – 496 с.
3	Velten K. Mathematical modeling and simulation. – Moerlenbach : Wiley, 2009. – 364 p.
4	Коржов Е.Н. Математическое моделирование: учебное пособие/ Е.Н. Коржов, – Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2012. - 76 с.
5	Тихонов Н.А., Токмачев М.Г. Основы математического моделирования: курс лекций. В 2-х частях. – М.: Изд-во МГУ, 2013. – 175 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	Ашихмин В.Н. Введение в математическое моделирование: учебное пособие / В.Н. Ашихмин, М.Б. Гитман, И.Э. Келлер, О.Б. Наймарк, В.Ю. Столбов, П.В. Трусов, П.Г. Фрик. – М. : Логос, 2005. – 440 с.
2	Краснощеков Н.С., Петров А.А. Принципы построения моделей. М.: ФАЗИС, ВЦ РАН, 2000. 412 с.
3	Венецианов Е.В., Рубинштейн Р.Н. Динамика сорбции из жидких сред. – М.: Наука, 1983. – 238 с.
4	Денисов А.М., Лукшин А.В. Математические модели однокомпонентной динамики сорбции: учебное пособие. – Изд-во МГУ, 1989. – 74 с.
5	Кравченко ТА, Полянский ЛН, Калиничев АИ, Конев ДВ. Нанокомпозиты металл-ионообменник. – М.: Наука, 2009. – 391 с.
6	Meerschaert M.M. Mathematical Modeling. – Amsterdam: Academic Press, 2013. – 368 p.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
1.	Электронная библиотека ВГУ www.lib.vsu.ru
2.	Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ»
3.	ЭБС «Консультант студента»
4.	ЭБС «Лань»

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1.	Коржов Е.Н. Физико-химическая механика: учебно-методическое пособие. – Воронеж: ИПЦ Воронежского госуниверситета, 2009. – 69 с.
2.	Коржов Е.Н. Математическое моделирование процессов редокс-сорбции: учебное пособие. – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2016. – 42 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение:

Дисциплина реализуется с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. Для организации занятий рекомендован онлайн-курс «Математическое моделирование», размещенный на платформе Электронного университета ВГУ (LMS moodle), а также Интернет-ресурсы, приведенные в п.15в.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Учебные аудитории для проведения лекционных и практических занятий, использование средств мультимедиа для визуализации решения задач

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основы теории моделирования физико-химических процессов и систем	ОПК-2	ОПК-2.1 ОПК-2.3	Домашние задания
2.	Теория математического моделирования с учётом физико-химических взаимодействий	ОПК-2	ОПК-2.1 ОПК-2.3	Лабораторные задания/домашние задания/практические задания
3.	Дискретизация математических моделей с помощью МКО	ОПК-2	ОПК-2.1 ОПК-2.3	Лабораторные задания/домашние задания
4.	Теоретические основы и технология компьютерного эксперимента	ОПК-2	ОПК-2.1 ОПК-2.3	Лабораторные задания/домашние задания/практические задания
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				Перечень вопросов

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Практикоориентированные задания/домашние задания

Перечень тем индивидуальных заданий

1. Охлаждение шарообразного твердого тела покоящейся жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия типа Дирихле (**базовая модель**).
2. Охлаждение шарообразного твердого тела покоящейся жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия типа Неймана.
3. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия конвективного типа (типа Робина).
4. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия сопряженного типа.
5. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкостью или газообразной окружающей средой с учетом теплового δ -слоя Нернста вокруг твердого тела. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия на поверхности раздела твердое тело / окружающая среда сопряженного типа.
6. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкостью или покоящейся газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды одного порядка с размером твердого тела, а его внешняя граница теплоизолирована. На поверхности раздела твердое тело / окружающая среда ставятся граничные условия сопряженного типа.
7. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, покоящейся жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия типа Дирихле.
8. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, покоящейся жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия типа Неймана.
9. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия типа Робина.
10. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, покоящейся жидкостью или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Границные условия сопряженного типа.
11. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкостью или газообразной окружающей средой с учетом теплового δ -слоя Нернста вокруг твердого тела. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Внутри твердого тела имеются распределенные стоки тепла. Границные условия на поверхности раздела твердое тело / окружающая среда сопряженного типа.
12. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкостью или покоящейся газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды одного порядка с размером твердого тела, а его внешняя граница теплоизолирована. Внутри твердого тела имеются распределенные стоки тепла, а на его поверхности раздела с окружающей средой задаются граничные условия сопряженного типа.

13. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, покоящейся жидкой или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Граничные условия типа Дирихле.
14. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, покоящейся жидкой или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Граничные условия типа Неймана.
15. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, жидкой или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Граничные условия типа Робина.
16. Охлаждение шарообразного твердого тела, внутри которого расположены внутренние стоки тепла, покоящейся жидкой или газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Граничные условия сопряженного типа.
17. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкой или газообразной окружающей средой с учетом теплового δ -слоя Нернста вокруг твердого тела. Характерный размер объема окружающей среды значительно превосходит размеры твердого тела. Внутри твердого тела имеются распределенные стоки тепла. Граничные условия на поверхности раздела твердое тело / окружающая среда сопряженного типа.
18. Охлаждение шарообразного твердого тела жидкой или покоящейся газообразной окружающей средой. Характерный размер объема окружающей среды одного порядка с размером твердого тела, а его внешняя граница теплоизолирована. Внутри твердого тела имеются распределенные стоки тепла, а на его поверхности раздела с окружающей средой задаются граничные условия сопряженного типа

Проводится путем проверки выполненных упражнений

Оценка	Критерии оценок
Отлично	Правильное решение задачи.
Хорошо	Правильное решение задачи, но есть некоторые ошибки.
Удовлетворительно	Неправильное решение задачи, но верно выбран метод решения.
Неудовлетворительно	Неправильное решение задачи, причем неверно выбран метод решения.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по экзаменационным билетам

(наименование оценочного средства промежуточной аттестации)

Вопросы к экзамену:

1. Предмет исследования в физико-химической механике (ФХМ).
2. Краткий исторический очерк развития механики с учётом физико-химических взаимодействий.
3. Основные понятия и определения ФХ процессов и систем.
4. Основные законы естествознания и уравнения балансов.
5. Реологические и определяющие уравнения. Законы Фика и Фурье.
6. Принцип построения определяющих уравнений с помощью неравновесной термодинамики.

7. Перекрестные эффекты, соотношения Онзагера.
8. О постановке граничных условий с учетом физико-химических взаимодействий.
9. Фазовые переходы и особенность постановки задач исследования
10. Классическая постановка задачи Стефана о промерзании грунта.
11. Вывод условия Стефана для случая теплофизических и физико-химических процессов.
12. Виды химических взаимодействий: гомогенные и гетерогенные химические реакции
13. Постановка задач исследования с учетом химических реакций.
14. Виды и типы процессов поглощения веществ с учетом физико-химических взаимодействий.
15. Виды процессов сорбции: абсорбция, адсорбция, хемосорбция, десорбция, электросорбция и др.
16. Сорбционные и мембранные процессы и их моделирование.
17. Процессы редокс-сорбции и их математическое моделирование.
18. Нанокомпозиты металл – ионообменник как высоко технологичный сорбент.
19. Понятие скорости химической реакции и построение для них математических моделей.
20. Принцип независимости в ФХ системах.
21. Стехиометрическое уравнение.
22. Закон действующих масс.
23. Уравнение Аррениуса.
24. Химический потенциал.
25. Постановка задачи кинетики сорбции.
26. Общая постановка задачи динамики сорбции.
27. Модель процесса сорбции для замкнутых систем водоподготовки.
28. Редокситы и процесс редокс-сорбции нанокомпозитами металл – ионообменник.
29. Основные факторы, определяющие функционирования систем редокс-сорбции
30. Построение иерархической схемы моделей процесса редокс-сорбции
31. Формулы для образования моделей первого, второго и третьего уровней иерархии.
32. Построение базовой модели кинетики процессов сорбции.
33. Установление основных закономерностей сорбционных процессов на основе базовой модели.
34. Построение математических моделей первого уровня иерархии для процессов кинетики.
35. Построение математических моделей первого уровня иерархии для процессов динамики.
36. Построение математических моделей второго уровня иерархии для процессов кинетики
37. Построение математических моделей второго уровня иерархии для процессов динамики.
38. Концептуальная модель реактора для процесса редокс-сорбции во внешнем электрическом поле.
39. О граничном условии на поверхности сорбента в случае его катодной поляризации.
40. Моделирование замкнутых систем водоподготовки в устройством на основе процесса редокс-сорбции.
41. Применение интегро-интерполяционного метода решения задач кинетики и динамики процессов редокс-сорбции

42. Применение технологии программирования OLYMPUS для разработки программного обеспечения процессов редокс-сорбции.
43. Проведение компьютерного эксперимента для процессов редокс-сорбции.
44. Анализ результатов компьютерного эксперимента процессов редокс-сорбции: время наступления равновесного состояния на отдельном зерне сорбента, профили концентрации активного компонента в характерные моменты времени, изменение концентрации активного компонента в центре и на поверхности зерна сорбента, изменение плотности диффузационного потока через поверхность сорбента, зависимость степени полноты процесса сорбции.

Экзамен проводится на основе КИМ, составленных на основе вопросов для подготовки к экзамену.

Оценка	Критерии оценок
Отлично	Успешное выполнение индивидуального задания, на все вопросы билета даны полные и правильные ответы.
Хорошо	Успешное выполнение индивидуального задания, На один из вопросов билета не дан правильный ответ
Удовлетворительно	Успешное выполнение индивидуального задания, На два вопроса билета даны не правильные ответы
Неудовлетворительно	Не выполнено индивидуальное задание или на все вопросы билета даны не правильные или не полные ответы