

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Кемеровский государственный университет»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан
химического факультета
_____ /
_____ Мороз /
« 25 » _____ марта 2013 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

курса по выбору «КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»
для специальности 020101.65 - «Химия»

факультет	химический	Зачет 3 семестр
курс	второй	
семестр	3	
лабораторные занятия	17 часов	
самостоятельные занятия	55 час	
Всего	72 часов	


Составил: д.ф-м.н, профессор

Каленский А.В.


Кемерово 2013

Рабочая программа курса по выбору “Компьютерное моделирование” цикла
Общие математические и естественнонаучные дисциплины ЕН.В1 по выбору
составлена в соответствии с требованиями Государственного образовательного
стандарта второго поколения по специальности 020101.65 «Химия»

Рабочая программа дисциплины
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 12 от «12» февраля 2013 г.
/ Зав. кафедрой  Ю.А. Захаров

Одобрено методической комиссией химического факультета

Протокол № 7 от «20» марта 2013 г.
Председатель  О.Н. Булгакова

1. Пояснительная записка

Одними из важнейших качеств специалиста в области Химии являются: умение а) использования компьютерных баз химических данных средств телекоммуникационного доступа к источникам научной информации, сети Internet в обучении и научной работе; б) применения методов математического моделирования в химических исследованиях;

наличие навыков построения эмпирических моделей с использованием пакетов программ статистической обработки данных, имитационного моделирования при решении проблем химической технологии и экологии,.

Цель курса по выбору “КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ” для специальности 020101 - «Химия»- дать студентам химических специальностей базовые представления о современных способах применения компьютеров в обучении и научных исследованиях.

Курс по выбору “Компьютерное моделирование” для студентов химического факультета Кемеровского Государственного университета (3 семестр) предусматривает углубленное изучение теории информации и информационных технологий; компьютера, программного обеспечения, операционных систем; пакетов обработки текста и экспериментальных данных.

Рабочая программа соответствует Государственному образовательному стандарту высшего профессионального образования для специальности 020101 - “Химия”.

Задачи изучения дисциплины:

Изучить теорию информации и информационные технологии;

Овладеть навыками обработки текста и экспериментальных данных;

Научиться использовать компьютерные базы данных (химических) в научной работе.

Перечень дисциплин, знания по которым в объеме Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования для специализации 020101 - “Химия” необходимы для успешного овладения материалом:

информатика,
основы математического анализа,
линейная алгебра,
аналитическая геометрия,
общая химия,
неорганическая химия,
общая физика.

Курс состоит из лабораторных занятий (17 часов) для закрепления знаний, самостоятельных занятий (55 час) для подготовки к аудиторным работам, овладения материала и освоения дополнительной литературы.

Контроль знаний студента осуществляется еженедельной проверкой результатов работы на семинарских занятиях, проведением контрольной работы, коллоквиума и зачета по окончании курса.

В результате изучения предмета студент должен получить навыки формулирования математической модели процесса, решения обратной кинетической задачи, изучить наиболее распространенные методы обработки экспериментальных данных, научиться составлять простейшие программы, научиться использовать готовые прикладные программные комплексы, с выбором методов решения поставленной задачи.

2. Тематический план

№	Название и содержание разделов, тем, модулей	Объем часов				Формы Контроля
		Общи й	Аудиторная работа		Самостоятельная работа	
			Лекции	семинар ские		
1	2	3	4	5	7	8
1	Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Параметры модели. Прямая и обратная задачи. Особенности численного (компьютерного) моделирования.	8	0	2	6 Константы химических реакций	Устный опрос
2	Виды и цели математического моделирования. Моделирование как способ проверки гипотез. Обработка	8	0	2	6 Составление программ на языке Pascal,	Устный опрос

	данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования. Имитационное моделирование (вычислительный эксперимент)				КОМПИЛЯЦИЯ.	
3	Поиск минимума функции одной переменной. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Общее представление о методах сопряженных направлений и переменной метрики. Частный случай минимизации суммы квадратов: метод Гаусса - Ньютона	8	0	2	6 Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука - Дживса	Устный опрос
4	Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели.	8	0	2	6 Составление программ по обработке данных МНК	Тест. Реферат

5	Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ): решение задачи Коши. Локальная и глобальная ошибки. "Жесткие" уравнения. Количественный критерий жесткости. Общее представление о принципах построения методов для интегрирования жестких систем ОДУ.	16	0	4	12 Понятие устойчивости решения. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера); их устойчивость.	Устный опрос
6	Скорость реакции, константа скорости реакции, порядок реакции. Реакции нулевого, первого и второго порядка	8	0	2	6 Запись системы ОДУ, соответствующей механизму реакции	Контрольная работа.
7	Кинетический анализ сложной химической реакции с учетом массо и теплообмена с окружающей средой.	8	0	2	6 подготовка к коллоквиуму	Консультация по электронной

	Визуализация полученных результатов.					почте. Реферат
8	Коллоквиум по проблемам теоретической химии,	8	0	1	7 подготовка к зачету	Устный опрос. Реферат
	Формы контроля					
1	Устный опрос проводится в начале занятия для проверки самостоятельной подготовки к студентов и проработки материала предыдущего занятия . Для контроля усвоения студентами учебно-программного материала - контрольные работы, тесты и коллоквиум.					
2	Формы итогового контроля, предусмотренные учебным планом специальности по данной дисциплине: по окончании 3 семестра – зачет (тест, устный опрос по контрольным вопросам).					

3. Содержание дисциплины

Содержание практикума

1. Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Параметры модели. Прямая и обратная задачи. Особенности численного (компьютерного) моделирования. 2 часа.

2. Виды и цели математического моделирования. Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования. Имитационное моделирование (вычислительный эксперимент). 2 часа.

3. Поиск минимума функции одной переменной. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука - Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Общее представление о методах сопряженных направлений и переменной метрики. Частный случай минимизации суммы квадратов: метод Гаусса - Ньютона. 2 часа.

4. Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели. 2 часа.

5. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ): решение задачи Коши. Локальная и глобальная ошибки. Понятие устойчивости решения. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера); их устойчивость. "Жесткие" уравнения. Количественный критерий жесткости. Общее представление о принципах построения методов для интегрирования жестких систем ОДУ. 4 часа.

6. Скорость реакции, константа скорости реакции, порядок реакции. Реакции нулевого, первого и второго порядка. 2 часа.

7. Кинетический анализ сложной химической реакции с учетом массо и теплообмена с окружающей средой. Визуализация полученных результатов. 2 часа.

8. Коллоквиум по проблемам теоретической химии. Элементы программирования и основные языки программирования; решение различных математических задач в химии,

статистическая обработка экспериментальных данных.

1 час.

4. Учебно – методические материалы по дисциплине

Основная литература

1. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. Год изд. 2010
2. Поршнева С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. СПб.: Издательство «Лань», 2011
3. Срочко В.А. Численные методы. Курс лекций // Лань. – 2010, 208 с.

Дополнительная литература

- 4.1 Информатика: Учебник / под ред. Проф. Н.В.Макаровой. –М.: Финансы и статистика. 1997.-768 с.
- 4.2. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989.
- 4.3 Банди Б. Методы оптимизации: Вводный курс. М.: Радио и связь, 1988.
- 4.4. Основы информатики. Учебное пособие. Издание 2-е. В.З. Аладьев, Ю.Л. Хукон – М.: 1999. 544с.
- 4.5. Фортран 77 ЕС ЭВМ/3. З.С. Брич, О.Н. Гулецкая, Д.В. Капилевич и др. –М.: Финансы и статистика. 1989.-351 с.
- 4.6 Дьяконов В. MATLAB 6: учебный курс – СПб.: Питер, 2001. – 292 с.
- 4.7. Каймин В.А. Основы компьютерной технологии. М.: «Финансы и статистика», 1992.
- 4.8 Джонсон К. Численные методы в химии. М.: Мир, 1983.
- 4.9. Информатика: энциклопедический словарь для начинающих/ В.В. Александров, А.В. Анисимов и др. – М.: Педагогика- 1994. 349с.

* Все учебно – методические материалы по дисциплине представлены в компьютерном классе на общем доступе в формате *.pdf

5. Контрольные вопросы и контрольные срезы.

5.1 Вопросы к зачетному занятию

- 1) Алгоритм. Языки низкого и высокого уровня.

- 2) Математическая модель.
- 3) Эмпирические, феноменологические и детальные модели.
- 4) Параметры модели. Прямая и обратная задачи.
- 5) Виды и цели математического моделирования. Моделирование как способ проверки гипотез.
 - 6) Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования.
 - 7) Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел.
 - 8) Поиск минимума функции одной переменной. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции.
 - 9) Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука - Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона.
 - 10) Частный случай минимизации суммы квадратов: метод Гаусса - Ньютона.
 - 11) Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК.
 - 12) Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ): решение задачи Коши.
 - 13) Понятие устойчивости решения. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера).
 - 14) "Жесткие" уравнения. Количественный критерий жесткости. Общее представление о принципах построения методов для интегрирования жестких систем ОДУ.
 - 15) Скорость реакции, константа скорости реакции, порядок реакции.
 - 16) Реакции нулевого, первого и второго порядка.
 - 17) Кинетический анализ сложной химической реакции с учетом массо и теплообмена с окружающей средой.

5.2 Темы рефератов.

1. Основные языки программирования (исторический обзор).

2. Решение задач массопереноса в химии.
3. Статистическая обработка экспериментальных данных.
4. Параллельное и последовательное программирование.
5. Элементы кластерного решения химических задач.
6. Основные пакеты программ для квантово-химического моделирования.

5.3 Вопросы на индивидуальную и самостоятельную работу.

1. Элементы программирования и основные языки программирования (исторический обзор);
2. Решение математических задач в химии;
3. Статистическая обработка экспериментальных данных.
4. Параллельное и последовательное программирование.
5. Элементы кластерного решения химических задач.
6. Принципы построения компьютерных сетей.
7. Константы химических реакций
8. Составление программ на языке Pascal, компиляция.
9. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука - Дживса
10. Составление программ по обработке данных МНК
11. Понятие устойчивости решения. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера); их устойчивость.
12. Запись системы ОДУ, соответствующей механизму реакции

5.4 Задание контрольной работы.

Контрольная работа проводится по 12 вариантам. Задания отличаются массивами экспериментальных точек и заданными в условии задач экстраполирующими функциями.

Пример Варианта:

Карточка №1

1. Методом МНК (по формуле) найти параметры линейной зависимости при значениях $X[1\ 2\ 3\ 4\ 5]$ и $Y[1.1\ 3.2\ 3.8\ 5.7\ 7.4]$.

2. Методом МНК (по формуле) найти параметры линейной зависимости при значениях $X[0.1\ 0.2\ 0.3\ 0.4\ 0.5]$ и $Y[1.1\ 1.2\ 1.4\ 1.1\ 1.4]$.

3. Определить параметры функции $y=f(x)=\exp(k_1*x(i))+k_2*x(i)^2+k_3*x(i)+k_4$, наилучшим образом описывающим экспериментальную зависимость $x = [1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6]$; $y = [1.1\ 3.2\ 3.8\ 5.7\ 7.4\ 9]$, построить график, сделать комментарии к программе