

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «МГТУ»)

Кафедра химии

**Методические указания
к самостоятельной работе студентов**

по дисциплине **Б1.В.03.01 Математические методы расчётов химических процессов**

для направления подготовки (специальности)

04.04.01 Химия

Профиль Физическая и коллоидная химия

Квалификация выпускника, уровень подготовки магистр

Форма обучения: очная

Составитель – Воронько Н.Г. доцент кафедры химии, к.т.н.

МУ к СР рассмотрены и одобрены на заседании кафедры химии,

24.06.2019 г. протокол № 12

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Общие организационно-методические указания.....3
2. Тематический план.....4
3. Список рекомендуемой литературы.....5
4. Содержание и методические указания к изучению тем дисциплины.....6

1. ОБЩИЕ ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Методические указания разработаны в соответствии с ФГОС ВО для направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденным приказом № 655 от 13 июля 2017 г. и УП, утвержденным Ученым советом МГТУ (Протокол № 7 от 28.02.2019), а также рабочей программой по дисциплине «Математические методы расчётов химических процессов», утвержденной на заседании кафедры химии МГТУ.

Минимум содержания дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов» для самостоятельной работы составляет 52 часа: «Линейные алгебраические системы, векторы, элементы исследования функции одной переменной, интегралы, дифференцирование функций нескольких переменных, метод наименьших квадратов, обыкновенные дифференциальные уравнения, ряды, элементы теории вероятностей и математической статистики».

В результате освоения программы дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов» магистр должен:

знать:

- основы математического аппарата современной химии, необходимые для решения вопросов, связанных с практической деятельностью;
- основы математического моделирования физико-химических процессов;
- методы реализации математических моделей физико-химических процессов на ЭВМ;

уметь:

- использовать математические методы в химических исследованиях;
- применить существующее программное обеспечение для решения физико-химических задач;

владеть:

- навыками построения математических моделей простейших физико-химических процессов;
- навыками составления программ, моделирующих физико-химические процессы.

Процесс изучения дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО для направления подготовки 04.04.01 Химия:

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции
1	ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук
2	УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий

Целью дисциплины «Математические методы расчётов химических процессов» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой магистра и рабочим учебным планом направления 04.04.01 Химия, что предполагает освоение обучающимися теоретических знаний и приобретения практических навыков в области математических методов расчётов химических процессов.

Задачи дисциплины:

- дать необходимые теоретические знания, практические умения и навыки по основам математических методов расчётов химических процессов, позволяющие успешно использовать их в профессиональной деятельности.

2. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№ п/п	Наименование тем и содержание самостоятельной работы	Кол-во часов
1.	<p>Линейные алгебраические системы Матрицы, действия над матрицами. Детерминант (определитель), его свойства. Системы линейных алгебраических уравнений. Метод Гаусса. Однородные линейные системы. Расчёт смесей сложного состава. Определение состава смеси по данным спектрофотометрических измерений. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Анализ размерностей.</p>	6
2.	<p>Векторы Обозначение и виды векторов. Действия над векторами. Законы векторной алгебры. Координатные формулы. Скалярное, векторное и смешанное произведение. Плоскость. Прямая. Момент силы. Координаты центра масс активированного комплекса. Расчёт расстояний в пространственных решётках.</p>	5
3.	<p>Элементы исследования функции одной переменной Определение функции. Непрерывность функции. Погрешность вычисления функции одной переменной. Линейная аппроксимация. Правило Лопиталья–Бернулли. Исследование функции. Правила исследования стационарных точек. Построение линии равновесия. Уравнение линии рабочих концентраций в процессе массопередачи. Максимум скорости реакции. Автокаталитические реакции. Уравнение Аррениуса. Приближённое решение конечных уравнений. Химические системы, описываемые нелинейными уравнениями.</p>	6
4.	<p>Интегралы Неопределённый интеграл. Теорема об общем виде первообразной. Неопределённые интегралы основных элементарных функций. Определённый интеграл. Несобственные интегралы. Простейшие дифференциальные уравнения. Теплота, расходуемая на нагревание образца. Температура водородного пламени. Закон Бугера–Ламберта–Бера. Скорость ламинарного течения жидкости. Закон Пуазейля. Инверсия сахаров. Определение размера частиц по скорости седиментации. Простая перегонка. Измерение излучения точечного источника радиоактивности. Регулирование кислотности среды в химическом реакторе.</p>	6
5.	<p>Дифференцирование функций нескольких переменных Функция двух переменных. Дифференцирование композиции. Частные производные высших порядков. Локальный экстремум функции двух переменных. Функции многих переменных. Дифференцирование композиции. Дифференцирование вектор-функций скалярных аргументов. Скалярное поле. Градиент. Векторное поле. Описание процесса многоступенчатой экстракции. Экстракция уксусной кислоты.</p>	6
6.	<p>Метод наименьших квадратов Случай линейной функциональной зависимости. Случай нелинейной функциональной зависимости. Определение Аррениусовых параметров. Определение гидратного числа для карбоновой кислоты.</p>	5
7.	<p>Обыкновенные дифференциальные уравнения Дифференциальные уравнения первого порядка. Уравнение в полных дифференциалах. Линейное уравнение. Однородное уравнение относительно искомой функции y и аргумента x. Дифференциальные уравнения второго порядка. Линейные однородные системы дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Радиоактивный распад. Среднее время жизни возбуждённого состояния молекулы. Определение порядка реакции. Средняя скорость реакции. Кинетика коагуляции. Седиментация частиц в жидкости. Линейные осцилляторы. Кинетика химической реакции в условиях диффузии. Необратимые и обратимые реакции первого порядка. Последовательные реакции. Последовательно-параллельные реакции первого порядка.</p>	6
8.	<p>Ряды Числовые ряды. Знакоположительные ряды. Знакопеременные ряды.</p>	6

	Степенные ряды. Вычисление радиуса сходимости. Ряды Фурье. Интеграл Фурье. Преобразование Фурье. Отмывка полимера. Фильтрация в цилиндрических фильтрах. Перенос тепла через стенку реактора. Фурье-спектроскопия. Выявление скрытых периодичностей.	
9.	Элементы теории вероятностей и математической статистики Некоторые элементы комбинаторики. Основные понятия теории вероятностей. Геометрическая интерпретация вероятности. Распределение частиц по ячейкам. Теоремы умножения и сложения вероятностей. Законы распределения и числовые характеристики случайных величин. Вероятностная модель задачи о примеси. Число частиц заданного размера. Эмпирическая функция распределения. Выборочное среднее. Выборочная дисперсия. Исправленная выборочная дисперсия. Распределения Пирсона и Стьюдента. Доверительный интервал. Доверительная вероятность. Распределение Фишера–Снедекора. Выборка результатов химического анализа. Статистическая проверка статистических гипотез. Построение доверительного интервала для регрессионной прямой.	6
	Всего:	52

3. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Основная литература:

1. **Воронько, Н. Г.** Математические методы расчётов химических процессов / Н. Г. Воронько. – Мурманск. : Изд-во МГТУ, 2015. – 171 с.

Дополнительная литература:

2. **Воронько, Н. Г.** Сборник расчётно-графических заданий и задач по коллоидной химии / Н. Г. Воронько. – Мурманск : Изд-во МГТУ, 2009. – 142 с.
3. **Краткий справочник физико-химических величин** / под ред. А. А. Равделя, А. М. Пономарёвой. – 10-е изд., испр. и доп. – СПб. : «Иван Фёдоров», 2002. – 240 с.
4. **Расчёты и задачи по коллоидной химии:** учебное пособие для химико-технологических специальностей вузов / под ред. В. И. Барановой. – М. : Высшая школа, 1989. – 288 с.

4. СОДЕРЖАНИЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ИЗУЧЕНИЮ ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Необходимо обратить внимание на следующие вопросы:

№	Вопрос
1.	Как осуществляется умножение матрица A на матрицу B ? В каком случае такая операция возможна? Приведите примеры.
2.	Какими свойствами обладают операции умножения матриц? Что такое перестановочные матрицы?
3.	Как осуществляется разложение детерминанта квадратной матрицы n -го порядка по элементам i -й строки и j -го столбца? Что такое адьюнкта и дополнительный минор к элементу a_{ij} ? Приведите примеры.
4.	Что такое обратная матрица A^{-1} по отношению к данной матрице A ? Сформулируйте теорему о существовании обратной матрицы.
5.	Для чего применяют матричную запись кинетики сложных реакций? Что такое стехиометрическая матрица и молекулярная матрица реакции? Чему равно их произведение?
6.	Как найти решение СЛАУ, используя правило Крамера?
7.	Как найти решение СЛАУ через обратную матрицу СЛАУ?
8.	В чём сущность метода исключения Гаусса? Что такое расширенная матрица СЛАУ и треугольная матрица? Как можно применить метод Гаусса к вычислению детерминантов?
9.	Сформулируйте теоремы об инвариантности ранга матрицы и о ранге треугольной матрицы. Как их можно применить для определения числа линейно независимых ста-

	дий сложной реакции?
10.	Что такое разрывная функция, кусочно-непрерывная функция, разрыв 1-го рода, разрыв 2-го рода, устранимый разрыв? Приведите примеры термодинамических функций с конечным и бесконечным разрывом.
11.	Что такое производная от функции $f(x)$ в точке x , дифференциал x , дифференцирование $f(x)$? Объясните физический и геометрический смысл производной функции на примере графической зависимости концентрации продукта от времени протекания химической реакции.
12.	Как рассчитываются производные: суммы функций $(u \pm v)'$, произведения функций $(uv)'$ и отношения функций $\left(\frac{u}{v}\right)'$? Приведите примеры.
13.	Как рассчитываются производные сложных функций $F(x) = f[\varphi(x)]$ и $F(x) = f\{\varphi[\psi(x)]\}$? Приведите примеры.
14.	Как осуществляется разложение функции в степенные ряды Маклорена и Тейлора? Объясните геометрический смысл ряда Тейлора на примере седиментационной кривой полидисперсной системы.
15.	Приведите биномиальную формулу Ньютона для разложения в степенной ряд функций $(y + x)^m$ и $(1 + x)^m$. Что происходит при $m \in \mathbb{N}$? Что такое биномиальное распределение?
16.	Как используется разложение функции в степенной ряд при выводе зависимости повышения температуры кипения раствора от молярной доли растворённого вещества?
17.	Что такое стационарная точка функции $f(x)$? Сформулируйте правила исследования стационарных точек.
18.	Что такое первообразная функции $f(x)$? Сформулируйте теорему об общем виде первообразной.
19.	Что такое неопределённый интеграл, подынтегральная функция, подынтегральное выражение? Объясните физический смысл понятия интеграла на примере процесса изотермического расширения газа.
20.	Как связаны между собой операции интегрирования и дифференцирования? Объясните геометрический смысл интегрирования. Что такое интегральная линия функции $f(x)$?
21.	В чём заключается метод интегрирования через вспомогательную переменную? Объясните на примере вывода уравнения Шишковского.
22.	Напишите формулу Ньютона–Лейбница. Сформулируйте и докажите теорему Барроу.
23.	Что такое определённый интеграл? Как найти численное значение определённого интеграла по графику интегрируемой функции? Что такое определённый интеграл? Как найти численное значение определённого интеграла по графику интегрируемой функции?
24.	Что такое дифференциальное уравнение (ДУ), обыкновенные ДУ, порядок ДУ? Напишите уравнения Липпмана как примеры ДУ 1-го и 2-го порядка.
25.	Объясните, как решить задачу Коши на примере дифференциального уравнения Кирхгофа и дифференциальных уравнений простых односторонних реакций 1-го 2-го и n -го порядков.