

КОНЦЕПЦИЯ КУРСА «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»

В.И. Яшкин

Белгосуниверситет, механико-математический факультет,
Независимости 4, 220050 Минск, Беларусь
yashkin@bsu.by

Первостепенным вопросом современного образования является подготовка специалистов, способных квалифицированно решать задачи математического моделирования. Решение задач повышения эффективности химической, нефтеперерабатывающей, нефтехимической, газоперерабатывающей и многих других смежных отраслей промышленности требует применения достаточно точных методов расчета химико-технологических процессов, что невозможно без использования моделирования и средств вычислительной техники. На химическом факультете БГУ вводится новая дисциплина «Математическое моделирование химических процессов» (ММХП), которая будет изучаться на втором курсе. Изучение ММХП является весьма важным этапом в подготовке специалистов-химиков. В докладе излагаются аспекты авторской концепции данной дисциплины.

1. Содержание курса должно отражать универсальность математических моделей. При построении химических (физико-химических) моделей используются фундаментальные законы или модельные представления о механизме реально протекающих процессов химии и химической технологии. Методологические принципы для создания таких моделей основаны на признании того факта, что различные процессы базируются на одинаковых законах физики и химии, в частности, на знании закономерностей, так называемых элементарных процессов (массо- и теплопередачи, химической кинетики, процессов фазовых переходов и т. д.). Обобщение этих закономерностей дает возможность с единых позиций подходить к разработке компьютерных моделей. Они, как правило, справедливы для описания поведения реальных процессов в более широком диапазоне изменения режимных и конструкционных параметров, чем эмпирические модели.

2. Содержание курса ММХП должно отражать следующие этапы: основы методологии построения моделей, конструирование модели, исследование математических моделей, вычислительный эксперимент, иерархические цепочки моделей. Учебное пособие [1] содержит задачи прикладного характера из различных разделов химии, которые решаются с помощью классических методов математики и могут быть использованы на каждом из перечисленных выше этапов. Вычислительный эксперимент — основной инструмент решения задач при использовании методов математического моделирования в химии. В [2] приведены алгоритмы и программы реализующие решения химических задач с помощью электронных таблиц, пакетов программирования и компьютерной системы Wolfram Research Mathematica.

3. В курсе ММХП должно быть "равновесие" в применении математических методов и компьютерных программ. Разумное сочетание аналитических методов и использование общего и специального программного обеспечения способствует решению главной задачи данной дисциплины — подготовить студентов к активной исследовательской работе, приобретение ими навыков необходимых для самостоятельного решения с применением компьютера математических вопросов, возникающих в их профессиональной деятельности.

Литература

1. Скатецкий В.Г., Свиридов Д.В., Яшкин В.И. Математическое моделирование физико-химических процессов. Минск: БГУ, 2003.
2. Яшкин В.И. Численные методы в химии. Математическое моделирование: практикум для студентов хим. фак. БГУ. Минск: БГУ, 2005.