

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

Иванов А.Г.

« 30 » ноября 2017г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Б1.В.06 МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ
СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ**

Направление
подготовки/специальность 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) /
специализация Физическая химия

Программа подготовки академическая

Форма обучения очная

Квалификация (степень) выпускника бакалавр

Краснодар 2017

Рабочая программа дисциплины Б1.В.06 «Моделирование физико-химических систем и процессов» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.03.01 Химия.

Программу составил(и):

Профессор кафедры физической химии
д-р хим. наук, профессор Никоненко В.В.



Доцент кафедры физической химии,
канд.хим.наук, Мареев С.А.



Рабочая программа дисциплины Б1.В.ОД.6 «Моделирование физико-химических систем и процессов» обсуждена и утверждена на заседании кафедры физической химии
протокол № 22 от «26» июня 2017г.

Заведующий кафедрой физической химии
д-р хим.наук, профессор, Заболоцкий В.И.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий
протокол № 5 от «27» июня 2017г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензенты:

М.Х. Уртенев, д-р физ-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики ФГБОУ ВО «КубГУ»

И.Ю. Казов, руководитель аналитической лаборатории ООО «Эир-Лаб»

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины Б1.В.06 «Моделирование физико-химических систем и процессов» является формирование у студентов представлений об основных законах, лежащих в основе моделирования физико-химических систем и процессов, а также математических приёмах, используемых в химии и физике.

При практическом проведении физико-химических расчетов большую помощь оказывает применение в учебном процессе компьютеров, использование компьютерных программ для типичных физико-химических расчетов. Это способствует формированию современного специалиста- бакалавра химии.

1.2 Задачи дисциплины.

- дать представление о математических методах исследования природных законов, о математическом моделировании как первой ступени создания теории в той или иной области науки.
- ознакомить с основными законами, выраженными уравнениями в области моделирования явлений переноса.
- сформировать представление об основных подходах к моделированию и обучить навыкам решения такого рода задач.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина Б1.В.06 «Моделирование физико-химических систем и процессов» относится к обязательным дисциплинам вариативной части Блока 1 учебного плана направления 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Физическая химия».

Изучению дисциплины Б1.В.06 «Моделирование физико-химических систем и процессов» должно предшествовать изучение таких дисциплин, как «Физическая химия» и «Химическая технология». При освоении данной дисциплины слушатели должны иметь знания по общей, неорганической, физической химии, умение работать с химической посудой и реактивами. Дисциплина Б1.В.06 «Моделирование физико-химических систем и процессов» является предшествующей при изучении дисциплин: «Физико-химия поверхности и наночастиц», «Планирование и организация эксперимента».

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся общепрофессиональных и профессиональных компетенций: ОПК-1, ОПК-3, ОПК-5, ПК-5.

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-1	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	фундаментальные основы процессов переноса, их классификацию и математическое описание в физико-химических системах	использовать полученные знания о теоретических основах процессов переноса в решении профессиональных задач	пониманием фундаментальных основ процессов, встречающихся в профессиональной деятельности, их математическим описанием

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
2	ОПК-3	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности	основные законы переноса, их классификацию, математическое описание	использовать знание основных законов процессов переноса в профессиональной деятельности, их математически моделировать	пониманием использования основных законов переноса для решения практических задач, в научно-исследовательской и профессиональной деятельности
3	ОПК-5	способностью к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации	основные источники научной и научно-технической информации	искать научную и научно-техническую информацию, осуществлять ее первичную обработку	обработкой и анализом научной и научно-технической информации
4	ПК-5	способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	принципы математического моделирования и компьютерной обработки данных	получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	математическим моделированием и компьютерной обработкой результатов научных экспериментов

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зач.ед. (108 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице (для студентов ОФО).

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры
		7
Контактная работа, в том числе:		
Аудиторные занятия (всего):	54	54
Занятия лекционного типа	18	18
Лабораторные занятия	36	36
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	-	-
Иная контактная работа:		
Контроль самостоятельной работы (КСР)	4	4
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2	0,2
Самостоятельная работа, в том числе:		
Самостоятельное изучение разделов	18	18
Подготовка докладов, рефератов, презентаций	5	5
Самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий)	10	10

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры
			7
Подготовка к сдаче лабораторных работ		16,8	16,8
Контроль:			
Подготовка к экзамену		-	-
Общая трудоемкость	час.	108	108
	в том числе контактная работа	58,2	58,2
	зач. ед	3	3

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 7-м семестре (для студентов ОФО)

№ разд ела	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа СР
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Математическое моделирование как метод научного исследования	20	4	-	6	10
2.	Неравновесная термодинамика. Уравнения Онзагера и Кедем-Качальского	20	4	-	6	10
3.	Линейные законы переноса (законы Ома, Фика, Дарси, Фурье)	20	4	-	6	10
4.	Моделирование процессов переноса с помощью известных программных продуктов.	43,8	6	-	18	19,8
	Итого по дисциплине:		18		36	49,8

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1.	Математическое моделирование как метод научного исследования	Понятия: математика, математическое моделирование, численный анализ, аналитическое исследование, теория	УО
2.	Неравновесная термодинамика. Уравнения Онзагера и Кедем-Качальского	Классическая термодинамика и термодинамика неравновесных процессов. Обоснование уравнений Онзагера, схема вывода уравнений Кедем-Качальского. Сопряжение явлений переноса в мембранных системах.	УО
3.	Линейные законы переноса (законы Ома, Фика, Дарси, Фурье)	Вывод линейных законов из уравнений Онзагера и Кедем-Качальского. Расчет скоростей простейших неравновесных процессов, используя законы Ома, Фика, Дарси, Фурье	РЗ
4.	Моделирование процессов переноса с помощью известных программных продуктов.	Освоение программных продуктов: «Микрогетерогенная модель» и «ЭлДиал». Расчет скорости диффузии и электромиграционного переноса через	КР

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
		мембраны. Расчет скорости электродиализа.	

Устный опрос (УО), решение задач (РЗ), контрольная работа (КР).

2.3.2 Занятия семинарского типа

Семинарские занятия - не предусмотрены

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3
1.	Расчет скорости фильтрования и переноса тепла	Защита ЛР
2.	Расчет скорости диффузии и электромиграции	Защита ЛР
3.	Вывод линейных законов Ома, Фика, Дарси, Фурье из уравнений Онзагера. Закон Гесса и Кедем-Качальского	Защита ЛР
4.	Обработка экспериментальных данных с помощью микрогетерогенной модели	Защита ЛР
5.	Обработка экспериментальных данных с помощью модели «ЭлДиал»	Защита ЛР
6.	Расчет скорости диффузии и электромиграционного переноса через мембраны. Расчет скорости электродиализа	Защита ЛР

Защита лабораторной работы (ЛР).

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы - не предусмотрены

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Самостоятельное изучение разделов	Кудинов И.В., Кудинов В.А., Еремин А.В. Математическое моделирование гидродинамики и теплообмена в движущихся жидкостях. М.: Лань. 2015. http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=64&pl1_id=1175
2	Подготовка докладов, рефератов, презентаций	Гумеров А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: Лань. 2014. http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=32&pl1_id=1040
3	Самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий)	Методические рекомендации к выполнению лабораторных работ. Методические рекомендации по подготовке рефератов и самостоятельной работе. Утверждены кафедрой физической химии, протокол № 17 от 11.05.2017 г. Методические указания к выполнению лабораторных работ по дисциплине. Утверждены кафедрой физической химии, протокол № 10 от 13.03.2018 г.
4.	Подготовка к сдаче лабораторных работ	Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов:

	методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В., Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с
--	--

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий).

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
7	ЛР	Работа в малых группах	6
		Метод поиска быстрых решений в группе	6
		Мозговой штурм	6
Итого:			18

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

Вопросы для устного опроса по теме «Математическое моделирование как метод научного исследования»

1. Как классифицируются физико-химические системы и процессы переноса?
2. Чем отличаются макроскопический и микроскопический механизмы переноса?
3. Какие основные законы сохранения существуют?
4. Какие уравнения относятся к уравнениям баланса?
5. Что описывают уравнения баланса массы и баланса количества вещества?
6. В чем особенность уравнения баланса количества движения?
7. Как звучит закон Фика?
8. Как звучит закон Ома?
9. Как звучит закон Фурье?

Перечень компетенции, проверяемых оценочным средством: способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1)

Вопросы для устного опроса по теме «Неравновесная термодинамика. Уравнения Онзагера и Кедем-Качальского»

1. Из каких уравнений и предположений вытекает уравнение Нернста-Планка?
2. Как выразить плотность потока ионов через градиент электрохимического потенциала?
3. В чем заключается условие равновесия?
4. Какие существуют основные элементы ТНП?
5. Что из себя представляет уравнения Онзагера?
6. Какова формулировка и физический смысл потоков, движущих сил и коэффициентов переноса в уравнении Кедем-Качальского?
7. Каким образом возможно осуществить вывод линейных законов переноса Фика, Ома и Дарси из уравнения Кедем-Качальского?
8. В чем основная идея баромембранных процессов?
9. Какие уравнения переноса вытекают из уравнений Кедем-Качальского?

Перечень компетенции, проверяемых оценочным средством: способность использовать основные законы естественно-научных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3).

Пример задачи по теме «Линейные законы переноса (законы Ома, Фика, Дарси, Фурье)»

Задача 1. Теплообмен

Человек оказался за бортом судна $t(в)=14\text{ }^{\circ}\text{C}$. Найдите, на сколько градусов понизится t° его тела за 10 мин, если энергетика дыхания возрастёт в 3,5 раза, при этом в нормальном состоянии скорость превращения энергии 72 ккал/час. Принять коэффициент теплопроводности $\alpha=0,06\text{ кДж}/(\text{м}^2\cdot\text{К}\cdot\text{с})$; теплоемкость тела: $C=0,86\text{ ккал}/(\text{кг}\cdot\text{К})$, площадь поверхности тела $1,8\text{ м}^2$. Масса тела 70 кг.

Задача 2. Выведение продуктов метаболизма

Работу почек оценивают по концентрации креатинина в крови. Нормальная концентрация креатинина в крови $C_{кр}=10\text{ мг/л}$. Гематокрит крови $H=0.4$ (объемная доля эритроцитов в крови). Концентрация креатинина в тканевой и внутриклеточной жидкости примерно такая же, как и в плазме крови. Креатинин выводится вместе с мочой, $V_m=2,4\text{ л/сут}$. Определить скорость производства креатинина G (мг/час), общую массу креатинина в организме M (мг).

Перечень компетенции, проверяемых оценочным средством: способность к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации (ОПК-5).

Контрольная работа по теме «Моделирование процессов переноса с помощью известных программных продуктов»

1.1. В плоском канале электродиализатора скорость течения раствора 1.6 см/с , расстояние между мембранами 0.8 мм . Рассчитать падение давления и объемную скорость раствора в канале шириной 40 см . Построить концентрационный профиль и найти степень обессоливания раствора в сечении на расстоянии 40 см от входа в канал. Рассчитать расход электроэнергии, необходимой для получения 1 м^3 обессоленной воды; учесть вклады, приходящиеся собственно на электродиализ и на работу насоса. Принять, что основным компонентом раствора является NaCl ($D=1.6\cdot 10^{-5}\text{ см}^2/\text{с}$, $\nu=10^{-2}\text{ см}^2/\text{с}$, $c^0=0.02\text{ моль/л}$); числа переноса противоионов через анионо- и катионообменную мембраны принять 0.95 , КПД насоса 0.6 . Расход электроэнергии в расчете на 1 час работы аппарата (в $\text{Вт}\cdot\text{час}$) равен:

на ЭД: $A_{ED}=I U$, где I – сила тока в А, а U – напряжение на всем аппарате в В,
на перекачку: $A_{\text{pomp}}=\Delta p W/\eta_p$, где Δp – падение давления в Н/м^2 , W – объемная

скорость в м³/час, а η_p – КПД насоса.

1.2. Определить минимальную длину канала обессоливания электродиализатора, на котором достигается степень обессоливания 50 %, если

- числа переноса = 0,98;
- межмембранное расстояние = 0,45 мм;
- скорость течения раствора 3,2 см/с;

Считать, что в растворе имеется только натрий-хлор.

1.3. Дан электродиализный аппарат, содержащий 100 парных камер.

Межмембранное расстояние = 0,5 мм.

Длина канала 60 см.

Размер мембраны 60 на 40 см.

Определить производительность аппарата, при которой степень обессоливания достигается равной 60 %. Нужно найти скорость работы аппарата.

1.4. Требуется спроектировать электродиализный аппарат, который бы обеспечивал 80% обессоливания раствора хлорида натрия.

Размер мембран 60 на 40.

Расстояние между мембранами = 0,4 мм.

Аппарат должен иметь производительность 2 м³/час.

Найти число парных камер в аппарате.

1.5. Требуется спроектировать электродиализный аппарат, который бы обеспечивал 80% обессоливания раствора хлорида натрия. Известно, что при скорости течения жидкости 2 см/с на каждые 10 см длины канала концентрация убывает на 20%.

Ширина мембран 40 см.

Расстояние между мембранами = 0,4 мм.

Аппарат должен иметь производительность 2 м³/час.

Найти длину канала обессоливания и число парных камер в аппарате.

Перечень части компетенции, проверяемых оценочным средством: способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5).

Критерии оценивания результатов устного опроса.

Оценка **«отлично»** ставится, если студент полно излагает материал (отвечает на вопрос), дает правильное определение основных понятий; обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры не только из учебника, но и самостоятельно составленные; излагает материал последовательно и правильно с точки зрения норм литературного языка.

Оценка **«хорошо»** ставится, если студент дает ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для оценки «отлично», но допускает 1–2 ошибки, которые сам же исправляет, и 1–2 недочета в последовательности и языковом оформлении излагаемого.

Оценка **«удовлетворительно»** ставится, если студент обнаруживает знание и понимание основных положений данной темы, но излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий или формулировке правил; не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры; излагает материал непоследовательно и допускает ошибки в языковом оформлении излагаемого.

Оценка **«неудовлетворительно»** ставится, если студент обнаруживает незнание большей части соответствующего вопроса, допускает ошибки в формулировке определений и правил, искажающие их смысл, беспорядочно и неуверенно излагает материал. Оценка «2» отмечает такие недостатки в подготовке, которые являются серьезным препятствием к успешному овладению последующим материалом.

Критерии оценивания результатов занятия с решением задач.

Оценка **«отлично»** выставляется, если студент имеет глубокие знания учебного материала по теме практической работы, показывает усвоение взаимосвязи основных понятий, используемых в работе, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы. Студент демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме практической работы, определяет взаимосвязи между показателями задачи, даёт правильный алгоритм решения, определяет междисциплинарные связи по условию задания.

Оценка **«хорошо»** выставляется, если студент показал знание учебного материала, усвоил основную литературу, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы. Студент демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме практической работы, допуская незначительные неточности при решении задач, имея неполное понимание междисциплинарных связей при правильном выборе алгоритма решения задания.

Оценка **«удовлетворительно»** выставляется, если студент в целом освоил материал практической работы, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы. Студент затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, даёт неполный ответ, требующий наводящих вопросов преподавателя, выбор алгоритма решения задачи возможен при наводящих вопросах преподавателя.

Оценка **«неудовлетворительно»** выставляется студенту, если он имеет существенные пробелы в знаниях основного учебного материала практической работы, который полностью не раскрыл содержание вопросов, не смог ответить на уточняющие и дополнительные вопросы. Студент даёт неверную оценку ситуации, неправильно выбирает алгоритм действий.

Критерии оценивания результатов контрольных работ.

Контрольная работа проводится в письменной форме.

Оценка **«отлично»** выставляется, если студент выполнил работу без ошибок и недочетов, допустил не более одного недочета.

Оценка **«хорошо»**, если студент выполнил работу полностью, но допустил в ней не более одной негрубой ошибки и одного недочета, или не более двух недочетов.

Оценка **«удовлетворительно»**, если студент правильно выполнил не менее половины работы или допустил не более двух грубых ошибок, или не более одной грубой и одной негрубой ошибки и одного недочета, или не более двух-трех негрубых ошибок, или одной негрубой ошибки и трех недочетов, или при отсутствии ошибок, но при наличии четырех-пяти недочетов, плохо знает текст произведения, допускает искажение фактов.

Оценка **«неудовлетворительно»**, если студент допустил число ошибок и недочетов превосходящее норму, при которой может быть выставлена оценка **«3»**, или если правильно выполнил менее половины работы.

Критерии оценивания лабораторных работ.

«5» (отлично): выполнены все задания лабораторной работы, студент четко и без ошибок ответил на все контрольные вопросы.

«4» (хорошо): выполнены все задания лабораторной работы; студент ответил на все контрольные вопросы с замечаниями.

«3» (удовлетворительно): выполнены все задания лабораторной работы с замечаниями; студент ответил на все контрольные вопросы с замечаниями.

«2» (не зачтено): студент не выполнил или выполнил неправильно задания лабораторной работы; студент ответил на контрольные вопросы с ошибками или не ответил на контрольные вопросы.

Критерии оценки рефератов:

Оценка «отлично» ставится, если выполнены все требования к написанию и защите реферата: обозначена проблема и обоснована её актуальность, сделан краткий анализ различных точек зрения на рассматриваемую проблему и логично изложена собственная позиция, сформулированы выводы, тема раскрыта полностью, выдержан объём, соблюдены требования к внешнему оформлению, даны правильные ответы на дополнительные вопросы.

Оценка «хорошо» ставится, если основные требования к реферату и его защите выполнены, но при этом допущены недочёты. В частности, имеются неточности в изложении материала; отсутствует логическая последовательность в суждениях; не выдержан объём реферата; имеются упущения в оформлении; на дополнительные вопросы при защите даны неполные ответы.

Оценка «удовлетворительно» ставится, если имеются существенные отступления от требований к реферированию. В частности, тема освещена лишь частично; допущены фактические ошибки в содержании реферата или при ответе на дополнительные вопросы; во время защиты отсутствует вывод.

Оценка «не удовлетворительно» ставится, если тема реферата не раскрыта, обнаруживается существенное непонимание проблемы, или реферат не представлен.

Критерии оценки презентации.

Оценка «*отлично*» выставляется студенту, если:

- презентация соответствует теме самостоятельной работы;
- оформлен титульный слайд с заголовком (тема, цели, план и т.п.);
- сформулированная тема ясно изложена и структурирована;
- использованы графические изображения (фотографии, картинки и т.п.), соответствующие теме;
- выдержан стиль, цветовая гамма, использована анимация, звук; работа оформлена и предоставлена в установленный срок.

Оценка «*хорошо*» выставляется студенту, если:

- презентация соответствует теме самостоятельной работы; оформлен титульный слайд с заголовком (тема, цели, план и т.п.);
- сформулированная тема ясно изложена и структурирована;
- использованы графические изображения (фотографии, картинки и т.п.), соответствующие теме;
- работа оформлена и предоставлена в установленный срок.

Оценка «*неудовлетворительно*» выставляется студенту, если работа не выполнена или содержит материал не по вопросу.

Во всех остальных случаях работа оценивается на «удовлетворительно»

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

К зачету допускаются студенты, выполнившие все контрольные и лабораторные работы.

Вопросы к зачету

1. Диффузия в условиях наложенного электрического поля. Уравнение Нернста-Планка.
2. Выражение плотности потока ионов через градиент электрохимического потенциала. Условие равновесия.
3. Элементы ТНП. Уравнения Онзагера.
4. Уравнения Кедем-Качальского. Формулировка и физический смысл потоков, движущих сил и коэффициентов переноса.
5. Уравнения Кедем-Качальского. Вывод линейных законов переноса Фика, Ома и

Дарси.

6. Уравнения Кедем-Качальского. Многообразие явлений переноса в мембранных системах.
7. Баромембранные процессы. Уравнения переноса, вытекающие из уравнений Кедем-Качальского.
8. Классификация баромембранных процессов. Механизм разделения в обратном осмосе и в других баромембранных процессах.
9. Параметры, определяющие качество разделения в баромембранных процессах (фактор задержки, коэффициент экстракции). Уравнения баланса.
10. Математическое описание осмоса и обратного осмоса.
11. Зависимость фактора задержки R от давления в обратном осмосе.
12. Диффузионные процессы в гемодиализаторе. Расчет площади мембраны, необходимой для одного сеанса очистки крови.
13. Расчет обратноосмотического процесса обессоливания морской воды.
14. Электромембранные процессы. Схема электродиализа.
15. Электродиализ. Уравнения переноса (уравнение переноса ионов Кедем-Качальского. Уравнение Нернста-Планка. Вывод из уравнений Онзагера. Связь с уравнениями Кедем-Качальского.)
16. Одномерная модель ЭД. Концентрационная поляризация при электродиализе.
17. Расчет скачка потенциала в мембранной системе.
18. Конвективная диффузия при электродиализе. Двумерная модель. Формулировка задачи.
19. Двумерная конвективно-диффузионная модель ЭД. Преобразование уравнений.
20. Вывод уравнения конвективной диффузии в частных производных. Уравнение Нернста-Планка и уравнение материального баланса.
21. Двумерная конвективно-диффузионная модель ЭД. Граничные условия.
22. Двумерная конвективно-диффузионная модель ЭД. Переход к безразмерным переменным.
23. Двумерная конвективно-диффузионная модель ЭД. Решение краевой задачи.
24. Распределение концентрации и плотности тока в ЭД. Вольтамперная характеристика.
25. Конвективно-диффузионная модель ЭД. Предельный ток и диффузионный слой.

Перечень компетенций, проверяемых оценочным средством: способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1) – вопросы 1–2; способность использовать основные законы естественно-научных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3) – вопросы 3,4,6-11, способность к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации (ОПК-5) – вопросы 5,14,15,16,18-20; способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5) – вопросы 12,13,17,21-25.

Критерии оценки по промежуточной аттестации в форме зачёта

Оценки **«зачтено»** заслуживает студент, обнаруживший знание основного программного материала в объёме, необходимом для дальнейшей учёбы и предстоящей работы по профессии, справляющийся с выполнением заданий, предусмотренных программой, знакомый с основной литературой, рекомендованной программой. Как правило, оценка «зачтено» выставляется студентам, допустившим погрешности не принципиального характера в ответе на зачете и при выполнении заданий;

Оценка **«не зачтено»** выставляется студенту, обнаружившему пробелы в знаниях основного программного материала, допустившему принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий. Как правило, оценка «не зачтено»

ставится студентам, которые не могут продолжить обучение или приступить к профессиональной деятельности по окончании вуза без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на зачете;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

5.1 Основная литература:

1. Кудинов И.В., Кудинов В.А., Еремин А.В. Математическое моделирование гидродинамики и теплообмена в движущихся жидкостях. М.: Лань. 2015.
http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=64&pl1_id=1175
2. Гумеров А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: Лань. 2014. http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=32&pl1_id=1040

5.2 Дополнительная литература:

1. Мулдер М. Введение в мембранную технологию [Текст] : [учебное пособие] / М. Мулдер ; пер. с англ. А. Ю. Алентьева, Г. П. Ямпольской ; под ред. В. П. Дубяги. - М. : Мир, 1999. - 513 с. : ил. - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5030031146.
2. Маликов, Р.Ф. Основы математического моделирования [Электронный ресурс] : учебное пособие / Р.Ф. Маликов. — Электрон. дан. — Москва : Горячая линия-Телеком, 2010. — 368 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/5169>.

5.3. Периодические издания:

- Журнал «Мембраны и мембранные технологии»

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы, необходимые для освоения дисциплины (модуля).

1. Справочно-правовая система «Консультант Плюс» <http://www.consultant.ru>
2. Портал открытых данных Российской Федерации <https://data.gov.ru>
3. База данных Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU <https://elibrary.ru/>
4. База данных Всероссийского института научной и технической информации (ВИНИТИ) РАН <http://www2.viniti.ru/>
5. Базы данных в сфере интеллектуальной собственности, включая патентные базы данных www.rusnano.com
6. Базы данных и аналитические публикации «Университетская информационная система РОССИЯ» <https://uisrussia.msu.ru/>
7. «Лекториум ТВ» - видеолекции ведущих лекторов России <https://www.lektorium.tv>
8. Электронный каталог Научной библиотеки КубГУ <http://212.192.128.113/MarcWeb/Work.asp?ValueDB=41&DisplayDB=Электронный каталог>
9. Электронная библиотечная система «РУКОНТ» <http://www.rucont.ru>
10. Среда модульного динамического обучения <http://moodle.kubsu.ru>
11. Российская государственная библиотека. <http://www.rsl.ru>
12. Российская мембранная сеть Russian membrane network www.rusmembrane.net/
13. Электронные учебники кафедры Мембранной Технологии Российского Химико-Технологического Университета им. Д.И. Менделеева, <http://membrane.msk.ru/index.php?pageID=77>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Успешное освоение дисциплины предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной работы. Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.

Имеется электронная версия лекций по данной дисциплине.

Основной формой обучения студентов является самостоятельная работа над учебным материалом.

Самостоятельная работа студентов – это ученая, научно-исследовательская и общественно-значимая деятельность студентов, направленная на развитие компетенций, которая осуществляется без непосредственного участия преподавателя, хотя и направляется им.

Процесс изучения дисциплины «Моделирование физико-химических систем и процессов» состоит из следующих этапов:

1. Проработка теоретического материала по рекомендованному учебнику и конспектам лекций, предоставленных преподавателем в электронном виде. В случае недоступности данного пособия необходимо обратиться к списку литературы, приведенного в рабочей программе дисциплины «Моделирование физико-химических систем и процессов».

2. Выполнение и защита лабораторных работ, подготовка к аудиторным занятиям и выполнение заданий разного типа и уровня сложности, подготовка к дискуссионным вопросам, изучение отдельных тем (вопросов) дисциплины в соответствии с учебно-тематическим планом, подготовка и написание рефератов, докладов и других письменных работ, устных сообщений на заданные темы, выполнение домашних заданий

разнообразного характера, подбор и изучение литературных источников; проведение расчетов и др.; выполнение индивидуальных заданий, направленных на развитие у студентов самостоятельности и инициативы, подготовка к участию в конференциях и др.

3. Подготовка и представление перед однокурсниками презентаций на заданную тему.

4. Сдачи зачета в устной или письменной форме (по усмотрению преподавателя).

Входной контроль осуществляется преподавателем в виде проверки и актуализации знаний студентов по соответствующей теме.

Выходной контроль осуществляется преподавателем проверкой качества и полноты выполнения задания.

Процесс организации самостоятельной работы студента включает в себя следующие этапы:

- подготовительный: определение целей, составление программы, подготовка методического обеспечения;
- основной: реализация программы, использование приемов поиска информации, усвоения, переработки, применения, передачи знаний, фиксирование результатов, самоорганизация процесса работы;
- заключительный: оценка значимости и анализа результатов, их систематизация, оценка эффективности программы и приемов работы, выводы о направлениях оптимизации труда.

Формы контроля самостоятельной работы – устный опрос, реферат, доклад на практических занятиях, тестирование, выполнение практических заданий, публикации в научных изданиях.

Лабораторные занятия – составная часть учебного процесса, групповая форма учебных занятий, направленная на развитие самостоятельности учащихся и приобретение умений и навыков, позволяющая привить практические навыки для самостоятельной работы с научной литературой, развить профессиональную компетентность, проверить на практике полученные теоретические знания.

Поскольку активность студента на лабораторных занятиях является предметом внутрисеместрового контроля его продвижения в освоении курса, подготовка к таким занятиям требует от студента ответственного отношения.

При подготовке к занятию студенты в первую очередь должны использовать материал лекций и соответствующих литературных источников. Самоконтроль качества подготовки к каждому занятию студенты осуществляют, проверяя свои знания и отвечая на вопросы для самопроверки по соответствующей теме.

Типовой план лабораторных занятий:

1. Изложение преподавателем темы занятия, его целей и задач.
2. Выдача преподавателем задания студентам (вопросов), необходимые пояснения.
3. Выполнение задания студентами под наблюдением преподавателя. Обсуждение результатов. Резюме преподавателя.
4. Общее подведение итогов занятия преподавателем и выдача домашнего задания.

Контрольная работа выполняется каждым студентом на отдельных листках. Не допускается использование любых средств коммуникации (ноутбуки, мобильные телефоны с выходом в интернет и пр.).

Допускается использование рабочих тетрадей, в которых законспектированы наиболее важные с точки зрения каждого из студентов моменты, выделенные при самостоятельной проработке каждой из тем.

С целью контроля и подготовки студентов к изучению новой темы в начале каждого занятия преподавателем проводится индивидуальный или фронтальный ***устный опрос*** по выполненным заданиям предыдущей темы.

Критерии оценки:

- правильность ответа по содержанию задания (учитывается количество и характер

ошибок при ответе);

- полнота и глубина ответа (учитывается количество усвоенных фактов, понятий и т.п.);
- сознательность ответа (учитывается понимание излагаемого материала);
- логика изложения материала (учитывается умение строить целостный, последовательный рассказ, грамотно пользоваться специальной терминологией);
- рациональность использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи (учитывается умение использовать наиболее прогрессивные и эффективные способы достижения цели);
- своевременность и эффективность использования наглядных пособий и технических средств при ответе (учитывается грамотно и с пользой применять наглядность и демонстрационный опыт при устном ответе);
- использование дополнительного материала (обязательное условие);
- рациональность использования времени, отведенного на задание (не одобряется затянутость выполнения задания, устного ответа во времени, с учетом индивидуальных особенностей студентов).

Развернутый ответ студента должен представлять собой связанное, логически последовательное сообщение на заданную тему, показывать его умение применять определения, правила в конкретных случаях.

Презентации на заданную тему выполняются в программе Power Point. Она должна состоять из 5-8 слайдов и содержать основные определения, фактический иллюстрированный материал, выводы и список использованных источников.

Материал для реферата необходимо искать в книгах, журналах и интернет-источниках, опубликованных в последние 3 года.

Доклад, сопровождающий презентации, должен занимать 7-10 минут.

И доклад, и презентации предварительно присылаются преподавателю по электронной почте на проверку.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала. Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1 Перечень информационных технологий.

1. Использование слайд-презентаций при проведении лекционных занятий.
2. Организация взаимодействия с обучающимися посредством электронной почты (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты).

8.2 Перечень необходимого лицензионного программного обеспечения

COMSOL Multiphysics

Microsoft Windows

Microsoft Office

Программное обеспечение для слабовидящих

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
---	-----------	--

1.	Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом учебной мебели, меловой доской, доской-экраном универсальной, переносным проектором, ноутбуком и соответствующим программным обеспечением для демонстрации презентаций. (ауд. 332с, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149)
2.	Лабораторные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лабораторного типа, оснащенная комплектом учебной и специализированной мебели, доской-экраном универсальной, короткофокусным интерактивным проектором и ноутбуками – 16 шт. (ауд.105а, г. Краснодар ул. Ставропольская, 149)
3.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, оснащенная местами для студентов, позволяющими разместить калькуляторы или ноутбуки, а так же переносным мультимедийным оборудованием и соответствующим программным обеспечением. (ауд. 105а, 332с, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149)
4.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебная аудитория для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная местами для студентов, позволяющими разместить калькуляторы или ноутбуки, а так же переносным мультимедийным оборудованием и соответствующим программным обеспечением. (ауд. 105а, 332с, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149)
5.	Самостоятельная работа	Помещения для самостоятельной работы студентов, оснащенные учебной мебелью и компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета. (ауд. 140, 329с, 401с, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149)