

## АННОТАЦИЯ

дисциплины Б1.В.06 «Моделирование физико-химических систем и процессов»

**Объём трудоёмкости:** 3 зачетные единицы (108 часов, из них – 54 часов аудиторной работы: лекционных 18 ч., лабораторных 36 ч., ИКР – 0,2 часа, КСР – 4 часа, 49,8 ч. СРС)

**Цель дисциплины:** состоит в формировании 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.

### 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.

### Место дисциплины в структуре ООП ВО

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».

### Требования к уровню освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Моделирование физико-химических систем и процессов» направлен на формирование следующих общекультурных, 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 | фундаментальные основы процессов переноса, их классифика    | использовать полученные знания о теоретических основах процессов переноса в | пониманием фундаментальных основ процессов, встречающихся в профессиональной |

| №<br>п.<br>п. | Индекс<br>компе-<br>тенции | Содержание<br>компетенции<br>(или её части)                                                                                                           | В результате изучения учебной дисциплины обучающи-<br>еся должны                            |                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                              |
|---------------|----------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|               |                            |                                                                                                                                                       | знать                                                                                       | уметь                                                                                                                                              | владеть                                                                                                                                                                      |
|               |                            | основ фундамен-<br>тальных разде-<br>лов химии при<br>решении профес-<br>сиональных за-<br>дач                                                        | цию и математи-<br>ческое описание<br>в физико-хими-<br>ческих системах                     | решении профес-<br>сиональных за-<br>дач                                                                                                           | деятельности, их<br>математическим<br>описанием                                                                                                                              |
| 2             | ОПК-3                      | способностью<br>использовать ос-<br>новные законы<br>естественнона-<br>учных дисци-<br>плин в професси-<br>ональной дея-<br>тельности                 | основные законы<br>переноса, их<br>классификацию,<br>математическое<br>описание             | использовать<br>знание основных<br>законов<br>процессов<br>переноса в<br>профессиональн<br>ой деятельности,<br>их<br>математически<br>моделировать | пониманием<br>использования<br>основных законов<br>переноса для<br>решения<br>практических<br>задач, в научно-<br>исследовательской<br>и<br>профессиональной<br>деятельности |
| 3             | ОПК-5                      | способностью к<br>поиску и первич-<br>ной обработке<br>научной и<br>научно-техниче-<br>ской информа-<br>ции                                           | основные источ-<br>ники научной и<br>научно-техниче-<br>ской информа-<br>ции                | искать научную<br>и научно-<br>техническую<br>информацию,<br>осуществлять ее<br>первичную<br>обработку                                             | обработкой и<br>анализом научной<br>и научно-<br>технической<br>информации                                                                                                   |
| 4             | ПК-5                       | способностью<br>получать и обра-<br>батывать резуль-<br>таты научных<br>экспериментов с<br>помощью совре-<br>менных компью-<br>терных техноло-<br>гий | принципы мате-<br>матического мо-<br>делирования и<br>компьютерной<br>обработки дан-<br>ных | получать и<br>обрабатывать<br>результаты<br>научных<br>экспериментов с<br>помощью<br>современных<br>компьютерных<br>технологий                     | математическим<br>моделированием и<br>компьютерной<br>обработкой<br>результатов<br>научных<br>экспериментов                                                                  |

### **Основные разделы дисциплины:**

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

| № раз-дела | Наименование разделов (тем)                                                 | Количество часов |                   |    |           |                      |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------|------------------|-------------------|----|-----------|----------------------|
|            |                                                                             | Всего            | Аудиторная работа |    |           | Внеаудиторная работа |
|            |                                                                             |                  | 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                 |
|            | <b>Итого по дисциплине:</b>                                                 |                  | <b>18</b>         |    | <b>36</b> | <b>49,8</b>          |

**Курсовые работы:** *не предусмотрены*

**Форма проведения аттестации по дисциплине:** *зачет*

**Основная литература:**

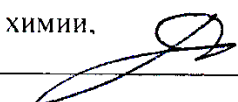
1. Кудинов И.В., Кудинов В.А., Еремин А.В. Математическое моделирование гидродинамики и теплообмена в движущихся жидкостях. М.: Лань. 2015.  
[http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=64&pl1\\_id=1175](http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=64&pl1_id=1175)
2. Гумеров А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: Лань. 2014. [http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=32&pl1\\_id=1040](http://www.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=32&pl1_id=1040)

**Авторы РПД**

Профессор кафедры физической химии,  
докт.хим.наук, профессор

 Никоненко В.В.

Ст. преподаватель кафедры физической химии,  
канд.хим.наук

 С.А. Мареев