

**Аннотация по дисциплине**  
**«ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ» Б1.В.ОД.3**

По направлению подготовки 09.06.01 Информатика и вычислительная техника для подготовки кадров высшей квалификации.

Профиль 05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Форма обучения очная и заочная

**Цель дисциплины:** формирование у аспирантов дисциплины «Компьютерное моделирование переноса ионов в физико-химических задачах» –системных знаний в области математического моделирования переноса частиц в мембранной электрохимии и обеспечение естественнонаучного фундамента для подготовки аспирантов к научной деятельности; формирование у аспирантов системных знаний в области математического моделирования в физико-химических средах и обеспечение естественнонаучного фундамента для профессиональной подготовки специалиста.

**Задачи дисциплины:**

- –формирование системных знаний об основных закономерностях математических методов и моделей в физико- химических задачах;
- формирование у навыков самостоятельной аналитической и научно-исследовательской работы в данной области;
- показать аспирантам возможности современных технических и программных средств для решения исследовательских задач теоретического характера применительно к данному классу задач;

**Место дисциплины в структуре образовательной программы.**

Дисциплина «Компьютерное моделирование переноса ионов в физико-химических задачах» относится к вариативному блоку Б1.В учебного плана направления подготовки 09.06.01 Информатика и вычислительная техника профиля Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Программа связана со следующими дисциплинами: математические методы и модели нанотехнологий, численные и аналитические методы исследований математических моделей, компьютерное моделирование в задачах гидродинамики, математические модели и инструментальные средства в экономике, а также с дисциплиной кандидатского экзамена математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине , соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.** Изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

| № п. п. | Индекс компетенции | Содержание компетенции (или ее части) | В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны |       |         |
|---------|--------------------|---------------------------------------|-------------------------------------------------------------|-------|---------|
|         |                    |                                       | знать                                                       | уметь | владеть |

|    |        |                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                          |                                                                                                                                             |                                                                                                                           |
|----|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. | УК - 2 | способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки; | как проектировать и осуществлять комплексные исследования, в предметной области дисциплины на основе научного мировоззрения.                             | применять знаний в области истории и философии науки при работе в предметной области дисциплины;                                            | набором умений проектирования комплексных исследований, в том числе междисциплинарных                                     |
| 2. | ОПК- 6 | способностью представлять полученные результаты научноисследовательской деятельности на высоком уровне и с учетом соблюдения авторских прав                                                                            | как представлять полученные результаты научно-исследовательской деятельности в области предмета, на высоком уровне и с учетом соблюдения авторских прав. | представлять полученные результаты научноисследовательской деятельности на высоком уровне и с учетом соблюдения авторских прав              | методами предмета и представлять полученные результаты научноисследовательской деятельности на высоком уровне             |
| 3. | ПК - 1 | владением основных теории, концепции и принципов в избранной области деятельности, способен к системному мышлению ;                                                                                                    | основные понятия компьютерного моделирование переноса ионов в физикохимических средах                                                                    | решать задачи теоретического и прикладного характера, относящиеся к компьютерному моделирование переноса ионов в физико-химических задачах. | математическим аппаратом компьютерном моделирование переноса ионов в физикохимических средах, применяя системное мышление |

### Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы (**108** часа), их распределение по видам работ представлено в таблице:

**Для ОФО:**

**Структура дисциплины:**

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины

| № раздела | Наименование разделов                                                                                                                                                                                                         | Количество часов |                   |    |    |                        |
|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|-------------------|----|----|------------------------|
|           |                                                                                                                                                                                                                               | Всего            | Аудиторная работа |    |    | Самостоятельная работа |
|           |                                                                                                                                                                                                                               |                  | Л                 | ПЗ | ЛР | СРС                    |
| 1         | Описание различных моделей переноса частиц в физико-химических средах. Описание процессов переноса в электродиализных аппаратах. Компьютерное моделирование электромембранных процессов и аппаратов для очистки воды.         | 32               | 6                 |    | 12 | 16                     |
| 2         | Математические модели физикохимических процессов переноса: однослойные и многослойные задачи переноса частиц. Стационарные и нестационарные модели. Математические пакеты физического моделирования.                          | 10               | 2                 |    | 6  | 2                      |
| 3         | Методы решения краевых задач физико-химических процессов. Аналитические, приближённые, численные методы. Методы решения однослойных и многослойных краевых задач. Задачи электродиффузионного переноса бинарного электролита. | 30               | 4                 |    | 6  | 20                     |
| 4         | Термодинамика неравновесных процессов. Математическое моделирование переноса в электромембранных системах с учетом электроконвекции                                                                                           | 24               | 2                 |    | 6  | 16                     |
| 5         | Моделирование течения электролита уравнений Навье-Стокса в канале электрохимической ячейки. Течение жидкости к вращающемуся диску. Турбулентное течение.                                                                      | 10               | 4                 |    | 6  |                        |

|  |                            |     |    |  |    |    |
|--|----------------------------|-----|----|--|----|----|
|  | <i>Итого по дисциплине</i> | 108 | 18 |  | 36 | 54 |
|--|----------------------------|-----|----|--|----|----|

**Для ЗФО:**

| №<br>раздела | Наименование разделов                                                                                                                                                                                                         | Количество часов |                      |    |    |                           |
|--------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|----------------------|----|----|---------------------------|
|              |                                                                                                                                                                                                                               | Всего            | Аудиторная<br>работа |    |    | Самостоятельная<br>работа |
|              |                                                                                                                                                                                                                               |                  | Л                    | ПЗ | ЛР | СРС                       |
| 1            | Описание различных моделей переноса частиц в физико-химических средах. Описание процессов переноса в электродиализных аппаратах. Компьютерное моделирование электромембранных процессов и аппаратов для очистки воды.         | 22               | 2                    |    | 4  | 16                        |
| 2            | Математические модели физикохимических процессов переноса: однослойные и многослойные задачи переноса частиц. Стационарные и нестационарные модели. Математические пакеты физического моделирования.                          | 20               | 2                    |    | 2  | 16                        |
| 3            | Методы решения краевых задач физико-химических процессов. Аналитические, приближённые, численные методы. Методы решения однослойных и многослойных краевых задач. Задачи электродиффузионного переноса бинарного электролита. | 24               |                      | 2  | 2  | 20                        |
| 4            | Термодинамика неравновесных процессов. Математическое моделирование переноса в электромембранных системах с учетом электроконвекции                                                                                           | 20               | 2                    |    | 2  | 16                        |
| 5            | Моделирование течения электролита уравнений Навье-Стокса в канале электрохимической ячейки. Течение жидкости к вращающемуся диску. Турбулентное течение.                                                                      | 22               | 2                    | 2  | 2  | 16                        |
|              | <i>Итого по дисциплине</i>                                                                                                                                                                                                    | 108              | 8                    | 4  | 12 | 84                        |

Курсовые работы - не предусмотрены.

**Перечень основной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины**

1. Амосов, А.А. Вычислительные методы [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А.А. Амосов, Ю.А. Дубинский, Н.В. Копченова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 672 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/42190>. — Загл. с экрана.
2. Лебедев К. А., Кузякина М. В. (КубГУ). Математические и компьютерные методы для моделирования переноса ионов. Краевые задачи [Текст] : Ч. 1 / К. А. Лебедев,; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар : [Кубанский государственный университет], 2017. - 97 с. Всего: 8
3. Уртенев К. М., Коваленко, Шапошникова Т. Л. Математическое моделирование тепломассопереноса в А. В. электродиализных аппаратах водоподготовки [Текст] / - М.: Финансы и статистика, 2010. - 214 с. Всего: 3