

Аннотация к рабочей программе дисциплины  
«Б1.В.05 Моделирование физико-химических систем и процессов»

**Объем трудоемкости:** 3 з.е.

**Цель дисциплины:** 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.

**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 образовательной программы:** дисциплина «Моделирование физико-химических систем и процессов» относится к части, формируемой участниками образовательного процесса, Блока 1 учебного плана. В соответствии с рабочим учебным планом дисциплина изучается на 4 курсе. Вид промежуточной аттестации: зачет.

Изучению дисциплины «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 «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**

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся на формирование следующих компетенций:

| Код и наименование индикатора достижения компетенции                                                                            | Результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>ПК-3 Способен использовать современные теоретические представления химической науки для анализа экспериментальных данных</b> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| ИПК-3.1. Использует современные теоретические представления химической науки в своей профессиональной деятельности              | Знает профессиональное программное обеспечение для сбора, обработки и передачи информации, и современные средства вычислительной техники и информационно-коммуникационные технологии для математического моделирования физико-химических систем и процессов, принципы математического моделирования и компьютерной обработки данных                                                                                                                                                                                                |
|                                                                                                                                 | Умеет осуществлять поиск и использовать профессиональное программное обеспечение для сбора, обработки и передачи информации, и современные средства вычислительной техники и информационно-коммуникационные технологии для математического моделирования физико-химических систем и процессов, получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий                                                                                                                              |
|                                                                                                                                 | Владеет профессиональным программным обеспечением для сбора, обработки и передачи информации и современными средствами вычислительной техники и информационно-коммуникационными технологиями для математического моделирования физико-химических систем и процессов, основными подходами к моделированию физико-химических систем и процессов для решения практических задач в научно-исследовательской и профессиональной деятельности, математическим моделированием и компьютерной обработкой результатов научных экспериментов |
|                                                                                                                                 | Знает терминологическую базу для интерпретации результатов моделирования физико-химических систем и процессов на основе современных теоретических представлений                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |

| Код и наименование индикатора достижения компетенции                                                          | Результаты обучения по дисциплине                                                                                                                                  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ИПК-3.2. Интерпретирует результаты химического эксперимента на основе современных теоретических представлений | Умеет интерпретировать результаты моделирования физико-химических систем и процессов на основе современных теоретических представлений                             |
|                                                                                                               | Владеет терминологической базой для интерпретации результатов моделирования физико-химических систем и процессов на основе современных теоретических представлений |

### Содержание дисциплины:

| №                                     | Наименование разделов (тем)                                                 | Количество часов |                   |    |    |                      |
|---------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|------------------|-------------------|----|----|----------------------|
|                                       |                                                                             | Всего            | Аудиторная работа |    |    | Внеаудиторная работа |
|                                       |                                                                             |                  | Л                 | ПЗ | ЛР |                      |
| 1                                     | Математическое моделирование как метод научного исследования                | 29               | 10                | -  | 10 | 9                    |
| 2                                     | Неравновесная термодинамика. Уравнения Онзагера и Кедем-Качальского         | 25               | 8                 | -  | 8  | 9                    |
| 3                                     | Линейные законы переноса (законы Ома, Фика, Дарси, Фурье)                   | 24               | 8                 | -  | 8  | 8                    |
| 4                                     | Моделирование процессов переноса с помощью известных программных продуктов. | 25,8             | 8                 | -  | 8  | 9,8                  |
| <i>ИТОГО по разделам дисциплины</i>   |                                                                             |                  | 34                |    | 34 | 35,8                 |
| Контроль самостоятельной работы (КСР) |                                                                             | 4                | -                 | -  | -  | -                    |
| Промежуточная аттестация (ИКР)        |                                                                             | 0,2              | -                 | -  | -  | -                    |
| Подготовка к экзамену                 |                                                                             | -                | -                 | -  | -  | -                    |
| Общая трудоемкость по дисциплине      |                                                                             | 108              | -                 | -  | -  | -                    |

**Курсовые работы:** не предусмотрена.

**Форма проведения аттестации по дисциплине:** зачет

Авторы:

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

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