

# АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

## Численные методы в химии

### Направление подготовки 04.03.01 – Химия

#### 5 семестр

#### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Численные методы в химии» являются освоение студентами современных вычислительных средств высокого уровня, как основы формирования математического подхода к использованию знаний фундаментальных химических наук; умение использовать современные вычислительные средства для решения конкретных задач химии, химической технологии, обработки эксперимента, и самостоятельно составлять простейшие программы для этих целей.

#### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина относится к вариативной части ОПОП.

Дисциплина «Численные методы в химии» является одной из основных в цикле математически ориентированных химических дисциплин, в который также входят «Обработка результатов химического эксперимента», «Системное моделирование химических процессов» и «Математическое моделирование». Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Численные методы в химии». 1. Математика. 2. Информатика. 3. Обработка результатов химического эксперимента. 4. Общая и неорганическая химия. 5. Аналитическая химия. 6. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента). Освоение дисциплины «Численные методы в химии» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин: 1. Системное моделирование химических процессов 2. Математическое моделирование. 3. Физическая химия. 4. Коллоидная химия. 5. Физико-химические методы анализа. 6. Химическая технология.

#### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учётом основных требований информационной безопасности (ОПК-4);
- способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

##### 1) Знать:

- Основы языка высокого уровня – DELPHI, – в той его части, которая необходима для математических вычислений (ОПК-4, ПК-5).
- Основные численные методы первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).
- Математические методы решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).

##### 2) Уметь:

- Составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).

- Применять навыки построения алгоритмов и составления программ для использования специальных математических пакетов, таких как MathCad, MathLab (ОПК-4, ПК-5).
- Разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии (ОПК-4, ПК-5).

### 3) Владеть:

- Основными методами решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии и реализации их на компьютере (ОПК-4, ПК-5).
- Основными методами написания программ на языках высокого уровня (ОПК-4, ПК-5).
- Основами правильной постановки эксперимента, первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии и дальнейшей их обработки с целью получения всей информации из этих экспериментальных данных (ОПК-4, ПК-5).

## 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Процедуры и функции в программировании. Средства работы с файлами. Решение нелинейных уравнений. Аппроксимация данных, имеющих экспериментальный разброс. Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса. Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса-Зейделя. Решение систем нелинейных алгебраических уравнений. Интерполяция таблично заданных функций.

## 5. ВИД АТТЕСТАЦИИ

Вид аттестации: экзамен.


## 6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

Составитель: доцент кафедры химии Лобко В.Н. 

Заведующий кафедрой химии Кухтин Б.А. 

Председатель учебно-методической комиссии

направления 04.03.01 – “Химия” Кухтин Б.А. 

Директор ИБЭ Ильина М.Н. 

Дата:

Печать института

