

АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Численные методы в химии

Направление подготовки 04.03.01 – Химия

6 семестр

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Численные методы в химии»: 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

Дисциплина «Численные методы в химии» изучается в базовой части учебного плана.

Пререквизиты 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).

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции (ОПК-5):

Знать: основы языка высокого уровня – DELPHI, – в той его части, которая необходима для математических вычислений, основные численные методы первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии, математические методы решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии.

Уметь: составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач химии, физической химии и химической технологии, применять навыки построения алгоритмов и составления программ для использования специальных математических пакетов, таких как MathCad, MathLab, разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии.

Владеть: основными методами решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии и реализации их на компьютере, основными методами написания программ на языках высокого уровня, 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.

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 – экзамен.

6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ – 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 Смирнова Н.Н.



Дата: 03.09.2018

Печать института