

**АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ**

Направление подготовки (специальность)	04.03.01 – Химия
Направленность (профиль) подготовки	Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов окружающей среды
Цель освоения дисциплины	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.
Общая трудоемкость дисциплины	6 зачетных единиц, 216 часов
Форма промежуточной аттестации	Экзамен
Краткое содержание дисциплины:	<p>Приближённое решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений. Теорема Вейерштрасса. Этапы численного решения. Этап отделения корней. Графический метод и понятие об аналитических методах. Графическое решение уравнений. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом деления отрезка пополам (дихотомии). Преимущества и недостатки метода. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом хорд. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом простых итераций и способы обеспечения сходимости. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом Ньютона. Условия применимости метода и скорость сходимости к решению. Сравнительный анализ методов и их использование при решении задач физической химии и химической технологии. Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели. Нелинейный МНК. Решение систем линейных алгебраических уравнений методами простых итераций, Зейделя и методом Гаусса с выбором главного элемента. Условия устойчивости вычислений. Интерполяция таблично заданной функции. Интерполяционные многочлены Ньютона и Лагранжа. Построение кубического интерполяционного сплайна.</p>

Аннотацию рабочей программы составил



Лобко В.Н.
доцент кафедры химии