

## АННОТАЦИЯ

### рабочей программы учебной дисциплины Б1.О.28 «Вычислительные методы в химии»

Направление подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

1.	<b>Цель изучения дисциплины «Вычислительные методы в химии»:</b> - изучение и освоение современных методов математического моделирования химических, физико-химических и химико –технологических процессов.		
2.	<b>Место дисциплины в структуре ОПОП ВО специалитета</b> Дисциплина «Вычислительные методы в химии» относится к основной части Блока 1 основной профессиональной образовательной программы специалитета по направлению подготовки 04.05.01. «Фундаментальная и прикладная химия». Изучается в 6-м семестре.		
3.	<b>Результаты освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии»</b>		
	<b>Код и наименование компетенций</b>	<b>Индикаторы</b>	<b>Дескрипторы</b>
	<b>Универсальные компетенции (УК)</b>		
	<b>УК-1</b> Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	<b>УК-1.1.</b> Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними	<b>Знать:</b> свои личностные особенности и ресурсы <b>Уметь:</b> адекватно оценивать свои способности и возможности с соответствием конкретной ситуации <b>Владеть:</b> навыками самодиагностики личностных коммуникативных способностей в деловом взаимодействии
		<b>УК-1.2.</b> Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников	<b>Знать:</b> способы совершенствования своей деятельности с учетом своих личностных, деловых, коммуникативных качеств <b>Уметь:</b> определять приоритеты личностного и профессионального роста <b>Владеть:</b> приемами целеполагания и планирования своей профессиональной деятельности
		<b>УК-1.3.</b> Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов	<b>Знать:</b> возможные варианты решения типичных задач <b>Уметь:</b> использовать инструменты непрерывного самообразования <b>Владеть:</b> методиками саморазвития и самообразования
	<b>Общепрофессиональные компетенции (ОПК)</b>		
	<b>ОПК-4</b> Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	<b>ОПК-4.1.</b> Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	<b>Знать:</b> Способы решения задач с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности <b>Уметь:</b> Работать с разделами информационных технологий, решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом
		<b>ОПК-4.2.</b> Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	
		<b>ОПК-4.3.</b> Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	

			информационной безопасности <b>Владеть:</b> Навыками использования задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом информационной безопасности
4.	<b>Структура и содержание дисциплины</b>		
	<b>4.1. Структура дисциплины</b>		
	<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>6 семестр</b>
	Общая трудоемкость дисциплины	180	180
	Аудиторные занятия	120	120
	Лекции	36	36
	Лабораторные занятия	84	84
	Самостоятельная работа студентов	60	60
	<b>4.2. Содержание дисциплины</b>		
	1.	Введение в численные методы	Задачи, требующие численного решения и допускающие численное решение. Область применимости численных методов. Типы решаемых задач. Вычислительные методы эквивалентных преобразований, методы аппроксимации, прямые методы, итерационные методы, методы статистических испытаний(методы Монте- Карло).Корректность вычислительной задачи.
	2.	Основы программирования	Основные понятия и термины: модель, алгоритм, блок- схема программы, программа для ЭВМ, языки низкого и высокого уровня, интерпретация и трансляция текста программы. Основы языка BASIC. Типы величин. Константы и переменные. Массивы переменных. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Использование стандартных математических функций. Структура программы: раздел описания и раздел операторов.  Логические выражения. Операторы: присвоения, ввода и вывода значений, организации циклов и разветвлений. Процедуры и функции. Внешние файлы данных.
	3.	Вычисления по автономным алгоритмам	Типы автономных алгоритмов. Примеры автономных алгоритмов в химических задачах: вычисление теплоемкости веществ: вычисление средней длины свободного пробега молекул; вычисление мольной доли одноосновной кислоты и соответствующих анионов как функции. Построение блок-схемы программы для расчета текущих концентрации в системе с тремя агрегатами

	4.	Вычисление корней уравнений	<p>Типы уравнений( линейные, алгебраические, трансцендентные) Линеаризация нелинейных уравнений. Примеры химических задач, приводящих к необходимости отыскания корней уравнений: уравнение состояние идеального газа; вычисление степени превращения в равновесных газовых реакциях; вычисление растворов слабых кислот; вычисление буферных растворов.</p> <p>Основные алгоритмы нахождения корней уравнений: методы половинного деления; метод хорд; метод простой итерации; метод Ньютона(касательных); метод секущих Блок- схема программы для нахождения равновесных концентрации газовой реакции по заданной константе равновесия методом Ньютона.</p>
	5.	Системы линейных уравнений	<p>Системы линейных уравнений(СЛУ). Химические задачи, приводящие к необходимости решения СЛУ: определение объема компонентов сплавов; приготовление смесей химических веществ требуемого состава; определение концентрации веществ по закону Бэра.</p> <p>Основные алгоритмы решения СЛУ. Матричная форма. Совместная и несовместная СЛУ. Прямые методы :метод Гаусса, метод исключения, метод Крамера и вычисление определителей. Итерационные методы: метод простой итерации, метод Зейделя. Пример программы нахождения корней СЛУ методом Зейделя.</p>
	6.	Численное интегрирование	<p>Примеры химических задач, приводящих к необходимости численного интегрирования: вычисление летучести газа, вычисление теплоемкости твердых тел, моделирование простой перегонки.</p> <p>Методы численного интегрирования: метод трапеций, методы левых, правых и средних прямоугольников, метод Симпсона.</p>
	7.	Дифференциальные уравнения	<p>Примеры химических задач, приводящих к необходимости решения дифференциальных уравнений: интегрирование дифференциальных уравнений формальной кинетики химических реакций, описание явлений переноса. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Эйлера, метод Рунге-Кутта. Решение прямой задачи химической кинетики для консекутивных химических реакций.</p>
	8.	Статистическая обработка экспериментальных данных	<p>Обработка данных методом наименьших квадратов(МНК).Линейный (МНК).Статистические характеристики оценок параметров модели. Интерполяция таблично заданной функции. Интерполяционный многочлен Лагранжа. Факторы, определяющие точность интерполяции. Понятие сходимости интерполяционного процесса. Сплаины и их свойства. Построение кубического интерполяционного сплайна</p>
<b>5. Образовательные технологии</b>			
	<p>При подготовке специалистов-химиков используются следующие основные формы проведения учебных занятий:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- интерактивные лекции;</li> <li>- лекции пресс-конференции;</li> </ul>		

	<ul style="list-style-type: none"> <li>- тренинги и семинары про развитию профессиональных навыков;</li> <li>- групповые, научные дискуссии, дебаты</li> </ul>
<b>6.</b>	<b>Используемые ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Internet; информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы</b>
	<b>Информационное обеспечение базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</b> <a href="http://fizrast.ru/sitemap.html">http://fizrast.ru/sitemap.html</a> <a href="http://www.don-agro.ru">http://www.don-agro.ru</a> <a href="http://xn-80abucjiihbv9a.xn-plai/">http://xn-80abucjiihbv9a.xn-plai/</a> <a href="http://www.agroxxi.ru/">http://www.agroxxi.ru/</a> (РГБ) <a href="http://elibrary.rsl.ru">http://elibrary.rsl.ru</a> Научная электронная библиотека <a href="http://elibrary.ru/default.asp">http://elibrary.ru/default.asp</a> Российская национальная библиотека <a href="http://primo.nl.ru">http://primo.nl.ru</a> <a href="http://nbmgu.ru">http://nbmgu.ru</a> Электронная библиотека Российской государственной библиотеки
<b>7.</b>	<b>Формы текущего контроля</b>
	тестовый контроль, контрольные работы
<b>8.</b>	<b>Форма промежуточного контроля</b>
	Зачет

Разработчик: д.ф- . ,

. . ., ст. преп. кафедры математики и ИВТ Горбакова З.С.