

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации

**Аннотация рабочей программы дисциплины
Б1.О.12 Вычислительные методы в химии**

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	Физико-химические методы анализа в производстве и контроле качества лекарственных средств
Форма обучения:	очная

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенция(и), индикатор(ы) и результаты обучения

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

Знать:

ОПК-3.1/Зн3 Знать цели и задачи численных методов расчетов, области их применения.

Уметь:

ОПК-3.1/Ум2 Уметь применять численные методы в задачах химической направленности

ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

Знать:

ОПК-3.2/Зн2 Знать программное обеспечение и методы, используемые при решении задач химической направленности

Уметь:

ОПК-3.2/Ум1 Уметь выбирать и использовать необходимое программное обеспечение в соответствии с поставленной задачей

ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

ОПК-4.2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик

Знать:

ОПК-4.2/ЗнЗ Знать методы обработки данных, аппроксимации и интерполяции

Уметь:

ОПК-4.2/УмЗ Уметь обрабатывать данные, выполнять аппроксимацию и интерполяцию

ОПК-5 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-5.1 Применяет базовые знания об основных принципах, методах и свойствах информационных технологий при выборе программного обеспечения для целей решения профессиональных задач

Знать:

ОПК-5.1/ЗнЗ Знать численные методы решения задач линейного и нелинейного программирования, решения дифференциальных уравнений, нахождения интегралов с помощью программного обеспечения

Уметь:

ОПК-5.1/УмЗ Уметь численно решать задачи линейного и нелинейного программирования, решать дифференциальные уравнения, находить интегралы с помощью программного обеспечения.

Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.О.12 «Вычислительные методы в химии» относится к обязательной части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 4.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

- Б1.О.10 Аналитическая химия;
- Б1.О.04 Математика;
- Б1.О.06 Общая и неорганическая химия;
- Б1.О.09 Статистические методы анализа;
- Б2.О.01(У) учебная практика, ознакомительная практика;
- Б1.О.05 Физика и биофизика;
- Б1.О.11 Физическая химия;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

- Б1.О.10 Аналитическая химия;
- Б1.О.19 Информационные технологии в профессиональной деятельности;
- Б1.О.15 Метрология в химическом анализе;
- Б3.01(Д) Подготовка к защите и защита выпускной квалификационной работы;
- Б2.О.02.01(Н) производственная практика, научно-исследовательская работа;
- Б1.О.11 Физическая химия;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

Содержание разделов, тем дисциплины

Раздел 1. Введение в дисциплину. Решение уравнений.

Тема 1.1. Введение в дисциплину. Решение уравнений.

Введение. Приближенное вычисление значений функций.

Тема 1.2. Метод наименьших квадратов для квадратичной зависимости.

Метод наименьших квадратов для квадратичной зависимости.

Решение уравнений и систем.

Раздел 2. Приближение функций.

Тема 2.1. Интерполирование функций методом Ньютона.

Приближение функций. Первая и вторая интерполяционные формулы Ньютона.

Экстраполирование.

Тема 2.2. Интерполирование периодических функций с помощью тригонометрических полиномов.

Интерполирование периодических функций с помощью тригонометрических полиномов.

Раздел 3. Приближенное нахождение интегралов и решение дифференциальных уравнений.

Тема 3.1. Численное интегрирование методом трапеций.

Приближенное вычисление определенных интегралов. Формулы Ньютона-Котеса. Интегрирование методом трапеций.

Тема 3.2. Численное решение дифференциальных уравнений методом Эйлера.

Приближенное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Аналитические методы. Численное решение ОДУ методом Эйлера.

Раздел 4. Решение оптимизационных задач.

Тема 4.1. Постановка и решение задачи линейного программирования

Постановка и решение задачи линейного программирования.

Тема 4.2. Постановка и решение задачи нелинейного программирования

Постановка и решение задачи нелинейного программирования.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Очная форма обучения

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Практические занятия (часы)	Лекции (часы)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
-----------------	---------------------------	--------------------------	---------------------------------	-----------------------------	---------------	--	--	---------------------------------

Четвертый семестр	108	3	62	22	18	22	42	Зачет (4)
Всего	108	3	62	22	18	22	42	4

Разработчик(и)

Кафедра высшей математики, кандидат технических наук, старший научный сотрудник Капутьцевич А. Е.