

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

Компетенции, индикаторы 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/Зн1 Знать теорию строения атома и химической связи, периодический закон, основные положения химической термодинамики и химической кинетики, коллигативные свойства растворов, положения теории электролитической диссоциации.

ОПК-3.1/Зн2 Знать классификацию и общие химические свойства основных классов неорганических соединений; химические свойства элементов различных групп и семейств Периодической системы и их важнейших соединений; номенклатуру, классификацию и химические свойства комплексных соединений

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

ОПК-3.1/Зн4 Знать методы описания химических равновесий в растворах сильных и слабых электролитов, буферных растворов; описание равновесий в гетерогенных системах, в растворах солей, подвергающихся гидролизу, в окислительно-восстановительных системах.

ОПК-3.1/Зн5 Знать способы выражения состава растворов; закон эквивалентов, координационную теорию строения комплексных соединений, классификацию и теорию кристаллического поля лигандов для комплексных соединений.

Уметь:

ОПК-3.1/Ум1 Уметь описывать строение атомов элементов, определять характеристики химической связи и объяснять пространственное строение молекул; решать расчетные задачи по разделам общей химии; записывать уравнения реакций в молекулярном и ионном виде; уравнивать окислительно-восстановительные реакции ионно-электронным методом

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/Зн1 Знать возможности современного программного обеспечения, применяемого для оценки результатов химического анализа

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-3.2/Ум2 Уметь использовать Matlab (Octave) для решения задач химической технологии

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/Зн1 Знать программное обеспечение аналитического оборудования

ОПК-5.1/Зн2 Знать основные принципы, методы и свойства ИТ при выборе программного обеспечения для целей решения профессиональных задач

ОПК-5.1/Зн3 Знать численные методы решения задач линейного и нелинейного программирования, решения дифференциальных уравнений, нахождения интегралов с помощью программного обеспечения

Уметь:

ОПК-5.1/Ум1 Уметь задать условия в соответствии с применяемой методикой анализа в программном обеспечении аналитического оборудования

ОПК-5.1/Ум2 Уметь пользоваться программным обеспечением, используемым для решения профессиональных задач

ОПК-5.1/Ум3 Уметь численно решать задачи линейного и нелинейного программирования, решать дифференциальные уравнения, находить интегралы с помощью программного обеспечения.

Владеть:

ОПК-5.1/Нв1 Владеть программным обеспечением аналитического оборудования

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/Зн1 Знать встроенные статистические и математические функции доступных пакетов программного обеспечения, позволяющие осуществить аппроксимацию результатов

ОПК-4.2/Зн2 Знать способы проверки линейной зависимости аналитического сигнала от концентрации и способы выявления отклонения от линейной регрессии

ОПК-4.2/Зн3 Знать методы обработки данных, аппроксимации и интерполяции

Уметь:

ОПК-4.2/Ум1 Уметь провести аппроксимацию полученных экспериментальных данных с использованием доступного программного обеспечения

ОПК-4.2/Ум2 Уметь построить линейную зависимость аналитического сигнала от содержания вещества методом наименьших квадратов

ОПК-4.2/Ум3 Уметь обрабатывать данные, выполнять аппроксимацию и интерполяцию

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(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.

2. Содержание разделов, тем дисциплин

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

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Контактные часы на аттестацию в период обучения (часы)	Лекции (часы)	Практические занятия (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Четвертый семестр	72	2	44	2	2	18	22	28	Зачет
Всего	72	2	44	2	2	18	22	28	

Разработчик(и)

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