

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Курганский государственный университет»  
(КГУ)

Кафедра «Физическая и прикладная химия»



УТВЕРЖДАЮ:  
Первый проректор  
/ Т.Р. Змызгова /  
« 30 » августа 2023 г.

Рабочая программа учебной дисциплины

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ  
образовательной программы высшего образования –  
программы специалитета

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность:  
**Аналитическая химия**

Форма обучения: очная

Курган 2023

Аннотация к рабочей программе дисциплины

**“Вычислительные методы в химии”**

Образовательной программы высшего образования  
программы специалитета

**04.05.01 - “Фундаментальная и прикладная химия”**  
направленность (профиль) **“Аналитическая химия”**

Трудоемкость дисциплины: 5 ЗЕ (180 академических часов)

Семестр: 3 (очная форма обучения)

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Содержание дисциплины

Теоретические основы вычислительных методов в химии. Общие вопросы вычислительных методов. Основы метрологических расчетов. Дисперсионный анализ. Корреляционный и регрессионный анализ. Способы представления химической информации. Создание и использование химических баз данных. Решение линейных систем. Итерационные способы решения систем. Основы математического моделирования химических систем. Прогнозирование свойств и параметров химических систем