

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

Кафедра физической и прикладной химии



УТВЕРЖДАЮ:

Ректор

/ Н.В.Дубив/

« 31 » августа 2020 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 2020

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