

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 /

«*З.А.*» *август* 2022 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 2022

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