

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Курганский государственный университет

Кафедра физической и прикладной химии
(наименование)

УТВЕРЖДАЮ

Врио ректора

Н.В. Дубив

«16» сентября 2019г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительные методы в химии

Образовательной программы высшего образования по программе специалитета
«Фундаментальная и прикладная химия» 04.05.01

Направленность (профиль) «Аналитическая химия»

Форма обучения: очная

(очная, заочная, очно-заочная и др.)

Курган 2019

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