

Министерство здравоохранения Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический  
университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации  
(ФГБОУ ВО СПбХФУ Минздрава России)

СОГЛАСОВАНО

УТВЕРЖДАЮ

Решением совета фармацевтического  
факультета, протокол от 21. 06. 2019 г., № 9

Проректор по учебной работе  
Ю.Г. Ильинова

### **Аннотация к рабочей программе дисциплины «Вычислительные методы в химии»**

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования – бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Синтез и анализ органических соединений» по очной форме обучения на русском языке.

#### **Место дисциплины в образовательной программе:**

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам изучения следующих дисциплин:

1. Б1.О.12 Математика
2. Б1.О.13 Статистические методы анализа

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» изучается в четвертом семестре, является базовой для освоения дисциплин:

1. Б1.О.20 Аналитическая химия,
2. Б1.О.23 Физическая химия,
3. Б1.О.24 Метрология в химическом анализе.

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» направлена на формирование компетенций:

**УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач, в части следующих индикаторов ее достижения:**

- УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие
- УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;

**ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники, в части следующих индикаторов ее достижения:**

- ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности
- ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности;

**ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач, в части следующих индикаторов ее достижения:**

ОПК-4.2 Обработывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.

**Перечень основных разделов дисциплины:**

1. Введение в дисциплину
2. Метод наименьших квадратов
3. Решение уравнений и систем.
4. Интерполирование и экстраполирование функций
5. Приближенное вычисление определенных интегралов
6. Приближенное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений
7. Тригонометрическая интерполяция и ее применение в химических технологиях
8. Тригонометрическая интерполяция и ее применение в химических технологиях
9. Задачи нелинейной оптимизации

Общий объем дисциплины – 3 зачетные единицы (108 часов).

**Правила аттестации по дисциплине.**

**Текущий контроль** по дисциплине проводится в форме опросов и расчётно-графической работы.

**Промежуточная аттестация** по дисциплине проводится по завершению периода ее освоения (семестра). Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета. Промежуточная аттестация оцениваются по шкале «зачтено» или «не зачтено». Оценка «зачтено» означает успешное прохождение промежуточной аттестации.

Если по итогам проведенной промежуточной аттестации хотя бы одна из компетенций не сформирована на уровне требований к дисциплине (результаты обучающегося не соответствуют критерию сформированности компетенции), обучающемуся выставляется оценка «не зачтено»

**Учебно-методическое обеспечение дисциплины.**

Учебно-методический комплекс по дисциплине «Вычислительные методы в химии» в электронной информационно-образовательной среде ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России:

Капутьцевич А.Е. Вычислительные методы в химии [Электронный ресурс]: электронный учебно-методический комплекс / А.Е. Капутьцевич ; ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России. – Санкт-Петербург, [2019]. - Режим доступа: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=2433>