

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

образовательная программа направления 020100.62 Химия
математический и естественнонаучный цикл, региональный компонент

Цели и задачи изучения дисциплины

Цель дисциплины - практический перенос знаний студентов, полученных ими в курсе высшей математики, на решение конкретных химических задач, а также приобретение студентами навыков решения таких задач с использованием одного из популярных компьютерных пакетов высшей математики.

Задачи дисциплины: научить студентов применению методов высшей математики для решения химических задач.

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

- **знать:**
- основы высшей математики, необходимые для решения большинства химических задач.
- **уметь:**
- использовать стандартные математические операции при решении химических задач, владеть навыками программирования в одном из популярных компьютерных пакетов высшей математики.
- **быть способным:**
- использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области компьютерной математики
- в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей;
- использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач.

Краткое содержание

4 семестр, зачет.

Всего 100 часов, аудиторных 50

ВВЕДЕНИЕ. Краткая история развития персональной вычислительной техники и программного обеспечения. Роль вычислительных методов в химии и химической технологии. Основные задачи химии, для решения которых требуется применение вычислительной техники.

ТЕМА 1. ПАКЕТЫ ПРОГРАММ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЕТОВ. Общий обзор возможностей наиболее популярных пакетов прикладных программ для проведения расчетов. Система scilab. Основные составляющие интегрированной интерактивной оболочки scilab. Возможности, предоставляемые системой scilab для проведения расчетов.

ТЕМА 2. ПРИМЕНЕНИЕ ВЫСШЕЙ МАТЕМАТИКИ В ХИМИИ. Области применения в химии основных понятий и разделов высшей математики. Производная, интеграл, дифференциальные уравнения, линейная алгебра, ряды. Основы численных методов: приближенное решение уравнений и систем уравнений, сплайн-аппроксимация.

Основы математической статистики. Понятие функции распределения. Параметры функции распределения. Свойства оценок параметров. Распределение Лапласа-Гаусса, центральная предельная теорема. Распределение Стьюдента, расчет доверительных интервалов. Методы поиска грубых погрешностей эксперимента. Метод наименьших квадратов. Основы теории ошибок.