

**АННОТАЦИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
«КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ»**

по направлению подготовки 04.03.01 Химия (бакалавриат)

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели освоения дисциплины: воспитание у молодых людей высокой математической культуры и ориентирование на развитие: верного представления о роли математики в современной цивилизации и мировой культуре; умения логически мыслить, оперировать с абстрактными объектами; корректности в употреблении математических понятий и символов для выражения количественных и качественных отношений; отношения к дисциплине как к необходимому инструменту в будущей профессиональной деятельности.

Задачи освоения дисциплины: овладение основными понятиями линейной алгебры и аналитической геометрии; изучение методов дифференциального и интегрального исчисления функции одного аргумента; изучение методов дифференциального и интегрального исчисления функций нескольких аргументов; теории числовых и функциональных рядов; нахождение решений дифференциальных уравнений и систем дифференциальных уравнений; ознакомление с основными понятиями теории вероятностей и ее приложениями; изучение основных методов математической статистики; использование основных приемов обработки экспериментальных данных с использованием ПЭВМ; исследование моделей с оценкой применимости полученных результатов.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплина «Компьютерное моделирование химических реакций» является дисциплиной по выбору вариативной части блока Б 1 дисциплин Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки бакалавров 04.03.01 Химия.

3. Перечень планируемых результатов освоения дисциплины

В результате освоения дисциплины обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

ПК-5: Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий.

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: основные принципы и приемы использования математического аппарата в химии; методы планирования эксперимента, выбора наиболее оптимального способа его проведения с целью получения данных, необходимых для моделирования механизма процесса.

Уметь: практически применять полученные навыки для решения задач; находить числовые характеристики случайных величин и их законы распределения; применять статистические методы для химических моделей; проводить моделирование кинетики для предложенного механизма процесса при заданных начальных условиях; предлагать на основании результатов моделирования возможный механизм процесса.

Владеть: навыками моделирования химических процессов; навыками решения типовых задач; современным программным обеспечением в предметной области и методами обработки с его помощью экспериментальных результатов и данных химических расчетов.

4. Общая трудоемкость дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы (108 часов).

5. Образовательные технологии

В ходе освоения дисциплины при проведении аудиторных занятий используются следующие образовательные технологии: лекции-визуализации, лекции-дискуссии, лекции-семинары, лекции-пресс-конференции, тесты.

При организации самостоятельной работы занятий используются следующие образовательные технологии: работа с текстом лекций, поиск информации в дополнительной литературе и Интернете, выполнение индивидуального задания, решение задач и упражнений, выполнение тестов, выполнение проверочных работ.

6. Контроль успеваемости

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды текущего контроля: тестирование.

Промежуточная аттестация проводится в форме: **зачета**.