

исс 889 2015

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



По учебно-методической работе

А.А. Панфилов

«16» апреля 2015г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Численные методы в химии

Направление подготовки – 04.03.01 – Химия

Профиль подготовки

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоём- кость зач. ед. (час.)	Лекций, час.	Практич. занятий, час.	Лаборат. работ, час.	СРС, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачёт)
5	6 (216)	36	-	36	108	Экзамен (36)
Итого	6 (216)	36	-	36	108	Экзамен (36)

Владимир, 2015

74

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Численные методы в химии» являются освоение студентами современных вычислительных средств высокого уровня, как основы формирования математического подхода к использованию знаний фундаментальных химических наук; умение использовать современные вычислительные средства для решения конкретных задач химии, химической технологии, обработки эксперимента, и самостоятельно составлять простейшие программы для этих целей.

Задачи курса. В результате изучения данного курса студент должен получить основные навыки программирования, изучить наиболее распространенные методы приближенных вычислений и ознакомиться с несколькими прикладными программными комплексами. Здесь не ставится задача дать фундаментальную подготовку в области профессионального программирования, хотя для некоторых специализаций это может быть оправдано. В большинстве случаев для решения задач обработки эксперимента и математического моделирования процессов уже существуют готовые программные комплексы. Однако студенты должны иметь ясное представление об основных методах приближенных вычислений и границах их применимости. Это позволит, во-первых, выбирать подходящую для решения конкретной задачи программу, во-вторых, правильно интерпретировать получаемые результаты.

Теоретические основы программирования студенты осваивают параллельно с изучением конкретного языка высокого уровня – Pascal (или Delphi). Это позволяет наряду с конкретным программированием численных методов в рамках данного курса в дальнейшем без труда освоить современные прикладные вычислительные системы – MathCad, MathLab и другие. Основной формой проведения занятий является выполнение студентами практических занятий на компьютере.

Учитывая наличие специальных курсов «Математические методы в химии», «Математическое моделирование», в рамках данной дисциплины рассматриваются следующие категории численных методов: решение нелинейных алгебраических уравнений методами дихотомии, хорд, простых итераций и Ньютона, а также проводится сравнительный анализ этих методов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Численные методы в химии» изучается в базовой части учебного плана.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Численные методы в химии».

1. Математика.

2. Информатика.
3. Обработка результатов химического эксперимента.
4. Общая и неорганическая химия.
5. Аналитическая химия.
6. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента).

Освоение дисциплины «Численные методы в химии» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин:

1. Численные методы в химии.
2. Системное моделирование химических процессов
2. Математическое моделирование.
3. Физическая химия.
4. Коллоидная химия.
5. Физико-химические методы анализа.
6. Химическая технология.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учётом основных требований информационной безопасности (ОПК-4);
- способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

1) Знать:

- Основы языка высокого уровня – DELPHI, – в той его части, которая необходима для математических вычислений (ОПК-4, ПК-5).
- Основные численные методы первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).
- Математические методы решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).

2) Уметь:

- Составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).
- Применять навыки построения алгоритмов и составления программ для использования специальных математических пакетов, таких как MathCad, MathLab (ОПК-4, ПК-5).
- Разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии (ОПК-4, ПК-5).

3) Владеть:

- Основными методами решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии и реализации их на компьютере (ОПК-4, ПК-5).
- Основными методами написания программ на языках высокого уровня (ОПК-4, ПК-5).
- Основами правильной постановки эксперимента, первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии и дальнейшей их обработки с целью получения всей информации из этих экспериментальных данных (ОПК-4, ПК-5).

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 6 зачётных единиц, 216 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Вид учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах).						Объем учебной работы с применением интерактивных методов (в часах.%)	Формы контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	Контрольные работы	СРС	КП/КР		
1	Процедуры и функции в программировании. Средства работы с файлами.	5	1-2	2		2		12		-	
2	Решение нелинейных уравнений	5	3-5	6		10		24		6/38	Рейтинг-контроль № 1
3	Аппроксимация данных, имеющих экспериментальный разброс.	5	6-9	4		10		24		4/29	
4	Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса.	5	10-13	8		8		18		4/25	Рейтинг-контроль № 2
5	Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса-Зейделя.	5	14-15	4		4		10		4/50	
6	Решение систем нелинейных алгебраических уравнений.	5	16	2		-		4		-	
7	Интерполяция таблично заданных функций.	5	17-18	10		2		16		7/58	Рейтинг-контроль № 3
	Всего			36		36		108		25/35	Экзамен (36)

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА

Часть I. Процедуры и функции. Работа с файлами

Процедуры и функции, их организация и использование в программах. Входные и выходные параметры. Формальные и фактические параметры. Параметры-значения и параметры-переменные. Локальные и глобальные переменные.

Организация взаимодействия программы с внешними файлами данных. Стандартные функции для работы с файлами при организации ввода и вывода информации.

Часть II. Решение нелинейных уравнений

Приближённое решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений. Теорема Вейерштрасса. Этапы численного решения. Этап отделения корней. Графический метод и понятие об аналитических методах. Графическое решение уравнений.

Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом деления отрезка пополам (дихотомии). Преимущества и недостатки метода.

Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом хорд,

Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом простых итераций и способы обеспечения сходимости.

Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом Ньютона. Условия применимости метода и скорость сходимости к решению.

Сравнительный анализ методов и их использование при решении задач физической химии и химической технологии..

Часть III. Аппроксимация и интерполяция функций

Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели. Нелинейный МНК.

Решение систем линейных алгебраических уравнений методами простых итераций, Зейделя и методом Гаусса с выбором главного элемента. Условия устойчивости вычислений.

Решение систем нелинейных уравнений методом Ньютона.

Интерполяция таблично заданной функции. Интерполяционные многочлены Ньютона и Лагранжа. Факторы, определяющие точность интерполяции. Понятие сходимости интерполяционного процесса. Сплаины и их свойства. Построение кубического интерполяционного сплайна.

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ

1. Процедуры и функции Ввод данных из файла и вывод в файл.
2. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методами дихотомии и хорд.
3. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методами простых итераций и Ньютона.
4. Рейтинг-контроль № 1.
5. Аппроксимация.
6. Аппроксимация (продолжение).
7. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса.
8. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса (продолжение).
9. Рейтинг-контроль № 2.
10. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса-Зейделя.
11. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса-Зейделя (продолжение).
12. Интерполяция по Ньютону.
13. Защита лабораторных работ.
14. Рейтинг-контроль № 3 (итоговый).

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Изложение теоретического материала осуществляется с применением электронных средств обучения.

Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Используются активные и интерактивные формы обучения: компьютерные симуляции вычислительных алгоритмов, разбор конкретных примеров для рассматриваемых алгоритмов. При чтении лекций могут применяться экспромтные психологические этюды.

Для оценки освоения теоретического материала студентами используются письменные контрольные работы и устный опрос.

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

Задания к рейтинг-контролю:

Рейтинг-контроль №1

1. Основные понятия теории погрешностей.
2. Какое соотношение связывает число верных знаков с погрешностью числа?
3. Что значит отделить корни уравнения?
4. Когда можно отделить корни уравнения аналитическим методом, графическим методом, машинным методом?
5. Суть итерационного метода. Каковы достаточные условия сходимости итерационной последовательности для уравнения на отрезке $[a, b]$, содержащем один корень?
6. При итерационном методе решения уравнений от исходного уравнения переходят к эквивалентному уравнению вида $x = \varphi(x)$, где φ - произвольная непрерывная функция.
7. Какая функция приводит к методу хорд, а какая к методу Ньютона? Каким образом выбираем начальное приближение в методе хорд?

Рейтинг-контроль №2

1. Каким образом выбираются начальные приближения при решении уравнения комбинированным методом?
2. Какое условие является критерием для достижения заданной точности при решении уравнения комбинированным методом?
3. Постановка задачи интерполирования. Почему приближают многочленами? Интерполяционная формула Лагранжа имеет вид: $L_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x)$. Написать в развернутом виде два первых слагаемых суммы.
4. Как связана степень многочлена с количеством узлов интерполяции?
5. Определить обобщенную степень числа.
6. Как получаются формулы приближенного дифференцирования?
7. Задача численного дифференцирования является некорректной - что это означает?
8. Суть численного интегрирования.
9. Как получаются квадратурные формулы Ньютона - Котеса?

10. Как меняется вычислительный алгоритм при изменении кратности интеграла для классических квадратурных формул и для метода Монте-Карло?

Рейтинг-контроль №3

1. К какому типу методов - прямым или итерационным относится метод главных элементов?
2. Каким образом получается эмпирическая формула?
3. Чем отличается метод наименьших квадратов от метода интерполирования?
4. Каким образом строится приближающая функция в виде различных элементарных функций?
5. Цель статистической обработки. Что значит детерминированный алгоритм?

Основные тематические направления для самостоятельной работы студентов:

Преподаватель должен ориентировать студентов на то, чтобы они учились оценивать полученные результаты. Ему необходимо обращать особое внимание на то, как студенты записывают результаты в тетрадь с монитора компьютера. Они должны записывать только верные цифры. Для этого следует преподавателю объяснять студентам о необходимости осмыслить результат, убедиться, что задача решена правильно. Он должен обратить внимание студентов на то, что при компиляции программы на языке Паскаль, выдаются сообщения о синтаксических ошибках в тексте программы, запуск программы на вычисление невозможен без исправления этих ошибок. Поэтому после прохождения компиляции у студентов может возникнуть иллюзия, что всё вычисляется верно, но это не всегда так. Преподаватель должен предложить студентам самостоятельно дополнить программу или выполнить какие-то действия с тем, чтобы они убедились, что программа выдаёт правильный результат. В каждом конкретном методе будут даны указания, что нужно делать для контроля результата.

1. Теория погрешностей. Теория погрешностей вынесена полностью на самостоятельное изучение студентами. Преподаватель должен проверить, как студенты усвоили основные понятия теории погрешностей. Особое внимание обратить на понятия предельной абсолютной погрешности и предельной относительной погрешности. Эти понятия являются весьма широкими, а именно всякое число, большее предельной погрешности, также может быть принято за предельную погрешность числа. Объяснить студентам, что точность измерения или вычисления определяется относительной погрешностью.

2. Решение уравнений с одним неизвестным. Преподаватель должен обратить внимание студентов на то, что методы отделения корней не являются универсальными, они зависят от вида уравнения и студенты должны их выбирать самостоятельно и уметь обосновать свой выбор. Преподаватель должен предложить студентам решить уравнение разными методами и сравнить

результаты по скорости сходимости. Для контроля вычислений им необходимо выдавать не только значение корня, но и значение функции в нём, и сравнивать визуально это значение с заданной точностью. Так, если точность 0.001, то значение функции в корне должно быть меньше этой величины. Дополнительно по этой теме студентам может быть предложено, рассмотреть геометрическую интерпретацию итерационных методов.

3. Интерполирование. Для определения погрешности формулы Лагранжа преподаватель должен предложить студентам выбор – решить её аналитически или с помощью вычислений на компьютере. Он должен объяснить студентам, что результат можно записать только тогда, когда будет определена погрешность. Для контроля вычислений преподавателю необходимо проверить значения интерполяционного многочлена в узловых точках, они должны точно совпадать со значениями исходной функции в узлах, и только после этого студент может использовать интерполяционный многочлен для произвольных точек.

4. Численное дифференцирование и интегрирование. При изучении численного дифференцирования обратить внимание студентов на то, что данная задача является некорректной. Решение этой задачи опирается на интерполирование, в котором мера близости приближающей функции – это совпадение в узлах с исходной функцией. Действительно, близость друг к другу ординат двух кривых и ещё не гарантирует близости на этом отрезке их производных и, т.е. малого расхождения угловых коэффициентов касательных к рассматриваемым кривым при одинаковых значениях аргумента. При изучении численного интегрирования обратить внимание студентов, что вывод квадратурных формул изложен в общем виде, для произвольного n , а затем приведены их частные случаи. Студенты вычисляют интеграл по разным квадратурным формулам, выполняют, так называемый вычислительный эксперимент, и определяют какая из формул более точная при равных условиях. Дополнительно в этой теме студенты могут научиться вычислять коэффициенты Котеса при различных значениях n .

5. Решение систем линейных алгебраических уравнений. При решении систем линейных алгебраических уравнений, число неизвестных может достигать нескольких десятков, сотен и даже тысяч. Преподавателю следует обратить внимание студентов на то, что необходимо учитывать не только время, требуемое для проведения большого количества арифметических операций в каком – либо методе, но и на то, что происходит накопление ошибок округления, появляющихся в результате большого числа операций - это является очень серьёзной проблемой. Обратить внимание студентов на то, что математическое изложение метода главных элементов достаточно простое, но реализация этого метода на алгоритмическом языке для компьютера весьма сложная задача. Поэтому, чтобы уменьшить вычислительную погрешность им, необходимо использовать метод Гаусса с выбором главных элементов. Дополнительно при вычислении обратной матрицы, студенты должны уметь расписать компактную формулу в развёрнутом виде.

Таким образом, они представят общий объём вычислений - это решение систем уравнений, относительно неизвестных.

6. Метод наименьших квадратов. Преподаватель должен обратить внимание студентов на отличие приближения функции по методу наименьших квадратов от приближения функции методом интерполирования. Преподаватель предлагает студентам таблично заданную функцию приближать различными аналитическими функциями. При сравнении результатов аппроксимирования определяющим является величина суммарной ошибки, где σ - По величине они должны самостоятельно сделать вывод - какая функция лучше приближает данную таблицу. Величины используются для контроля вычислений. Они должны быть небольшими по значениям, а знаки этих величин должны чередоваться. Дополнительно студенты могут выполнить самостоятельно аппроксимирование по методу наименьших квадратов логарифмической и гиперболической функциями.

Экзаменационные вопросы

1. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом деления отрезка пополам.
2. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом хорд.
3. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом простых итераций.
4. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методом Ньютона.
5. Аппроксимация данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Линеаризация. Неполиномиальная аппроксимация.
6. Аппроксимация данных методом наименьших квадратов (МНК). Нелинейный МНК.
7. Решение систем линейных уравнений методом Гаусса. Прямой ход.
8. Решение систем линейных уравнений методом Гаусса. Обратный ход.
9. Решение систем линейных уравнений методом простых итераций.
10. Решение систем линейных уравнений методом Гаусса-Зейделя.
11. Решение систем линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей методом прогонки.
12. Решение систем нелинейных уравнений методом Ньютона.
13. Интерполяция функций методом Ньютона.
14. Интерполяция функций методом Лагранжа.
15. Интерполяция функций методом кубических сплайнов.
16. Методы численного дифференцирования.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основная литература:

1. Е.В. Карманова. Численные методы. 2-е изд., стер. М.: ФЛИНТА, 2015
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785976523036.html>.
2. Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. Численные методы. 8-е изд. (эл.). М. БИНОМ. Лаборатория знаний. 2015. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326167.html>.
3. Н. С. Бахвалов, А. В. Лапин, Е. В. Чижонков. Численные методы в задачах и упражнениях. под ред. В. А. Садовниченко. 4-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329809.html>.
4. Королёв А.Л. Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум. 2-е изд. (эл.). М. БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html>.

Дополнительная литература:

1. Г.А. Кокотушкин, А.А. Федотов, П.В. Храпов. Численные методы алгебры и приближения функций : метод. указания к выполнению лабораторных работ по курсу "Численные методы". М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0006.html.
2. Численные методы решения задач диффузии: Метод. указания к компьютерному практикуму по курсу "Уравнения математической физики". - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0434.html.
3. Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. Емельянов. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: КолосС. 2008. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953206310.html>

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.

1. Язык программирования Pascal.
2. Интегрированная среда разработки программ Borland Delphi.
3. <http://www.y10k.ru/books/> 4. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
5. <http://www.sciencedirect.com>
6. <http://chemteq.ru/lib/book>
7. <http://www.chem.msu.su/rus>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор.

На лабораторных занятиях используются компьютеры и соответствующее программное обеспечение.

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на 2015/2016 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.15 года

Заведующий кафедрой

Кухтин

Рабочая программа одобрена на 2016/2017 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1/1 от 5.09.16 года

Заведующий кафедрой

Кухтин

Рабочая программа одобрена на 2017/2018 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.17 года

Заведующий кафедрой

Кухтин

Рабочая программа одобрена на 2018/2019 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 3.09.18 года

Заведующий кафедрой

Кухтин