

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 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Обработка результатов химического эксперимента

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)
3	4 (144)	18	36	-	90	Зачёт с оценкой
Итого	4 (144)	18	36	-	90	Зачёт с оценкой

Владимир, 2015

Жмс

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями дисциплины «Обработка результатов химического эксперимента» 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.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Обработка результатов химического эксперимента» изучается в базовой части учебного плана.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Обработка результатов химического эксперимента».

1. Математика.
2. Информатика.
3. Общая и неорганическая химия.
4. Аналитическая химия.

5. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента).
6. Философия (категории и законы материалистической диалектики, теория познания).

Освоение дисциплины «Обработка результатов химического эксперимента» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин:

1. Численные методы в химии.
2. Системное моделирование химических процессов
2. Математическое моделирование.
3. Физическая химия.
4. Строение вещества.
5. Коллоидная химия.
6. Физико-химические методы анализа.
7. 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:

- Основные принципы построения вычислительных алгоритмов для решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).
- 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).

2) Уметь:

- Мысленно выстраивать основу алгоритма при решении задач химии, физической химии и химической технологии для его дальнейшей компьютерной реализации (ОПК-4, ПК-5).

- Составлять простейшие программы на языке DELPHI для реализации решения указанных задач (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 построения вычислительных алгоритмов для решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).
- Основными методами написания простейших программ на языках высокого уровня (ОПК-4, ПК-5).
- Основами правильной постановки эксперимента и первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4, ПК-5).

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётные единицы, 144 часа.

№ 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	Основные методы построения алгоритмов обработки экспериментальных данных	3	1	2	4			12		3/50	Рейтинг-контроль № 1
2	Язык программирования Pascal и интегрированная среда DELPHI	3	3-7	5	10			24		12/80	Рейтинг-контроль № 2
3	Разветвляющиеся алгоритмы	3	7-9	2	4			10		4/67	
4	Циклические алгоритмы	3	9-13	4	8			18		9/75	
5	Массивы чисел при представлении данных эксперимента	3	13-15	3	6			18		6/67	
6	Итерационные циклы	3	17	2	4			8		2/33	Рейтинг-контроль . № 3
	Всего			18	36			90		36/67	Зачёт с оц.

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА

Часть I. Программирование

Алгоритм. Использование алгоритмов при обработке результатов химического эксперимента. Языки низкого и высокого уровня. Интерпретация и трансляция текста программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем.

Основные методы построения алгоритмов и использование блок-схем. Линейные и разветвляющиеся алгоритмы.

Циклические алгоритмы, параметр цикла и организация работы цикла.

Работа с массивами чисел. Классификация массивов и их представление. Алгоритмы вычисления суммы и произведения, поиска максимального и минимального элемента, задача ранжирования.

Итерационные циклы. Особенности выбора параметра цикла. Применение итерационных циклов.

Оптимизация алгоритмов.

Часть II. Язык программирования DELPHI

Практикум программирования на языке Pascal. Типы величин. Константы и переменные. Массивы данных. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Использование стандартных математических функций.

Структура программы: раздел описания и раздел операторов. Логические выражения. Использование операций отношения и логических операций and, or, not.

Операторы: присваивания, условный, операторы циклов, ввода и вывода, оператор выбора.

Часть II. Погрешности компьютерных вычислений

Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел. Машинный ноль. Источники и классификация погрешностей. Ошибки округления. Накопление погрешностей округления. Абсолютная и относительная погрешности результатов основных арифметических операций. Потеря точности при операциях сложения и вычитания и накопление ошибок. Устойчивость вычислительных алгоритмов.

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

1. Основные методы построения алгоритмов: разветвляющиеся алгоритмы.
2. Основные методы построения алгоритмов: циклические алгоритмы.
3. Работа с массивами чисел. Алгоритмы поиска максимального и минимального элемента.
4. Задача ранжирования.
5. Алгоритмы вычисления суммы и произведения.
6. Итерационные циклы.
7. Рейтинг-контроль № 1.
8. Программирование на языке Pascal. Арифметические выражения.
9. Работа в интегрированной среде DELPHI 7.0. Структура программы. Операторы присваивания, ввода и вывода.
10. Логические выражения. Условный оператор. Программирование разветвляющихся алгоритмов.
11. Операторы циклов. Программирование циклических алгоритмов.
12. Рейтинг-контроль № 2.
13. Массивы данных. Программирование задачи накопления суммы и произведения.
14. Программирование итерационных циклов.
15. 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.

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 И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

Задания к рейтинг-контролю:

Рейтинг-контроль №1

1. $y = \begin{cases} 4\sin x - 1, & \text{если } x < 1 \\ \ln x + 5, & \text{если } x \geq 1 \end{cases};$
2. $y = \begin{cases} 25 - x, & \text{если } x < 0 \\ \cos^2 x - x, & \text{если } x \geq 0 \end{cases};$
3. $y = \begin{cases} \sqrt{4x^2 + 1}, & \text{если } x \leq 2 \\ e^x - 1, & \text{если } x > 2 \end{cases};$
4. $y = \begin{cases} \frac{x^2 + 5}{x + 1}, & \text{если } x > -1 \\ \ln|x + 2|, & \text{если } x \leq -1 \end{cases};$
5. $y = \begin{cases} \frac{x + 1}{3x + 6}, & \text{если } x < -2 \\ x^2 + 5, & \text{если } x \geq -2 \end{cases};$
6. $y = \begin{cases} x + \sin x, & \text{если } x > 0 \\ x^3 - 2, & \text{если } x \leq 0 \end{cases};$
7. $y = \begin{cases} 2^x, & \text{если } x < -3 \\ (x + 1)^6 - 1, & \text{если } x \geq -3 \end{cases};$
8. $y = \begin{cases} 4\sin^2 x + 1, & \text{если } x < 1 \\ \ln x + 5x, & \text{если } x \geq 1 \end{cases};$
9. $y = \begin{cases} -x + 5, & \text{если } x < 10 \\ \cos^2 x + 2x, & \text{если } x \geq 10 \end{cases};$
10. $y = \begin{cases} \sqrt{4x^2 + 3}, & \text{если } x < 3 \\ e^{x+1}, & \text{если } x \geq 3 \end{cases};$

$$11. y = \begin{cases} 0.5 \sin x + 1, & \text{если } x \leq 4 \\ -2x + 3, & \text{если } x > 4 \end{cases};$$

$$12. y = \begin{cases} 1 - \cos x, & \text{если } x \leq 5 \\ x^2 + 2, & \text{если } x > 5 \end{cases};$$

Рейтинг-контроль №2

	Функция	Начальные значения аргументов	Шаг изменения аргументов	Число циклов
1	2	3	4	5
1	$y = \frac{4 \sin x - b^3}{\ln x + 5}$	$x_0 = 0.4$ $b_0 = -27$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta b = 3.5$	$n = 8$ $k = 3$
2	$y = \frac{25 - x^3}{\cos^2 x - a^4}$	$x_0 = -1.7$ $a_0 = 15$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta a = 0.5$	$n = 5$ $k = 4$
3	$y = \frac{\sqrt{4 x }}{e^x - b^3}$	$x_0 = -1.2$ $b_0 = 100$	$\Delta x = 0.3$ $\Delta b = 2.5$	$n = 6$ $k = 3$
4	$y = \frac{a^4 - \sin a}{a^3 - 2ax}$	$x_0 = 1.6$ $a_0 = -30$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta a = 5$	$n = 6$ $k = 4$
5	$y = \frac{4 \sin x - 1}{\ln a}$	$x_0 = -10.5$ $a_0 = 3.4$	$\Delta x = 0.5$ $\Delta a = 0.4$	$n = 6$ $k = 4$
6	$y = (x^2 - b)(3x + 5)$	$x_0 = 2.4$ $b_0 = -23.5$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta b = 1.5$	$n = 5$ $k = 6$
7	$y = e^{-a}(3a^2 - x)$	$x_0 = 2.65$ $a_0 = 1.85$	$\Delta x = 0.15$ $\Delta a = 0.05$	$n = 5$ $k = 5$
8	$y = \frac{b^2 - x^3}{\cos^2(2x)}$	$x_0 = 0.98$ $b_0 = 0.35$	$\Delta x = 0.04$ $\Delta b = 0.05$	$n = 6$ $k = 4$
9	$y = \cos^2 x - ax$	$x_0 = 1.6$ $a_0 = 12$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta a = 0.5$	$n = 6$ $k = 3$
10	$y = 2 \lg(x + 0.2a^2)$	$x_0 = 0.8$ $a_0 = 1.5$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta a = 0.2$	$n = 6$ $k = 3$
11	$y = \lg(x^2 - 5a)$	$x_0 = 2.9$ $a_0 = 54$	$\Delta x = 0.3$ $\Delta a = 2$	$n = 5$ $k = 4$

12	$y = e^x(x - a^2)$	$x_0 = -1.85$ $a_0 = 1.28$	$\Delta x = 0.05$ $\Delta a = 0.02$	$n = 8$ $k = 3$
13	$z = e^x - 2xy + y^2$	$x_0 = -5.4$ $y_0 = -28$	$\Delta x = 0.4$ $\Delta y = 2$	$n = 6$ $k = 4$
14	$z = \sin x + \cos y - xy^2$	$x_0 = -5.2$ $y_0 = 6.4$	$\Delta x = 0.4$ $\Delta y = 0.2$	$n = 3$ $k = 5$
1	2	3	4	5
15	$z = \frac{x^2 - y^2}{2xy}$	$x_0 = 0.25$ $y_0 = 9.1$	$\Delta x = 0.5$ $\Delta y = 0.1$	$n = 4$ $k = 4$
16	$z = \frac{\sqrt{ x + y }}{x^2 + y^2}$	$x_0 = -12$ $y_0 = 8.5$	$\Delta x = 2$ $\Delta y = 2.5$	$n = 5$ $k = 4$
17	$z = x^2 - xy + \sin y$	$x_0 = 0.93$ $y_0 = 1.4$	$\Delta x = 0.02$ $\Delta y = 0.1$	$n = 4$ $k = 5$
18	$z = \cos^2 x + 2xy$	$x_0 = -3.5$ $y_0 = 12.5$	$\Delta x = 0.5$ $\Delta y = 0.5$	$n = 5$ $k = 3$
19	$z = x^2 + y^2 - \sin y$	$x_0 = -2.5$ $y_0 = 5.0$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 1$	$n = 2$ $k = 10$
20	$z = \ln(x^2 - xy)$	$x_0 = 0.85$ $y_0 = 3.8$	$\Delta x = 0.05$ $\Delta y = 0.4$	$n = 3$ $k = 6$
21	$z = 2\sin^2(x - y) - x$	$x_0 = 7.75$ $y_0 = 2.1$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.1$	$n = 4$ $k = 5$
22	$z = \frac{\sin(at)}{t} + t^2$	$a_0 = 6$ $t_0 = 0.1$	$\Delta a = 0.5$ $\Delta t = 0.2$	$n = 3$ $k = 7$
23	$z = e^{-x} + 2e^{-y} + 4$	$x_0 = 5$ $y_0 = 2.4$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.2$	$n = 2$ $k = 9$
24	$z = (e^{1.2x} - 1)(e^{-y} + y)$	$x_0 = 1.75$ $y_0 = 5.4$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.2$	$n = 3$ $k = 8$
25	$z = \sin(x^2 + y^2) - 2xy$	$x_0 = 5.5$ $y_0 = 4.0$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.25$	$n = 4$ $k = 7$
26	$z = \sin x(1 - tg(xy))$	$x_0 = 4.5$ $y_0 = -2.2$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta y = 0.1$	$n = 3$ $k = 6$

27	$z = x^2 + \sin(xy) - y^2$	$x_0 = 3.6$ $y_0 = 0.4$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta y = 0.2$	$n = 3$ $k = 7$
28	$z = x^2 y^2 (1 - \sin x)$	$x_0 = 1$ $y_0 = 15$	$\Delta x = 0.3$ $\Delta y = 5$	$n = 3$ $k = 7$

Рейтинг-контроль №3

- $1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$; при $x = 2$; (это e^x).
- $1 + \frac{x \ln a}{1!} + \frac{(x \ln a)^2}{2!} + \frac{(x \ln a)^3}{3!} + \dots + \frac{(x \ln a)^n}{n!} + \dots$; при $x = 2$; $a = 10$; (это a^x).
- $x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots + (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1} \pm \dots$; при $x = 0.5$; (это $\ln(1+x)$).
- $-\left(x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4} + \dots + \frac{x^n}{n} + \dots\right)$; при $x = 0.5$; (это $\ln(1-x)$).
- $2\left(x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} + \frac{x^7}{7} + \dots + \frac{x^{2n+1}}{2n+1} + \dots\right)$; при $x = 0.5$; (это $\ln \frac{1+x}{1-x}$ или $2 \operatorname{arctg} x$).
- $4\left(1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \dots + \frac{(-1)^n}{2n+1} + \dots\right)$; (это π).
- $x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \pm \dots$; при $x = 1$; (это $\sin x$).
- $1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} \pm \dots$; при $x = -1$; (это $\cos x$).
- $\frac{1}{1 \cdot 2} + \frac{1}{2 \cdot 3} + \frac{1}{3 \cdot 4} + \dots + \frac{1}{n(n+1)} + \dots$; здесь $n = 1, 2, 3, \dots$; (это 1).
- $\frac{\pi}{2} - \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} \pm \dots\right)$; при $x = -0.5$; (это $\operatorname{arctg} x$).
- $\frac{\pi}{2} - \frac{1}{x} + \frac{1}{3x^3} - \frac{1}{5x^5} + \frac{1}{7x^7} - \dots + (-1)^{n-1} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)x^{2n+1}} \pm \dots$; при $x = 3$; (это $\operatorname{arctg} x$).
- $\frac{1}{x} + \frac{1}{3x^3} + \frac{1}{5x^5} + \frac{1}{7x^7} - \dots + \frac{1}{(2n+1)x^{2n+1}} + \dots$; при $x = 2$; (это $\operatorname{arctg} x$).

Контрольные задания для самостоятельной работы студентов:

Задание №1

$$1. y = \begin{cases} x, & \text{при } -10 < x < 0 \\ \sin x, & \text{при } 0 < x < 20 \end{cases};$$

$$\begin{aligned}
2. \ y &= \begin{cases} \ln|x|, & \text{при } -2 < x < -1; \\ \lg x, & \text{при } -1 < x < 0 \end{cases}; \\
3. \ y &= \begin{cases} x^2 - x, & \text{при } -5 < x < 0; \\ x^3 + \sin x, & \text{при } 0 < x < 5 \end{cases}; \\
4. \ y &= \begin{cases} \arcsin x, & \text{при } -1 < x < 0; \\ 1 - \cos x, & \text{при } 0 < x < 1 \end{cases}; \\
5. \ y &= \begin{cases} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|, & \text{при } 2 < x < 3; \\ x^3, & \text{при } 3 < x < 6 \end{cases}; \\
6. \ y &= \begin{cases} \frac{1}{x^2 + 1}, & \text{при } -5 < x < 0; \\ x^2 + 1, & \text{при } 0 < x < 5 \end{cases}; \\
7. \ y &= \begin{cases} e^x, & \text{при } -5 < x < 0; \\ 1 - e^x, & \text{при } 0 < x < 5 \end{cases}; \\
8. \ y &= \begin{cases} \frac{x^2 - 1}{x^2 + 1}, & \text{при } -7 < x < 0; \\ x^2 - 1, & \text{при } 0 < x < 7 \end{cases}; \\
9. \ y &= \begin{cases} \ln|1+x|, & \text{при } -2 < x < 0; \\ \ln|1-x|, & \text{при } 0 < x < 2 \end{cases}; \\
10. \ y &= \begin{cases} \sin e^{-x}, & \text{при } -20 < x < 0; \\ \cos e^{-x}, & \text{при } 0 < x < 20 \end{cases}.
\end{aligned}$$

Задание №2

	Функция	Начальные значения аргументов	Шаг изменения аргументов	Число циклов
1	2	3	4	5
1	$y = \frac{4 \sin x - b^3}{\ln x + 5}$	$x_0 = 0.4$ $b_0 = -27$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta b = 3.5$	$n = 8$ $k = 3$
2	$y = \frac{25 - x^3}{\cos^2 x - a^4}$	$x_0 = -1.7$ $a_0 = 15$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta a = 0.5$	$n = 5$ $k = 4$
3	$y = \frac{\sqrt{4 x }}{e^x - b^3}$	$x_0 = -1.2$ $b_0 = 100$	$\Delta x = 0.3$ $\Delta b = 2.5$	$n = 6$ $k = 3$

4	$y = \frac{a^4 - \sin a}{a^3 - 2ax}$	$x_0 = 1.6$ $a_0 = -30$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta a = 5$	$n = 6$ $k = 4$
5	$y = \frac{4 \sin x - 1}{\ln a}$	$x_0 = -10.5$ $a_0 = 3.4$	$\Delta x = 0.5$ $\Delta a = 0.4$	$n = 6$ $k = 4$
6	$y = (x^2 - b)(3x + 5)$	$x_0 = 2.4$ $b_0 = -23.5$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta b = 1.5$	$n = 5$ $k = 6$
7	$y = e^{-a}(3a^2 - x)$	$x_0 = 2.65$ $a_0 = 1.85$	$\Delta x = 0.15$ $\Delta a = 0.05$	$n = 5$ $k = 5$
8	$y = \frac{b^2 - x^3}{\cos^2(2x)}$	$x_0 = 0.98$ $b_0 = 0.35$	$\Delta x = 0.04$ $\Delta b = 0.05$	$n = 6$ $k = 4$
9	$y = \cos^2 x - ax$	$x_0 = 1.6$ $a_0 = 12$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta a = 0.5$	$n = 6$ $k = 3$
10	$y = 2 \lg(x + 0.2a^2)$	$x_0 = 0.8$ $a_0 = 1.5$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta a = 0.2$	$n = 6$ $k = 3$
11	$y = \lg(x^2 - 5a)$	$x_0 = 2.9$ $a_0 = 54$	$\Delta x = 0.3$ $\Delta a = 2$	$n = 5$ $k = 4$
12	$y = e^x(x - a^2)$	$x_0 = -1.85$ $a_0 = 1.28$	$\Delta x = 0.05$ $\Delta a = 0.02$	$n = 8$ $k = 3$
13	$z = e^x - 2xy + y^2$	$x_0 = -5.4$ $y_0 = -28$	$\Delta x = 0.4$ $\Delta y = 2$	$n = 6$ $k = 4$
14	$z = \sin x + \cos y - xy^2$	$x_0 = -5.2$ $y_0 = 6.4$	$\Delta x = 0.4$ $\Delta y = 0.2$	$n = 3$ $k = 5$
1	2	3	4	5
15	$z = \frac{x^2 - y^2}{2xy}$	$x_0 = 0.25$ $y_0 = 9.1$	$\Delta x = 0.5$ $\Delta y = 0.1$	$n = 4$ $k = 4$
16	$z = \frac{\sqrt{ x + y }}{x^2 + y^2}$	$x_0 = -12$ $y_0 = 8.5$	$\Delta x = 2$ $\Delta y = 2.5$	$n = 5$ $k = 4$
17	$z = x^2 - xy + \sin y$	$x_0 = 0.93$ $y_0 = 1.4$	$\Delta x = 0.02$ $\Delta y = 0.1$	$n = 4$ $k = 5$
18	$z = \cos^2 x + 2xy$	$x_0 = -3.5$ $y_0 = 12.5$	$\Delta x = 0.5$ $\Delta y = 0.5$	$n = 5$ $k = 3$

19	$z = x^2 + y^2 - \sin y$	$x_0 = -2.5$ $y_0 = 5.0$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 1$	$n = 2$ $k = 10$
20	$z = \ln(x^2 - xy)$	$x_0 = 0.85$ $y_0 = 3.8$	$\Delta x = 0.05$ $\Delta y = 0.4$	$n = 3$ $k = 6$
21	$z = 2 \sin^2(x - y) - x$	$x_0 = 7.75$ $y_0 = 2.1$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.1$	$n = 4$ $k = 5$
22	$z = \frac{\sin(at)}{t} + t^2$	$a_0 = 6$ $t_0 = 0.1$	$\Delta a = 0.5$ $\Delta t = 0.2$	$n = 3$ $k = 7$
23	$z = e^{-x} + 2e^{-y} + 4$	$x_0 = 5$ $y_0 = 2.4$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.2$	$n = 2$ $k = 9$
24	$z = (e^{1.2x} - 1)(e^{-y} + y)$	$x_0 = 1.75$ $y_0 = 5.4$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.2$	$n = 3$ $k = 8$
25	$z = \sin(x^2 + y^2) - 2xy$	$x_0 = 5.5$ $y_0 = 4.0$	$\Delta x = 0.25$ $\Delta y = 0.25$	$n = 4$ $k = 7$
26	$z = \sin x(1 - \operatorname{tg}(xy))$	$x_0 = 4.5$ $y_0 = -2.2$	$\Delta x = 0.1$ $\Delta y = 0.1$	$n = 3$ $k = 6$
27	$z = x^2 + \sin(xy) - y^2$	$x_0 = 3.6$ $y_0 = 0.4$	$\Delta x = 0.2$ $\Delta y = 0.2$	$n = 3$ $k = 7$
28	$z = x^2 y^2 (1 - \sin x)$	$x_0 = 1$ $y_0 = 15$	$\Delta x = 0.3$ $\Delta y = 5$	$n = 3$ $k = 7$

Задание №3

13. $1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \dots + \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \dots$; при $x = 1$; (это $\operatorname{ch} x$).

14. $x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \dots + \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots$; при $x = 1$; (это $\operatorname{sh} x$).

15. $2 \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{3x^3} + \frac{1}{5x^5} + \frac{1}{7x^7} + \dots + \frac{1}{(2n+1)x^{2n+1}} + \dots \right)$; при $x = 2$; (это $\ln \frac{1+x}{1-x}$ или $2 \operatorname{arctg} x$).

16. $x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} \pm \dots$; при $x = -0.5$; (это $\operatorname{arctg} x$).

17. $2 \left(\frac{x-1}{x+1} + \frac{(x-1)^3}{3(x+1)^3} + \frac{(x-1)^5}{5(x+1)^5} + \dots + \frac{(x-1)^{2n+1}}{(2n+1)(x+1)^{2n+1}} + \dots \right)$; при $x = 3$; (это $\ln x$).

18. $(x-1) - \frac{(x-1)^2}{2} + \frac{(x-1)^3}{3} - \dots + (-1)^n \frac{(x-1)^n}{n} \pm \dots$; при $x = 2$; (это $\ln x$).

19. $\frac{(x-1)}{x} + \frac{(x-1)^2}{2x^2} + \frac{(x-1)^3}{3x^3} + \dots + \frac{(x-1)^n}{nx^n} + \dots$; при $x = 2.5$; (это $\ln x$).
20. $-\frac{\pi}{2} - \frac{1}{x} + \frac{1}{3x^3} - \frac{1}{5x^5} + \frac{1}{7x^7} - \dots + \frac{(-1)^{n+1}}{(2n+1)x^{2n+1}} \pm \dots$; при $x = -2$; (это $\arctg x$).
21. $x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} + \frac{x^7}{7} + \dots + \frac{x^{2n+1}}{2n+1} + \dots$; при $x = -0.5$; (это $\arctg x$).
22. $\cos x + \frac{1}{3}\cos 3x + \frac{1}{5}\cos 5x + \dots + \frac{\cos(2n+1)x}{2n+1} + \dots$; при $x = 2$; (это $\frac{1}{2}\ln \ctg \frac{x}{2}$).

Экзаменационные вопросы

1. Понятие алгоритма. Языки низкого и высокого уровня. Компиляция и линковка текста программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем.
2. Основные блоки графического представления алгоритмов и их характеристика.
3. Основные методы построения алгоритмов с помощью блок-схем: разветвляющиеся алгоритмы. Логические выражения, правила их построения. Операции сравнения и логические операции.
4. Основные методы построения алгоритмов с помощью блок-схем: циклические алгоритмы. Блок цикла.
5. Работа с массивами чисел. Ввод двумерных массивов (матриц) по строкам, по столбцам.
6. Алгоритмы поиска максимального и минимального элемента одномерных массивов.
7. Алгоритмы вычисления суммы и произведения.
8. Задача ранжирования.
9. Итерационные циклы.
10. Программирование на языке Pascal. Типы величин. Константы и переменные. Массивы данных.
11. Pascal. Операции и приоритет операций. Выражения. Арифметические выражения, правила их построения.
12. Pascal. Структура программы.
13. Pascal. Операторы присваивания, ввода и вывода.
14. Pascal. Логические выражения. Условный оператор.
15. Pascal. Операторы циклов.
16. Pascal. Массивы данных.
17. Pascal. Функции, описание и обращение. Формальные и фактические, входные и выходные параметры.

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

Основная литература:

1. Р.Г. Сафин, А.И. Иванов, Н.Ф. Тимербаев. Основы научных исследований. Организация и планирование эксперимента : учебное пособие. Казан. нац. исслед. технол. ун-т. -Казань : Изд-во КНИТУ. 2013. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788214122.html>.
2. А.Л. Королёв. Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум. 2-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html>.
3. Ф.И. Карманов, В.А. Острейковский. Статистические методы обработки экспериментальных данных. Лабораторный практикум с использованием пакета MathCad: Учеб. Пособие. М.: Абрис, 2012. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785437200599.html>.
4. Н. С. Бахвалов, А. В. Лапин, Е. В. Чижонков. Численные методы в задачах и упражнениях: учебное пособие. ред. В. А. Садовниченко. 4-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329809.html>.
5. Санников Е.В. Курс практического программирования в Delphi. Объектно - ориентированное программирование. М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2013. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913591227.html>.

Дополнительная литература:

1. Назаров Н.Г. Практическое руководство по решению измерительных задач на основе оптимальных планов измерений...: Учеб. пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785703829585.html>.
2. 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.
3. С. В. Федотова. Создание Windows-приложений в среде Delphi. - М.: СОЛОН-Пресс, 2010. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5980031766.html>.
4. В.П. Осипов. Практикум по программированию на языке DELPHI : в 2 ч. Ч. 1 : Структурное программирование : учеб. Пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0359.html.
5. Курс Delphi для начинающих. Полигон нестандартных задач. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2010. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN598003241.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.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки – 04.03.01 – “Химия” (бакалавриат)

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент

А.В. Стрельников научный сотрудник ООО “БМТ”
Стрельников А.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 7/1 от 14.04. 2015 г.

Заведующий кафедрой *Кухтин*

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 04.03.01 – “Химия”

Протокол № 7/1 от 16.04. 2015 г.

Председатель комиссии *Кухтин*

Программа переутверждена:

на 2015/2016 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.15 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на 2016/2017 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1/1 от 5.09.16 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на 2017/2018 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.17 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на 2018/2019 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 30.09.18 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на _____ учебный год. Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года
Зав. кафедрой _____