

2017

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



УТВЕРЖДАЮ
 Проректор
 по образовательной деятельности
 А.А. Панфилов

« 03 » 09 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Направление подготовки – 04.03.01 – Химия

Профиль/программа подготовки – Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов окружающей среды

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточной аттестации (экзамен/зачет/зачет с оценкой)
6	6/216	36		36	108	Экзамен (36)
Итого	6/216	36		36	108	Экзамен (36)

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Численные методы в химии»: 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: 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 «Численные методы в химии» изучается в базовой части учебного плана.

Пререквизиты 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).

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП

Код формируемых компетенций	Уровень освоения компетенции ¹	Планируемые результаты обучения по дисциплине характеризующие этапы формирования компетенций (показатели освоения компетенции)
1	2	3
ОПК-5	частичное	<p><i>Знать:</i> основы языка высокого уровня – DELPHI, – в той его части, которая необходима для математических вычислений, основные численные методы первичной обработки экспериментальных данных химии, физической химии и химической технологии, математические методы решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии.</p> <p><i>Уметь:</i> составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач химии, физической химии и химической технологии, применять навыки построения алгоритмов и составления программ для использования специальных математических пакетов, таких как MathCad, MathLab, разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии.</p> <p><i>Владеть:</i> основными методами решения прикладных задач химии, физической химии и химической технологии и реализации их на компьютере, основными методами написания программ на языках высокого уровня, 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.</p> <p>.</p>

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоёмкость дисциплины составляет 6 зачётных единиц, 216 часа.

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем 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 текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	СРС		
1	Процедуры и функции в программировании. Средства работы с файлами.	6	1-2	2		2	12		
2	Решение нелинейных уравнений.	6	3-5	6		10	12	6/38	Рейтинг-контроль № 1
3	Аппроксимация данных, имеющих экспериментальный разброс.	6	6-9	4		10	12	4/29	
4	Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса.	6	10-13	8		8	20	4/25	Рейтинг-контроль. № 2
5	Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса-Зейделя.	6	14-15	4		4	10	4/50	
6	Решение систем нелинейных алгебраических уравнений.	6	16	2			6		
7	Интерполяция таблично заданных функций	6	17-18	10		2		7/58	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 5 семестр:				36		36	108	25/36	Экзамен (36)
Наличие в дисциплине КП/КР									
Итого по дисциплине				36		36	108	25/36	Экзамен (36)

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел I. Процедуры и функции. Работа с файлами

Тема 1. Процедуры и функции

Содержание темы. 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.

Тема 2. Работа с файлами

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

Раздел II. Решение нелинейных уравнений

Тема 3. Приближённое решение нелинейных уравнений

Содержание темы. 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.

Тема 4. Решение уравнений для общих случаев

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

Тема 5. Решение уравнений для дифференцируемых функций

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.

Раздел III. Аппроксимация функций и решение систем уравнений

Тема 6. Аппроксимация функций методом наименьших квадратов

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

Тема 7. Решение систем линейных алгебраических уравнений

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

Тема 8. Решение систем нелинейных уравнений

Содержание темы. Решение систем нелинейных уравнений методом Ньютона.

Раздел IV. Интерполяция функций

Тема 9. Интерполяция функций

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

Содержание лабораторных занятий по дисциплине

Тема 1. Процедуры и функции Ввод данных из файла и вывод в файл.

Тема 2. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методами дихотомии и хорд.

Тема 3. Решение нелинейных и трансцендентных алгебраических уравнений методами простых итераций и Ньютона.

Тема 4. Аппроксимация.

Тема 5. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса.

Тема 6. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса-Зейделя.

Тема 7. Интерполяция по Ньютону.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В преподавании дисциплины «Численные методы в химии» используются разнообразные образовательные технологии как традиционные, так и с применением активных и интерактивных методов обучения.

Активные и интерактивные методы обучения:

- *Интерактивная лекция (тема № 3, 4, 6);*
- *Групповая дискуссия (тема № 6, 9);*

- Тренинг (тема № 1, 2, 6);
- Анализ ситуаций (тема № 3, 6, 9);
- Применение имитационных моделей (тема № 2, 6);
- Разбор конкретных ситуаций (тема № 6, 9).

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

Текущий контроль успеваемости приводится по результатам рейтинг-контроля по следующим контрольным вопросам:

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 и 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:
$$P(x) = \sum_{k=0}^{n-1} y_k L_k(x)$$
. Написать в развернутом виде два первых слагаемых суммы.

4. Как связана степень многочлена с количеством узлов интерполяции?
5. Определить обобщённую 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?

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины.

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.

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы студентов

Нелинейные уравнения

Задача 1. Методом бисекции найти решение нелинейного уравнения на отрезке $[a;b]$ с точностью $\varepsilon=10^{-2}$. Выбрав полученное решение в качестве начального приближения, найти решение уравнения методом простой итерации с точностью $\varepsilon=10^{-4}$. Для метода простой итерации обосновать сходимость и оценить достаточное для достижения заданной точности число итераций.

Задача 2. Отделить корни нелинейного уравнения аналитически

$$2\arccotgx - x + 3 = 0$$

Задача 3. Отделить корни нелинейного уравнения аналитически и уточнить один из них методом проб с точностью до 0,01.

$$3x^4 - 8x^3 - 18x^2 + 2 = 0$$

Задача 4. Отделить корни нелинейного уравнения графически (например, в среде EXCEL) уточнить один из них методом проб с точностью до 0,01.

$$x^2 - 20\sin x = 0$$

Задача 5. Отделите корни уравнения графически и уточните один из них методом хорд с точностью до 0,001. Уточните один из корней этого уравнения методом касательных с точностью до 0,001.

$$x - \sqrt{-\cos 0.387x} = 0$$

Задача 6. Отделить корни уравнения графически и уточнить один из них методом итераций с точностью до 0,001.

$$x + 1 - \sqrt{x} = 1$$

Задача 7. На отрезке $[0;2]$ методом Ньютона найти корень уравнения $-x^3 - 2x^2 - 4x + 10 = 0$ с точностью 0,01.

Задача 8. Методом хорд найти отрицательный корень уравнения $x^3 - 2x^2 - 4x + 7 = 0$ с точностью 0,0001. Требуется предварительное построение графика функции и отделение корней.

Задача 9. Решить нелинейные уравнения с точностью до 0.001.

$$1) x^3 - 12x - 5 = 0 \quad (x > 0),$$

$$2) \tan x - 1/x = 0.$$

Задача 10. Решить задания:

1. Вычислить положительный корень уравнения

$$f(x) = x^5 - x - 0.2 = 0 \text{ точностью } 0.0001.$$

2. Найти положительный корень уравнения с точностью 0.0001

$$f(x) = x^3 - 0.2x - 1.2 = 0$$

3. Вычислить методом Ньютона отрицательный корень уравнения с точностью до 0.0001.

$$f(x) = x^4 - 3x^2 + 75x - 10000 = 0$$

4. Решить методом простой итерации уравнение

$$f(x) = x^2 - 0.6$$

на отрезке с точностью 0.025.

5. Решить нелинейное уравнения

$$f(x) = x^2 - \ln(x) - 2 \cdot \cos(x) - 1$$

методом хорд с точностью 0.001.

6. Используя метод простой итерации, решить уравнения

$$f(x) = \sin x - x^2 = 0$$

точностью 0.0001.

Численное интегрирование

Задача 1. Вычислить интеграл

$$\int_0^1 \frac{4dx}{1+x^2}, \quad \int_{16\sqrt{5}}^{10} \frac{x^2 dx}{\sqrt{x^2-25}}, \quad \int_{3\sqrt{2}}^6 \frac{dx}{x\sqrt{x^2-9}}$$

используя квадратурные формулы:

а) центральных прямоугольников с шагом $h=0.4$; дать априорную оценку погрешности;

б) трапеций с шагами $h=0.4$ и $h=0.2$; оценить погрешность результата по формуле Рунге и уточнить результат по Рунге;

в) Симпсона с шагом $h=0.4$.

Промежуточные результаты вычислять с шестью значащими цифрами. Аргументы тригонометрических функций вычислять в радианах.

Задача 2. Вычислить для $n=10$ с точностью до 0,0001 по формуле трапеций

$$\int_0^1 \frac{x^2 dx}{\sqrt{4-x^2}}, \quad \int_2^4 x^2 \sqrt{16-x^2} dx$$

Задача 3. 1) Вычислите приближенное значение интеграла с помощью формул прямоугольников, трапеций и Симпсона. Число равных отрезков разбиения интервала [a;b] взять равным 10.

2) Определите оценку погрешности через вторую или четвертую производные.

3) Определите абсолютную погрешность приближенного значения интеграла.

4) Определите количество узлов разбиения, при которых погрешность приближенного значения интеграла по формулам прямоугольников, трапеций и Симпсона составит 0,01.

$$\int_{\sqrt[3]{2}}^6 \frac{dx}{x\sqrt{x^2-9}} \quad \int_1^2 \frac{\sqrt{4-x^2} dx}{x}$$

Задача 4. 1) Вычислить приближенное значение интеграла, используя квадратурную формулу Гаусса с 11 узлами.

2) Определите оценку погрешности через производную $2n$.

3) Определите абсолютную погрешность приближенного значения интеграла.

$$\int_0^2 \frac{x^3 dx}{\sqrt{16-x^2}} \quad \int_{\sqrt[4]{2}}^8 \frac{dx}{x\sqrt{x^2-16}}$$

Задача 5. Методом прямоугольников вычислить интеграл с шагом 0,02:

$$\int_{\frac{1}{4}}^{\sqrt[4]{3}} \frac{dx}{x\sqrt{x^2+16}} \quad \int_0^3 \frac{x^2 dx}{\sqrt{36-x^2}}$$

Задача 6. Для функции $f(x)=\cos x/(2+\sin x)$, приближенно вычислить определенный интеграл на отрезке [2;8] точно, по формулам прямоугольников, трапеций и Симпсона при $n=12$ разбиении отрезка интегрирования. Вычислить абсолютную и относительную погрешность.

Для успешного выполнения самостоятельной работы студентам рекомендуется следующая литература:

Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. Численные методы. 8-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2015.

Фонд оценочных средств для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ	
		Количество экземпляров изданий в библиотеке ВлГУ в соответствии с ФГОС ВО	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3	4
Основная литература*			
1. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Основы программирования вычислительных задач. Учебное пособие. Владимир 2018	2018	10	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/7426
2. Е.В. Карманова. Численные методы. 2-е изд., стер. М.: ФЛИНТА, 2015..	2015		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785976523036.html
3. Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. Численные методы. 8-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2015..	2015	3	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326167.html
4. 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..	2015		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329809.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.	2011	1	http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0006.html
2. Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. Емельянов. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: КолосС. 2008.	2008		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953206310.html

7.2. Периодические издания:

- 1, Информатика и программирование.

7.3. 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

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий лабораторного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Лабораторные работы проводятся в лаборатории 422-2, 423-2.

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

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения: Windows 10, Lazarus, Microsoft Office 2010, Power Point, Adobe Reader,

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент
(представитель работодателя)

АО «РМ НАНОТЕХ», начальник аналитического отдела центральной заводской лаборатории
к.х.н.



А.В. Третьяков

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Заведующий кафедрой

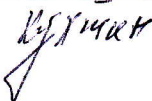


Б.А.Кухтин

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 04.03.01 – «Химия»

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Председатель комиссии



Б.А.Кухтин

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

в рабочую программу дисциплины

НАИМЕНОВАНИЕ

образовательной программы направления подготовки код и наименование ОП, направленность:
наименование (указать уровень подготовки)

Номер изменения	Внесены изменения в части/разделы рабочей программы	Исполнитель ФИО	Основание (номер и дата протокола заседания кафедры)
1			
2			

Зав. кафедрой _____ / _____
Подпись *ФИО*