

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)

Институт биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Смирнова Н.Н.
2021 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

направление подготовки / специальность

04.03.01 – Химия

направленность (профиль) подготовки

Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов
окружающей среды

г. Владимир

2021



1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Численные методы в химии» является 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

Дисциплина «Численные методы в химии» относится к обязательной части учебного плана.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
<p>ОПК-5 Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности.</p> <p>ПК-5 Способен применять информационные технологии и специализированные программы для обработки полученных данных</p>	<p>ОПК-5.1. Знает основные методы сбора и предварительной обработки полученной информации, основные математические модели, применяемые для решения задач в области профессиональной деятельности.</p> <p>ОПК-5.2. Умеет применять существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности.</p> <p>ОПК-5.3. Владение навыками системной обработки полученной информации и результатов при проведении физико-химических исследований и научных работ; основными средствами поиска и сортировки научной информации в глобальной сети Internet; способностью анализировать и оценивать угрозы информационной безопасности объекта.</p> <p>ПК-5.1. Знает методы проведения сравнительного анализа, исследований и экспериментальных работ.</p> <p>ПК-5.2. Умеет работать со сложным исследовательским, лабораторным оборудованием и средствами измерений; Формулировать выводы и рекомендации по результатам исследования.</p> <p>ПК-5.3 Владеет методами и</p>	<p>Знает: 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>Умеет: 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>Владеет: основными методами решения прикладных задач</p>	тесты, вопросы

	<p>средствами математической обработки и обобщения результатов исследований на основе статистических данных.</p>	<p>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>	
--	--	--	--

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часа.

Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	В форме практической подготовки		
1	Процедуры и функции в программировании. Средства работы с файлами.	6	1-2	3		3		12	
2	Решение нелинейных уравнений.	6	3-5	9		15	3	12	Рейтинг-контроль № 1
3	Аппроксимация данных, имеющих экспериментальный разброс.	6	6-9	6		15	3	12	
4	Решение систем линейных и	6	10-13	12		12	2	20	Рейтинг-контроль. № 2

	алгебраических уравнений. Метод Гаусса.								
5	Решение систем линейных и алгебраических уравнений. Метод Гаусса-Зейделя.	6	14-15	6		6	1	10	
6	Решение систем нелинейных алгебраических уравнений.	6	16	3					
7	Интерполяция таблично заданных функций	6	17-18	15		3	1	6	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 6 семестр:				54		54		72	Экзамен (36)
Наличие в дисциплине КП/КР									
Итого по дисциплине				54		54		72	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

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

5.1. Текущий контроль успеваемости

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: $L_n(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x) y_k$. 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?

5.2. 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.

5.3. Самостоятельная работа обучающегося.

Нелинейные уравнения

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

Задача 2. Отделить корни нелинейного уравнения аналитически $2\arctg x - x + 3 = 0$.

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

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

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.

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

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.

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

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

$$\int_4^{4\sqrt{3}} \frac{dx}{x\sqrt{x^2+16}} \quad \int_0^3 \frac{x^2 dx}{\sqrt{36-x^2}}$$

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

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

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ
		Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3
Основная литература*		
1. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Основы программирования вычислительных задач. Учебное пособие. Владимир: Изд-во ВлГУ. 2018.	2018	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/7426
2. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Численные методы решения алгебраических задач и обработки функций. Учебное пособие. Владимир: Изд-во ВлГУ, 2019.	2019	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/8267
3. 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.	2013	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788214122.html
4. Ф.И. Карманов, В.А. Острейковский. Статистические методы обработки экспериментальных данных. Лабораторный практикум с использованием пакета MathCad: Учеб. Пособие. М.: Абрис, 2012.	2012	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785437200599.html
Дополнительная литература		
1. 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...	2010	http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0359.html

6.2. Периодические издания

1. Программирование (журнал).

6.3. 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>

7. 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)

ООО «БИОХИМПРЕСУРС», научный сотрудник
к.х.н.


Д.К. Лаврухин

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 10 от 25.06 2021 г.

Заведующий кафедрой


Б.А. Кухтин

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

Протокол № 10 от 25.06 2021 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

«Численные методы в химии» образовательной программы направления подготовки 04.03.01 –
Химия, направленность: Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов
окружающей среды

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

Зав. кафедрой _____ / _____
Подпись *ФИО*