

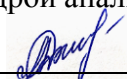
МИНОБРНАУКИ РОССИИ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП

 А.В. Великородов

«31» мая 2021 г.

УТВЕРЖДЕНО

Заведующий кафедрой аналитической и
физической химии  Л.А. Джигола

«3» июня 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Составитель

**Золотарева Н.В., к.т.н., доцент,
доцент кафедры АФХ**

Направление подготовки / специальность

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль) ОПОП

Медицинская и фармацевтическая химия

Квалификация (степень)

бакалавр

Форма обучения

очно-заочная

Год приема

2020

Курс

2

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью изучения дисциплины «Численные методы в химии» является знакомство студентов с теоретическими основами численных методов в химии.

1.2. Задачи дисциплины «Численные методы в химии»: знакомство с важнейшими теоретическими идеями и их численными методами расчета, освоение элементов автоматизации и компьютеризации в различных направлениях химической отрасли, в частности, применение аналитических процедур с целью улучшения ориентирования в лабораторно-практических задачах или проведение оптимизационных процедур.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина «Численные методы в химии» входит в вариативную часть (Б1.В.04) обязательных дисциплин. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами:

- «Высшая математика»

Знания: представления о функциях одной и нескольких переменных; статистическая обработка данных;

Умения: решение систем линейных и нелинейных уравнений; построение корреляционных зависимостей;

Навыки: осуществлять интегрирование и дифференцирование функций; решения дифференциальных уравнений; обработка экспериментальных данных.

- «Физическая химия»

Знания: представления об основных химических законах, описывающих химическое равновесие;

Умения: решать задачи по теме ступенчатой диссоциации в растворах;

Навыки: решения задач по термодинамике, кинетике химических реакций и каталитических процессов; обработка экспериментальных данных.

- «Квантовая механика и квантовая химия»

Знания: представления о математических операторах и постулатах, уравнение Шредингера в моделях водородоподобных атомов и многоэлектронных систем;

Умения: решать типовые модельные квантово-механические задачи, в частности, вычислять энергию системы приближенными методами;

Навыки: использования вычислительных схем прогноза реакционной способности молекул и оценки термодинамики и кинетики химических процессов.

- «Информатика»

Знания: представлениями об устройстве компьютера, функционировании системного и прикладного программного обеспечения;

Умения: работать в программных комплексах по направлению подготовки;

Навыки: использования электронных баз данных, программных пакетов для обработки и построения корреляционных зависимостей.

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- физическая химия (практикум, решение задач, самостоятельная работа);
- коллоидная химия (практикум, самостоятельная работа);

- физические методы исследования в химии;
- метрология, стандартизация и сертификация в химии;
- подготовка выпускной квалификационной работе, научно-исследовательской работе.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

б) общепрофессиональных (ОПК): *ОПК-1* – Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

Таблица 1
Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
<i>ОПК-1</i>	теоретические основы численных методов решения СЛАУ и интегрально-дифференциальных уравнений, методов обработки экспериментальных данных в химических исследованиях	использовать математический аппарат, алгоритмы численного решения СЛАУ и интегрально-дифференциальных уравнений, корреляционных и регрессионных методов обработки экспериментальных данных	приемами, техникой численного решения интегрально-дифференциальных уравнений и СЛАУ, корреляционного и регрессионного методов обработки экспериментальных данных

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
<i>ОПК-1</i>	ОПК-1.1 Систематизирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений; ОПК-1.2 Предлагает подход для интерпретации результатов эксперимента; ОПК-1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных	ОПК-1.1 Анализирует результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов; ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов; ОПК-1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа	ОПК-1.1 Способами систематизации и анализа результатов наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов; ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии; ОПК-1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа собственных

	данных.	собственных экспериментальных работ химической направленности.	экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.
--	---------	---	---

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет **3 зачетных единицы**, в том числе 36 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий в соответствии с учебным планом 18 часов – лекции, 18 часов – лабораторных занятий, 72 часа – на самостоятельную работу, зачет – 4 семестр.

Таблица 2
Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Наименование радела (темы)	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа (в часах)			Самостоятельн ая работа (в часах)		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
1	Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	4	1-3	3		3		10	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
2	Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	4	4-6	2		2		10	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
3	Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	4	7-9	3		3		10	Решение задач, Контрольная работа №1
4	Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	4	10-12	3		3		10	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
5	Методы математической	4	13,14	2		2		10	Подготовка презентаций,

	статистики. Статистическая обработка эксперименталь- ных данных для решения задач аналитической химии.								решение задач (работа в мини- группах)
6	Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	4	15, 16	2		2		10	Решение тематических задач, Контрольная работа №2
7	Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	4	17,18	3		3		12	Подготовка презентаций, работа в мини- группах
ИТОГО				18		18		72	ЗАЧЕТ

Условные обозначения:

Л – занятия лекционного типа; ПЗ – практические занятия, ЛР – лабораторные работы;

КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа по отдельным темам.

Таблица 3
Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины
и формируемых в них компетенций

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции	Общее количество компетенций
		ОПК-1	
Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	16	+	1
Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	14	+	1
Механическая, структурная, квантово- химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	16	+	1
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	16	+	1
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	14	+	1
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	14	+	1
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	18	+	1
Итого	108		

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ

1. Элементы численных методов. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса с выбором главного элемента. Решение уравнений методом деления отрезка пополам и методом Ньютона (модификации). Применимость методов и скорость сходимости задач. Одномерная и многомерная оптимизация. Поиск минимума функции одного переменного. Поиск минимума и максимума функции многих переменных. Основные типы рельефа функции: котловинный, овражный, нерегулярный, связь с задачами математического моделирования в химии. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука-Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Частный случай минимизации суммы квадратов: Метод Гаусса-Ньютона. Программная реализация поиска минимума и максимума функции одной и нескольких переменных. Способы минимизации функционала, их приложение для решения задач квантовой химии.

2. Численные методы решения квантово-механических задач и задач физической химии. Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Одномерные и многомерные задачи. Графическое представление радиальных и угловых частей водородоподобных орбиталей. Вариационный принцип квантовой механики. Задача о приближенных методах решения уравнения Шредингера. Представление молекулярных орбиталей в теории линейной комбинации атомных орбиталей. Пути химических реакций. Понятие переходного состояния системы. Математический вывод термодинамических параметров, их приложение для решения задач физической химии. Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений. Химические задачи, описываемые системами ЛАУ. Некоторые сведения о дифференциальных уравнениях химических процессов, уравнения кинетики. Математические модели химических процессов. Необратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции n -порядков.

3. Численные методы решения химико-аналитических задач. Источники и вид представления экспериментальных данных. Промехи. Q-критерий. Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других методах исследования. Характеристика систематических ошибок. Случайные ошибки методов анализа. Статистическая обработка результатов измерений. Генеральная совокупность и выборка. Кривая распределения результатов. Функция распределения, математическое ожидание, дисперсия и другие параметры. Средние значения. Мера рассеяния. Эмпирическая функция распределения. Оценки параметров распределения и их свойства. Метод наименьших квадратов. Оценка параметров. Таблично заданные функции и их интерполяция. Точность и сходимость интерполяции. Приближенное вычисление определенных интегралов. Порядок точности. Формулы Ньютона-Котеса и Гаусса, формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона. Оценка погрешности. Численное дифференцирование. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений: решение задачи Коши. Устойчивость решения. Метод Эйлера.

4. Численные методы и комплексы программ. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах (OpenOffice.org Calc, SciDAVis, Mathcad, Games PC и др.) и решение конкретных задач физической химии, аналитической химии, квантовой механики и квантовой химии с использованием вычислительных процедур.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

5.1. Указания по организации и проведению лекционных и лабораторных занятий с перечнем учебно-методического обеспечения

При подготовке к лабораторно-вычислительным занятиям студентам отводится время на самостоятельную работу в объеме 72 часов, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете, выполнение домашних (задач для самоконтроля) и подготовку презентаций.

Предусмотрено самостоятельное выполнение заданий по отдельным темам дисциплины. Пакет заданий выдается в начале изучения соответствующих тем. Задания выполняются в отдельной тетради. На самостоятельное решение задач отводится две недели. Оформленная тетрадка сдается преподавателю на проверку перед текущей контрольной работой. После изучения некоторых разделов практической части курса проводятся контрольные работы.

Лекция в классическом представлении является главным звеном дидактического цикла обучения, однако такие лекции дополнены презентациями, видеороликами, «ошибками» и др.

Лекционный материал выстроен следующим образом:

- изложение материала ведется от простого к сложному, от известного к неизвестному с включением интерактивных методов;
- выстраивается логичность, четкость и ясность изложения материала с примерами выполнения заданий;
- смысловая часть должна содержать факты, закономерности и статистические данные;
- с целью активизации деятельности студентов часть лекционного материала включает проблемные темы с дискуссией (диалогом);
- прослеживается тесная связь теоретических положений, формулировок и выводов с практикой и реализацией будущей профессиональной деятельностью студентов.

Работа в минигруппах на персональных компьютерах предусматривает выполнение заданий по отдельным темам разделов: «Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии», «Реализация численных методов в прикладных программных комплексах». Состав минигруппы 2-4 человека.

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. 7-е изд. – М.: БИНОМ, 2012. 635 с. (ЕИ-10 экз.);
2. Математические методы решения химических задач : доп. УМО по клас. унив. образованию в качестве учеб. пособия для студентов вузов...по направ. подготовки "Химия" / А.И. Козко и др. - М.: Академия, 2013. - 368 с. (ЕИ-4 экз.);
3. Харитонов Ю.Я. Аналитическая химия: Аналитика: В 2-х кн. Кн. 2 : учеб. для вузов. Количественный анализ. Физико-химические (инструментальные) методы анализа. - М.: Высш. шк., 2001. - 559 с. (ЕИ-6);
4. Наац В.И., Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы [Электронный ресурс] / Наац В.И., Наац И.Э. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.

Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922111607.html>;

5. Кокотушкин Г.А., Численные методы алгебры и приближения функций: метод. указания к выполнению лабораторных работ по курсу "Численные методы" [Электронный

ресурс] / Г.А. Кокотушкин, А.А. Федотов, П.В. Храпов. - М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. - 58 с.

Режим доступа: http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0006.html

6. Федоров А.А., Методы химического анализа объектов природной среды [Электронный ресурс] /А. А. Федоров, Г. З. Казиев, Г. Д. Казакова. - М. : КолосС, 2013. - 118 с. (Учебники и учеб. пособия для студентов высш. учеб. заведений) Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953202886.html>

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 4
Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер раздела (темы)	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	Решение уравнений методом деления отрезка пополам и методом Ньютона (модификации). Применимость методов и скорость сходимости задач.	3	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука-Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Частный случай минимизации суммы квадратов: Метод Гаусса-Ньютона.	2	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	Графическое представление радиальных и угловых частей водородоподобных орбиталей. Вариационный принцип квантовой механики. Задача о приближенных методах решения уравнения Шредингера.	3	Решение задач, Контрольная работа №1
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	Математический вывод термодинамических параметров, их приложение для решения задач физической химии. Математические модели химических процессов. Необратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции n -порядков.	3	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения	Кривая распределения результатов. Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других	2	Подготовка презентаций, решение задач (работа в мини-группах)

задач аналитической химии.	методах исследования.		
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	Численное дифференцирование. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений: решение задачи Коши. Устойчивость решения. Метод Эйлера.	2	Решение тематических задач, Контрольная работа №2
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	Реализация численных методов в прикладных программных комплексах OpenOffice.org Calc, SciDAVis, Mathcad, Gamess PC	3	Подготовка презентаций, работа в мини-группах

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно

Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов по основным модулям курса, выполнения контрольных задач и вычислительных заданий на ПК.

Работа по вычислительному практикуму выполняется за компьютерами в минигруппах. Ответ оформляется в электронном виде в формате *.doc или *.docx. Выравнивание текста по ширине. Шрифт Times New Roman. Размер 12. Параметры страницы соответствуют: верхнее 2см, нижнее 2см, левое 2см, правое 2см. Студенты отчитываются индивидуально по выполненной работе (в отчет могут быть включены типовые вопросы и задачи из темы для самостоятельной проработки).

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

6.1. Образовательные технологии

С целью формирования и развития профессиональных навыков у обучающихся в учебном процессе по дисциплине “Численные методы в химии” предусмотрены следующие интерактивные формы проведения лекционных занятий:

- презентации с обучающими видеороликами (русский язык, английский язык);
- лекция с ошибками;
- обучающие вычислительные программы.

На практических занятиях предусмотрены следующие активные и интерактивные формы обучения в образовательном процессе:

- работа в минигруппах с применением компьютерных технологий (работа на ПК);
- тематические учебные конференции, самостоятельная работа студентов;
- учебные дискуссии с подготовкой презентаций на заданную тему.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, составляет не менее 30% аудиторных семинарских занятий и 16% лекционных занятий. Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов, контрольных работ, выполнения и отчета практических заданий.

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеолекций, лекций-презентаций, видеоконференции, собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных практических и/или лабораторных работ и др.

6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- использование возможностей Интернета в учебном процессе (использование информационного сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление учащихся с оценками и т.д.));
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронные библиотеки, журналы и т.д.) как источников информации;
- использование возможностей электронной почты преподавателя (zoloto.chem@mail.ru);
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т.д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т.е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);
- использование виртуальной обучающей среды (или системы управления обучением LMS Moodle <http://moodle.asu.edu.ru/>) или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

- Лицензионное программное обеспечение:

Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013 Пакет офисных программ;

Microsoft Windows 7 Professional (Операционная система);

Adobe Reader (Программа для просмотра электронных документов);

MathCad 14 (Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением, отличается лёгкостью использования).

Moodle Образовательный портал ФГБОУ ВО «АГУ»

Google Chrome Браузер

Notepad++ Текстовый редактор

- Современные профессиональные базы данных, информационные справочные системы:

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех»: <https://biblio.asu.edu.ru> Учетная запись образовательного портала АГУ;
2. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований: www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ;
3. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги»: www.biblio-online.ru;
4. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu.edu.ru/>

5. Электронный каталог «Научные журналы АГУ»: <http://journal.asu.edu.ru/>
6. Электронно-библиотечная система elibrary: <http://elibrary.ru/>

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Численные методы в химии» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

Таблица 5
Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины	Код контролируемой компетенции (компетенций)	Наименование оценочного средства
1	Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	<i>ОПК-1</i>	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
2	Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	<i>ОПК-1</i>	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
3	Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	<i>ОПК-1</i>	Решение задач, Контрольная работа №1
4	Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	<i>ОПК-1</i>	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
5	Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	<i>ОПК-1</i>	Подготовка презентаций, решение задач (работа в мини-группах)
6	Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	<i>ОПК-1</i>	Решение тематических задач, Контрольная работа №2
7	Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	<i>ОПК-1</i>	Подготовка презентаций, работа в мини-группах

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Для оценивания ответов (решение проблемной, ситуационной, научно-практической, учебной задачи) используются следующие критерии оценивания

Таблица 6
Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их анализировать и применять; - последовательное, правильное выполнение всех видов заданий; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы; -привлекать дополнительную информацию, которая включает обзор научной литературы (журналы, материалы конференций и др.) с последующим описанием; -умение работать как в коллективе, так и самостоятельно.
4 «хорошо»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять; - последовательное, правильное выполнение предложенных заданий; -возможны единичные ошибки, исправляемые самим студентом после замечания преподавателя; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы; -умение работать в коллективе, так и самостоятельно.
3 «удовлетворительно»	-затруднения с комплексной оценкой предложенной ситуации; -неполное теоретическое обоснование, требующее наводящих вопросов преподавателя; -выполнение заданий при подсказке преподавателя; - затруднения в формулировке выводов; -умение работать в коллективе, так и самостоятельно.
2 «неудовлетворительно»	- неправильная оценка предложенной ситуации; -отсутствие теоретического обоснования выполнения заданий;

Таблица 7
Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	-демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, - последовательно и правильно выполняет задания, -умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	-демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, -последовательно и правильно выполняет задания,

	-умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, -допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	-демонстрирует отдельные, - несистематизированные навыки, -не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, -испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, -выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	-не способен правильно выполнить задание

7.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Ниже приводятся типовые тематические вопросы для практических занятий, тестовые задания, задачи и вопросы для самоконтроля, темы проблемных задач для подготовки к вычислительным экспериментам, над которыми целесообразно работать при изучении основного материала, также приведен перечень вопросов к зачету.

Тема 1. Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений

1. Подготовка презентаций и ключевые темы к семинару «Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений»

1. Основные определения и обозначения. Матрицы.
2. Метод исключения Гаусса. Блок-схема.
3. Особенности реализации метода Гаусса на ЭВМ.
4. Метод квадратного корня. Алгоритм.
5. Метод простой итерации. Алгоритм.
6. Метод Зейделя. Алгоритм.
7. Метод Крамера. Алгоритм.
8. Метод Ньютона-Рафсона: описание.
9. Применимость методов и скорость сходимости задач.
10. Методы контроля сходимости итерационных методов решения систем.

2. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. Методом Жордана-Гаусса и правилом Крамера найти общее решение системы:

$$A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 + 6x_4 = 16 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 30 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 + 5x_4 = 20 \\ 2x_1 + 8x_2 + 7x_3 + 3x_4 = -8 \end{cases}$$

2. Решить систему методом Зейделя:

$$\begin{cases} 2x + y + z = 5 \\ 3x + 4y - 2z = 3 \\ -4x + 2y + 6z = 10 \end{cases}$$

3. Решить систему методом квадратного корня:

$$\text{а) } \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 = 5 \\ 5x_1 + 14x_2 = 14 \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} 2,448x_1 + 3x_2 = 9,668 \\ 3x_1 + 8,224x_2 = 21,962 \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 4,4x_1 - 3x_2 = 5,8 \\ -3x_1 + 9,6x_2 = 3,6 \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 1,999 \\ 2x_1 + 16x_2 = 8,666 \end{cases}$$

4. Методом Жордана-Гаусса найти общее решение системы:

$$\text{а) } A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 = 8 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 7 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 10 \end{cases}$$

$$\text{б) } A = \begin{cases} x_1 - 2x_2 + 3x_3 = 4 \\ 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 = -2 \\ 3x_1 - 2x_2 - 5x_3 = -2 \end{cases}$$

$$\text{в) } A = \begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 5 \end{cases}$$

$$\text{г) } A = \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - 4x_3 = 9 \\ 3x_1 + 15x_2 - 9x_3 = 21 \\ 5x_1 + 5x_2 - 7x_3 = 15 \end{cases}$$

5. Решить систему методом простой итерации:

$$\text{а) } \begin{cases} 6x + 2y - 3z = 10 \\ 2x - 5y + z = -8 \\ 3x + 2y + 6z = 7 \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - x_3 = -4 \\ 10x_1 + 2x_2 - 2x_3 = -8 \\ -x_1 - 2x_2 + 6x_3 = 24 \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 6x_1 - 2x_2 - x_3 = 7 \\ 3x_1 + 5x_2 - x_3 = 15 \\ x_1 + x_2 + 7x_3 = 11 \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} 5x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 4 \\ 2x_1 - 7x_2 + 2x_3 = 8 \\ 6x_1 + 3x_2 + 8x_3 = 28 \end{cases}$$

6. Решить систему методом Зейделя:

$$\text{а) } \begin{cases} 6x_1 - 2x_2 - x_3 = -1 \\ 2x_1 + 5x_2 - 3x_3 = 3 \\ 4x_1 + 2x_2 - 7x_3 = -13 \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} x_1 + 3x_2 - 2x_3 = -3 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ 4x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 26 \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 2x + y + z = 5 \\ 3x + 4y - 2z = 3 \\ -4x + 2y + 6z = 10 \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} x_1 + 4x_2 - x_3 = 8 \\ 12x_1 - 3x_2 + x_3 = 7 \\ 7x_1 - x_2 + 12x_3 = 17 \end{cases}$$

7. Решить систему методом Крамера:

$$\text{а) } A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 + 6x_4 = 16 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 30 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 + 5x_4 = 20 \\ 2x_1 + 8x_2 + 7x_3 + 3x_4 = -8 \end{cases}$$

$$\text{б) } A = \begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = -3 \\ 5x_1 + 10x_2 + 16x_3 + 19x_4 = -2 \\ 7x_1 + 14x_2 + 20x_3 + 27x_4 = 0 \\ 3x_1 + 5x_2 + 6x_3 + 13x_4 = 5 \end{cases}$$

$$\text{в) } A = \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - 4x_3 = 8 \\ 3x_1 + 15x_2 - 9x_3 = 5 \\ 5x_1 + 5x_2 - 7x_3 = 27 \end{cases}$$

$$\text{г) } A = \begin{cases} 7x_1 - 3x_2 + 5x_3 = 32 \\ 5x_1 + 2x_2 + x_3 = 11 \\ 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 14 \end{cases}$$

Тема 2. Численные методы одномерной и многомерной оптимизации

1. Подготовка презентаций и ключевые темы к семинару «Численные методы одномерной и многомерной оптимизации»

1. Метод золотого сечения. Алгоритм.
2. Метод прямого поиска Хука-Дживса. Алгоритм.
3. Метод наискорейшего спуска. Алгоритм.

4. Метод Ньютона (Гаусса-Ньютона). Алгоритм.
5. Метод Монте-Карло. Алгоритм.

2. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. Методом золотого сечения локализируйте точку экстремума в интервале r [1, 3], для функции вида $Q(r) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a_0}} \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot r}{3 \cdot a_0} + \frac{2 \cdot r^2}{27 \cdot (a_0)^2}\right)$ где a_0 – радиус боровской орбиты 0,529Å.

2. Рассчитайте энергию $2p_z$ -электрона $\psi = \frac{\sqrt{Z^3}}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \cdot \frac{Zr}{a_0} \cdot e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cdot \cos \theta$ водородоподобного иона.

3. Методом деления отрезка пополам установите экстремум в интервале r [0, 4], где a_0 – радиус Боровской орбиты 0,529Å

$$Q(r) = \frac{e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot \left(1 - \frac{r}{2 \cdot a_0}\right)}{\sqrt{2}}.$$

4. Методами Ньютона (хорд и секущих) найдите корень уравнения $4 \cos x + 0,3x = 0$, [-10; -9], $\varepsilon = 10^{-3}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.
5. Найдите корень уравнения $3 \sin 8x - 0,7x + 0,9 = 0$, [0,5; 1], с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ методом половинного деления.
6. Рассчитайте энергетические дескрипторы (в кДж/моль) трехъядерной системы, если известны кулоновские и резонансные интегралы:

$$\begin{pmatrix} -14 & -3 & -2 \\ -3 & -12 & -3 \\ -2 & -3 & -14 \end{pmatrix}$$

Постройте графическую зависимость « $|\psi|^2$ – r » и сформулируйте выводы о распределении электронной плотности в системе. Можно ли на основании результатов сделать выводы о составе, строение и реакционной способности молекулы.

7. Рассчитайте энергетические дескрипторы (в кДж/моль) трехъядерной системы, если известны кулоновские и резонансные интегралы:

$$\begin{pmatrix} -0.5 & -1 & -2 \\ -1 & -4 & -1 \\ -2 & -1 & -0.5 \end{pmatrix},$$

коэффициент межъядерного перекрытия $S_{12} = S_{21}$ составляет 20%, тогда как коэффициент межъядерного перекрытия $S_{23} = S_{32}$ составляет 16%, а $S_{13} = S_{31}$ составляет 0%.

8. Рассчитайте собственные значения поверхности потенциальной энергии, если известно функция вида $f(x, y) = 4x^2 + 2x^2y + y^2 - xy + x - 0,5y + 3$, результаты визуализируйте в программе MathCAD.
9. Для непрерывной случайной величины, заданной функцией плотности вероятности

$$f(x) = \frac{e^{1-x^2}}{e-1} \quad \text{на отрезке } [a, b] \quad \text{дисперсия } D[x] \quad \text{находится по формуле:}$$

$$D[x] = \int_a^b x^2 \cdot f(x) dx. \quad \text{Рассчитайте эту величину для случая } a=-0,5, b=1,5 \text{ с точностью до}$$

6 значащих цифр.

10. С помощью симплекс-метода требуется решить задачу:

$$\begin{cases} x_1 - x_4 + x_5 = 2 \\ x_2 + 2x_4 + 3x_5 = 7 \\ x_3 + x_4 - 2x_5 = 1 \\ f - x_4 + 2x_5 = 3 - \rightarrow \min \end{cases}$$

11. Зависимость теплоемкости метана от температуры описывается уравнением $C_p = a + bT + cT^2 + d \lg T$, найдя значение констант a, b, c, d вычислите теплоемкость метана при температурах 250 °C и 450 °C (с точностью до 6 значащих цифр), если известно:

T, K	400	600	700	900
C _p , Дж/(моль·K)	40,74	52,53	58,05	67,27

Определите температуру, при которой теплоемкость метана составит 60,1 Дж/(моль·K).

3. Комплект заданий к контрольной работе

Вариант 1

1. Приведите примеры построения аналитических и имитационных моделей.
2. Найдите корень уравнения $(0,2x)^3 - \cos x = 0$, принадлежащий интервалу $[-4,5; -3,5]$, с заданной точностью $\varepsilon = 7 \cdot 10^{-4}$ методом половинного деления.
3. Методом Ньютона (касательных и секущих) найдите корень уравнения $x \sin x - 1 = 0$, $[2; 3]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Вариант 2

1. Приведите примеры построения вещественных и идеальных моделей.
2. Найдите корень уравнения $\sin x - x^2 + 3 = 0$, принадлежащий интервалу $[-2; -1]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4}$ методом простой итерации.
3. Методами Ньютона (хорд и секущих) найдите корень уравнения $10 \cos x - 0,1x^2 = 0$, $[-2; -1]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Вариант 3

1. Приведите примеры непрерывных и дискретных моделей.
2. Найдите корень уравнения $\ln x + 0,5x - 2 = 0$, принадлежащий интервалу $[2; 3]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4}$ методом простой итерации.
3. Методами Ньютона (касательных, секущих, хорд) найдите корень уравнения $(0,2x)^3 - \cos x = 0$, $[-2; -1]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Вариант 4

1. Детерминированные и стохастические виды моделей.
2. Найдите корень уравнения $\ln x + 0,5x - 2 = 0$, принадлежащий интервалу $[2; 3]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4}$ методом простой итерации.
3. Методами Ньютона (касательных, секущих, хорд) найдите корень уравнения $(0,2x)^3 - \cos x = 0$, $[-2; -1]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Тема 3. Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения

1. Подготовка презентаций и ключевые темы к семинару «Численные методы решения квантово-механических задач»

1. Квантово-химическая, механическая и структурная модели молекул.

2. Одномерные и многомерные задачи поиска минимума энергии молекул.
3. Графические представления радиальных, угловых частей водородоподобных орбиталей и поверхностей потенциальной энергии молекул.
4. Вариационный подход в квантовой механики
5. Задача о приближенных методах решения уравнения Шредингера.
6. Представление молекулярных орбиталей в теории линейной комбинации атомных орбиталей.
7. Пути химических реакций. Понятие переходного состояния системы.
8. Математический вывод термодинамических параметров, их приложение для решения задач физической химии.
9. Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений.
10. Химические задачи, описываемые системами ЛАУ.
11. Некоторые сведения о дифференциальных уравнениях химических процессов, уравнения кинетики.
12. Математические модели химических процессов.
13. Необратимые реакции первого порядка.
14. Обратимые реакции первого порядка и реакции n -порядков.

2. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. Рассчитайте собственные значения поверхности потенциальной энергии, если известно функция вида $f(x, y) = 4x^2 + 2x^2y + y^2 - xy + x - 0,5y + 3$, результаты визуализируйте в программе SciDavis.

2. Для непрерывной случайной величины, заданной функцией плотности вероятности

$$f(x) = \frac{e^{1-x^2}}{e-1} \quad \text{на отрезке } [a, b] \quad \text{дисперсия } D[x] \text{ находится по формуле:}$$

$$D[x] = \int_a^b x^2 \cdot f(x) dx. \quad \text{Рассчитайте эту величину для случая } a=-0,5, b=1,5 \text{ с точностью до}$$

6 значащих цифр.

8. С помощью симплекс-метода требуется решить задачу:

$$\begin{cases} x_1 - x_4 + x_5 = 2 \\ x_2 + 2x_4 + 3x_5 = 7 \\ x_3 + x_4 - 2x_5 = 1 \\ f - x_4 + 2x_5 = 3 - - > \min \end{cases}$$

9. Зависимость теплоемкости метана от температуры описывается уравнением $C_p = a + bT + cT^2 + d \lg T$, найдя значение констант a, b, c, d вычислите теплоемкость метана при температурах 250 °C и 450 °C (с точностью до 6 значащих цифр), если известно:

T, K	400	600	700	900
C_p , Дж/(моль·К)	40,74	52,53	58,05	67,27

Определите температуру, при которой теплоемкость метана составит 60,1 Дж/(моль·К).

Тема 4. Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии

1. Темы для обсуждения в мини-группах (дискуссии)

1. Математические модели химических процессов.
2. Квантово-химические модели химических процессов.
3. Термодинамические модели химических процессов.
4. Статистические модели химических процессов.

5. Кинетические модели химических процессов.
6. Компьютерная реализация моделей.

Тема 5. Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.

Тема 6. Метод наименьших квадратов. Интерполяция

1. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. При адсорбции ионов никеля из водного раствора 10^{-4} активным углем были получены следующие данные:

Ni^{+2} , мл	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,9	1
$A_{\text{до}}$	0,046	0,108	0,204	0,32	0,403	0,506	0,576	0,589	0,630	0,682
$A_{\text{после}}$	0,023	0,012	0,149	0,223	0,315	0,325	0,429	0,500	0,606	0,66

Постройте график зависимости оптической плотности – содержание ионов никеля в растворе и обработайте методом наименьших квадратов.

2. При адсорбции ионов никеля из водного раствора 10^{-4} активным углем были получены следующие данные:

Co^{+2} , мл	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,9	1
$A_{\text{до}}$	0,076	0,176	0,295	0,4	0,48	0,58	0,67	0,75	0,852	0,922
$A_{\text{после}}$	0,044	0,122	0,177	0,164	0,168	0,217	0,218	0,199	0,253	0,179

Постройте график зависимости оптической плотности – содержание ионов никеля в растворе и обработайте методом наименьших квадратов.

3. При изучении содержания оксида кальция (масс. доля) в пробе гравиметрическим методом были получены следующие результаты: 0,15; 0,16; 0,17; 0,11; 0,11; 0,11; 0,12; 0,11; 0,11; 0,12; 0,15; 0,15; 0,12; 0,19; 0,12; 0,11; 0,15; 0,12; 0,17; 0,15. Проведите статистическую обработку данных.
4. При изучении содержания в пробе метионина (мл) титриметрическим методом были получены следующие результаты: 13,4; 16,8; 12,2; 18,1; 16,5; 16,1; 12,9; 16,4; 12,5; 12,4; 15,7; 16,2; 16,7; 18,9; 12,9; 13,0; 15,2; 15,5; 17,0; 15,9. Проведите статистическую обработку данных.
5. При изучении содержания марганца (%) в руде были получены следующие результаты: 1,5; 1,6; 1,4; 1,3; 1,1; 1,4; 1,2; 1,1; 1,1; 1,2; 1,5; 1,5; 1,2; 1,9; 1,2; 1,1; 1,5; 1,4; 1,9; 1,7. Проведите статистическую обработку данных.
6. Обработайте результаты лабораторного исследования методом наименьших квадратов.

x	=	2	3	4	5	6	7	8	9
y	=	0,95	0,88	0,81	0,75	0,71	0,67	0,63	0,60

7. При анализе железной руды были найдены следующие значения (% Fe_2O_3): 23,11; 24,90; 22,62; 23,14; 24,45%. Определите величину доверительного интервала при $P=0,95$.
8. Для десяти определений марганца в усредненной пробе надо найти стандартное отклонение. Получены следующие значения (в %, Mn):
0,69 0,70 0,67 0,66 0,67 0,68 0,67 0,69 0,68 0,68.

2. Комплект заданий к контрольной работе

Вариант 1

1. При изучении содержания оксида кремния (%) в пробе гравиметрическим методом были получены следующие результаты: 15; 16; 17; 11; 11; 11; 12; 11; 11; 12; 15; 15; 12; 19; 12; 11; 15; 12; 17; 15. Проведите статистическую обработку данных.
2. Обработайте результаты лабораторного исследования методом наименьших квадратов.

x	=	0,1	0,2	0,4	0,6	0,8	1	1,2	1,4
y	=	0,95	0,88	0,81	0,75	0,71	0,67	0,63	0,60

При анализе руды были найдены следующие значения (% Fe_3O_4): 13,14; 14,50; 20,20; 31,14; 14,08; 12,87%. Определите величину доверительного интервала при

P=0,95.

Вариант 2

1. При изучении содержания оксида кальция (мол. доля) в пробе гравиметрическим методом были получены следующие результаты: 4,5; 4,6; 4,7; 4,1; 4,1; 4,1; 4,2; 4,1; 4,1; 4,2; 4,5; 4,5; 4,2; 4,9; 4,2; 4,1; 4,5; 4,2; 4,7; 4,5. Проведите статистическую обработку данных.
2. При адсорбции ионов меди (II) из водного раствора 10^{-4} активным углем были получены следующие данные:

Cu^{+2} , мл	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,9	1
$A_{\text{до}}$	0,026	0,780	0,194	0,302	0,38	0,498	0,589	0,702	0,990	0,970
$A_{\text{после}}$	0,003	0,012	0,149	0,183	0,198	0,250	0,329	0,341	0,470	0,470

Постройте график зависимости оптическая плотность – содержание ионов меди в растворе и обработайте методом наименьших квадратов.

Тема 7. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах

1. Вычислительный практикум для работы на ПК

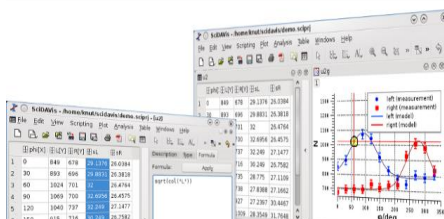
Построение 3D-поверхностей в SciDAVis



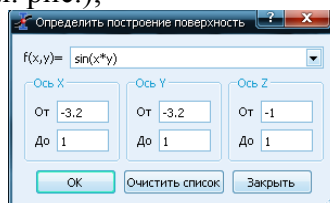
What is SciDAVis?

SciDAVis is a free application for Scientific Data Analysis and Visualization.

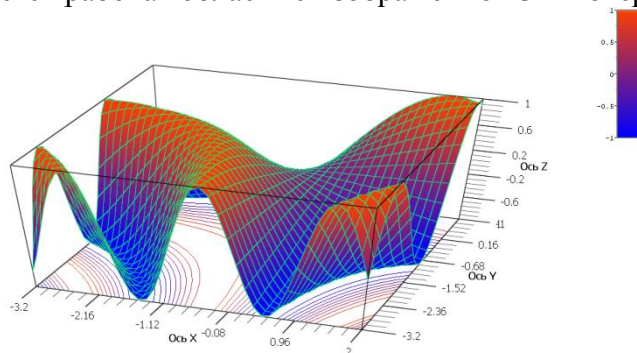
What does it look like?



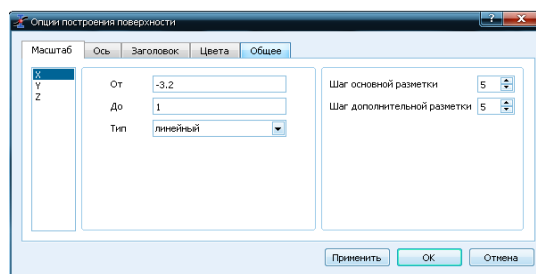
1. Открыть меню **Файл** и выбрать команду **Новый** → **Новый график 3D поверхности**;
2. В открывшемся диалоговом окне задать вид функции $f(x, y)$ и границы построения поверхности по осям ox , oy , oz (см. рис.);



3. Нажать **ОК**. Откроется рабочая область с изображенной 3D-поверхностью (см. рис.);

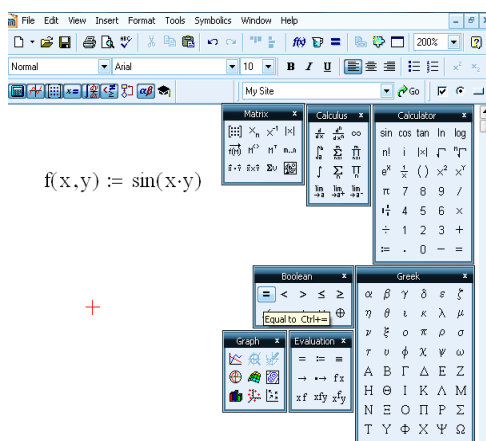


4. Построенную трехмерную поверхность можно вращать, приближать, удалять, копировать, изменять параметры, управляя колесиком и левой кнопкой мыши;
5. Вид поверхности можно менять, используя панель инструментов **3D-поверхность**;
6. Изменить масштаб, диапазон построения поверхности, подписи осей, цвет и другие параметры можно с помощью двойного щелчка мыши по рисунку. Появится диалоговое окно (см. рис.).



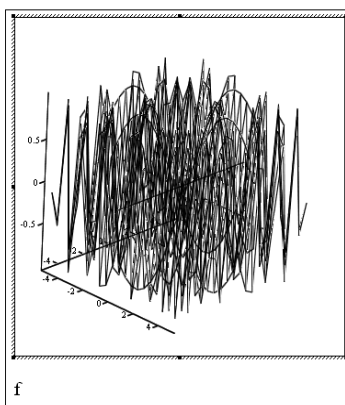
Построение 3D-поверхностей в Mathcad

1. В открывшемся окне создать формулу, используя панель инструментов – калькулятор для введения параметров, открыть меню **Вид (View)**, выбрать команду **Панель инструментов (Toolbars)**, поставить галочку напротив команды **Калькулятор (Calculator)** (см. рис.);

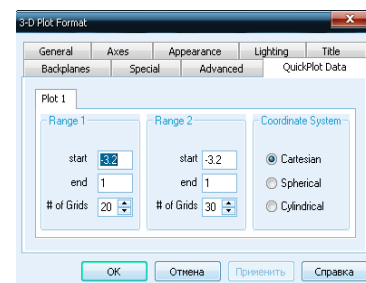
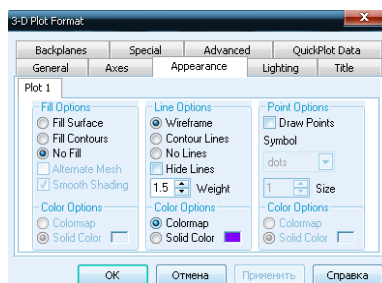
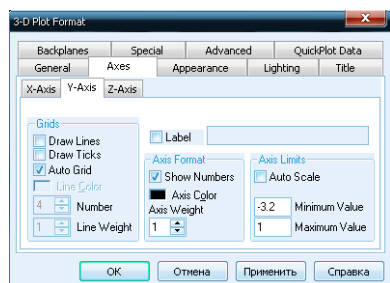


2. Открыть меню **Вставка (Insert)** и выбрать команду **График (Graph)** → **График поверхности (Surface plot)** (см. рис.);

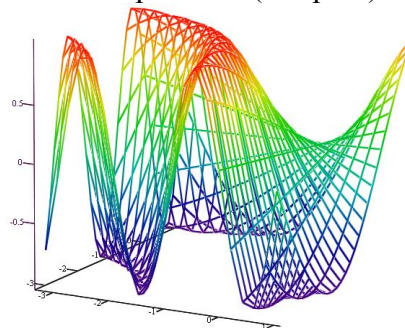
$$f(x,y) := \sin(x \cdot y)$$



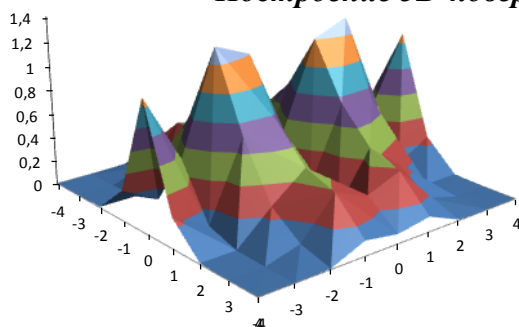
3. Построенную трехмерную поверхность можно вращать, приближать, удалять, копировать, изменять параметры, управляя колесиком и левой кнопкой мыши;
4. Изменить масштаб, диапазон построения поверхности, подписи осей, цвет и другие параметры можно с помощью двойного щелчка мыши по рисунку. Появится диалоговое окно (см. рис.).



5. В результате, можно получить 3D-поверхность (см. рис.).



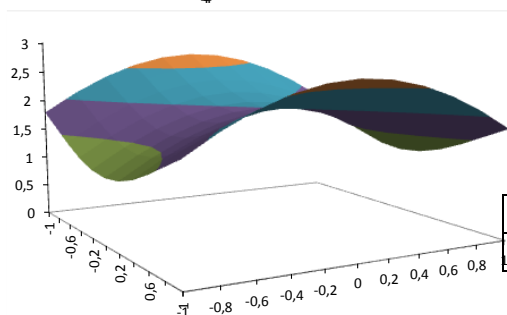
Построение 3D-поверхностей в Microsoft Office Excel



$$f(x, y) = (a * (\sin(x)^2) + b * (\cos(y)^2)) * \exp\left(-c * \left(\frac{x * y}{4}\right)^2 - d * \left(\frac{y}{4}\right)^2\right)$$

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

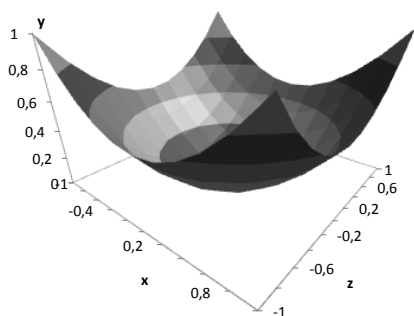
a	b	c	d
1	0,5	1	1



$$f(x, y) = \frac{\frac{\sin(x)^2}{(a)^2} + \cos(y)^2}{(b)^2 - c}$$

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c
1	1	0



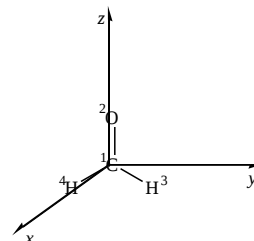
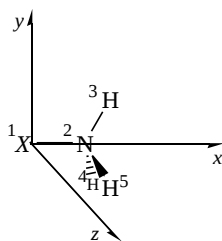
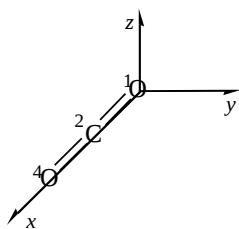
$$f(x, y) = \frac{\frac{(x)^2}{(a)^2} + \frac{(y)^2}{(b)^2} + (d)}{c}$$

Диапазоны: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c	d
1	1	2	0

Векторная алгебра в применении к химическим задачам

1. Вычислите величины декартовых координат следующих молекул:



где X-псевдоатом задается только для определения симметрии, принять расстояние X-A 1.00Å, валентный угол HNH составляет $107^{\circ}3'$, HCO 120°

- Вычислите величины декартовых координат следующих молекул и определите расстояния между любыми подряд стоящими тремя атомами: а) бензол; б) хлорбензол; в) пиридин; г) фосфорная кислота; д) хлорноватая кислота
- Вычислите величины декартовых координат атомов в молекуле хлоруксусной кислоты и вычислите оптимальное расстояние между атомами H⁷ и O³:

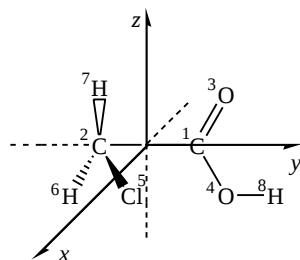


Таблица Характерные свойства некоторых элементов

Z	Элемент	Радиус, Å		
		атомный	ковалентный по Полингу	экспериментальный
1	H	0.78	0.30	0.31
2	He	1.28	—	0.28
3	B	0.83	0.88 0.76 0.68	0.84
4	C— C= C≡	0.91	0.77 0.67 0.60	0.76 0.73 0.69
5	N	0.71	0.70 0.60 0.55	0.71
6	O	0.60	0.66 0.55	0.66
7	P	1.15	1.10 1.00 0.93	1.07
8	S	1.04	1.04 0.94	1.05
9	Cl	1.07	0.99	1.02

*Экспериментальные уточненные данные [Dalton Trans., 2008, 2832-2838].

2. Подготовка презентаций по ключевым темам

- Реализация численных методов в прикладных программных комплексах OpenOffice.org Calc (Microsoft Office), SciDAVis, Mathcad и решение задач построения кривых, поверхностей потенциальной энергии молекул по направлению физической химии, аналитической химии.

2. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах Gamess PC, MaSK и решение задачи поиска частот колебаний, поиска оптимальной конфигурации молекул по направлению квантовой механики и квантовой химии с использованием вычислительных процедур.
3. Задание строения молекул в системе декартовых и сферических (z-матрица) координат. Спецификация молекулы (мультиплетность, заряд, симметрия и др.). 3D-визуализация молекул в программе MaSK. Оптимизация геометрии молекулы в рамках самосогласованного поля Хартри-Фока (RHF, ROHF, UHF). Оценка стабильности молекул. Выполнение расчетов в программе Морас.
4. Построение и анализ диаграммы энергетических уровней органических молекул в программе MaSK.

3. Типовой перечень вопросов к зачету

1. Каковы условия применимости методов Ньютона и итераций?
2. В чем суть методов половинного деления, Ньютона и итераций?
3. Какой метод обычно дает самую быструю сходимость?
4. Как ставится задача интерполяции и какие виды интерполяции вы знаете?
5. В чем суть и геометрический смысл линейной интерполяции?
6. Что такое сплайн-интерполяция и в чем ее суть?
7. Какие типы приближенных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений Вы знаете? Назовите по одному примеру каждого типа.
8. Какова общая схема численных методов решения дифференциальных уравнений первого порядка?
9. Каков порядок точности при решении дифференциальных уравнений методами Эйлера, Рунге-Кутты второго и четвертого порядков?
10. Каким образом на практике следят за точностью при решении дифференциальных уравнений методами Рунге-Кутты второго и четвертого порядков? Обоснуйте этот способ.
11. В чем сходство и различие постановки задачи метода наименьших квадратов и задачи интерполяции?
12. Какие виды приближающих функций обычно применяются?
13. В чем суть метода приближения таблично заданной функции по методу наименьших квадратов линейной функцией?
14. Какова общая постановка задачи решения систем линейных уравнений?
15. С чем связана необходимость переставлять местами уравнения системы при решении?
16. В чем преимущество метода итераций перед другими методами?
17. В чем суть метода простых итераций, и каковы условия применимости данного метода?
18. В чем суть классического подхода к решению задач нахождения экстремума функций одной переменной?
19. Сформулируйте общую схему нахождения экстремума функций одной переменной при помощи численных методов.
20. Метод золотого сечения. Постановка задачи.
21. Сформулируйте общую схему нахождения экстремума функций многих переменных при помощи численных методов.
22. Метод координатного спуска и его реализация для функций многих переменных.
23. Метод наискорейшего координатного спуска, в чем его суть?
24. Сформулируйте определения генеральной совокупности, выборочной совокупности, средней величины, средней арифметической выборочной совокупности, дисперсии и стандартного отклонения выборочной совокупности?
25. Каков должен быть объем выборки? Принцип отбора вариант в выборочную

совокупность.

26. Графические представления эмпирического распределения: гистограмма распределения частот, полигон распределения частот.
27. Дайте определения медианы, моды эмпирического распределения.

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Методические материалы составляют систему текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины, закрепляют виды и формы текущего контроля, сроки проведения, а также виды промежуточной аттестации по дисциплине, ее сроки и формы проведения. В системе контроля указывается процедура оценивания результатов обучения по данной дисциплине при использовании бально-рейтинговой системы, показывается механизм получения оценки, основные положения БАРС, указывается система бонусов и штрафов, примерный набор дополнительных показателей.

Преподаватель, реализующий дисциплину, в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

Таблица 8
Контрольная карта

№ пп	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/ баллы	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
Основной блок				
1	Посещение занятий	0.5 балла за занятие	6	по расписанию
2	Активность студента на занятии	0.5 балла за занятие		по расписанию
3	Выступление на семинарских занятиях:			
3.1	полный ответ по вопросу	1 балл за занятие	6	по расписанию
3.2	дополнение	0.1 балла за занятие	4	
4	Выполнение самостоятельной работы	6 баллов за работу	24	по расписанию
5	Выполнение контрольной работы	10 баллов за работу	20	по расписанию
Промежуточный контроль			60 баллов	
6	Зачет	10 баллов за вопрос	40 баллов	по расписанию
Итого			100 баллов	Зачёт

Таблица 9
Система штрафов

Показатели	Баллы
Опоздание (более двух раз)	-2
Не готов(а) к практической части лабораторных занятий	-3
Нарушение учебной дисциплины	-2
Пропуск лекций без уважительной причины (за одно занятие)	-3

Пропуск лабораторного занятия без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Нарушение правил техники безопасности	-2

Таблица 10
Наличие бонусов

Показатели	Баллы
Отсутствие пропусков лекции	+2
Отсутствие пропусков на лабораторных занятиях	+2
Составление тематических докладов, сообщений	+2
Активная работа студента на занятии, вклад студента на занятии	+1
Участие с докладами на научных конференциях по тематике дисциплины/смежным дисциплинам:	
- заочная	+1/+1
- очная	+2/+1
- внутривузовская	+1/+1
- городская	+2/+1
- региональная	+3/+1
- всероссийская	+4/+2
- международная	+5/+3
Участие в учебно-производственных, научно-производственных выставках	+3

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) Основная литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. 7-е изд. – М.: БИНОМ, 2012. 635 с. (ЕИ-10 экз.);
2. Харитонов Ю.Я. Аналитическая химия: Аналитика: В 2-х кн. Кн. 2: учеб. для вузов. Количественный анализ. Физико-химические (инструментальные) методы анализа. - М.: Высш. шк., 2001. - 559 с. (ЕИ-6);
3. Кокотушкин Г.А., Численные методы алгебры и приближения функций: метод. указания к выполнению лабораторных работ по курсу "Численные методы" [Электронный ресурс] / Г.А. Кокотушкин, А.А. Федотов, П.В. Храпов. - М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. - 58 с.

Режим доступа: http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0006.html

4. Федоров А.А., Методы химического анализа объектов природной среды [Электронный ресурс] /А. А. Федоров, Г. З. Казиев, Г. Д. Казакова. - М.: КолосС, 2013. - 118 с. (Учебники и учеб. пособия для студентов высш. учеб. заведений) Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953202886.html>

б) Дополнительная литература

5. Математические методы решения химических задач: доп. УМО по клас. унив. образованию в качестве учеб. пособия для студентов вузов...по направ. подготовки "Химия" / А.И. Козко и др. - М.: Академия, 2013. - 368 с. (ЕИ-4 экз.);
6. Наац В.И., Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы [Электронный ресурс] / Наац В.И., Наац И.Э. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.

Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922111607.html>;

7. Харитонов Ю.Я., Аналитическая химия. Аналитика 2. Количественный анализ. Физико-химические (инструментальные) методы анализа [Электронный ресурс] / Ю.Я. Харитонов - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2014. - 656 с. - ISBN 978-5-9704-2941-9 - Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970429419.html>;
8. Информационные технологии в экономике и управлении (эффективная работа в MS

Office 2007) [Электронный ресурс]: Учебное пособие / Г. М. Киселев, Р.В. Бочкова, В. И. Сафонов. – М.: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К», 2013. – 272 с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785394017551.html>.

в) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения дисциплины

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех»: <https://biblio.asu.edu.ru> Учетная запись образовательного портала АГУ;
2. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований: www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ;
3. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги»: www.biblio-online.ru;

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает в себя лекционную аудиторию, оснащенную проекционным оборудованием, экраном, ЭВМ с презентационным ПО и компьютерный класс для проведения практических занятий. В учебном процессе для освоения дисциплины используются следующие технические средства – компьютерное, мультимедийное оборудование для проведения практических занятий.

При необходимости рабочая программа дисциплины может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе для обучения с применением дистанционных образовательных технологий. Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК).

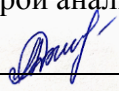
МИНОБРНАУКИ РОССИИ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП

 А.В. Великородов

«31» мая 2021 г.

УТВЕРЖДЕНО

Заведующий кафедрой аналитической и
физической химии  Л.А. Джигола

«3» июня 2021 г.

ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ
в рабочей программе дисциплины
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ
по направлению подготовки **04.03.01 ХИМИЯ**
(направленность (профиль) **Медицинская и фармацевтическая химия**)
год приёма **2020** форма обучения **очно-заочная**
на **2021-2022** учебный год

1. В раздел 4 «Структура и содержание дисциплины» вносятся следующие изменения:
 - 1.1. скорректировано распределение часов, отводимых на самостоятельную работу студентов по темам дисциплины (таблица 2, таблица 3).
2. В раздел 5 «Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся» вносятся следующие изменения:
 - 2.1. в подразделе 5.1. скорректирован перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине и добавлено количество экземпляров, имеющихся в наличии библиотеки АГУ.
 - 2.2. в подразделе 5.2. скорректировано количество часов, отводимых на самостоятельное изучение тем, а также изменена форма контроля работы (таблица 4).
3. В раздел 6 «Образовательные и информационные технологии» вносятся следующее дополнение: При реализации различных видов учебной работы по дисциплине могут использоваться электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.
 - 3.1. В подраздел 6.1. Образовательные технологии вносятся следующее дополнение: Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и off-line в формах: видеоконференции, лекций-презентаций, собеседования в режиме чат, выполнения виртуальных практических и самостоятельных работ.
 - 3.2. В подраздел 6.2. Информационные технологии вносятся следующее дополнение: При реализации различных видов учебной и внеучебной работы используются следующие информационные технологии: виртуальная обучающая среда (или система управления обучением LMS Moodle) или иные информационные системы, сервисы и мессенджеры.
 - 3.3. В подраздел 6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем вносятся следующее дополнение:
 - Перечень лицензионного программного обеспечения (2021–2022 уч. г.)Платформа дистанционного обучения LMS Moodle (Виртуальная обучающая среда).
4. В раздел 7 «Фонд оценочных средств для текущего контроля и промежуточной аттестации» вносятся следующие изменения:
 - 4.1. обновлен перечень типовых контрольных заданий, типовые задачи и вопросы для самоконтроля по темам разделов, над которыми целесообразно работать при изучении

основного материала и типовой перечень вопросов к зачету.

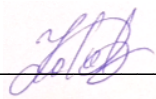
5 В раздел 8 «Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины» вносятся следующие изменения:

5.1. скорректирован перечень основной литературы, дополнительной литературы, а также ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения данной дисциплины.

6. Добавлен раздел 9 «Материально-техническое обеспечение дисциплины» вносятся следующие сведения:

6.1. Добавлены сведения о необходимости адаптировать рабочую программу дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья.

Составитель _____



Н.В. Золотарева, к.т.н., доцент
кафедры аналитической и
физической химии