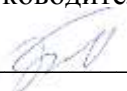


МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОПОП

 А.Г. Тырков
«01» сентября 2022 г.

УТВЕРЖДЕНО

Заведующий кафедрой аналитической и
физической химии  Л.А. Джигола
«01» сентября 2022 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

Химия

Квалификация (степень)

бакалавр

Форма обучения

очная

Год приема

2021

Курс

2

Семестр

1

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, способных работать с вычислительными методами, схемами и алгоритмами, применяемыми для решения химических задач. Численные методы являются инструментом решения конкретных задач, возникающих в рамках фундаментальной и прикладной 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.

Для обработки результатов научного эксперимента или наблюдения необходима грамотная обработка полученных результатов, исходя из целей и задач проводимых исследований. Поэтому студенты должны уметь выбирать оптимальный для решения конкретной задачи метод, правильно интерпретировать результат или подобрать подходящую программу, позволяющую обработать данные на компьютере.

На практических занятиях студент знакомится с базовыми численными методами, занимается построением графических зависимостей, гиперповерхностей, энергетических профилей, обработкой и интерпретацией результатов вычислений. Практические занятия, предусмотренные в данном курсе, позволяют качественно усвоить студентами численный аппарат. Практический курс знакомит студентов с методикой численного и аналитического эксперимента.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина «Численные методы в химии» относится к вариативной части дисциплин (Б1.В.07), формируемой участниками образовательных отношений и осваивается в 3 семестре. 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 (модуля) необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими учебными дисциплинами (модулями):

- «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: представления 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. Последующие учебные дисциплины (модули) и (или) практики, для которых необходимы знания, умения, навыки, формируемые данной учебной дисциплиной (модулем):

- 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. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

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

б) профессиональных (ПК): *ПК-1* – Способен проводить сбор, анализ и обработку информации, необходимой для решения задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

ПК-4 – Способен обрабатывать результаты работ химической направленности с использованием стандартных методов и методик.

Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
<i>ПК-1</i>	ПК-1.1.1 ключевые программные пакеты, онлайн ресурсы для составления многопоточных задач ПК-1.1.2 основы корреляционных и регрессионных методов обработки данных.	ПК-1.2.1 использовать математический аппарат и алгоритмы численного решения СЛАУ ПК-1.2.2 работать с программными средствами и онлайн ресурсами для построения зависимостей и обработки данных.	ПК-1.3.1 приемами, техникой численного решения СЛАУ ПК-1.3.2 базовыми умениями работы с вычислительными программами по обработке данных и построению корреляционных и регрессионных зависимостей.
<i>ПК-4</i>	ПК-1.1.1	ПК-1.2.1	ПК-1.3.1

	Систематизирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений; ПК-1.1.2. Предлагает подход для интерпретации результатов эксперимента	Анализирует результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов; ПК-1.2.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов	Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач ПК-1.3.2 Предлагает интерпретацию результатов и расчетно-теоретических работ с использованием основ традиционных и новых разделов химии
--	--	--	---

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет **2 зачетные единицы**, в том числе 72 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий в соответствии с учебным планом 18 часов – лекции, 36 часов – практические, семинарские занятия, 18 часов – на самостоятельную работу, зачёт – 3 семестр.

Таблица 2 – Структура и содержание дисциплины (модуля)

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самостоятельная работа		Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	3	3	6			3	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	3	2	6			2	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	3	3	4			3	Решение задач, Контрольная работа №1
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	3	3	6			3	Подготовка презентаций, решение задач для самоконтроля

Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	3	2	2			2	Подготовка презентаций, решение задач (работа в мини-группах)
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	3	2	6			2	Решение тематических задач, Контрольная работа №2
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	3	3	6			3	Подготовка презентаций, работа в мини-группах
ИТОГО		18	36			18	ЗАЧЕТ

Примечание: Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа.

Таблица 3 – Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых компетенций

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции		Общее количество компетенций
		ПК-1	ПК-4	
Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	12	+	+	2
Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	10	+	+	2
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	10		+	1
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	12	+	+	2
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	6	+	+	2
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	10	+	+	2
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	12		+	1
Итого	54			

Краткое содержание каждой темы дисциплины

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, Gamess PC и др.) и решение конкретных задач физической химии, аналитической химии, квантовой механики и квантовой химии с использованием вычислительных процедур.

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных

занятий по дисциплине

При подготовке к практическим занятиям студентам отводится время на самостоятельную работу в объеме 18 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.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

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>

Таблица 4 – Содержание самостоятельной работы обучающихся

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 задач аналитической химии. Кривая распределения результатов. Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других методах исследования.	2	Подготовка презентаций, решение задач (работа в мини-группах)
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.

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.

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Раздел I. Элементы численных методов			
<i>Тема 1.</i> Решение систем линейных алгебраических уравнений: точные и итерационные методы	Вводная лекция	Выполнение задания	Не предусмотрено
<i>Тема 2.</i> Одномерная и многомерная оптимизация. Поиск минимума функции одного переменного.	Лекция	Выполнение задания	Не предусмотрено
Раздел II. Численные методы решения квантово-механических задач и задач физической химии			
<i>Тема 1.</i> Одномерные и многомерные задачи.	Лекция	Выполнение задания	Не предусмотрено
<i>Тема 2.</i> Химические задачи,	Лекция	Выполнение	Не

сводящиеся к решению нелинейных уравнений.		задания	предусмотрено
Раздел III. Численные методы решения химико-аналитических задач			
Тема 1. Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других методах исследования.	Лекция	Выполнение задания	Не предусмотрено
Тема 2. Численное дифференцирование и интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений: решение задачи Коши.	Лекция	Выполнение задания	Не предусмотрено
Раздел IV. Численные методы и комплексы программ			
Тема 1. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах	Лекция	Выполнение задания	Не предусмотрено

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 (LMS Moodle «Цифровое обучение») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

6.3.1. Программное обеспечение

Microsoft Office 2013	Пакет офисных программ
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
Scilab	Пакет прикладных математических программ
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением

	Система автоматизации деятельности на предприятии
--	---

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu.edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu.edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu.edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru Регистрация с компьютеров АГУ
10. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
11. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>
12. Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.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 6 – Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

Контролируемый раздел, тема дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Численные методы решения систем линейных и	ПК-1; ПК 4	Фронтальный

нелинейных алгебраических уравнений.		опрос Решение задач
Численные методы одномерной и многомерной оптимизации.	<i>ПК-1; ПК 4</i>	Фронтальный опрос Решение задач
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	<i>ПК-4</i>	Пятиминутка Решение задач
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	<i>ПК-1; ПК 4</i>	Фронтальный опрос Самостоятельная работа
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	<i>ПК-1; ПК 4</i>	Фронтальный опрос Решение задач
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	<i>ПК-1; ПК 4</i>	Фронтальный опрос Решение задач
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	<i>ПК 4</i>	Фронтальный опрос

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

Таблица 7 – Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры

Таблица 8 – 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, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание по подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задания

7.3. Контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине

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:

$$\begin{array}{ll} \text{а) } \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 = 5 \\ 5x_1 + 14x_2 = 14 \end{cases} & \text{б) } \begin{cases} 2,448x_1 + 3x_2 = 9,668 \\ 3x_1 + 8,224x_2 = 21,962 \end{cases} \\ \text{в) } \begin{cases} 4,4x_1 - 3x_2 = 5,8 \\ -3x_1 + 9,6x_2 = 3,6 \end{cases} & \text{г) } \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 1,999 \\ 2x_1 + 16x_2 = 8,666 \end{cases} \end{array}$$

4. Методом Жордана-Гаусса найти общее решение системы:

$$\begin{array}{ll} \text{а) } A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 = 8 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 7 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 10 \end{cases} & \text{б) } A = \begin{cases} x_1 - 2x_2 + 3x_3 = 4 \\ 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 = -2 \\ 3x_1 - 2x_2 - 5x_3 = -2 \end{cases} \\ \text{в) } A = \begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 5 \end{cases} & \text{г) } A = \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - 4x_3 = 9 \\ 3x_1 + 15x_2 - 9x_3 = 21 \\ 5x_1 + 5x_2 - 7x_3 = 15 \end{cases} \end{array}$$

5. Решить систему методом простой итерации:

$$\begin{array}{ll} \text{а) } \begin{cases} 6x + 2y - 3z = 10 \\ 2x - 5y + z = -8 \\ 3x + 2y + 6z = 7 \end{cases} & \text{б) } \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - x_3 = -4 \\ 10x_1 + 2x_2 - 2x_3 = -8 \\ -x_1 - 2x_2 + 6x_3 = 24 \end{cases} \\ \text{в) } \begin{cases} 6x_1 - 2x_2 - x_3 = 7 \\ 3x_1 + 5x_2 - x_3 = 15 \\ x_1 + x_2 + 7x_3 = 11 \end{cases} & \text{г) } \begin{cases} 5x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 4 \\ 2x_1 - 7x_2 + 2x_3 = 8 \\ 6x_1 + 3x_2 + 8x_3 = 28 \end{cases} \end{array}$$

6. Решить систему методом Зейделя:

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

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

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

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

7. Решить систему методом Крамера:

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

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

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

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

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 $r \in [1, 3]$, для функции вида $Q(r) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \cdot e^{-\frac{r}{3a_0}} \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot r}{3 \cdot a_0} + \frac{2 \cdot r^2}{27 \cdot (a_0)^2}\right)$ где a_0 – радиус боровской орбиты $0,529\text{\AA}$.

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 $r \in [0, 4]$, где a_0 – радиус Боровской орбиты $0,529\text{\AA}$

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

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 « $|\psi|^2$ –г» 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 °С и 450 °С (с точностью до 6 значащих цифр), если известно:

T, К	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).

3. Комплект заданий к контрольной работе

Вариант 1

- Приведите примеры построения аналитических и имитационных моделей.
- 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.
- 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

- 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 механике
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

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

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

6 значащих цифр.

8. С помощью симплекс-метода требуется решить задачу:

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

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 °С и 450 °С (с точностью до 6 значащих цифр), если известно:

T, К	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
$A_{до}$	0,046	0,108	0,204	0,32	0,403	0,506	0,576	0,589	0,630	0,682
$A_{после}$	0,023	0,012	0,149	0,223	0,315	0,325	0,429	0,500	0,606	0,66

Постройте график зависимости оптическая плотность – 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
$A_{до}$	0,076	0,176	0,295	0,4	0,48	0,58	0,67	0,75	0,852	0,922
$A_{после}$	0,044	0,122	0,177	0,164	0,168	0,217	0,218	0,199	0,253	0,179

Постройте график зависимости оптическая плотность – 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.

- 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.
- 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.
- 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
- При анализе железной руды были найдены следующие значения (% Fe₂O₃): 23,11; 24,90; 22,62; 23,14; 24,45%. Определите величину доверительного интервала при P=0,95.
- 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

- 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.
- 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 (% Fe₃O₄): 13,14; 14,50; 20,20; 31,14; 14,08; 12,87%. Определите величину доверительного интервала при P=0,95.

Вариант 2

- 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.
- 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 _{до}	0,026	0,780	0,194	0,302	0,38	0,498	0,589	0,702	0,990	0,970
A _{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

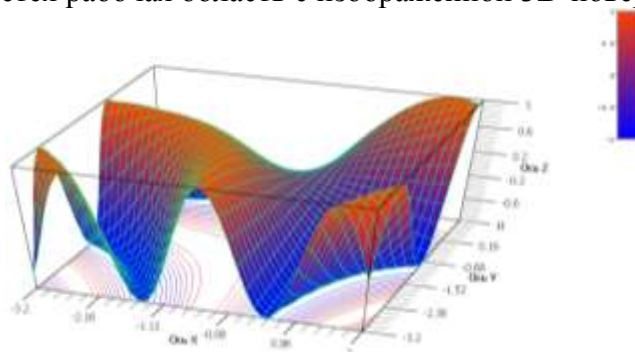
Построение 3D-поверхностей в SciDAVis



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.);

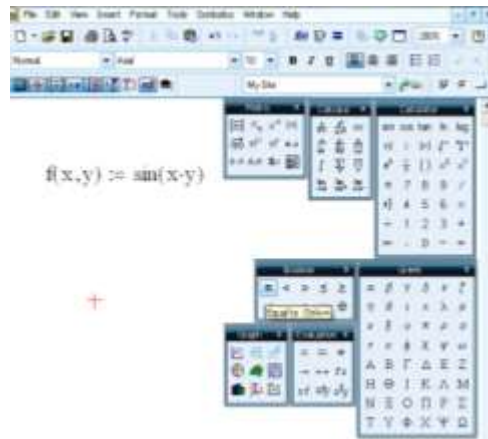


4. Построенную трехмерную поверхность можно вращать, приближать, удалять, копировать, изменять параметры, управляя колесиком и левой кнопкой мыши;
5. Вид поверхности можно менять, используя панель инструментов **3D-поверхность**;
6. Изменить масштаб, диапазон построения поверхности, подписи осей, цвет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

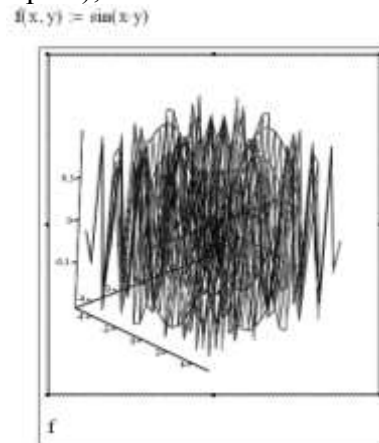


Построение 3D-поверхностей в Mathcad

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.);



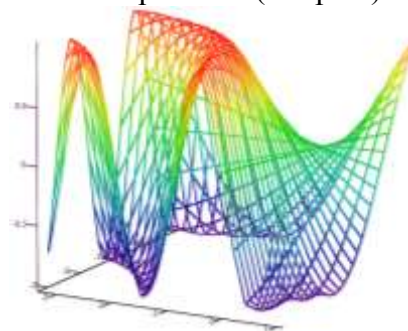
2. Открыть меню **Вставка (Insert)** и выбрать команду **График (Graph)** → **График поверхности (Surface plot)** (см. рис.);



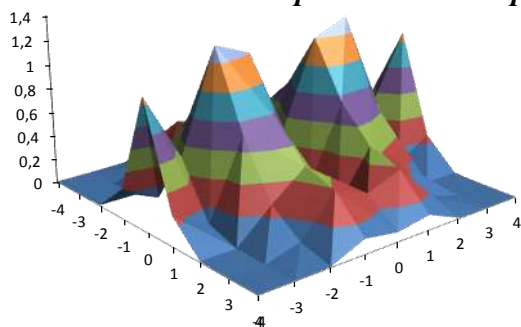
3. Построенную трехмерную поверхность можно вращать, приближать, удалять, копировать, изменять параметры, управляя колесиком и левой кнопкой мыши;
4. Изменить масштаб, диапазон построения поверхности, подписи осей, цвет и другие параметры можно с помощью двойного щелчка мыши по рисунку. Появится диалоговое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



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



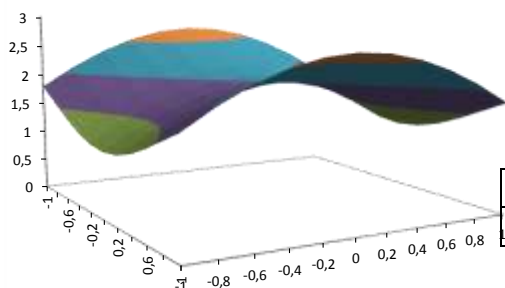
Построение 3D-поверхностей в Microsoft Office Excel



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

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

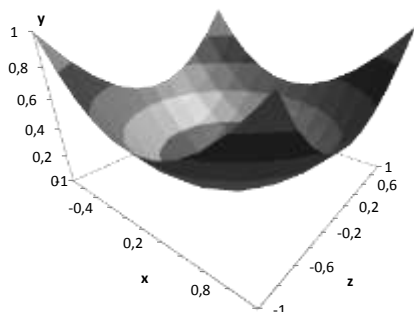
a	b	c	d
1	0,5	1	1



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

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c
1	1	0



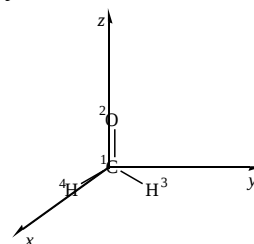
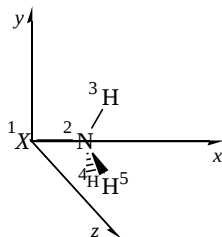
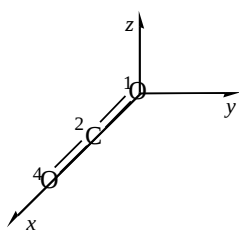
$$f(x, y) = \frac{\frac{(x)^2}{(a)^2} + \frac{(y)^2}{(b)^2} + (d)}{c}$$

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°3', HCO 120°

2. 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
3. Вычислите величины декартовых координат атомов в молекуле хлоруксусной кислоты и вычислите оптимальное расстояние между атомами H⁷ и O³:

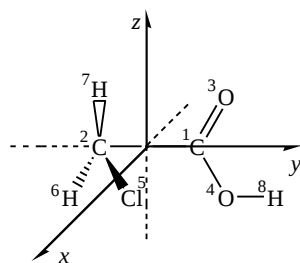


Таблица Характерные свойства некоторых элементов

<i>Z</i>	<i>Элемент</i>	<i>Радиус, Å</i>		
		<i>атомный</i>	<i>ковалентный по Полингу</i>	<i>экспериментальный</i>
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

1. 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.

**Перечень вопросов и заданий,
выносимых на экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт**
Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ПК-1 – Способен проводить сбор, анализ и обработку информации, необходимой для решения задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации				
1.	Задание закрытого типа	Браузеры (например, Google) являются: а) серверами Интернет. б) антивирусными программами. в) трансляторами языка программирования. г) средством просмотра Web-страниц.	г	1
2.		Какой метод из итерационных обычно дает самую быструю сходимость? а) Жордана-Гаусса б) Зейделя	б	1
3.		Информационно-поисковые системы позволяют: а) осуществлять поиск, вывод и сортировку данных; б) осуществлять поиск и сортировку данных; в) редактировать данные и осуществлять их поиск; г) редактировать и сортировать данные.	а	1
4.		К каким методам относится метод прогонки? а) прямые методы; б) итерационные методы.	а	1
5.	Задание открытого типа	В чем суть и геометрический смысл линейной интерполяции?	интерполяция алгебраическим двучленом $P_1(x)=ax+b$ функции $f(x)$, заданной в двух точках x_0 и x_1 отрезка $[a,b]$. В случае, если заданы значения в нескольких точках, функция заменяется кусочно-линейной функцией.	5
6.		Какой метод обычно	Из всех методов точных и	5

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		дает самую быструю сходимость?	итерационных, наиболее удачным считается и по временным затратам и по эффективности – метод Зейделя. Среди точных методов можно отметить – метод прогонки.	
7.		Метод координатного спуска и его реализация для функций многих переменных.	<i>Идея метода:</i> Движение от начальной точки по направлению одной из осей координат до момента начала возрастания целевой функции, переход к направлению другой оси и т. д., пока не будет достигнута точка, движение из которой по любой оси координат с минимально возможным шагом приводит к увеличению значения целевой функции. Основные этапы поиска $\min f(x_1, \dots, x_n)$ методом координатного спуска: 1) выбор начального приближения; 2) выбор направления поиска, т.е. номера компоненты вектора $(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которая будет изменяться; 3) вычисление значения производной целевой функции по выбранному аргументу увеличивается, то уменьшается, до тех пор, пока $f(x_1(k+1), x_2(k+1), \dots, x_n(k+1)) < f(x_1(k), x_2(k), \dots, x_n(k))$; 4) в противном случае производится возврат на п. 2) и выбор следующего направления поиска, при этом $x_i(0) = x_i(k)$, $i=1, 2, \dots, n$ (h – шаг поиска, $\text{sign}(z)$ – знак выражения (z)); 5) если попытка движения с шагом h в любом из n возможных направлений приводит к ситуации, то осуществляется дробление шага: $h = h/p$ ($p > 1$) и вновь выполняется п. 4); 6) поиск считается законченным, когда значение h становится меньше заданной точности ϵ.	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
8.		Что такое сплайн-интерполяция и в чем ее суть?	Сплайн интерполяция – это кусочно заданная функция, то есть совокупность нескольких функций, каждая из которых задана на каком-то множестве значений аргумента, причём эти множества попарно непересекающиеся. Сплайны имеют многочисленные применения в вычислительных программах. В частности, сплайны двух переменных интенсивно используются для задания поверхностей в различных системах компьютерного моделирования. Сплайны двух аргументов называют би-сплайнами (например, бикубический сплайн), которые являются двумерными сплайнами, моделирующими поверхности.	5-8
ПК-4 – Способен обрабатывать результаты работ химической направленности с использованием стандартных методов и методик				
9.	Задание закрытого типа	Прикладное программное обеспечение предназначено для: а) применения в различных сферах деятельности человека; б) создания архивных копий документов; в) создания программ на одном из языков программирования; г) диагностики и лечения от компьютерных вирусов.	а	1
10.		Какая из представленных моделей описывает квантовые состояния системы: а) Квантово-химические модели химических процессов. б) Статистические модели химических процессов.	а	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		в) Кинетические модели химических процессов		
11.		Модель уравнения линейной регрессии имеет вид: а) $y = 1/a + b \cdot x + e$ б) $y = a + b \cdot x + e$ в) $y = b \cdot x^2 + e$ г) $y = e^{a + b \cdot x}$	б	1
12.	Задание открытого типа	Решить задачу и описать этапы вычисления: Вычислите декартовы координаты хлорноватистой кислоты HOCl. Известны радиусы по Полингу (Å) для H = 0,3; O = 0,66, Cl = 0,99.	Пронумеруем атомы и центрируем на координатной сетке. Поскольку молекула укладывается в плоскости xu, то целесообразно упростить вычислительную модель. Таким образом, связь $\text{O}^1\text{-Cl}^2$ будет вытянута вдоль оси x, а H будет направлен в третью четверть под углом 104 градуса. Что приблизительно соответствует валентному углу в молекуле воды. Для O^1 координаты соответствуют (0;0;0). Для Cl^2: $x = (R(\text{O}) + R(\text{Cl})) \cdot \cos(0) = (0,66 + 0,99) \cdot 1 = 1,65$ $y = (R(\text{O}) + R(\text{Cl})) \cdot \sin(0) = (0,66 + 0,99) \cdot 0 = 0$ $z = 0.$ Для H^3: $x = (R(\text{H}) + R(\text{O})) \cdot \cos(180 - 104) = (0,3 + 0,66) \cdot 0,24 = 0,23$ $y = (R(\text{H}) + R(\text{O})) \cdot \sin(76) = (0,3 + 0,66) \cdot 0,97 = 0,93$ $z = 0.$ Следовательно, атомы в молекуле хлорноватистой кислоты имеют следующие декартовы координаты: O^1 (0;0;0) Cl^2 (1,65;0;0) H^3 (0,23;0,93;0)	5-8
13.		Для чего используется кластерный анализ и в какой области химического знания могут быть применены методы кластерного	Кластерный анализ представляет собой способ графического представления материала (объекта), дает возможность наглядно изучить результат. Это многомерная статистическая	5

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		анализа?	процедура по сбору данных, содержащих информацию о выборке объектов и упорядочиванию объектов в сравнительно однородные группы. Задача кластеризации относится к статистической обработке и может быть выполнена в любой вычислительной программе, включая Excel. В химии, методы кластерного анализа могут быть применимы при изучении структуры и свойств гомологов и (или) изомеров, при обработки данных в производственных масштабах.	
14.		Предложите программы или онлайн-редакторы для обработки результатов лабораторного исследования методом наименьших квадратов. $x = 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ 8 \ 9$ $y = 0,95 \ 0,88 \ 0,81 \ 0,75 \ 0,71 \ 0,67 \ 0,63 \ 0,60$	Для обработки по методу наименьших квадратов достаточно использовать приложение Excel с включением дополнительной функции. Для этого необходимо внести данные в табличном виде. Далее добавить функции, которые фигурируют в формулах и вычислить значения. На основании полученных результатов можно продемонстрировать график зависимости.	5-8

Полный комплект оценочных материалов по дисциплине (фонд оценочных средств) хранится в электронном виде на кафедре, утверждающей рабочую программу дисциплины, и в Центре мониторинга и аудита качества обучения.

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

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 10 – Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине

№ пп	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/ баллы	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
Основной блок				
1	Посещение занятий	0,5 балла за занятие	10	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	18	по расписанию
3.2	дополнение	0,1 балла за занятие	18	
4	Выполнение самостоятельной работы	6 баллов за работу	24	по расписанию
5	Выполнение контрольной работы	10 баллов за работу	20	по расписанию
Промежуточный контроль			90 баллов	
6	Зачет (тестирование)	10 баллов за вопрос	10 баллов	по расписанию
Итого			100 баллов	Зачёт

Таблица 11 - Система штрафов (для одного занятия)

Показатели	Балл
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 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90–100	5 (отлично)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		
70–74		
65–69	3 (удовлетворительно)	
60–64		
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено

При реализации дисциплины (модуля) в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1. 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>

8.2. 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>.

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu.edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu.edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu.edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» www.studentlibrary.ru Регистрация с компьютеров АГУ

9. 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 и семинарских работ. В учебном процессе для освоения дисциплины используются следующие технические средства – компьютерное, мультимедийное оборудование для проведения практических занятий.

Рабочая программа дисциплины при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами, или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. Для инвалидов содержание рабочей программы дисциплины может определяться также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).