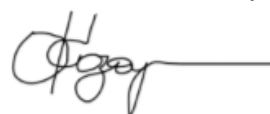


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой  
физической химии



Козадеров О.А..

20.04.2020 г

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б1.В.11 Вычислительные методы в химии**

- 1. Шифр и наименование специальности:**  
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Профиль специализации:** Фундаментальная химия в профессиональном образовании
- 3. Квалификация выпускника:** Химик. Преподаватель химии
- 4. Форма образования:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:**  
кафедра физической химии
- 6. Составители программы:** Протасова Ирина Валентиновна, к.х.н., доцент
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета 19.03.2020, протокол № 3
- 8. Учебный год:** 2021/ 2022                      **Семестр:** 3

### 9. Цели и задачи изучения дисциплины:

Вычислительные методы в химии – дисциплина, направленная на изучение структуры программ, языков, алгоритмов, принципов формирования массивов данных и вычислительных алгоритмов, методов решения химических задач, сводящихся к численному решению нелинейных уравнений, численному интегрированию, интерполяции. В ходе преподавания дисциплины ставится цель обучения студентов использованию навыков программирования для рассмотрения численных методов интегрирования, дифференцирования, элементов матричной алгебры и т. д., для решения химических задач.

Обучающиеся знакомятся с основными алгоритмами построения программ и методами их реализации; обучения правилам написания программ на языке программирования высокого уровня.

### 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Учебная дисциплина «Вычислительные методы в химии» является обязательной дисциплиной вариативной части блока 1 в структуре образовательной программы направления подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и изучается в 3 семестре.

Освоение дисциплины «Вычислительные методы в химии» является основой для последующего изучения дисциплин вариативной части профессионального цикла, прохождения производственной практики.

### 11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии	ПК -3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературным и данными	Знать: вычислительные методы решения нелинейных уравнений, систем уравнений, интегрирования, интерполяции;  Уметь: применять вычислительные методы для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание
		ПК -3.2	Определяет	Знать: методы реализации

			возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	алгоритмов посредством языков программирования  Уметь: составлять алгоритмы решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций  Владеть: методами реализации алгоритмов с использованием языков программирования
--	--	--	--	--

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом - 4 / 144**

Форма промежуточной аттестации зачет

**13. Виды учебной работы:**

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	По семестрам
		3
Аудиторные занятия	102	102
в том числе: лекции	34	34
лабораторные	68	68
Самостоятельная работа	42	42
Форма промежуточной аттестации		
Зачет		х
Итого:	144	144
Форма текущей аттестации		Контрольная работа (1)

**13.1. Содержание разделов дисциплины:**

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
<b>1. Лекции</b>			
1.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Структура программы. Структура языка. Форма. Классы. Правила наследования. Реализация линейных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>

1.2	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Организация разветвленных алгоритмов. Условный оператор.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.3	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Организация разветвленных алгоритмов. Оператор выбора.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.4	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Реализация циклических алгоритмов. Операторы цикла.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.5	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических алгоритмов. Операторы цикла.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.6	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Файловые типы данных. Ввод и вывод с использованием текстовых и типизированных файлов	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.7	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования.	Тип массив. Формирование преобразование элементов массива. Сортировка элементов массива методом перестановки, пузырька, методом нахождения среднего с использованием рекурсивного алгоритма.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.8	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Динамические массивы. Тип строка. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.9	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Процедуры и функции пользователя. Правила локализации объектов. Рекурсия. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм: функций и процедур пользователя	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>

1.10	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Тип запись. Тип множество. Формирование массива данных на основе типов Запись, Множество.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.11	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Задачи нахождения значения и табуляции сложной функции. Задачи нахождения значения конечных и бесконечных рядов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.12	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.13	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических задач, сводящихся к численному интегрированию. Численное интегрирование методом трапеций, методом Симпсона. Оценка сходимости методов. Нахождение значения интеграла с заданной точностью.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.14	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Решение химических и химико-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.15	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц. Решение системы линейных уравнений методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.16	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Локальная и глобальная аппроксимация. Аппроксимация функцией заданного вида. Метод наименьших квадратов Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
1.17	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Поиск решения дифференциальных уравнений методом Эйлера, методом Рунге-Кутты. Решение химических задач, сводящихся к численному решению дифференциальных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
<b>2. Лабораторные работы</b>			
2.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка	Структура программы. Структура языка. Форма. Классы. Правила наследования. Реализация линейных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>

	программирования		
2.2.	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal, Python	Организация разветвленных алгоритмов. Условный оператор.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.3	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Организация разветвленных алгоритмов. Оператор выбора.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.4	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических алгоритмов. Операторы цикла.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.5	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических. Операторы цикла.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.6	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Файловые типы данных. Ввод и вывод с использованием текстовых и типизированных файлов	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.7	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Тип массив. Формирование преобразование элементов массива. Сортировка элементов массива методом перестановки, пузырька, методом нахождения среднего с использованием рекурсивного алгоритма.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.8	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Динамические массивы. Тип строка. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>

2.9	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Процедуры и функции пользователя Правила локализации объектов. Рекурсия. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм: функций и процедур пользователя	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.10	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Тип запись. Тип множество. Формирование массива данных на основе типов Запись, Множество.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.11	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Задачи нахождения значения и табуляции сложной функции. Задачи нахождения значения конечных и бесконечных рядов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.12	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.13	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических задач, сводящихся к численному интегрированию. Численное интегрирование методом трапеций, методом Симпсона. Оценка сходимости методов. Нахождение значения интеграла с заданной точностью.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.14	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических и химико-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.15	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц. Решение системы линейных уравнений методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.16	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Локальная и глобальная аппроксимация. Аппроксимация функцией заданного вида. Метод наименьших квадратов Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
2.17	Применение вычислительных методов к химическим	Поиск решения дифференциальных уравнений методом Эйлера, методом Рунге-Кутты. Решение химических задач, сводящихся к численному решению дифференциальных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>

	задачам.		
--	----------	--	--

### 13.2. Разделы дисциплины и виды занятий:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования.	18		40	14	72
2	Применение вычислительных методов к химическим задачам	16		28	28	72
	Итого:	34		68	42	144

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «MOOC ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети для организации лекционных, лабораторных занятий и самостоятельной работы студентов.

Овладение знаниями по дисциплине предполагает посещение лекций и лабораторных занятий, проводимых под руководством преподавателя, а также активную самостоятельную работу.

Формы работы студентов при изучении дисциплины отражены в методических материалах к каждой теме занятия.

При изучении дисциплины используются следующие виды и формы аудиторной работы студентов:

- посещение лекций;
- выполнение практических заданий;
- изучение учебной, научной и методической литературы с использованием ресурсов библиотеки ВГУ, материалов, размещенных в электронном курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ» и электронных библиотечных систем;
- тестирование;

Контроль результатов самостоятельной работы студентов, которую они выполняют на лабораторных занятиях осуществляется в пределах времени, отведенного на занятие по дисциплине.

Формы контроля при изучении дисциплины:

- индивидуальное практическое задание;
- тестирование.

При изучении дисциплины используются следующие виды и формы внеаудиторной работы студентов:



- изучение учебной, научной и методической литературы с использованием ресурсов библиотеки ВГУ, материалов, размещенных в электронном курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ» и электронных библиотечных систем;
- выполнение индивидуальных практических заданий по темам;
- самотестирование в электронном курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ»

Контроль результатов внеаудиторной самостоятельной работы преподаватель осуществляет в электронном курсе на курсе на образовательном портале «Электронный университет ВГУ» на каждом лабораторном занятии в пределах времени, отведенного на занятие по дисциплине.

В ходе подготовки к лабораторным занятиям, текущим и промежуточным аттестациям студенту рекомендуется активно использовать электронный курс "Вычислительные методы в химии", размещенный на Образовательном портале "Электронный университет ВГУ", где размещен дополнительный теоретический материал по теме занятия, тесты для самопроверки, практические задания по дисциплине и перечень вопросов для подготовки к текущим и промежуточным аттестациям. Также студенту рекомендуется использовать весь набор методов и средств современных информационных технологий для изучения отечественной и зарубежной литературы по дисциплине, оценки и анализа ее текущего состояния и перспектив развития.

Студенту предоставляется возможность работать в компьютерном классе химического факультета (271 аудитория), предоставляется доступ к Интернет-ресурсам и электронной почте, программному обеспечению компьютерного класса факультета, ресурсам Зональной научной библиотеки ВГУ, в том числе электронно-библиотечным системам.

## 15. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Северанс, Ч. Р. Python для всех [Электронный ресурс] / Северанс Ч. Р. Москва : ДМК Пресс, 2022. 262 с. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/241115">https://e.lanbook.com/book/241115</a>
2.	Амосов А. А. Вычислительные методы [Электронный ресурс] / Амосов А. А., Дубинский Ю. А., Копченова Н. В. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 672 с. — URL: <a href="http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=42190">http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=42190</a> .

### б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3.	Бюиссон, Ф. Анализ поведенческих данных на R и Python [Электронный ресурс] / Бюиссон Ф. Москва : ДМК Пресс, 2022. 368 с. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/241145">https://e.lanbook.com/book/241145</a>
4.	Крылов, В. И. Вычислительные методы / В.И. Крылов, В.В. Бобков, П.И. Монастырский ; ред. Е. Ю. Ходан ; ред. Е. В. Шикин. — Москва : Наука, 1977. — 400 с. — <a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a> .— <URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=456989">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=456989</a> >.
5.	Каныгина, О. Н. Вычислительные методы в химии : учебное пособие / О. Н. Каныгина. — Оренбург : ОГУ, 2019. — 99 с. — ISBN 978-5-7410-2274-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/15994">https://e.lanbook.com/book/15994</a>
6.	Алексеев Е. Программирование на Free Pascal и Lazarus / Е. Алексеев, О. Чеснокова, Т. Кучер. — 2-е изд., исправ. — Москва : Национальный Открытый

	Университет «ИНТУИТ», 2016. – 552 с. – URL: <a href="https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=429189">https://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=429189</a>
7.	Широков, А.И. Информатика. Разработка программ на языке программирования Питон. Базовые языковые конструкции [Электронный ресурс] / А.И. Широков, М.О. Пышняк. - М. : МИСиС, 2020. — ISBN 5-907226-76-0 .— <URL: <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785907226760.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785907226760.html</a> >.
8.	Стивенс, Р. Delphi. Готовые алгоритмы / Стивенс Р. .— Москва : ДМК Пресс, 2007 .— 380 с. — (Для программистов) .— .— ISBN 5-94074-106-1 .— URL: <a href="http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&amp;pl1_id=1249">http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&amp;pl1_id=1249</a> .
9.	Тюкачев Н. А. Программирование в Delphi для начинающих : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по специальности 351400 "Прикладная информатика (по областям)" и другим специальностям / Н.Тюкачев, К. Рыбак, Е. Михайлова. — СПб. : БХВ-Петербург, 2007. — 651 с.
10.	Программирование на языке Паскаль : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по направлению подгот. бакалавров и магистров "Информатика и вычисл. техника" и по направлениям подгот. дипломир. специалистов "Информатика и вычисл. техника" и "Информ. системы" : задачник / [под ред. О.Ф. Усковой]. — СПб. : Питер, 2002.— 333 с.
11.	Протасова И. В. Численные методы. Применение в химии : учеб.-метод. пособие по курсу "Численные методы и программирование" по специальностям: 020201 (011000) - Химия / И.В. Протасова, В.А. Крысанов .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2005 .— 47 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы Интернет)\*:

№ п/п	Источник
12.	Информационная система "Университетская библиотека ONLINE" — URL: <a href="http://biblioclub.ru">http://biblioclub.ru</a>
13.	Электронно-библиотечная система "Издательство "Лань" — URL: <a href="http://e.lanbook.com">http://e.lanbook.com</a>
14.	Электронно-библиотечная система "Консультант студента". – URL: <a href="http://www.studmedlib.ru">http://www.studmedlib.ru</a>
15.	Научная электронная библиотека — URL: <a href="http://www.elibrary.ru">http://www.elibrary.ru</a>
16.	Электронная библиотека Воронежского государственного университета — URL: <a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a>
17.	Образовательный математический сайт - URL: <a href="http://www.exponenta.ru">http://www.exponenta.ru</a>
18.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" . — URL: <a href="http://window.edu.ru">http://window.edu.ru</a>
19.	Протасова И.В. Вычислительные методы в химии. Электронный курс/ И.В. Протасова. – URL: <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>

## 16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

Самостоятельная работа

№ п/п	Источник
1	Практикум по информатике. Статистическая обработка химического эксперимента средствами электронных таблиц [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие : [для студентов 1-го курса химического факультета, для направлений: 04.03.01 - Химия, 04.03.02 - Химия, физика и механика материалов (бакалавриат), 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (специалитет)] / Воронеж. гос. ун-т ; сост. И.В. Протасова ; сост. И.В. Нечаев .— Электрон. текстовые дан. —

	Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2017 .— Свободный доступ из интрасети ВГУ .— Текстовый файл .— Windows 2000; Adobe Acrobat Reader .— URL: <a href="http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-80.pdf">http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-80.pdf</a> .
3	Протасова И.В. Вычислительные методы в химии: Электронный курс/ И.В. Протасова. – URL: <a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587</a>
4.	Протасова И. В. Численные методы. Применение в химии : учеб.-метод. пособие по курсу "Численные методы и программирование" по специальностям: 020201 (011000) - Химия / И.В. Протасова, В.А. Крысанов .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2005 .— 47 с.

## **17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ, электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):**

При реализации дисциплины используются технологии:

1. Организация взаимодействия со студентами посредством мессенжера в ЭУМК, электронной почты - [protasova@chem.vsu.ru](mailto:protasova@chem.vsu.ru), через сайт факультета - <http://www.chem.vsu.ru>

2. Использование электронных библиотечных систем и профессиональных электронных ресурсов для организации самостоятельной работы:

ЭБС «Консультант студента». <URL <http://www.studentlibrary.ru/>>,

ЭБС «Университетская библиотека онлайн». <URL:<http://biblioclub.ru/>>,

ЭБС «Лань». <URL:<http://www.e.lanbook.com/>>,

ЭБС IPRbooks <URL:<http://www.iprbookshop.ru/>>,

Образовательный портал «Электронный университет ВГУ»,

Сайт химического факультет ВГУ. - <URL: <http://www.chem.vsu.ru>>,

Официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Интернет. <<http://www.chemnet.ru>>,

Образовательный математический сайт Exponenta.ru. <[www.exponenta.ru](http://www.exponenta.ru)>,

Научная электронная библиотека. — <<http://www.elibrary.ru>>,

Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" . — <<http://window.edu.ru>>

3. Программное обеспечение – WinSrvStd 2012 RUS OLP NL Acdmc 2Proc, Антивирус Касперского, Антивирус Dr. Web, MS Office 2003 Std Win32 RUS OLP NL AE, Gaussian09, Microsoft Windows 7, Программная система для обнаружения текстовых заимствований в учебных и научных работах «Антиплагиат.ВУЗ», СПС «ГАРАНТ-Образование», СПС "Консультант Плюс" для образования, LibreOffice, Mozilla Firefox

## **18. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

1. Аудиторный фонд корпуса №1 по ул. Университетская пл.1 - 271 аудитория, Интернет-центр ВГУ

2 Мебель и оборудование учебных аудиторий - столы, стулья, мультимедийная переносная система, электронно-вычислительная техника.

3. Компьютерный класс на 12 посадочных мест, оборудованных персональными компьютерами на базе процессоров Intel, объединенных в локальную вычислительная сеть, подключенную к сети Воронежского госуниверситета, имеющие выход в Интернет.

4. Предусмотрена возможность обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья с применением специального оборудования: колонки, мультимедийный проектор, операционные системы с режимом настройки специальных возможностей (оптимизация изображения на экране, подключение режима чтения с экрана, голосового ввода и др.), мобильные компьютеры – ноутбуки.

## 19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования.	ПК 3	ПК.3.1	Практическое задание, Тест
2.	Применение вычислительных методов к химическим задачам	ПК	ПК 3.2	Практическое задание, Тест
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет				Перечень вопросов Практическое задание

## 20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущих и промежуточных аттестаций.

Текущие аттестации проводятся в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущие аттестации проводятся в форме контрольной работы. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточные аттестации проводятся в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Промежуточная аттестация (зачет) проводится в форме Тестового опроса на образовательном портале "Электронный университет ВГУ" индивидуального контрольного задания. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы (в тесте), позволяющие оценить уровень полученных знаний и практические задания, позволяющее оценить степень сформированности умений и навыков.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены ниже

### 20.1. Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Даны две квадратные вещественные матрицы 10-го порядка. Напечатать квадрат той из них, в которой наименьшая сумма диагональных элементов, считая, что такая матрица одна.

1. Даны действительные числа  $a$ ,  $b$ ,  $c$ .

Получить  $(\max(a, a+b) + \max(a, b+c)) / (1 + \max(a+b*c, 1, 15))$ .

2. Составить процедуру, заменяющую в исходной строке символов все единицы нулями, а все нули единицами. Замена должна выполняться начиная с заданной позиции строки.

3. Описать функцию  $\text{step}(x, n)$ , от вещественного  $x$  и натурального  $n$ , вычисляющую (через умножение) величину  $x^n$ , и использовать ее для вычисления значения выражения  $b = 2.7^k + (a+1)^{-5}$ .

4. Дан файл  $f$ , компоненты которого являются действительными числами. Найти сумму компонент файла  $f$ .

5. Дан файл  $f$ , компоненты которого являются целыми числами. Записать в файл  $g$  все четные числа файла  $f$ , в файл  $h$  - все нечетные. Порядок следования чисел сохраняется.

6. Дан символьный файл  $f$ . Получит копию файла в файле  $g$ .

7. Дан файл, содержащий сведения об элементах: указывается название, знак, порядковый номер, атомная масса, металл/неметалл. Найти порядковые номера и названия всех неметаллов.

8. Дан файл, содержащий сведения об элементах: указывается название, знак, порядковый номер, атомная масса, металл/неметалл. Найти порядковые номера и названия всех неметаллов.

9. Найти сумму положительных и произведение отрицательных элементов двумерного массива.
10. Вывести на печать номера позиций, в которых находятся нулевые элементы двумерного массива.
11. Поменять местами строки  $n$  и  $m$ , столбцы  $l$  и  $k$  квадратной матрицы.
12. Обнулить элементы столбца двумерного массива, содержащего максимальный элемент.
13. В столбцах матрицы элементы переставить так, чтобы их значения нарастали с увеличением номера строки.
14. Даны натуральное число  $n$ , строка длиной в  $n$  символов. Группы символов, разделенные пробелами (одним или несколькими) и не содержащие пробелов внутри себя, будем считать *словами*. Найти самое длинное слово в введенной фразе и посчитать число слов.
15. Даны натуральное число  $n$ , строка длиной в  $n$  символов. Группы символов, разделенные пробелами (одним или несколькими) и не содержащие пробелов внутри себя, будем считать *словами*. Выяснить, встречается ли в строке последовательность символов состоящая из стоящих рядом трех точек.
16. Даны натуральное число  $n$ , строка длиной в  $n$  символов. Группы символов, разделенные пробелами (одним или несколькими) и не содержащие пробелов внутри себя, будем считать *словами*. Подсчитать количество слов в данной последовательности.
17. Даны натуральное число  $n$ , строка длиной в  $n$  символов. Группы символов, разделенные пробелами (одним или несколькими) и не содержащие пробелов внутри себя, будем считать *словами*. Найти количество слов, начинающихся с буквы, заданной пользователем.
18. Даны натуральное число  $n$ , строка длиной в  $n$  символов. Группы символов, разделенные пробелами (одним или несколькими) и не содержащие пробелов внутри себя, будем считать *словами*. Найти длину самого короткого слова.
19. Даны натуральное число  $n$ , строка длиной в  $n$  символов. Группы символов, разделенные пробелами (одним или несколькими) и не содержащие пробелов внутри себя, будем считать *словами*. Напечатать все символы между двумя первыми двоеточиями.
20. Из диагональных элементов квадратной матрицы действительных чисел создать одномерный массив.
21. Из элементов квадратной матрицы целых чисел кратных 8 создать одномерный массив.
22. Из максимальных элементов каждой строки квадратной матрицы целых чисел создать одномерный массив. Нахождение максимального элемента в строке оформить виде процедуры.
23. Из минимальных элементов каждой строки квадратной матрицы вещественных чисел создать одномерный массив. Нахождение минимального элемента в строке оформить виде функции.
24. Из максимальных элементов каждого столбца квадратной матрицы натуральных чисел создать одномерный массив. Нахождение максимального элемента в столбце оформить виде процедуры.
25. Из номеров позиций вхождения символа  $a$  в строку создать одномерный массив натуральных чисел.
26. По результатам сессии (4 экзамена) часть студентов получила только отличные оценки. Программа должна распечатывать список этих студентов.

27. На курсе 8 групп. В сессию каждая группа сдает 4 экзамена. Распечатать средний балл каждой группы и списки групп с самым высоким и самым низким средним баллом.
28. Имеется одномерный массив целых чисел. Создать и напечатать новый массив из чисел первого массива, кратных одновременно 3 и 5.
29. Имеется квадратная матрица. Программа должна обнулять элементы главной и побочной диагоналей.
30. В одномерном массиве вещественных чисел провести циклический сдвиг:  $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n \rightarrow a_n, a_1, a_2, a_3, \dots, a_{n-1}$ .
31. Задан массив из 20 целых чисел. Сформировать из него двумерный массив размерностью  $4 \times 5$  и вывести его на экран.
32. Преобразовать исходный одномерный массив действительных чисел, удалив из него повторяющиеся элементы, массив сжать.

33. Сколько сомножителей надо взять в произведении:

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left( 1 + \frac{(-1)^k}{2k+1} \right) = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

, чтобы равенство выполнялось до шестой значащей цифры, то есть с погрешностью не более  $10^{-6}$ ?

34. Написать программу, вычисляющую значение выражения, используя оператор

цикла с постусловием: 
$$P = \frac{2!}{x} + \frac{4!}{x^2} + \frac{6!}{x^3} + \dots + \frac{2n!}{x^n}$$

35. Целой переменной  $s$  присвоить сумму цифр трёхзначного целого числа  $k$ .

36. Проверьте предел:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{1}{n} \right)^n = e$$

вычислив его как сумму ряда с заданной точностью  $E=0,00001$ :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{1}{n} \right)^n = 2 + \left( 1 + \frac{1}{2} \right)^2 + \left( 1 + \frac{1}{3} \right)^3 + \left( 1 + \frac{1}{4} \right)^4 + \left( 1 + \frac{1}{5} \right)^5 \dots$$

37. Сравните скорости сходимости при вычислении числа  $e$ :

$$e = 2 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{5!} + \dots$$

$$e = 1 + \frac{1}{1 - \frac{1}{2 + \frac{1}{3 - \frac{1}{2 + \frac{1}{5 - \dots}}}}}}$$

38. Найдите корень уравнения  $\sin(x) = 0$  на интервале  $[-4; -2]$ . Сравните скорости сходимости методов хорд и касательных и половинного деления для точности  $\epsilon=10^{-5}$ .

39. Численно убедитесь в справедливости равенства, для чего вычислите правую часть с точностью  $\epsilon$ . Испытайте разложение на сходимость для разной точности, для чего выведите число итераций (слагаемых), необходимых для достижения заданной точности.

$$a^x = 1 + \frac{x \ln a}{1!} + \frac{(x \ln a)^2}{2!} + \dots + \frac{(x \ln a)^n}{n!} + \dots$$

### Критерии оценивания контрольной работы

1. Знание правил написания программ на одном из языков программирования.
2. Умение использовать операторы для составления программы;
3. Владение навыками работы в среде программирования.

Для оценивания результатов контрольной работы используется шкала: «зачтено», «не зачтено»

"Зачтено" - представлен работающий код, продемонстрировано знание правил написания программ, умение использовать операторы для составления программ, владение навыками работы в соответствующей среде программирования.

«Не зачтено» - не представлен работающий код или не продемонстрировано знание правил написания программ, умение использовать операторы для составления программ, владение навыками работы в соответствующей среде программирования.

## **20.2 Промежуточная аттестация**

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств

### **20.2.1. Список вопросов для подготовки к промежуточной аттестации**

1. Структура программы.
2. Структура языка.
3. Форма.
4. Классы.
5. Правила наследования.
6. Реализация линейных алгоритмов.
7. Организация разветвленных алгоритмов.
8. Условный оператор.
9. Оператор выбора.
10. Операторы цикла.
11. Тип массив. Формирование одно и многомерного массива
12. Сортировка элементов массива методом перестановки, пузырька, методом нахождения среднего с использованием рекурсивного алгоритма.
13. Процедуры и функции пользователя Правила локализации объектов. Рекурсия.
14. Тип строка.
15. Тип запись.
16. Тип множество.
17. Файловые типы данных.
18. Задачи нахождения значения и табуляции сложной функции.
19. Задачи нахождения значения конечных и бесконечных рядов.
20. Численное решение нелинейных уравнений. Метод половинного деления.
21. Численное решение нелинейных уравнений. Метод стягивающих.
22. Численное решение нелинейных уравнений. Метод касательных.
23. Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.
24. Решение химических задач, сводящихся к численному интегрированию.
25. Численное интегрирование методом трапеций.
26. Численное интегрирование методом Симпсона.
27. Оценка сходимости методов интегрирования. Нахождение значения интеграла с заданной точностью.
28. Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц.
29. Решение системы линейных уравнений методом Крамера.
30. Решение системы линейных уравнений методом Гаусса.
31. Решение системы линейных уравнений методом Гаусса-Жордана.
32. Решение химических и химико-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.



33. Интерполяция полиномом Лагранжа.
34. Интерполяция полиномом Ньютона.
35. Слайн-интерполяция.
36. Регрессионный анализ.
37. Метод наименьших квадратов.

### 20.2.2. Тестовые задания промежуточной аттестации (фрагмент)

Тестовое задание содержит 36 случайных вопросов, рассчитано на 60 минут. Фонд тестовых заданий находится в Банке вопросов Электронного Учебно-методического комплекса «Вычислительные методы в химии», размещенного в системе Moodle электронного университета ВГУ

(URL: <https://edu.vsu.ru/mod/quiz/view.php?id=56995>)

Банк вопросов содержит 124 вопросов разного типа, распределенных по 20 категориям, отвечающим темам курса С1.Б.21 Вычислительные методы в химии.

**Тестовый опрос оценивается по пятибальной шкале:**

90-100% - отлично                      80-89 % - хорошо;  
70 -79 % - удовлетворительно;      69% и менее - неудовлетворительно

### Примеры тестовых заданий из Банка вопросов.

#### Вопрос 1

Заполните пропуски:

```
if (Radiobutton2.Checked= ) and (n>1)   
 mas:=n*c+2*n*h;  
s:='C'+inttostr(n)+'H'+inttostr(2*n);  
Memo1.Lines.Add('M('+s+')='+Inttostr(mas)); 
```

#### Вопрос 2

Какой тип отвечает значению выражения:  
 $\text{abs}(s0-s) \leq e$  ?

Выберите один ответ:

- boolean
- string
- byte
- longint
- real

#### Вопрос 3

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом касательных

Выберите один ответ:

- $x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);$
- $x:=x0-f(x0)/p(x0);$
- $x:=f(x0);$
- $x:=(a+B)/2;$

#### Вопрос 4

Какой тип отвечает переменной S?

```
S:=strtoint(edit1.Text);
```

Выберите один ответ:

- string
- byte
- real
- longint
- integer

### Вопрос 5

Чему равно значение переменной P после выполнения цикла?

```
P:=1;  
  j:=1;  
  i:=10;  
while i>0 do  
begin  
  P:=P+j;  
  i:=i-1;  
end;
```




### Вопрос 6

В приведенном коде укажите назначение переменной a

```
...  
S0:=0;  
s:=s0;  
repeat  
s0:=s;  
s:=0;  
dx:=(b-a)/n/2;  
s1:=0;  
x:=a+dx;  
while x<=b-dx do  
begin  
s1:=s1+4*f(x);  
x:=x+2*dx;  
end;  
s2:=0;  
x:=a+2*dx;  
repeat  
s2:=s2+2*f(x);  
x:=x+2*dx;  
until x>=b-2*dx;  
s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;  
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));  
n:=n*2;  
until abs(s0-s)<=e;  
end;
```

Выберите один ответ:

- Сохраняет значение границы в интегрирования

-  Сохраняет предыдущее значение интеграла
-  Сохраняет порядковый номер итерации
-  Сохраняет новое вычисляемое значение суммы

### 20.2.3. Примеры индивидуальных заданий промежуточной аттестации

#### Задача 1

Теплота испарения этилового спирта описывается как функция от температуры на интервале температур от 10°C до 150°C следующим соотношением

$$\Delta H = 777.3 + \frac{257.6}{6} \left( \frac{110-t}{20} \right) - \frac{9.9}{6} \left( \frac{110-t}{20} \right)^2 - \frac{1.1}{6} \left( \frac{110-t}{20} \right)^3.$$

Написать программу, которая находит температуры при которых поглощается количество тепла  $\Delta H$  (Дж/г).

Программа должна считывать в массив из файла vvod.txt теплоты испарения : 886,3; 855,1; 818,4; 775,3. Результаты выполнения программы записать в файл data.txt в формате:

$\Delta H_1$              $T_1$   
 $\Delta H_2$              $T_2$   
 $\Delta H_3$              $T_3$   
 $\Delta H_4$              $T_4$

#### Задача 2

Пусть имеется раствор слабого электролита  $K_2A$ , который диссоциирует согласно реакции:

$K_2A \xrightleftharpoons{K_C} 2K^+ + A^{2-}$ . согласно закону разбавления Оствальда, это равновесие можно описать следующей формулой:

$$K_C = \frac{4\alpha^2 C_0^2}{1-\alpha}.$$

Написать программу расчета степени диссоциации этого электролита при заданных  $K_C$  и  $C_0$ .

Программа должна считывать в массив записей  $K_C$  и  $C_0$  из файла vvod.txt следующие данные:

- а)  $K_C = 0.0$ ,  $C_0 = 0.001$ ;
- б)  $K_C = 0.01$ ,  $C_0 = 0.005$ ;
- в)  $K_C = 0.001$ ,  $C_0 = 0.01$ .
- г)  $K_C = 0.001$ ,  $C_0 = 0.01$

#### Задача 3

Даны четыре емкости с растворами кислоты различной концентрации. Если смешать растворы в определенном соотношении, то получится кислота заданной процентной концентрации:

Концентрация конечного раствора, %	Доля кислоты в общей смеси			
	$\omega_1$ , %	$\omega_2$ , %	$\omega_3$ , %	$\omega_4$ , %
25	1	1	1	1
20	4	3	2	1
25	4	1	1	4
22	4	1	4	1

Найдите концентрации кислот в каждом сосуде:  $\omega_1$ ,  $\omega_2$ ,  $\omega_3$  и  $\omega_4$ .

Ввод исходный значений концентраций организовать через запись значений в массив из файла input.txt. Решение системы уравнений осуществить методом Крамера. Найденные концентрации записать в файл data.txt.

#### Задача 4

Пусть в некоторой системе одновременно протекают две химические реакции. Они характеризуются выходами  $U_1$  и  $U_2$ . Зависимость выхода, выраженного в %, в достаточно

узкой области описывается двумя линейными относительно четырех параметров уравнениями:

$$U_1 = 10 + 1 \cdot C_1 - 2 \cdot C_2 + 2.0 \cdot \text{pH} + 0.5 \cdot (T - 300);$$

$$U_2 = 15 - 1 \cdot C_1 - 1 \cdot C_2 + 1.2 \cdot \text{pH} + 0.9 \cdot (T - 300);$$

$T$  – температура в градусах Кельвина;  $C_1$  – концентрация вещества 1 в моль/л;  $C_2$  – концентрация вещества 2 в моль/л.

Найти pH и температуру в градусах Кельвина для заданных условий

$C_1 = C_2 = 2$  моль/л,  $U_1 = 36.0\%$  и  $U_2 = 51,8\%$ .

$C_1 = 1$  моль/л;  $C_2 = 2$  моль/л,  $U_1 = 36.2\%$  и  $U_2 = 49.3\%$ .

$C_1 = 1$  моль/л;  $C_2 = 2$  моль/л,  $U_1 = 48.6\%$  и  $U_2 = 36,8\%$ .

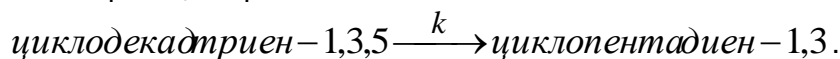
Ввод исходных значений организовать через считывание данных из текстового файла input.txt в массив записей.

Найденные значения pH и  $T$  записать в файл data.txt.

Решение системы уравнений осуществить методом Гаусса-Жордана.

### Задача 5

Исследована кинетика реакции при  $190^\circ\text{C}$ :



Измерены концентрации исходного вещества в разные моменты времени. Реакция

подчиняется кинетическому уравнению  $-\frac{dC}{dt} = kC$  или  $-\ln C = -\ln C_0 + kt$ . Найдите

значения константы скорости реакции и начальную концентрацию исходного вещества  $C_0$ .

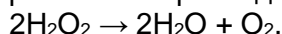
$1/C, (\text{моль/л})^{-1}$	1,85	2,04	2,34	2,07	3,83	5,28
t, c	524	620	752	876	1188	1452

Задачу решить, используя метод наименьших квадратов.

Ввод исходных данных осуществить через считывание данных в массив записей из файла input.txt. Результаты выполнения программы записать в файл data.txt.

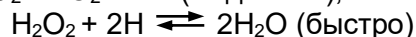
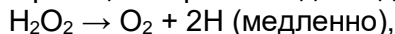
### Задача 6

Пероксид водорода способен самопроизвольно распадаться:



Поверхность твердых тел (платина, соли, оксиды металлов) оказывает на распад каталитическое действие. Особенно активна в этом отношении платиновая чернь, т.е. электролитически осажденная платина с сильно развитой поверхностью.

Считается, что гетерогенная реакция перекиси идет в две стадии:



Суммарная скорость процесса определяется медленной стадией, и поэтому реакция является кинетически необратимой реакцией первого порядка и изменение концентрации

$\text{H}_2\text{O}_2$  во времени происходит в соответствии с уравнением  $c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t) = c_{\text{H}_2\text{O}_2}^0 \cdot e^{-k_1 t}$ , где

$c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t)$  - концентрация пероксида к моменту времени  $t$ . Логарифмируя это уравнение

получают линейную зависимость в координатах  $\lg c_{\text{H}_2\text{O}_2} - t$ :

$$\lg c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t) = \lg c_{\text{H}_2\text{O}_2}^0 - 0,43 \cdot k_1 \cdot t,$$

По текущим концентрациям  $\text{H}_2\text{O}_2$  найдите  $k_1$  и рассчитайте период полураспада  $t_{1/2}$  по соотношению  $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1} = \frac{0.69}{k_1}$ .

t, с	0	10	15	30	40	45	60
$c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t)$ , моль/л	0,0054	0,0049	0,0045	0,0041	0,0035	0,0033	0,0031

Задачу решить, используя метод наименьших квадратов.

Ввод исходных данных осуществить через считывание данных в массив записей из файла input.txt. Результаты выполнения программы записать в файл data.txt.

### Критерии оценивания промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на зачете используются следующие показатели

- 1) знание учебного материала и понятийного аппарата по дисциплине «Вычислительные методы в химии»;
- 2) умение связывать теорию с практикой;
- 3) умение иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований;
- 4) умение устанавливать междисциплинарные связи;
- 5) самостоятельность и обоснованность решений;

Для оценивания результатов обучения на зачете используется шкала – «зачтено», «не зачтено»

Таблица

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения на экзамене.

Критерии оценивания компетенций	Шкала оценок
Компетенции сформированы полностью, используются систематически. Обучающийся в полной мере владеет теоретическими основами вычислительных методов, приемами программирования, способен применять теоретические знания для решения практических задач в области химии/ Сдана текущая аттестация, выполнено тестовое задание и итоговое задание на положительную оценку	Зачтено
Компетенции в целом сформированы, но проявляются и используются фрагментарно, не в полном объеме. Не сданы на положительную оценку одно или несколько итоговых контролей по дисциплине: текущая аттестация, тестовое задание и итоговое задание.	Не зачтено

Итоговая оценка при реализации дисциплины выставляется по результатам текущей успеваемости (выполнения тестов и практических заданий по темам), текущей аттестаций, итогового тестирования и выполнения итогового задания.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценка за зачет также может быть выставлена по результатам текущей успеваемости обучающегося в семестре.

**Задания, рекомендуемые к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины**

ПК-3.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.	Знать: вычислительные методы решения нелинейных уравнений, систем уравнений, интегрирования, интерполяции. Уметь: применять вычислительные методы для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание
---	---

**Вопрос 01 Интегрирование. Методы**

Установите соответствие между методом и способом нахождения решения			МАТ
<b>Балл по умолчанию:</b>			<b>1</b>
#	Вопрос	Ответ	
1.	$S_n = \frac{h}{3} [f(x_0) + f(x_n) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i})]$	Численное интегрирование методом Симпсона	
2.	$S_n = h \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + h \cdot \frac{f(x_0) + f(x_n)}{2}$	Численное интегрирование методом трапеций	
3.	$S_n = h \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f(x_k) + f(x_{k+1})}{2}$	Численное интегрирование методом прямоугольников	

Вопрос 02

Метод трапеций

В приведенном коде укажите назначение переменной **a**

```
...
begin
a:=strtofloat(Edit1.Text);
b:=strtofloat(Edit2.Text);
E:=strtofloat(Edit3.Text);
s0:=0;
s:=0;
n:=2;
repeat
s0:=s;
h:=abs(a-b)/n;
i:=1;
while i<n do
BEGIN
s:=s+f(a+h*i);
i:=i+1;
END;
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;
n:=n*2;
Memo1.Lines.Add(Floattostf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));
until ABS(s-s0)<=e;
end;
...
```

**Балл по умолчанию:** 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение суммы	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет вводимое значение границы в интегрирования	100



Вопрос 03

**Метод трапеций**

В приведенном коде укажите назначение переменной **h**.

```
...
begin
a:=strtofloat(Edit1.Text);
b:=strtofloat(Edit2.Text);
E:=strtofloat(Edit3.Text);
s0:=0;
s:=0;
n:=2;
repeat
s0:=s;
h:=abs(a-b)/n;
i:=1;
while i<n do
BEGIN
s:=s+f(a+h*i);
i:=i+1;
END;
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;
n:=n*2;
Memo1.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));
until ABS(s-s0)<=e;
end;
...
```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение суммы	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение величины изменения	X 100

## Вопрос 04

### Метод трапеций

В приведенном коде укажите назначение переменной **S0**.

```
...
begin
a:=strtofloat(Edit1.Text);
b:=strtofloat(Edit2.Text);
E:=strtofloat(Edit3.Text);
s0:=0;
s:=0;
n:=2;
repeat
s0:=s;
h:=abs(a-b)/n;
i:=1;
while i<n do
BEGIN
s:=s+f(a+h*i);
i:=i+1;
END;
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;
n:=n*2;
Memo1.Lines.Add(Format('s={:6.4}'+Inttostr( n)));
until ABS(s-s0)<=e;
end;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение суммы	100
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0

**Вопрос 05****Метод трапеций**

В приведенном коде укажите назначение переменной **S**.

```
...
begin
a:=strtofloat(Edit1.Text);
b:=strtofloat(Edit2.Text);
E:=strtofloat(Edit3.Text);
s0:=0;
s:=0;
n:=2;
repeat
s0:=s;
h:=abs(a-b)/n;
i:=1;
while i<n do
BEGIN
s:=s+f(a+h*i);
i:=i+1;
END;
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;
n:=n*2;
Memo1.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));
until ABS(s-s0)<=e;
end;
...
```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение суммы	100
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0

**Вопрос 06****Метод трапеций**

В приведенном коде укажите назначение переменной **i**.

```
...  
begin  
a:=strtofloat(Edit1.Text);  
b:=strtofloat(Edit2.Text);  
E:=strtofloat(Edit3.Text);  
s0:=0;  
s:=0;  
n:=2;  
repeat  
s0:=s;  
h:=abs(a-b)/n;  
i:=1;  
while i<n do  
BEGIN  
s:=s+f(a+h*i);  
i:=i+1;  
END;  
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;  
n:=n*2;  
Memo1.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));  
until ABS(s-s0)<=e;  
end;  
...
```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет текущий номер итерации	100
C.	Сохраняет текущее число разбиений отрезка	0
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0

**Вопрос 07****Метод трапеций**

В приведенном коде укажите назначение переменной **n**.

```
...  
begin  
a:=strtofloat(Edit1.Text);  
b:=strtofloat(Edit2.Text);  
E:=strtofloat(Edit3.Text);  
s0:=0;  
s:=0;  
n:=2;  
repeat  
s0:=s;  
h:=abs(a-b)/n;  
i:=1;  
while i<n do  
BEGIN  
s:=s+f(a+h*i);  
i:=i+1;  
END;  
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;  
n:=n*2;  
Memo1.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));  
until ABS(s-s0)<=e;  
end;  
...
```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет текущий номер итерации	0
C.	Сохраняет число разбиений отрезка	100
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0

**Вопрос 08****Метод Симпсона**

В приведенном коде укажите назначение переменной **a**

```
...
S0:=0;
s:=s0;
repeat
s0:=s;
s:=0;
dx:=(b-a)/n/2;
s1:=0;
x:=a+dx;
while x<=b-dx do
begin
s1:=s1+4*f(x);
x:=x+2*dx;
end;
s2:=0;
x:=a+2*dx;
repeat
s2:=s2+2*f(x);
x:=x+2*dx;
until x>=b-2*dx;
s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));
n:=n*2;
until abs(s0-s)<=e;
end;
...
```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение суммы	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет значение границы в интегрирования	100

**Вопрос 09****Метод Симпсона**

В приведенном коде укажите назначение переменной **S0**.

```
...  
S0:=0;  
s:=s0;  
repeat  
s0:=s;  
s:=0;  
dx:=(b-a)/n/2;  
s1:=0;  
x:=a+dx;  
while x<=b-dx do  
begin  
s1:=s1+4*f(x);  
x:=x+2*dx;  
end;  
s2:=0;  
x:=a+2*dx;  
repeat  
s2:=s2+2*f(x);  
x:=x+2*dx;  
until x>=b-2*dx;  
s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;  
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));  
n:=n*2;  
until abs(s0-s)<=e;  
end;  
...
```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение суммы	100
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0

**Вопрос 10**  
**Метод Симпсона**

```

В приведенном коде укажите назначение переменной S.
...
S0:=0;
s:=s0;
repeat
s0:=s;
s:=0;
dx:=(b-a)/n/2;
s1:=0;
x:=a+dx;
while x<=b-dx do
begin
s1:=s1+4*f(x);
  x:=x+2*dx;
end;
s2:=0;
  x:=a+2*dx;
repeat
s2:=s2+2*f(x);
  x:=x+2*dx;
until x>=b-2*dx;
  s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));
n:=n*2;
until abs(s0-s)<=e;
end;
...

```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла	100
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0



## Метод Симпсона

### Вопрос 11

В приведенном коде укажите назначение переменной **n**.

```
...
S0:=0;
s:=s0;
repeat
s0:=s;
s:=0;
dx:=(b-a)/n/2;
s1:=0;
x:=a+dx;
while x<=b-dx do
begin
s1:=s1+4*f(x);
x:=x+2*dx;
end;
s2:=0;
x:=a+2*dx;
repeat
s2:=s2+2*f(x);
x:=x+2*dx;
until x>=b-2*dx;
s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));
n:=n*2;
until abs(s0-s)<=e;
end;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение интеграла	0
B.	Сохраняет текущий номер итерации	0
C.	Сохраняет текущее число разбиений отрезка	100
D.	Сохраняет текущее значение шага интегрирования	0

## Метод Симпсона

### Вопрос 12

В приведенном коде укажите назначение переменной **dx**.

```
...
S0:=0;
s:=s0;
repeat
s0:=s;
s:=0;
dx:=(b-a)/n/2;
s1:=0;
x:=a+dx;
while x<=b-dx do
begin
s1:=s1+4*f(x);
x:=x+2*dx;
end;
s2:=0;
x:=a+2*dx;
repeat
s2:=s2+2*f(x);
x:=x+2*dx;
until x>=b-2*dx;
s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));
n:=n*2;
until abs(s0-s)<=e;
end;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет предыдущее значение суммы	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение величины изменения $\Delta$	100

## Уравнения нелинейные

### Вопрос 01

**Установите соответствие**

Установите соответствие между методом и способом нахождения решения нелинейного уравнения		
		<b>Балл по умолчанию: 1</b>
#	Вопрос	Ответ
1.	$x_c = a - f(a) \frac{b-a}{f(b)-f(a)}$	Метод хорд
2.	$F'(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$	Метод касательных
3.	$x = \frac{x_A + x_B}{2}$	Метод половинного деления

### Уравнения нелинейные

**Метод Хорд. Вопрос 02**

**Установите соответствие**

В приведенном коде укажите назначение переменной **n**.

```

...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
  A:=strtofloat(trim(A0.text));
  B:=strtofloat(trim(B0.text));
n:=0;
  x0:=a;
  x1:=b;
  repeat
    n:=n+1;
    x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);
memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n));
    x0:=x1 ;
    x1:=x;
  until abs(x0-x1)<e;
...

```

**Балл по умолчанию: 1**

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	100
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

Метод Хорд. Вопрос 03

В приведенном коде укажите назначение переменной **X1**.

```
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
  A:=strtofloat(trim(A0.text));
  B:=strtofloat(trim(B0.text));
n:=0;
  x0:=a;
  x1:=b;
repeat
  n:=n+1;
  x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);
memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n));
  x0:=x1 ;
  x1:=x;
until abs(x0-x1)<e;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	100
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

Метод Хорд. Вопрос 04

В приведенном коде укажите назначение переменной **X0**.

```
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
  A:=strtofloat(trim(A0.text));
  B:=strtofloat(trim(B0.text));
n:=0;
  x0:=a;
  x1:=b;
repeat
  n:=n+1;
  x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);
memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n));
  x0:=x1 ;
  x1:=x;
until abs(x0-x1)<e;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	100
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	0
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

### Метод Хорд. Вопрос 05

В приведенном коде укажите назначение переменной **X1**.

```
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
  A:=strtofloat(trim(A0.text));
  B:=strtofloat(trim(B0.text));
n:=0;
  x0:=a;
  x1:=b;
repeat
  n:=n+1;
  x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);
memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n));
  x0:=x1 ;
  x1:=x;
until abs(x0-x1)<e;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	100
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

### Метод Хорд. Вопрос 06

В приведенном коде укажите назначение переменной **e**.

```
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
  A:=strtofloat(trim(A0.text));
  B:=strtofloat(trim(B0.text));
n:=0;
  x0:=a;
  x1:=b;
repeat
  n:=n+1;
  x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);
memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n ));
  x0:=x1 ;
  x1:=x;
until abs(x0-x1)<e;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет вводимое значение точности решения	100
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

**Метод Хорд. Вопрос 07**

<p>В приведенном коде укажите назначение переменной <b>A</b>.</p> <pre> ... begin e:=strtofloat(trim(E0.text));   A:=strtofloat(trim(A0.text));   B:=strtofloat(trim(B0.text)); n:=0;   x0:=a;   x1:=b; repeat   n:=n+1;   x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1); memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n));   x0:=x1 ;   x1:=x; until abs(x0-x1)&lt;e; ... </pre>		
<b>Балл по умолчанию:</b>		<b>1</b>

E.	Сохраняет текущее значение корня	0
F.	Сохраняет вводимое значение границы поиска решения	100
G.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
H.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

**Метод Хорд. Вопрос 08**

<p>В приведенном коде укажите назначение переменной <b>B</b>.</p> <pre> ... begin e:=strtofloat(trim(E0.text));   A:=strtofloat(trim(A0.text));   B:=strtofloat(trim(B0.text)); n:=0;   x0:=a;   x1:=b; repeat   n:=n+1;   x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1); memo3.Lines.Add(floattostrf(x0,ffixed,8,6)+' '+floattostr( n));   x0:=x1 ;   x1:=x; until abs(x0-x1)&lt;e; ... </pre>		
<b>Балл по умолчанию:</b>		<b>1</b>

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет вводимое значение границы поиска решения	100
C.	Сохраняет порядковый номер итерации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

**Метод простых итераций. Вопрос 09**

<p>В приведенном коде укажите назначение переменной <b>n</b>.</p> <pre> ... begin e:=strtofloat(trim(E0.text)); x0:= strtofloat(trim(X0.text)); n:=0 ; while abs(x0-x)&gt;e do begin n:=n+1; x0:=x; x:=f(x0); memo3.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,8,6)+' ' + floattostrf(x0,ffixed,8,6)) ; memo3.Lines.Add(floattostr(n)); end;; ... </pre>	<b>Балл по умолчанию: 1</b>
--	-----------------------------

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	0
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	100
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

**Метод простых итераций. Вопрос 10**

<p>В приведенном коде укажите назначение переменной <b>X0</b>.</p> <pre> ... begin e:=strtofloat(trim(E0.text)); x0:= strtofloat(trim(X0.text)); n:=0 ; while abs(x0-x)&gt;e do begin n:=n+1; x0:=x; x:=f(x0); memo3.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,8,6)+' ' + floattostrf(x0,ffixed,8,6)) ; memo3.Lines.Add(floattostr(n)); end; ... </pre>	<b>Балл по умолчанию: 1</b>
--	-----------------------------

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	100
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	0
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

Метод простых итераций. Вопрос 11

```
В приведенном коде укажите назначение переменной e.
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
x0:= strtofloat(trim(X0.text));
n:=0 ;
while abs(x0-x)>e do
begin
n:=n+1;
x0:=x;
x:=f(x0);
memo3.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,8,6)+' ' + floattostrf(x0,ffixed,8,6)) ;
memo3.Lines.Add(floattostr(n));
end;
...

```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет вводимое значение точности решения	100
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

Метод касательных. Вопрос 12

```
В приведенном коде укажите назначение переменной n.
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
x:=strtofloat(trim(X0.text));
if p(x)<>0 then
begin
n:=0 ;
repeat
n:=n+1;
x0:=x;
x:=x0-f(x0)/p(x0);
memo2.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,7,6)+' ' +floattostr(n));
until abs(x-x0)<=e;
end;
...

```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	0
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	100
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0



Метод касательных. Вопрос 13

В приведенном коде укажите назначение переменной **X0**.

```
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
x:=strtofloat(trim(XO.text));
if p(x)<>0 then
begin
n:=0 ;
repeat
n:=n+1;
x0:=x;
x:=x0-f(x0)/p(x0);
memo2.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,7,6)+' ' +floattostr(n));
until abs(x-x0)<=e;
end;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	100
B.	Сохраняет новое вычисляемое значение корня	0
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

Метод касательных. Вопрос 14

В приведенном коде укажите назначение переменной **e**.

```
...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
x:=strtofloat(trim(XO.text));
if p(x)<>0 then
begin
n:=0 ;
repeat
n:=n+1;
x0:=x;
x:=x0-f(x0)/p(x0);
memo2.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,7,6)+' ' +floattostr(n));
until abs(x-x0)<=e;
end;
...
```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет вводимое значение точности решения	100
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	0
D.	Сохраняет текущее значение правой границы	0

**Метод касательных. Вопрос 15**

В приведенном коде укажите назначение параметра  $p(x)$ .

```

...
begin
e:=strtofloat(trim(E0.text));
x:=strtofloat(trim(X0.text));
if p(x)<>0 then
begin
n:=0 ;
repeat
n:=n+1;
x0:=x;
x:=x0-f(x0)/p(x0);
memo2.Lines.Add(floattostrf(x,ffixed,7,6)+' ' +floattostr(n));
until abs(x-x0)<=e;
end;
...

```

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	Сохраняет текущее значение корня	0
B.	Сохраняет вычисляемое значение производной	100
C.	Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций. Вопрос ации	0
D.	Сохраняет вычисляемое значение функции	0

**Метод Вопрос 16**

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом половинного деления

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	$x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);$	0
B.	$x:=f(x0);$	0
C.	$x:=(a+B)/2;$	100
D.	$x:=x0-f(x0)/p(x0);$	0

**Метод Вопрос 17**

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом касательных

Балл по умолчанию: 1

#	Ответы	Оценка
A.	$x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);$	0
B.	$x:=f(x0);$	0
C.	$x:=(a+B)/2;$	100
D.	$x:=x0-f(x0)/p(x0);$	100

**Метод вопрос 18**

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом простых итераций	
--	--

<b>Балл по умолчанию:</b>	<b>1</b>
---------------------------	----------

#	Ответы	Оценка
A.	$x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0))) * f(x1);$	0
B.	$x:=f(x0);$	100
C.	$x:=(a+B)/2;$	0
D.	$x:=x0-f(x0)/p(x0);$	0

**Метод Вопрос 19**

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом секущих (хорд)	
--	--

<b>Балл по умолчанию:</b>	<b>1</b>
---------------------------	----------

#	Ответы	Оценка
A.	$x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0))) * f(x1);$	100
B.	$x:=f(x0);$	0
C.	$x:=(a+B)/2;$	0
D.	$x:=x0-f(x0)/p(x0);$	0

**Метод Вопрос 20**

Укажите правильное выражение для нахождения коня методом касательных (Ньютона)	MS
--	----

<b>Балл по умолчанию:</b>	<b>1</b>
---------------------------	----------

#	Ответы	Оценка
A.	$x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0))) * f(x1);$	0
B.	$x:=x0-f(x0)/p(x0);$	100
C.	$x:=f(x0);$	0
D.	$x:=(a+B)/2;$	0
E.	$x1:=x-f(x)/p(x);$	100

**Метод Вопрос 21**

Укажите правильное выражение для нахождения коня методом хорд (секущих)	MS
---	----

<b>Балл по умолчанию:</b>	<b>1</b>
---------------------------	----------

#	Ответы	Оценка
A.	$x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0))) * f(x1);$	100
B.	$x:=x0-f(x0)/p(x0);$	0
C.	$x:=f(x0);$	0
D.	$x:=(a+B)/2;$	0
E.	$x:=xb-((xb-xa)/(f(xb)-f(xa))) * f(xb);$	100

<p>ПК-3.2.          Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.</p>	<p>Знать:          методы реализации алгоритмов посредством языков программирования.          Уметь:          составлять алгоритмы решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций.          Владеть          навыками: методами реализации алгоритмов с использованием языков программирования.</p>
--	---

### Вопрос 01

(блоки приведены в правильной последовательности)

*Расставьте элементы кода с правильном порядке*

```

a:=strtofloat(Edit1.Text);
b:=strtofloat(Edit2.Text);
E:=strtofloat(Edit3.Text)
n:=2; if a>b then begin S:=A; A:=B; B:=S; END;
S0:=0; s:=s0;
repeat
  s0:=s; s:=0;
  dx:=(b-a)/n/2;
  s1:=0; x:=a+dx;
while x<=b-dx do
  begin s1:=s1+4*f(x); x:=x+2*dx; end;
s2:=0; x:=a+2*dx;
repeat
  s2:=s2+2*f(x);
x:=x+2*dx;
until x>=b-2*dx;
s:=(s1+s2+f(a)+f(b))*dx/3;
Memo2.Lines.Add(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr(n));
n:=n*2;
until abs(s0-s)<=e;

```

## Вопрос 02

(блоки приведены в правильной последовательности)

Расставьте фрагменты кода в правильном порядке

```
a:=strtofloat(Edit1.Text);  
b:=strtofloat(Edit2.Text);  
E:=strtofloat(Edit3.Text);  
s0:=0;  
s:=0;  
n:=2;
```

---

```
repeat  
s0:=s;  
h:=abs(a-b)/n;  
i:=1;
```

---

```
while i<n do  
begin  
s:=s+f(a+h*i);  
i:=i+1;
```

---

```
end;  
s:=(s+(f(a)+f(b))/2)*h;  
n:=n*2;
```

---

```
until ABS(s-s0)<=e;  
end;
```

## Вопрос 03

Расставьте фрагменты кода в правильном порядке

```
const e=0.001;  
var i,x,x0:real;  
function f(x:real):real;  
begin  
f:=x*x*cos(x);  
end;
```

---

```
begin  
x0:=StrToFloat(Edit1.Text);  
Edit1.Text:= '('+Edit1.Text+')'+floattostr(f(x0));  
x:=f(x0);  
i:=1;
```

---

```
while abs(x0-x)>e do  
begin  
x0:=x ;  
x:=f(x0);  
Memo1.lines.add(floattostr(i)+' '+floattostr(f(x)));  
Memo2.lines.add(floattostr(i)+' '+floattostr(x));  
i:=i+1;
```

---

```
end;  
end;
```

**Вопрос 04**  
**(блоки приведены в правильной последовательности)**

Расставьте фрагменты кода в правильном порядке

```
var x, x0,i,e:real;
function f(x:real):real;
begin
  f:=10*exp(5*ln(x))-exp(x*x);
end;
function p(x:real):real;
begin
  p:=50*exp(4*ln(x))-2*x*exp(x*x);
end ;

```

---

```
begin
x0:=StrToFloat(Edit1.Text);
Edit1.Text:= 'f('+Edit1.Text+')='+floattostr(f(x0));
e:=StrToFloat(Edit2.Text);
x:=x0;

```

---

```
if (p(x0)<>0) then
begin
i:=1;
repeat
x0:=x;
  x:=x0-f(x0)/p(x0);
  Memo1.lines.add(floattostr(i)+' '+ floattostr(x0));
  Memo2.lines.add(floattostr(i)+' '+ floattostr(x));
  i:=i+1;
until (abs(x-x0)<=e);
end

```

---

```
else if p(x0)=0 then Showmessage('корней нет');
end;
```

## Вопрос 05

(блоки приведены в правильной последовательности)

Расставьте фрагменты кода в правильном порядке

```
const e=0.000001;
var a,b,n,h,i,pol,x,e :real;
function f(x:real):real;
begin
f:=10*exp(5*ln(x))-exp(x*x);
end;
begin
a:=StrToFloat(Edit1.Text);
Edit1.Text:= 'f('+Edit1.Text+')='+floattostr(f(a));
b:=StrToFloat(Edit2.Text);
Edit2.Text:= 'f('+Edit2.Text+')='+floattostr(f(b));
E:=StrToFloat(Edit3.Text);
if a>b then begin x:=a; a:=b; b:=x end;
if f(a)*f(b)>=0 then begin
n:=100;
h:=abs(a-b)/n;
i:=0 ;
repeat
x:=a+i*H;
i:=i+1;
until (f(a)*f(x)<0) or (x>b);
b:=x;
end;
if f(a)*f(b)<0 then
begin
i:=1;
while abs(a-b)>e do begin
pol:=(a+B)/2;
if f(a)*f(pol)>0 then a:=pol else b:=pol;
Memo1.lines.add(floattostr(i)+' '+floattostr(a));
Memo2.lines.add(floattostr(i)+' '+floattostr(b))
Memo3.lines.add(floattostr(i)+' '+floattostr(pol)) ;
i:=i+1;
end;
end
else Showmessage('корней нет');
end;
```

## Вопрос 06

(блоки приведены в правильной последовательности)

Расставьте фрагменты кода в правильном порядке

```
var a,b,n,h,i,pol,x,x0,x1,e :real;
```

```
function f(x:real):real;
```

```
begin
```

```
  f:=10*exp(5*ln(x))-exp(x*x);
```

```
end;
```

---

```
begin
```

```
a:=StrToFloat(Edit1.Text);
```

```
  Edit1.Text:= 'f('+Edit1.Text+')='+floattostr(f(a));
```

```
b:=StrToFloat(Edit2.Text);
```

```
  Edit2.Text:= 'f('+Edit2.Text+')='+floattostr(f(b));
```

```
e:=StrToFloat(Edit3.Text);
```

```
if a>b then begin x:=a; a:=b; b:=x end;
```

---

```
if f(a)*f(b)>=0 then begin
```

```
  n:=100;
```

```
  h:=abs(a-b)/n;
```

```
  i:=0 ;
```

---

```
repeat
```

```
  x:=a+i*H;
```

```
  i:=i+1;
```

```
until (f(a)*f(x)<0) or (x>b);
```

```
b:=x;
```

```
end;
```

---

```
if f(a)*f(b)<0 then
```

```
  begin
```

```
    i:=1;
```

```
    x0:=a;
```

```
    x1:=b;
```

```
      repeat
```

```
        x:=x1-((x1-x0)/(f(x1)-f(x0)))*f(x1);
```

```
        Memo3.lines.add(floattostr(i)+' '+ floattostr(x) );
```

```
        x0:=x1 ;
```

```
        x1:=x;
```

```
        i:=i+1;
```

```
          until abs(x0-x1)<e;
```

```
      end
```

---

```
else Showmessage('корней нет');
```

```
end;
```



### Вопрос 07

Дан фрагмент программы Укажите значения каких переменных будут выводиться в компонент Мемо1 ..... x0:=a; x1:=b; while abs(x0-x1)>e do begin x:=x1-(x1-x0)/(f(x1)-f(x0))*f(x1); x0:=x1; x1:=x; memo1.Lines.Add(floattostr(x0)); memo1.Text:=memo1.Text+' '+floattostr(x1); end;	МС
<b>Балл по умолчанию:1</b>	

#	Ответы	Оценка
A.	X0	0
B.	X1	100
C.	a	0
D.	b	0

### Вопрос 08

Дан фрагмент программы. Укажите его назначение K := 0; While Not Eof(F) Do Begin ReadLn(F, S); I := 1; While I <= Length(S) Do Begin If S[I] In ['А'..'Я', 'а'..'я', 'р'..'р'] Then Begin K := K + 1; Delete(S, I, 1); I := I - 1 End;  I := I + 1  End  End;	МС
<b>Балл по умолчанию:1</b>	

#	Ответы	Оценка
A.	удаляет из текстового файла F все русские буквы;	100
B.	определяет в текстовом файле количество символов, являющихся русскими буквами	0
C.	определяет в текстовом файле количество символов, не являющихся русскими буквами;	0
D.	определяет в текстовом файле количество символов;	0

### Вопрос 09

<u>Задан двумерный массив X[1..n, 1..m]. Укажите назначение процедуры</u>		МА
Procedure Sub (Var X: Myarray); Var i, j: Integer; Begin For i := 1 To n Do For j := 1 To m Div 2 Do X[i, 2 * j] := X[i, 2 * j] + X[i, 1]; End;		
<b>Балл по умолчанию:</b>		<b>1</b>
#	Ответы	Оценка
A.	к элементам столбцов в первой половины матрицы прибавляет элементы первого столбца соответствующей строки;	0
B.	добавляет к матрице еще M столбцов с элементами, равными соответствующим элементам первого столбца;	0
C.	к элементам четных столбцов прибавляет элементы первого столбца соответствующей строки;	100
D.	к элементам четных строк прибавляет элементы	0

### Вопрос 10

<u>Фрагмент программы Укажите его назначение</u>		МА
S := X[1,i]; X[1,i]:= X[5,i]; Y[5,i]:= S; .		
<b>Балл по умолчанию:</b>		<b>1</b>
#	Ответы	Оценка
A.	обмен значений элементов 1 - го и 5 - го столбца	100
B.	замена значений элементов 1- ой строки значениями элементов 5-ой строки;	0
C.	замена значений элементов 1- ого столбца значениями элементов 5-го столбца;	0
D.	к элементам четных строк прибавляет элементы	0