


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

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
физической химии

 Введенский А.В.
31.08.2017

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ОД.6 Вычислительные методы в химии

- 1. Шифр и наименование направления подготовки:**
04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализации:**
Органическая и полимерная химия, Теоретическая и экспериментальная химия
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр
- 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:** научно - методическим Советом химического факультета от 26.06.2017, протокол № 6
- 8. Учебный год:** 2018 / 2019 **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 (Pascal, Delphi),

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 04.03.01 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):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ПК-5	Способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	знать: численные методы решения нелинейных уравнений, систем уравнений, интегрирования, интерполяции; уметь: составлять алгоритмы и реализовывать их с помощью программ на языке программирования высокого уровня Free Pascal в среде программирования Lazarus; владеть: навыками обработки результатов научных экспериментов с использованием численных методов и реализации их в виде компьютерных программ

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом - 3 / 108

13. Виды учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	По семестрам
		3
Аудиторные занятия	54	54
в том числе: лекции	18	18
лабораторные	36	36
Самостоятельная работа	54	54
Форма промежуточной аттестации		
Зачет		х
Итого:	108	108
Форма текущей аттестации		Контрольная работа (1)

13.1. Содержание разделов дисциплины:

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal.	<p>Структура программы. Структура языка. Форма. Классы. Правила наследования. Среда программирования Lazarus. Реализация линейных алгоритмов.</p> <p>Организация разветвленных алгоритмов. Условный оператор. Оператор выбора.</p> <p>Реализация циклических алгоритмов в языке Pascal. Операторы цикла.</p> <p>Структурированные типы. Формирование преобразование элементов массива. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка. Формирование массива данных на основе типов Запись, Множество.</p> <p>Ввод и вывод с использованием текстовых и типизированных файлов.</p> <p>Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм: функций и процедур пользователя. Файловые параметры.</p>
1,2	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	<p>Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц. Решение системы линейных уравнений методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана. Решение химических и химико-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.</p> <p>Методы численного решения нелинейных уравнений. Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.</p> <p>Локальная и глобальная аппроксимация. Аппроксимация функцией заданного вида. Метод наименьших квадратов. Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ.</p>

		Численное интегрирование методом трапеций, методом Симпсона. Оценка сходимости методов. Нахождение значения интеграла с заданной точностью. Решение химических задач, сводящихся к численному интегрированию.
2. Лабораторные работы		
1.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal.	<p>Среда программирования Lazarus. Структура программы. Структура языка. Форма. Классы. Правила наследования. Решение задач с использованием линейных алгоритмов.</p> <p>Условный оператор. Решение задач с использованием условного оператора.</p> <p>Оператор выбора. Реализация алгоритмов ветвления с помощью оператора выбора.</p> <p>Оператор цикла с параметром. Реализация циклических алгоритмов в языке Pascal с помощью оператора</p> <p>Оператор цикла с предусловием. Реализация циклических алгоритмов в языке Pascal с помощью оператора цикла с предусловием.</p> <p>Оператор цикла с постусловием. Реализация циклических алгоритмов в языке Pascal с помощью оператора цикла с постусловием</p> <p>Структурированные типы. Тип массив. Формирование одно и многомерных массивов. Динамические массивы. Решение задач поиска, замены, преобразования элементов массива</p> <p>Структурированные типы. Тип массив. Сортировка элементов массива методом перестановки, пузырька, методом нахождения среднего с использованием рекурсивного алгоритма.</p> <p>Процедуры и функции пользователя Правила локализации объектов. Рекурсия. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм: функций и процедур пользователя.</p> <p>Структурированные типы. Тип строка. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.</p> <p>Структурированные типы. Формирование массива данных на основе типов Запись, Множество.</p> <p>Файловые параметры. Ввод и вывод с использованием текстовых и типизированных файлов.</p>
1.2	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	<p>Методы численного решения нелинейных уравнений. Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.</p> <p>Методы численного интегрирования. Решение химических задач, сводящихся к численному интегрированию. Численное интегрирование методом трапеций, методом Симпсона. Оценка сходимости методов.</p>

		<p>Решение системы линейных уравнений методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана. Решение химических и микро-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.</p> <p>Метод наименьших квадратов. Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ. Решение задач аппроксимации результатов химического эксперимента.</p>
--	--	--

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. Языки программирования как средство формальной записи алгоритмов. Обзор языков программирования. Язык программирования Pascal. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Pascal	12		20	32	64
2	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	6		16	22	44
	Итого:	18		36	54	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

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.

13. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Амосов, А. А. Вычислительные методы : / А. А. Амосов, Ю. А. Дубинский, Н. В. Копченова .— Москва : Лань", 2014 .— 672 с. : ил. ; 21 см .— (Учебники для вузов. Специальная литература) .— .— Предметный указатель: с. 655-666 .— <URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=42190 >
2.	Ачкасов, В. Программирование на Lazarus / В. Ачкасов. - 2-е изд., исправ. - М. : Национальный Открытый Университет «ИНТУИТ», 2016. - 521 с. [Электронный ресурс]. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=429187 (02.09.2016).
3.	Черпаков И. В. Основы программирования : учебник и практикум для прикладного бакалавриата / И. В. Черпаков. — М. : Издательство Юрайт, 2016. — 219 с. // Издательство «Юрайт» : электронно-библиотечная система. – URL : http://www.biblio-online.ru
4.	Алексеев, Е.Р. Free Pascal и Lazarus: Учебник по программированию [Электронный ресурс] : учебник / Е.Р. Алексеев, О.В. Чеснокова, Т.В. Кучер. — Электрон. дан. — М. : ДМК Пресс, 2010. — 438 с. — URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=1267

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
5.	Зеленяк, О.П. Практикум программирования на Turbo Pascal. Задачи, алгоритмы и решения [Электронный ресурс] : . — Электрон. дан. — М. : ДМК Пресс, 2009. — 311 с. — URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=1249
6.	Стивенс, Р. Delphi. Готовые алгоритмы / Стивенс Р. .— Москва : ДМК Пресс,

	2007 .— 380 с. — (Для программистов) .— .— ISBN 5-94074-106-1 .— <URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=1234
7.	Фаронов В.В. Delphi. Программирование на языке высокого уровня : учебник для студ. вузов, обуч. по направлению подгот. дипломир. специалистов "Информатика и вычисл. техника" / В. В. Фаронов. — СПб. : Питер, 2007. — 639 с.
8.	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.
9.	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.
10.	Фаронов В.В. Система программирования Delphi / В. В. Фаронов. — СПб. : БХВ-Петербург, 2003. — 888 с.
11.	Веремей Е. И. Программирование в среде Delphi : учеб. пособие .— СПб. : Изд-во С.-Петербур. ун-та, 1998. — 86 с.
12.	Кетков Ю. Л. Основы программирования в среде Delphi : Учеб. пособие / Ю.Л.Кетков, К.В.Лебедев, Е.В.Петрова, Е.П.Уварова. — Нижний Архыз : CYGNUS, 1997. — 134 с.
13.	Культин Н. Б. Основы программирования в Delphi 7 / Н. Б. Культин. — СПб. : БХВ-Петербург, 2003. — 598 с.
14.	Дарахвелидзе П. Программирование в Delphi 7 / П. Дарахвелидзе, Е. Марков. — СПб. : БХВ-Петербург, 2003. — 781 с.
15.	Бобровский С.И. Delphi 7 : Учебный курс / С.И. Бобровский. — СПб. : Питер, 2003. — 735 с.
16.	Баженова И.Ю. Delphi 7 : Самоучитель программиста / И. Ю. Баженова. — М. : Кудиц-образ, 2003. — 447 с.
17.	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
18.	Информационная система "Университетская библиотека ONLINE" — < http://biblioclub.ru >
19.	Электронно-библиотечная система "Издательство "Лань" — < http://e.lanbook.com >
20.	Научная электронная библиотека — < http://www.elibrary.ru >
21.	Электронная библиотека Воронежского государственного университета — < http://www.lib.vsu.ru >
22.	Образовательный математический сайт - < http://www.exponenta.ru >
23.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" . — < http://window.edu.ru >
24.	Протасова И.В. Вычислительные методы в химии. Электронный курс/ И.В. Протасова. — < http://www.moodle.vsu.ru >

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 .— Загл. с титул. экрана .— Свободный доступ из интрасети ВГУ .— Текстовый файл .— Windows 2000; Adobe Acrobat Reader .— <URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m17-80.pdf >.
3	Протасова И.В. Вычислительные методы в химии: Электронный курс/ И.В. Протасова. - < http://www.moodle.vsu.ru >
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. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

1. Чтение лекций с использованием презентаций.
2. ЗНБ ВГУ www.lib.vsu.ru
3. ЭБС «Университетская библиотека online» <https://biblioclub.ru/>
4. ЭБС «Консультант студента» <http://www.studmedlib.ru/>
5. Электронный образовательный портал "Электронный университет ВГУ",

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 вычислительную сеть, подключенную к сети Воронежского государственного университета, 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. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ПК-5	знать: численные методы решения нелинейных уравнений, систем уравнений, интегрирования, интерполяции;	Тема 2. Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Практическое задание ПА1
	уметь: составлять алгоритмы и реализовывать их с помощью программ на языке программирования высокого уровня Free Pascal в среде программирования Lazarus;	Тема 1 Алгоритмы и алгоритмические языки. Языки программирования как средство формальной записи алгоритмов. Обзор языков программирования. Язык программирования Pascal. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Pascal	Практическое задание ТА1 ПА1
	владеть: навыками обработки результатов научных экспериментов с использованием численных методов и реализации их в виде компьютерных программ	Тема 1 Алгоритмы и алгоритмические языки. Языки программирования как средство формальной записи алгоритмов. Обзор языков программирования. Язык программирования Pascal. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Pascal Тема 2. Применение вычислительных методов к химическим задачам	Практическое задание ПА1
Промежуточная аттестация Зачет			Индивидуальное контрольное задание Контрольный тест

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при 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 зачете

Компетенция	Показатель сформированности компетенции	Шкала и критерии оценивания уровня освоения компетенции	
		«зачтено»	«не зачтено»
		Соответствие любым трем из перечисленных показателей	Нет соответствия более чем трем любым перечисленным показателям
ПК-5	знать: численные методы решения нелинейных уравнений, систем уравнений, интегрирования, интерполяции;	Сформированные знания численных методов решения нелинейных уравнений, систем уравнений, интегрирования, интерполяции	Фрагментарные знания или отсутствие знаний
	уметь: составлять алгоритмы и реализовывать их с помощью программ на языке программирования высокого уровня Free Pascal в среде программирования Lazarus;	Сформированные умения составления алгоритмов и их реализации с помощью программ на языке программирования высокого уровня Free Pascal в среде программирования Lazarus;	Фрагментарные умения или отсутствие умения
	владеть: навыками обработки результатов научных экспериментов с использованием численных методов и реализации их в виде компьютерных программ	Сформированные навыки обработки результатов научных экспериментов с использованием численных методов и реализации их в виде компьютерных программ	Фрагментарные навыки или отсутствие навыков

19.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень разноуровневых практических заданий текущей аттестации (контрольной работы)

1. Даны две квадратные вещественные матрицы 10-го порядка. Напечатать квадрат той из них, в которой наименьшая сумма диагональных элементов, считая, что такая матрица одна.
2. Даны действительные числа a , b , c .
Получить $(\max(a, a+b) + \max(a, b+c)) / (1 + \max(a+b*c, 1, 15))$.
3. Составить процедуру, заменяющую в исходной строке символов все единицы нулями, а все нули единицами. Замена должна выполняться начиная с заданной позиции строки.
4. Описать функцию **step**(x, n), от вещественного x и натурального n , вычисляющую (через умножение) величину x^n , и использовать ее для вычисления значения выражения $b = 2.7^k + (a+1)^{-5}$.
5. Дан файл f , компоненты которого являются действительными числами. Найти сумму компонент файла f .
6. 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.
7. Дан символьный файл f . Получить копию файла в файле g .
8. Дан файл, содержащий сведения об элементах: указывается название, знак, порядковый номер, атомная масса, металл/неметалл. Найти порядковые номера и названия всех неметаллов.
9. Дан файл, содержащий сведения об элементах: указывается название, знак, порядковый номер, атомная масса, металл/неметалл. Найти порядковые номера и названия всех неметаллов.
10. Найти сумму положительных и произведение отрицательных элементов двумерного массива.
11. Вывести на печать номера позиций, в которых находятся нулевые элементы двумерного массива.
12. Поменять местами строки n и m , столбцы l и k квадратной матрицы.
13. Обнулить элементы столбца двумерного массива, содержащего максимальный элемент.
14. В столбцах матрицы элементы переставить так, чтобы их значения нарастали с увеличением номера строки.
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*. Найти самое длинное слово в введенной фразе и посчитать число слов.
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*. Выяснить, встречается ли в строке последовательность символов состоящая из стоящих рядом трех точек.
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*. Подсчитать количество слов в данной последовательности.

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 количество слов, начинающихся с буквы, заданной пользователем.
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*. Найти длину самого короткого слова.
20. 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.
21. Из диагональных элементов квадратной матрицы действительных чисел создать одномерный массив.
22. Из элементов квадратной матрицы целых чисел кратных 8 создать одномерный массив.
23. Из максимальных элементов каждой строки квадратной матрицы целых чисел создать одномерный массив. Нахождение максимального элемента в строке оформить виде процедуры.
24. Из минимальных элементов каждой строки квадратной матрицы вещественных чисел создать одномерный массив. Нахождение минимального элемента в строке оформить виде функции.
25. Из максимальных элементов каждого столбца квадратной матрицы натуральных чисел создать одномерный массив. Нахождение максимального элемента в столбце оформить виде процедуры.
26. Из номеров позиций вхождения символа a в строку создать одномерный массив натуральных чисел.
27. По результатам сессии (4 экзамена) часть студентов получила только отличные оценки. Программа должна распечатывать список этих студентов.
28. 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.
29. Имеется одномерный массив целых чисел. Создать и напечатать новый массив из чисел первого массива, кратных одновременно 3 и 5.
30. Имеется квадратная матрица. Программа должна обнулять элементы главной и побочной диагоналей.
31. В одномерном массиве вещественных чисел провести циклический сдвиг: $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n \rightarrow a_n, a_1, a_2, a_3, \dots, a_{n-1}$.
32. Задан массив из 20 целых чисел. Сформировать из него двумерный массив размерностью 4×5 и вывести его на экран.
33. Преобразовать исходный одномерный массив действительных чисел, удалив из него повторяющиеся элементы, массив сжать.
34. 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} ?

35. Написать программу, вычисляющую значение выражения, используя оператор

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

36. Целой переменной s присвоить сумму цифр трёхзначного целого числа k.

37. Проверьте предел:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = e$$
 вычислив его как сумму ряда с заданной точностью $E=0,00001$:

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

38. Сравните скорости сходимости при вычислении числа e:

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

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

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

40. Численно убедитесь в справедливости равенства, для чего вычислите правую часть с точностью ϵ . 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 языке Pascal
2. Умение использовать операторы для составления;
3. Владение навыками работы в среде программирования Lazarus

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

"Зачтено" - представлен работающий код, продемонстрировано знание правил написания программ на языке Pascal, умение использовать операторы для составления программ, владение навыками работы в среде программирования Lazarus

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

19.3.2 Перечень вопросов к зачету

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.

19.3.2 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 Б1.В.ОД.6 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?

$S:=\text{strtoint}(\text{edit1.Text});$

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

19.3.4 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 ΔH (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:

ΔH_1 T_1
 ΔH_2 T_2
 ΔH_3 T_3
 ΔH_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			
	ω_1 , %	ω_2 , %	ω_3 , %	ω_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: ω_1 , ω_2 , ω_3 и ω_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:

$$\begin{aligned}U_1 &= 10 + 1 \cdot C_1 - 2 \cdot C_2 + 2.0 \cdot pH + 0.5 \cdot (T - 300); \\U_2 &= 15 - 1 \cdot C_1 - 1 \cdot C_2 + 1.2 \cdot pH + 0.9 \cdot (T - 300); \end{aligned}$$

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

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

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

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

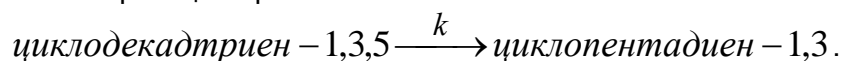
Ввод исходных значений организовать через считывание данных из текстового файла `input.txt` в массив записей.

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

Решение системы уравнений осуществить методом Гаусса-Жордана.

Задача 5

Исследована кинетика реакции при 190°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 .

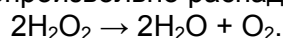
$1/C, (\text{моль/л})^{-1}$	1,85	2,04	2,34	2,07	3,83	5,28
$t, \text{с}$	524	620	752	876	1188	1452

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`.

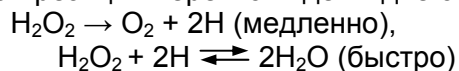
Задача 6

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

H_2O_2 во времени происходит в соответствии с уравнением $c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t) = c_{\text{H}_2\text{O}_2}^0 \cdot e^{-k_I t}$, где

$c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t)$ – концентрация пероксида к моменту времени t . Логарифмируя это уравнение получают линейную зависимость в координатах $\lg c_{\text{H}_2\text{O}_2} - t$:

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

По текущим концентрациям H_2O_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.

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

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 выше.