

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

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
физической химии

 Введенский А.В.
04.06.2018 г

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.Б.21 Вычислительные методы в химии

- 1. Шифр и наименование направления подготовки:**
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Профиль специализации:** без специализации
- 3. Квалификация 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:** НМС химического факультета от 24.05.18, протокол № 5
- 8. Учебный год:** 2019/ 2020 **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 04.05.01 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):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ПК-5	способность приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций	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 решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций

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

13. Виды учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	По семестрам
		3
Аудиторные занятия	72	72
в том числе: лекции	36	36
лабораторные	36	36
Самостоятельная работа	72	72
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
1. Лекции		
1.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal.	Структура программы. Структура языка. Форма. Классы. Правила наследования. Реализация линейных алгоритмов.
1.2	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Организация разветвленных алгоритмов. Условный оператор.
1.3	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Организация разветвленных алгоритмов. Оператор выбора.
1.4	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Реализация циклических алгоритмов в языке Паскаль. Операторы цикла.
1.5	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Реализация циклических алгоритмов в языке Паскаль. Операторы цикла.

1.6	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Файловые типы данных. Ввод и вывод с использованием текстовых и типизированных файлов
1.7	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal.	Тип массив. Формирование преобразование элементов массива. Сортировка элементов массива методом перестановки, пузырька, методом нахождения среднего с использованием рекурсивного алгоритма.
1.8	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Динамические массивы. Тип строка. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.
1.9	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Процедуры и функции пользователя Правила локализации объектов. Рекурсия. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм: функций и процедур пользователя
1.10	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Тип запись. Тип множество. Формирование массива данных на основе типов Запись, Множество.
1.11	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Задачи нахождения значения и табуляции сложной функции. Задачи нахождения значения конечных и бесконечных рядов.
1.12	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.

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.
1.14	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Решение химических и химико-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.
1.15	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц. Решение системы линейных уравнений методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана.
1.16	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Локальная и глобальная аппроксимация. Аппроксимация функцией заданного вида. Метод наименьших квадратов
1.17	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ.
1.18	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Поиск решения дифференциальных уравнений методом Эйлера, методом Рунге-Кутты. Решение химических задач, сводящихся к численному решению дифференциальных уравнений.
2. Лабораторные работы		
2.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Структура программы. Структура языка. Форма. Классы. Правила наследования. Реализация линейных алгоритмов.
2.2.	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Организация разветвленных алгоритмов. Условный оператор.
2.3	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Организация разветвленных алгоритмов. Оператор выбора.

2.4	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Реализация циклических алгоритмов в языке Паскаль. Операторы цикла.
2.5	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Реализация циклических алгоритмов в языке Паскаль. Операторы цикла.
2.6	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Файловые типы данных. Ввод и вывод с использованием текстовых и типизированных файлов
2.7	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Тип массив. Формирование преобразование элементов массива. Сортировка элементов массива методом перестановки, пузырька, методом нахождения среднего с использованием рекурсивного алгоритма.
2.8	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Динамические массивы. Тип строка. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.
2.9	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Процедуры и функции пользователя Правила локализации объектов. Рекурсия. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм: функций и процедур пользователя
2.10	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования Free Pascal	Тип запись. Тип множество. Формирование массива данных на основе типов Запись, Множество.
2.11	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Задачи нахождения значения и табуляции сложной функции. Задачи нахождения значения конечных и бесконечных рядов.
2.12	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.
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.

2.14	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических и химико-технологических задач, сводящихся к нахождению корней системы линейных и нелинейных уравнений.
2.15	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц. Решение системы линейных уравнений методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана.
2.16	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Локальная и глобальная аппроксимация. Аппроксимация функцией заданного вида. Метод наименьших квадратов
2.17	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ.
2.18	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Поиск решения дифференциальных уравнений методом Эйлера, методом Рунге-Кутты. Решение химических задач, сводящихся к численному решению дифференциальных уравнений.

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	20		20	38	78
2	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	16		16	34	66
	Итого:	36		36	72	144

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 ресур-сам" . — <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:

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{(-1)^k}{2k+1} \right) = \frac{\sqrt{2}}{2}, \text{ чтобы равенство выполнялось до шестой значащей цифры, то есть с погрешностью не более } 10^{-6}?$$

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.

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

$C_1 = C_2 = 2$ 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 $U_2 = 36.8\%$.

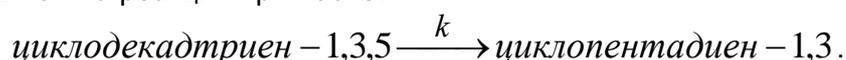
Ввод исходных значений организовать через считывание данных из текстового файла `input.txt` в массив записей.

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

Решение системы уравнений осуществить методом Гаусса-Жордана.

Задача 5

Исследована кинетика реакции при 190°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 .

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`.

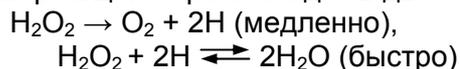
Задача 6

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 $c_{\text{H}_2\text{O}_2}(t) = c_{\text{H}_2\text{O}_2}^0 \cdot e^{-kt}$, 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 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.