

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии



Козадеров О.А..
03.06.2025 г 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:** 1004 физической химии
6. **Составители программы:** Протасова Ирина Валентиновна, к.х.н., доцент
7. **Рекомендована:** НМС химического факультета 27.03.2025, протокол № 10-03
8. **Учебный год:** 2026/ 2027

Семестр: 3

9. Цели и задачи изучения дисциплины:

Целями освоения учебной дисциплины являются:

сформировать компетенции обучающегося в области критического анализа результатов научно-исследовательской деятельности для оценки перспективы практического применения результатов научных исследований и продолжения работы в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии

Задачи учебной дисциплины:

сформировать представления о теоретических основах вычислительных методов, используемых при решении профессиональных задач;

ознакомить с базовыми алгоритмами, применяемыми при анализе профессиональной информации

развить навыки использования программного обеспечения для анализа данных, полученных в ходе НИР.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Часть, формируемая участниками образовательных отношений

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: освоения компетенций, приобретаемых при изучении дисциплин «Информатика» и «Математика» обязательной части образовательной программы.

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 литературными данными	Знать: методы и алгоритмы, применяемые при решении профессиональных задач Уметь: применять методы анализа данных, полученных в ходе НИР, имеющих естественнонаучное содержание Владеть: программным обеспечением для анализа данных, полученных в ходе НИР.
		ПК -3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Знать: методы реализации, применяемых для анализа данных, полученных в ходе НИР Уметь: составлять алгоритмы решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций Владеть: программным обеспечением для решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации *зачет*

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость	
	Всего	По семестрам
		3 семестр
Аудиторные занятия	102	102

в том числе:	лекции	34	34
	практические		-
	лабораторные	68	68
Самостоятельная работа		42	42
в том числе: курсовая работа (проект)			-
Форма промежуточной аттестации - <i>зачет</i>			
Итого:		144	144

13.1. Содержание разделов дисциплины:

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языков программирования	Программное обеспечение для анализа данных. Языки программирования. Структура программы. Структура языка	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.2	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языков программирования	Реализация линейных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.3	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Организация разветвленных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.4	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.5	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.6	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Файловые типы данных. Ввод и вывод данных с использованием текстовых и типизированных файлов	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.7	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования.	Формирование структуры данных в виде упорядоченной пронумерованной совокупности однотипных элементов (массив). Анализ и преобразование данных, представленных в виде массива.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587

1.8	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Динамические структуры данных. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.9	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Подпрограммы пользователя Правила локализации объектов. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.10	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Формирование структуры данных в виде совокупности элементов разного типа. Анализ и преобразование данных, представленных с использованием типов запись, множество.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.12	Применение вычислительных методов к химическим задачам	Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
1.16	Применение	Локальная и глобальная	ЭУМК

	вычислительных методов к химическим задачам	аппроксимация. Аппроксимация функцией заданного вида. Метод наименьших квадратов Интерполяция полиномом Лагранжа, Ньютона, сплайн-интерполяция. Регрессионный анализ.	«Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
2. Практические занятия			
не предусмотрены учебным планом			
3. Лабораторные работы			
3.1	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Инструменты для создания и реализации алгоритмов. Реализация линейных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.2.	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Организация разветвленных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.3	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Организация разветвленных алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.4	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических алгоритмов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.5	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Реализация циклических алгоритмов..	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.6	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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587

3.7	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Формирование и преобразование структуры данных на основе однотипных элементов. Тип массив.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.8	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Строковые типы данных. Обработка текстовой информации, представленной типом Строка.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.9	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Подпрограммы пользователя. Организация вычислительного алгоритма с использованием подпрограмм.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.10	Алгоритмы и алгоритмические языки. Реализация алгоритмов средствами языка программирования	Формирование и преобразование структуры данных на основе разнотипных элементов. .	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.11	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Задачи нахождения значения и табюляции сложной функции. Задачи нахождения значения конечных и бесконечных рядов.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.12	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Решение химических задач, сводящиеся к численному решению нелинейных уравнений.	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.13	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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.14	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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.15	Применение вычислительных методов к химическим задачам.	Обращение, транспонирование матрицы; сложение, умножение матриц. Решение системы линейных уравнений	ЭУМК «Вычислительные методы в химии» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587

		методом Крамера, Гаусса, Гаусса-Жордана.	
3.16	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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
3.17	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» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587

13.2. Разделы дисциплины и виды занятий:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)			
		Лекции	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 «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton 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.

Планирование и организация текущих аттестации знаний, умений и навыков осуществляется в соответствии с содержанием рабочей программы и календарно-тематическим планом с применением фонда оценочных средств. Текущая аттестация является обязательной, ее результаты могут быть учтены при промежуточной аттестации обучающихся.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации с использованием программ-синтезаторов речи, а также использование звукозаписывающих устройств на лекциях. На занятиях также может присутствовать ассистент. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование; время подготовки на экзамене может быть увеличено. Студенты с нарушениями опорно-двигательного аппарата могут проходить часть занятий дистанционно. Промежуточная аттестация для них проводится на общих основаниях, при необходимости процедура экзамена может быть реализована дистанционно.

15. . Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения 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: https://e.lanbook.com/book/241115
2.	Амосов, А. А. Вычислительные методы / А. А. Амосов, Ю. А. Дубинский, Н. В. Копченова. — 5-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2023. — 672 с. — ISBN 978-5-507-47808-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/327497 и.

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: https://e.lanbook.com/book/241145

4.	Крылов, В. И. Вычислительные методы / В.И. Крылов, В.В. Бобков, П.И. Монастырный ; ред. Е. Ю. Ходан ; ред. Е. В. Шукин . — Москва : Наука, 1977 . — 400 с. — http://biblioclub.ru/ . — <URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=456989 >.
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: https://e.lanbook.com/book/159947
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: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=429189
7.	Широков, А.И. Информатика. Разработка программ на языке программирования Питон. Базовые языковые конструкции [Электронный ресурс] / А.И. Широков, М.О. Пышняк. - М. : МИСус, 2020. — ISBN 5-907226-76-0 . — <URL: https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785907226760.html >.
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.	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
11.	Информационная система "Университетская библиотека ONLINE" — URL: http://biblioclub.ru
12.	Электронно-библиотечная система "Издательство "Лань" — URL: http://e.lanbook.com
13.	Электронно-библиотечная система "Консультант студента". — URL: http://www.studmedlib.ru
14.	Научная электронная библиотека — URL: http://www.elibrary.ru
15.	Электронная библиотека Воронежского государственного университета — URL: http://www.lib.vsu.ru
16.	Образовательный математический сайт - URL: http://www.exponenta.ru
17.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам". — URL: http://window.edu.ru
18.	Протасова И.В. Вычислительные методы в химии. Электронный курс/ И.В. Протасова. — URL: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ 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: 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. — URL: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10587
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 учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

19. Материально-техническое обеспечение дисциплины

20.

Аудиторный фонд корпуса №1 Университетская пл.1. Учебная аудитория (ауд. 439): доска магнитная меловая мультимедиа-проектор, ноутбук, проектор, экран для проектора WinPro 8, Office Standard 2019, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome, Mozilla Firefox
271 аудитория: Мебель и оборудование учебных аудиторий - столы, стулья, мультимедийная переносная система, электронно-вычислительная техника. 12 посадочных мест, оборудованных персональными компьютерами на базе процессоров Intel, объединенных в локальную вычислительную сеть, подключенную к сети Воронежского госуниверситета, имеющие выход в Интернет. WinPro 8, Office Standard 2019, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome, Mozilla Firefox
Помещение для самостоятельной работы обучающихся, компьютерный класс (ауд. 271): специализированная мебель, компьютеры с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ВГУ WinPro 8, OfficeSTD, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome
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 аттестаций

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	<i>Практическое задание, Тестовый опрос</i>
2.	Применение вычислительных методов к химическим задачам	ПК	ПК 3.2	<i>Практическое задание, Тестовый опрос</i>
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет				<i>Перечень вопросов Практическое задание</i>

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 (*контрольная работа в виде практического задания*):

Примеры заданий 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 :

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

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

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

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 одном из языков программирования.
2. Умение использовать операторы для составления программы;
3. Владение навыками работы в среде программирования.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме: практического задания.

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. Промежуточный контроль успеваемости

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: практическое задание и собеседование по заданию.

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. Сплайн-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 Б1.В.11 Вычислительные методы в химии.

Тестовый опрос оценивается по шкале:

90-100% - отлично

70-89 % - хорошо;

60 -69 % - удовлетворительно;

59% и менее - неудовлетворительно

Примеры тестовых заданий из Банка вопросов.

Вопрос 1

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом простых итераций

1. $x := x_1 - ((x_1 - x_0) / (f(x_1) - f(x_0))) * f(x_1);$

2. $x := f(x_0);$

3. $x := (a + b) / 2;$

верный ответ

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом простых итераций

4. $x := x_0 - f(x_0)/p(x_0);$

Вопрос 2

Какой тип отвечает значению выражения:

$\text{abs}(s_0 - s) \leq e$?

Выберите один ответ:

1. Boolean *верный ответ*
2. string
3. byte
4. longint
5. real

Вопрос 3

Какой тип отвечает переменной S?

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

Выберите один ответ:

1. ☐ string
2. ☐ byte
3. ☐ real
4. ☐ longint
5. ☒ integer *верный ответ*

Вопрос 4

Чему равно значение переменной S после выполнения цикла?

Введите целое число со знаком.

```
x:=2;
Sign:=-1;
a:=-1;
  S:=a;
  i:=0;
while Abs(a)>i do
begin
  i:=i+1;
  Sign:=-Sign; a:=Sign*a*i;
  S:=S+a;
end;
```

Ответ: -2

Вопрос 5

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 *верный ответ*
- ☐ 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 °С до 150 °С следующим соотношением

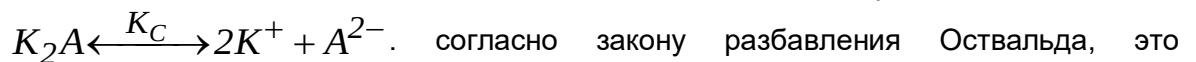
Написать программу, которая находит температуры при которых поглощается количество тепла Q (Дж/г).

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:

- | | |
|----------|-------|
| 1. H_1 | T_1 |
| 2. H_2 | T_2 |
| 3. H_3 | T_3 |
| 4. H_4 | T_4 |

Задача 2

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



равновесие можно описать следующей формулой:

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

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 исходных 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:

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

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

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

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, c	0	10	15	30	40	45	60
$C_{H_2O_2}(t)$, 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.

Описание технологии проведения

Промежуточная аттестация студентов является основной формой контроля аудиторной работы студентов и проводится с целью установления уровня и качества подготовки студентов ФГОС 3++ и определяет:

- полноту и прочность теоретических знаний;
- сформированность умений применять теоретические знания при решении практических и профессиональных задач;
- сформированность общих и профессиональных компетенций.

Подготовка к промежуточной аттестации является формой самостоятельной работы студентов. При этом обучающийся должен использовать рекомендованный рабочей программой перечень основной и дополнительной литературы, материалы лекций, информационные и электронно-образовательные ресурсы. Для подготовки к промежуточной аттестации студент также может использовать перечень вопросов, вынесенных на зачет, позволяющий оценить уровень сформированности профессиональных компетенций по дисциплине «Вычислительные методы в химии».

Промежуточная аттестация проводится в устной (или письменной) форме. Преподаватель, проводящий промежуточную аттестацию, имеет право задавать студентам дополнительные вопросы по всему разделу программы учебной дисциплины. Время проведения аттестации устанавливается нормами времени. Результат сдачи промежуточной аттестации заносится преподавателем в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Оценка результатов обучения на промежуточной аттестации происходит по следующим показателям:

- 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»

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 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.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

- при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

- при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

- при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

20.3. Фонды оценочных средств для проведения диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения дисциплины

ПК-3.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.	Знать: методы и алгоритмы, применяемые при решении профессиональных задач Уметь: применять методы анализа данных, полученных в ходе НИР, имеющих естественнонаучное содержание Владеть: программным обеспечением для анализа данных, полученных в ходе НИР.
---	--

Тестовые вопросы (закрытый тип)

Вопрос 01

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом простых итераций

5. $x := x_1 - ((x_1 - x_0) / (f(x_1) - f(x_0))) * f(x_1);$
6. $x := f(x_0);$
7. $x := (a + b) / 2;$
8. $x := x_0 - f(x_0) / p(x_0);$

верный ответ

Вопрос 02

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

1. $x := x_1 - ((x_1 - x_0) / (f(x_1) - f(x_0))) * f(x_1);$
2. $x := f(x_0);$
3. $x := (a + b) / 2;$
4. $x := x_0 - f(x_0) / p(x_0);$

верный ответ

Вопрос 03

Укажите правильное выражение для нахождения корня методом касательных (Ньютона)

1. $x := x_1 - ((x_1 - x_0) / (f(x_1) - f(x_0))) * f(x_1);$
2. $x := x_0 - f(x_0) / p(x_0);$
3. $x := f(x_0);$
4. $x := (a + b) / 2;$
5. $x_1 := x - f(x) / p(x);$

верный ответ

верный ответ

Вопрос 04 (Интегрирование. Методы)

Установите соответствие между методом и способом нахождения решения

- | | | |
|----|---|--|
| 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 05

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом половинного деления

1. $x := x_1 - ((x_1 - x_0) / (f(x_1) - f(x_0))) * f(x_1);$
2. $x := f(x_0);$
3. $x := (a + b) / 2;$
4. $x := x_0 - f(x_0) / p(x_0);$

верный ответ

Вопрос 06

Укажите правильное выражение для вычисления корня нелинейного уравнения методом касательных

1. $x := x_1 - ((x_1 - x_0) / (f(x_1) - f(x_0))) * f(x_1);$
2. $x := f(x_0);$
3. $x := (a + b) / 2;$
4. $x := x_0 - f(x_0) / p(x_0);$

верный ответ

Вопрос 07

Установите соответствие между методом и способом нахождения решения нелинейного уравнения

- | | | |
|----|---|---------------------------|
| 4. | $x_c = a - f(a) \frac{b - a}{f(b) - f(a)}$ | Метод хорд |
| 5. | $F'(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$ | Метод касательных |
| 6. | $x = \frac{x_A + x_B}{2}$ | Метод половинного деления |

Тестовые вопросы (закрытый тип) Среднего уровня сложности

Вопрос 01

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(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));
until ABS(s-s0)<=e;
end;..
```

- | | | |
|---|--|---------------------|
| 1 | Сохраняет предыдущее значение интеграла | |
| 2 | Сохраняет новое вычисляемое значение суммы | |
| 3 | Сохраняет порядковый номер итерации | |
| 4 | Сохраняет вводимое значение границы в интегрирования | <i>верный ответ</i> |

Вопрос 02

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;
```

- ...
1. Сохраняет предыдущее значение суммы
 2. Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла
 3. Сохраняет порядковый номер итерации
 4. Сохраняет текущее значение величины изменения *верный ответ*

Вопрос 03

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(Floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...'+Inttostr( n));
until ABS(s-s0)<=e;
end;
```

- ...
1. Сохраняет предыдущее значение суммы *верный ответ*
 2. Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла
 3. Сохраняет порядковый номер итерации
 4. Сохраняет текущее значение шага интегрирования

Вопрос 04

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;
```

- ...
1. Сохраняет предыдущее значение интеграла
 2. Сохраняет новое вычисляемое значение суммы
 3. Сохраняет порядковый номер итерации
 4. Сохраняет значение границы в интегрирования

верный ответ

Вопрос 05

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;
```

- ...
- 1 Сохраняет предыдущее значение суммы
 - 2 Сохраняет новое вычисляемое значение интеграла
 - 3 Сохраняет порядковый номер итерации
 - 4 Сохраняет текущее значение шага интегрирования

верный ответ

Вопрос 7

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;
...
```

1. Сохраняет текущее значение корня
2. Сохраняет новое вычисляемое значение корня
3. Сохраняет порядковый номер итерации
4. Сохраняет текущее значение правой границы

верный ответ

Вопрос 8

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;
...
```

1. Сохраняет текущее значение корня
2. Сохраняет новое вычисляемое значение корня
3. Сохраняет порядковый номер итерации
4. Сохраняет текущее значение правой границы

верный ответ

Вопрос 9

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

```
...
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;
...
```

1. Сохраняет текущее значение корня
2. Сохраняет вводимое значение границы поиска решения
3. Сохраняет порядковый номер итерации
4. Сохраняет текущее значение правой границы

верный ответ

Вопрос 10

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

```
...
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;;
...
```

1. Сохраняет текущее значение корня
2. Сохраняет новое вычисляемое значение корня
3. Сохраняет порядковый номер Метод простых итераций.
4. Сохраняет текущее значение правой границы

верный ответ

ПК-3.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.	Знать: методы реализации, применяемых для анализа данных, полученных в ходе НИР Уметь: составлять алгоритмы решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций Владеть: программным обеспечением для решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций.
--	--

Закрытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

Вопрос 01

Дан фрагмент программы

Укажите значения каких переменных будут выводиться в компонент Memo1

.....

```
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;
```

1. X0
2. X1
3. a
4. b

верный ответ

Вопрос 02

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', 'П', 'п']
      Then Begin K := K + 1;
        Delete(S, I, 1); I := I - 1
      End;
    I := I + 1
  End
End;
```

1. удаляет из текстового файла F все русские буквы;
2. определяет в текстовом файле количество символов, являющихся русскими буквами
3. определяет в текстовом файле количество символов, не являющихся русскими буквами;
4. определяет в текстовом файле количество символов;

верный ответ

Вопрос 03

Задан двумерный массив $X[1..n, 1..m]$. Укажите назначение процедуры

```
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;
```

1. к элементам столбцов в первой половины матрицы прибавляет элементы первого столбца соответствующей строки;
2. добавляет к матрице еще M столбцов с элементами, равными соответствующим элементам первого столбца;
3. к элементам четных столбцов прибавляет элементы первого столбца соответствующей строки;
4. к элементам четных строк прибавляет элементы

верный ответ

Вопрос 04

Фрагмент программы Укажите его назначение

```
S := X[1,i]; X[1,i]:= X[5,i]; Y[5,i]:= S;
```

.

1. обмен значений элементов 1 - го и 5 - го столбца
2. замена значений элементов 1- ой строки значениями элементов 5-ой строки;
3. замена значений элементов 1- ого столбца значениями элементов 5-го столбца;
4. к элементам четных строк прибавляет элементы

верный ответ

Вопрос 05

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(floattostrf(s,ffixed,6,4)+'...' +Inttostr( n));
until ABS(s-s0)<=e;
end;
```

Выберите один ответ:

- Сохраняет вводимое значение границы в интегрирования *верный ответ*
- Сохраняет новое вычисляемое значение суммы
- Сохраняет порядковый номер итерации
- Сохраняет предыдущее значение интеграла

Вопрос 06

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;
...
```

Выберите один ответ:

1. Сохраняет порядковый номер итерации
2. Сохраняет текущее значение корня
3. Сохраняет вычисляемое значение производной *верный ответ*
4. Сохраняет вычисляемое значение функции

Открытые задания (средний уровень сложности):

Вопрос 01

(блоки приведены в правильной последовательности)

Расставьте элементы кода в 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

(блоки приведены в правильной последовательности)

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:= 'f('+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;

```

Критерии и шкалы оценивания:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

3) открытые задания (мини-кейсы, средний уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
- 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из выполнения нескольких подзаданий, 50% которых выполнено верно;
- 0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки, значительно влияющие на дальнейшее его изучение).