

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительные методы в химии

**Кафедра прикладной математики факультета математики и
компьютерных наук**

Образовательная программа

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) программы

Аналитическая химия;

Неорганическая химия;

Органическая химия

Уровень высшего образования

Специалитет

Форма обучения

Очная

Статус дисциплины: *входит в обязательную часть ОПОП*

Махачкала, 2021

Рабочая программа дисциплины «Вычислительные методы в химии» составлена в 2021 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО - специалитет по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

Приказ №652 Минобрнауки России от 13.07.2017 г.

Разработчик: доцент, канд. физ.-мат. наук. Гаджиева Т.Ю.

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры прикладной математики от
«22» мая 2021 г., протокол № 9

Зав. кафедрой К Кадиев Р.И.
(подпись)

и
на заседании Методической комиссии химического факультета от «18» июня
2021г., протокол №10.

Председатель Уасаз Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим
управлением « 09 » 07 2021 г.

Начальник УМУ М Гасангаджиева А.Г.
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» входит в *входит в обязательную часть ОПОП* часть образовательной программы *специалитета* по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой прикладной математики факультета математики и компьютерных наук.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с ознакомлением с базовыми математическими моделями и освоением численных методов, решения задач математического анализа, линейной алгебры, а также знакомством с современными направлениями развития вычислительных методов в химии.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: общепрофессиональных – ОПК-4.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, практические занятия, самостоятельная работа.*

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме контрольных работ, коллоквиума и промежуточный контроль в форме экзамена.

Объем дисциплины 5 зачетных единиц, в том числе в 180 академических часах по видам учебных занятий

Семес тр	Учебные занятия						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцирован ный зачет, экзамен
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Всего	из них						
Лекции		Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	консультации			
5	180	36		36			108	экзамен

1. Цели освоения дисциплины

Цель изучения курса «Вычислительные методы в химии» - владение студентами умения применять численные методы при решении различных задач, встречающиеся в естествознании.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалитета

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» входит в *обязательную* часть образовательной программы *специалитета* по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

Курс по дисциплине «Вычислительные методы в химии» вводится после изучения дисциплин алгебра, информатика, математический анализ, так как для успешного усвоения этого курса студентам необходимы знания по указанным дисциплинам.

Разработанные в курсе методы могут применяться при составлении различных моделей в естествознании.

3. 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения и процедура освоения).

Код и наименование компетенции из ОПОП	Код и наименование индикатора достижения компетенций (<i>в соответствии с ОПОП</i>)	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ОПК-4. ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4. Использует базовые знания в области физики и математики при планировании работ химической направленности	Знает: базовые разделы математики (математический анализ, аналитическую геометрию, линейную алгебру, дифференциальные уравнения, численные методы, теорию вероятности и	Участие в коллективной разработке проектов

		<p>математическую статистику); современные методы обработки результатов измерений. Умеет: применять знания базовых разделов математики при обработке результатов химических и физико-химических опытов. Владеет: математическими методами обработки результатов эксперимента.</p>	
	<p>ОПК-4.2. Грамотно обрабатывает численные результаты измерений свойств веществ и материалов</p>	<p>Знает: базовые разделы математики (математический анализ, аналитическую геометрию, линейную алгебру, дифференциальные уравнения, численные методы, теорию вероятности и математическую статистику); современные методы обработки результатов измерений. Умеет: применять знания базовых разделов математики и физики при обработке результатов</p>	

		химических и физико-химических опытов. Владеет: математическими методами обработки результатов эксперимента.	
	ОПК-4.3. Предлагает физико-математические модели химических систем и процессов	Знает: математические основы моделирования. Умеет: применять различные математические модели для описания химических явлений. Владеет: навыками применения различных математических моделей для описания химических явлений.	
	ОПК-4.4. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	Знает: базовые разделы физики (классическую механику, молекулярную физику и термодинамику, электродинамику и оптику, основы теоретической механики). Умеет: решать типовые задачи, имитирующие реальные химические проблемы, с привлечением аппарата высшей математики,	

		общей и теоретической физики; предлагать физически непротиворечивые объяснения наблюдаемых химических явлений. Владеет: навыками решения типовых задач, имитирующих реальные химические проблемы.	
--	--	---	--

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 академических часа.

4.2. Структура дисциплины.

№	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Контроль сам. раб.		
Модуль 1. Численные методы решения нелинейных уравнений.									
1	Введение. Погрешность вычисления значения функции	5	1	2	1			4	Индивидуальный фронтальный опрос, тестирование, проверка групп журнала
2	Метод половинного деления. Метод секущих	5	2	2	1			4	
4	Метод простой итерации	5	4-5	2	1			8	

	решения нелинейных уравнений.								
5	Метод Ньютона.	5	6	2	2			6	Контрольная работа
	Итого			8	6			22	

Модуль 2. Численные методы линейной алгебры

7	Сходимости последовательностей матриц и векторов. Три нормы матриц и векторов.	5	7	2	2			4	Индивидуальный фронтальный опрос, тестирование, проверка групп журнала
8	Матричная геометрическая прогрессия.	5	8	2	2			4	
9	Прямые методы решения СЛАУ.	5	9-10	4	4			4	
10	Итерационные методы решения СЛАУ	5	11-12	2	2			4	
	Итого			10	10			16	

Модуль 3. Интерполяция и основы теории приближения

	Постановка задачи. Интерполяционный многочлен Лагранжа. Оценка остаточного члена	5		4	4			4	Индивидуальный фронтальный опрос, тестирование, проверка групп журнала
	Разделенные разности и их свойства. Интерполяцион	5		2	2			4	

	ный многочлен Ньютона.								
	Конечные разности и их применение к численному дифференцированию	5		2	2			4	Индивидуальный фронтальный опрос, тестирование, проверка групп журнала
	Понятие о сплайнах и их применении	5		2	2			4	Контрольная работа Коллоквиум
	Итого			10	10			16	
Модуль 4. Численное интегрирование									
	Квадратурные формулы Ньютона-Котеса.	5	13	2	2			5	Индивидуальный фронтальный опрос, тестирование, проверка групп журнала
	Квадратурные формулы прямоугольников и трапеций, оценка погрешности.	5	14	2	2			5	
	Квадратурная формула Симпсона, оценка погрешности.	5	15	2	2			5	
	Метод Монте-Карло.	5	16	2	2			5	Контрольная работа Коллоквиум
	Итого			8	8			20	
Модуль 5. Подготовка к экзамену									

17	<i>Подготовка к экзамену</i>							36	
ИТОГО:				36	36			72	

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

Модуль 1. Численные методы решения нелинейных уравнений.

Тема 1. Введение. Погрешность вычисления значения функции.

Источники и классификация погрешностей. Общая формула теории погрешностей. Погрешность арифметически значений.

Тема 2. Метод половинного деления. Метод секущих.

Приближенное решение алгебраических и трансцендентных уравнений. Отделение корней. Уточнение корней. Метод половинного деления. Метод секущих.

Тема 3. Метод парабол.

Применение метода парабол для решение нелинейных уравнений.

Тема 4-5. Метод простой итерации решения нелинейных уравнений.

Формулы метода простой итерации решения функциональных уравнений. Сходимость метода, оценка погрешности. Применение метода простой итераций к решению нелинейных алгебраических уравнений.

Тема 6. Метод Ньютона.

Формулы метода Ньютона решения функциональных уравнений. Сходимость метода, оценка погрешности. Применение метода Ньютона к решению нелинейных алгебраических уравнений.

Модуль 2. Численные методы линейной алгебры

Тема 7. Сходимости последовательностей матриц и векторов. Три нормы матриц и векторов.

Различные виды сходимостей последовательностей векторов и матриц.

Определения норм векторов и матриц. Три наиболее распространенные нормы матриц и векторов.

Тема 8. Матричная геометрическая прогрессия.

Понятие матричной геометрической прогрессии. Необходимые и достаточные условия сходимости матричной геометрической прогрессии. Сумма сходящейся матричной геометрической прогрессии.

Тема 9-10. Прямые методы решения СЛАУ.

Метод исключения неизвестных. Метод Гаусса решения СЛАУ. Метод Крамера. Метод квадратного корня.

Тема 11-12. Итерационные методы решения СЛАУ.

Формулы метода простой итерации. Необходимые и достаточные условия сходимости метода простой итерации. Достаточные условия сходимости метода простой итерации. Оценка погрешности. Решение СЛАУ с заданной точностью методом простой итерации.

Причина возникновения метода Зейделя. Формулы метода Зейделя. Необходимые и достаточные условия сходимости метода Зейделя. Достаточные условия сходимости метода. Оценка погрешности. Решение СЛАУ с заданной точностью методом Зейделя.

Модуль 3. Интерполяция и основы теории приближения

Тема 7. Постановка задачи. Интерполяционный многочлен

Лагранжа. Оценка остаточного члена.

Понятие интерполяции, значение интерполяции в вычислительной математике. Определение интерполяционного многочлена. Существование и единственность интерполяционного многочлена. Интерполяционный многочлен в форме Лагранжа. Остаточный член.

Тема 8. Разделенные разности и их свойства. Интерполяционный многочлен Ньютона.

Понятие разделенной разности. Свойства разделенных разностей.

Вычисление разделенных разностей. Запись интерполяционного многочлена в форме Ньютона с помощью разделенных разностей.

Тема 9. Конечные разности и их применение к численному дифференцированию.

Понятие конечной разности k -ого порядка, свойства конечных разностей, вычисление конечных разностей. Применение конечных разностей к вычислению производных.

Тема 10. Понятие о сплайнах и их применении.

Определение сплайна, применение сплайна. Построение сплайна третьей степени.

Модуль 4. Численное интегрирование.

Тема 13. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса.

Введение. Необходимость приближенного вычисления интегралов. Подход к приближенному вычислению, основанный на интерполяции функции. Вывод квадратурных формул Ньютона-Котеса.

Тема 14. Квадратурные формулы прямоугольников и трапеций, оценка погрешности.

Понятие о квадратурных формулах и их применении к приближенному вычислению интегралов. Вывод простейших и составных квадратурных формул прямоугольников и трапеций. Вывод соответствующих формул остаточных членов и их оценок.

Тема 15. Квадратурная формула Симпсона, оценка погрешности.

Вывод простейшей и составной квадратурной формулы Симпсона. Вывод формулы остаточного члена и его оценки.

Тема 16. Метод Монте-Карло.

Использование метода Монте-Карло для приближенного вычисления определенного интеграла.

4.3.2. Содержание практических занятий по дисциплине

Модуль 1. Численные методы решения нелинейных уравнений.

Тема 1. Метод половинного деления. Метод секущих.

Общая формула теории погрешностей. Погрешность арифметически значений. Приближенное решение алгебраических и трансцендентных уравнений методом половинного деления и методом секущих.

Тема 2. Метод простой итерации решения нелинейных уравнений.

Применение метода простой итераций к решению нелинейных алгебраических уравнений.

Тема 3. Метод Ньютона.

Формулы метода Ньютона решения функциональных уравнений. Сходимость метода, оценка погрешности. Применение метода Ньютона к решению нелинейных алгебраических уравнений.

Модуль 2. Численные методы линейной алгебры

Тема 4. Матричная геометрическая прогрессия.

Сумма сходящейся матричной геометрической прогрессии.

Тема 5. Прямые методы решения СЛАУ.

Метод Гаусса. Метод Крамера. Метод квадратного корня.

Тема 6. Метод простой итерации и метод Зейделя решения СЛАУ.

Формулы метода простой итерации. Решение СЛАУ с заданной точностью методом простой итерации. Формулы метода Зейделя. Решение СЛАУ с заданной точностью методом Зейделя.

Модуль 3. Интерполяция и основы теории приближения

Тема 7. Интерполяция

Интерполяционный многочлен Лагранжа. Оценка остаточного члена. Разделенные разности и их свойства. Интерполяционный многочлен Ньютона.

Тема 8. Разделенные разности и их свойства.

Интерполяционный многочлен Ньютона. Понятие разделенной разности. Свойства разделенных разностей. Вычисление разделенных разностей. Запись интерполяционного многочлена в форме Ньютона с помощью разделенных разностей.

Тема 9. Конечные разности.

Конечные разности и их применение к численному дифференцированию. Многочлен Чебышева. Минимизация оценки погрешности интерполяции.

Тема 10. Понятие о сплайнах и их применении.

Наилучшее приближение в линейном нормированном пространстве

Модуль 4. Численное интегрирование.

Тема 7. Квадратурные формулы прямоугольников и трапеций, оценка погрешности.

Применении квадратурных формул к приближенному вычислению интегралов. Нахождение остаточных членов и их оценок.

Тема 8. Квадратурная формула Симпсона, оценка погрешности.

Применение квадратурной формулы Симпсона и метода Рунге-Кутты для вычисления интегралов.

Тема 9. Метод Монте-Карло.

Применение квадратурных формул к приближенному вычислению несобственных интегралов различных видов.

5. Образовательные технологии

Лекции проводятся с использованием меловой доски и мела. Параллельно материал транслируется на экран с помощью мультимедийного проектора. Семинарские занятия проводятся с использованием мела и меловой доски. Для проведения лекционных занятий необходима аудитория, оснащенная мультимедиа-проектором, экраном, доской, ноутбуком (с программным обеспечением для демонстрации слайд-презентаций).

Для проведения семинарских занятий необходима аудитория на 25 человек, оснащена доской.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Решение задач.
3. Подготовка к коллоквиуму.
4. Подготовка к экзамену.

	Виды самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечения
	Изучение рекомендованной литературы	Устный опрос по разделам дисциплины	См. разделы 6.2, 7.2, 8, 9 данного документа
	Решение задач	Проверка домашнего задания	См. разделы 6.2, 7.2, 8, 9 данного документа
	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы	См. разделы 6.2, 7.2, 8, 9 данного документа
	Подготовка к экзамену	Устный опрос, либо компьютерное тестирование	См. разделы 6.2, 7.2, 8, 9 данного документа

Текущий контроль: проверка рефератов, решения задач из предложенного преподавателем списка.

Промежуточная аттестация: контрольные работы, коллоквиум.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу практических занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня усвоения тем. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения домашних заданий.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы и коллоквиума, в которых содержатся практические задачи и теоретические вопросы.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного зачета, либо в форме экзамена.

6.2. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Вопросы для самостоятельного изучения по конкретным разделам (модулям) приведены в п. 7.2 настоящей Программы. Там же приведены типовые контрольные работы и вопросы к зачету.

Задания для проверочной работы, самостоятельной работы, домашние задания содержатся в пособиях, указанных в списке учебной литературы.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Типовые контрольные задания

Контрольная работа 1

1. Найти второе приближение к решению системы:

$$\begin{cases} x_1 = 0.1x_1 + 0.2x_2 + 0.3x_3 + 1, \\ x_2 = 0.1x_1 - 0.2x_3 - 1, \\ x_3 = 0.2x_1 + 0.2x_2 + 0.2x_3 + 2 \end{cases}$$

методом простой итерации, взяв вектор $x^0 = (0;0;0)$ за начальное приближение.

2. Найти $E + A + A^2 + \dots$, если $A = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.25 \\ 1 & 0.5 \end{pmatrix}$.

3. Пусть $A = \begin{pmatrix} a & -a \\ \frac{a}{2} & a \end{pmatrix}$. Найти все значения a , при которых ряд

$E + A + A^2 + \dots$ сходится.

4. Пусть $A = \begin{pmatrix} a & 0 & -a \\ a & 1 & -1 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix}$. Решить неравенство $\|A\|_2 \leq 6$

Контрольная работа 2

1. Найти приближенное значение I_{np} интеграла

$$I = \int_1^2 |3 - 2x| x dx,$$

по квадратурной формуле средних прямоугольников, разбив отрезок интегрирования на 4 равные части. Вычислить $|I - I_{np}|$.

2. На какое наименьшее число равных частей надо разбить отрезок интегрирования, чтобы вычислить интеграл

$$\int_{-1}^2 \frac{x}{2+x} dx$$

по квадратурной формуле трапеций с точностью $\varepsilon = 10^{-3}$?

3 Объяснить как вычислить несобственный интеграл

$$\int_{-2}^{+\infty} \frac{e^{-2x^2} \sin x}{4+x^2} dx$$

с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$.

Задания для самостоятельной работы студентов

1. Что означает запись:

1) $a = 2,747 \pm 0,001$; 2) $a = 0,4685(1 \pm 0,02)$?

2. Как оценить относительную погрешность произведения $u \cdot v$ или частного

$$\frac{u}{v} ?$$

3. Как оценить абсолютную погрешность суммы или разности ?
4. Как оценить абсолютную погрешность вычисления функции ?
5. Каким условиям должен удовлетворять алгебраический интерполяционный многочлен для функции $f(x)$ по ее значениям в узлах x_0, x_1, \dots, x_n ?
6. Построить интерполяционный многочлен Лагранжа для табличной функции $f(x)$:

x	1	1,2	1,5	1,6
$f(x)$	0,87	0,97	0,80	0,62

используя все значения этой функции.

7. Пользуясь формулой интерполяционного многочлена Ньютона, найти $f(0,75)$ для табличной функции $f(x)$:

x	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
$f(x)$	2,13	1,88	1,25	1,00	1,20

8. Вычислить разделенную разность $f(0;1;2;\dots;100)$, если $f(x) = x(x-1)(x-2)\dots(x-99)$.
9. Найти конечную разность $\Delta^4 f_1$, если $x_i = ih$, $f(x) = \sin \pi x + x^4 + 2$.
10. Где используются конечные разности?
11. Пользуясь квадратурной формулой средних прямоугольников с четырьмя узлами, вычислить приближенно интеграл $\int_0^1 \frac{dx}{(1+x)^2}$.
12. Пользуясь квадратурной формулой трапеций с пятью узлами, вычислить

приближенно интеграл $\int_1^2 (x + \frac{1}{x^2}) dx$. Сравнить полученное значение с точным.

13. На какое минимальных число равных частей необходимо разделить отрезок $[0,1]$, чтобы вычислить интеграл $\int_0^1 \frac{x-1}{x+1} dx$ с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$ по квадратурной формуле трапеций?

14. На какое минимальных число равных частей необходимо разделить отрезок $[0,1]$, чтобы вычислить интеграл $\int_1^2 \frac{x+1}{x^2} dx$ с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$ по квадратурной формуле Симпсона?

15. Вывести квадратурную формулу Гаусса с тремя узлами для приближенного вычисления интеграла $\int_2^3 f(x) dx$.

16. Многочлены Чебышева, их свойства и применение.

17. Нормы матриц и векторов. Наиболее употребительные нормы. Найти

$$\frac{\|A\|_1 + \|A\|_2 + \|A\|_3}{3} + \|b\|_2, \text{ если } A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

18. Матричная геометрическая прогрессия, ее сходимость. Сходится ли матричная геометрическая прогрессия $E + A + A^2 + \dots$, если $A = \begin{pmatrix} 1/2 & -1 \\ 1/4 & 1/2 \end{pmatrix}$? Если сходится, то найти ее сумму.

19. Метод простой итерации для СЛАУ, его сходимость. Сходится ли метод простой итерации для системы $x = Bx + c$, где

$$B = \begin{pmatrix} 0,1 & -0,1 & 0,1 \\ 0,2 & 0 & -0,1 \\ 0,05 & 0,1 & -0,1 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} ?$$

Если сходится, то найти третье приближение к решению, взяв начальное

приближение $x^0 = c$, и оценить при этом какую-либо норму погрешности.

20. Метод Зейделя решения СЛАУ, его сходимость. Сходится ли метод

Зейделя для системы $x = Bx + c$, если $B = \begin{pmatrix} 1/2 & -1 \\ 1/3 & -1/2 \end{pmatrix}$?

21. Составить методом простой итерации сходящийся итерационный процесс для нахождения приближенного решения уравнения $xe^x = 2$. За какое минимальное число итераций можно найти корень этого уравнения с точностью $\varepsilon = 10^{-3}$?

22. Составить методом Ньютона сходящийся итерационный процесс для нахождения приближенного решения уравнения $2x = \cos x + 3$. За какое минимальное число итераций можно найти корень этого уравнения с точностью $\varepsilon = 10^{-3}$?

Вопросы к экзамену:

1. Квадратурные формулы Симпсона. Остаточный член, оценка погрешности.

2. Метод простой итерации решения СЛАУ. Необходимые и достаточные условия сходимости.

3. Метод секущих решения нелинейных уравнений.

4. Метод парабол решения нелинейных уравнений.

5. Теорема об оценке погрешности метода простой итерации решения СЛАУ.

6. Метод Зейделя решения СЛАУ. Необходимое и достаточное условие сходимости.

7. Метод Ньютона приближенного решения одного уравнения с одним неизвестным. Сходимость, оценка погрешности.

8. Квадратурные формулы прямоугольников. Остаточный член, оценка

погрешности.

9. Квадратурные формулы трапеций. Остаточный член, оценка погрешности.

10. Метод Монте-Карло.

11. Нормы векторов и матриц. Три нормы векторов. Сходимость последовательностей векторов и матриц.

12. Матричная геометрическая прогрессия. Необходимые и достаточные условия сходимости геометрической прогрессии.

13. Метод Гаусса решения СЛАУ, схема алгоритма оптимального исключения.

14. Основные понятия теории погрешности (абсолютная и относительная погрешности, значащие и верные цифры числа).

15. Абсолютные и относительные погрешности суммы, разности, произведения и частного.

16. Метод половинного деления решения нелинейных уравнений.

17. Интерполяционный многочлен Лагранжа

18. Конечные разности

19. Интерполяционный многочлен Ньютона

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

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля – 30 % и промежуточного контроля – 70 %.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 10 баллов,
- участие на практических занятиях - 10 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 10 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 40 баллов,

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) основная литература:

1. Харлампики, Д. Д. Вычислительные методы в химии : учебное пособие / Д. Д. Харлампики, С. О. Адамсон. — Москва : Московский педагогический государственный университет, 2020. — 80 с. — ISBN 978-5-4263-0908-1. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/105894.html> (дата обращения: 20.05.2021).
2. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М. Наука, 1989. <http://www.mat.net.ua/mat/Gulin-Chislennye-metodi.htm> (дата обращения 13.06.2018).
3. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М. Наука, 1987.
4. Сборник задач по методам вычислений под редакцией Монастырного П.И. Минск, 1969.

б) дополнительная литература

1. Кокотушкин Г.А. Численные методы алгебры и приближения функций [Электронный ресурс] : методические указания к выполнению лабораторных работ по курсу «Численные методы» / Г.А. Кокотушкин, А.А. Федотов, П.В. Храпов. — Электрон. текстовые данные. — М. : Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2011. — 60 с. — 2227-8397. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31590.html> (дата обращения 13.06.2018).
2. Абдурагимов Э.И., Кадиев Р.И. Приближенное вычисление интегралов. Лабораторные задания и методические указания по численным методам. // ДГУ, Махачкала, 2010.

3. Вержбицкий В.М. Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения). М. Высшая школа, 2000

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

1. Федеральный портал российское образование <http://edu.ru>;
2. Электронные каталоги Научной библиотеки Даггосуниверситета <http://elib.dgu.ru/?q=node/256>;
3. Образовательные ресурсы сети Интернет <http://catalog.iot.ru/index.php>;
4. Электронная библиотека <http://elib.kuzstu.ru>.

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» содержит внутри 4 модуля. Данные модули имеют определенную направленность по отношению к установленным целям и результатам обучения и определяют базу для развития и овладения компетенциями.

При изучении дисциплины рекомендуется рейтинговая технология обучения, которая позволяет реализовать комплексную систему оценивания учебных достижений студентов. Текущие оценки усредняются на протяжении семестра при изучении модулей. Комплексность означает учет всех форм учебной и творческой работы студента в течение семестра.

Рейтинг направлен на повышение ритмичности и эффективности самостоятельной работы студентов. Он основывается на широком использовании тестов и заинтересованности каждого студента в получении более высокой оценки знаний по дисциплине.

Принципы рейтинга: непрерывный контроль (в идеале на каждом из аудиторных занятий) и получение более высокой оценки за работу, выполненную в срок. При проведении практических занятий необходимо

предусматривать широкое использование активных и интерактивных форм (компьютерных симуляций, деловых и ролевых игр).

Рейтинг включает в себя два вида контроля: текущий, промежуточный и итоговый по дисциплине.

Текущий контроль (ТК) - основная часть рейтинговой системы, основанная на беглом опросе раз в неделю или в две недели. Формы: тестовые оценки в ходе практических занятий, оценки за выполнение индивидуальных заданий и лабораторных работ. Важнейшей формой ТК, позволяющей опросить всех студентов на одном занятии являются короткие тесты из 2-3 тестовых заданий.

Основная цель ТК: своевременная оценка успеваемости студентов, побуждающая их работать равномерно, исключая малые загрузки или перегрузки в течение семестра.

Лекционные занятия желательно проводить в режиме презентаций с демонстрацией применения основных методов анализа и синтеза. Это существенно улучшает динамику лекций.

Целесообразно обеспечивать студентов на 1-2 лекции вперед раздаточным материалом в электронном виде (сложные схемы, графики, аналитические исследования и опорный конспект). Основное время лекции лучше тратить на подробные аналитические комментарии и особенности применения рассматриваемого материала в профессиональной деятельности студента.

Практические занятия следует проводить, используя профессиональные программы.

Лабораторный практикум проводится фронтальным методом в классах, оборудованных лабораторными стендами для исследования электрических цепей. Так как используется компьютерное моделирование, то следует проводить занятия в компьютерном классе либо самостоятельно на домашнем

компьютере. При этом и коллоквиум, и защита результатов исследований проводятся по традиционной методике в классе.

Промежуточный контроль (ПК) - это проверка знаний студентов по разделу программы. Формы: тест из 7–10 заданий. Тестирование проводится в компьютерных классах в часы самостоятельной работы студентов по заранее составленному расписанию.

Цель ПК: побудить студентов отчитаться за усвоение раздела дисциплины накопительным образом, т.е. сначала за первый, затем за второй, затем за третий разделы каждого семестра.

Итоговый контроль по дисциплине (ИКД) - это проверка уровня учебных достижений студентов по всей дисциплине за семестр. Формы контроля: экзамен в 4 и 5-ом семестрах. Цель итогового контроля: проверка базовых знаний по дисциплине, полученных при изучении всех модулей семестра.

ИКД в 5 семестре является выходным контролем по дисциплине, после которого можно рассчитывать на то, что процесс обучения по дисциплине завершен и в дальнейшем студент может сам при необходимости совершенствовать свои знания.

Распределение объемов различного вида контролей можно проиллюстрировать следующими цифрами на примере семестра: текущий контроль – 15 условных баллов; промежуточный контроль - 35 условных баллов; итоговый контроль - 50 условных баллов. Вся дисциплина оценивается в 100 условных баллов, если вся дисциплина оценивается цифрой, отличной от 100 баллов, то под условным баллом следует понимать процент от максимального числа баллов.

При этом действует следующая система перевода рейтинговых (условных) баллов в обычную шкалу оценок: “Отлично” (5) - 86–100 условных

баллов; “Хорошо” (4) - 66–85 условных баллов; “Удовлетворительно” (3) - 51–65 условных баллов; “Неудовлетворительно” (2) - < 51 условных баллов.

Приведенные цифры говорят о том, что на любой стадии обучение студента можно считать удовлетворительным, если он набирает не менее 51 условных баллов. Так, например, набрав в ходе ТК и ПК 51 баллов, студент гарантирует себе оценку “удовлетворительно”.

Примеры оценочных средств (тестовых заданий) для текущего промежуточного и выходного контроля успеваемости по дисциплине:

Первый уровень сложности тестовых заданий (ТЗ) соответствует удовлетворительному владению предметом. Он представляет минимум базовых знаний, необходимых для дальнейшего обучения в университете и включает в себя знания - копии ключевых понятий и формул. Проверке этого уровня посвящены простейшие тестовые задания с нормой трудности в 1 балл.

Второй уровень ТЗ соответствует хорошим знаниям и предполагает глубокое понимание понятий и формул, умения их преобразовывать и интерпретировать.

Проверке второго уровня посвящены тестовые задания повышенной трудности, с нормой трудности в 2 балла.

Третий уровень ТЗ соответствует отличным знаниям и предполагает навыки по использованию ключевых понятий и формул в стандартных, а иногда и в не стандартных ситуациях. Проверке третьего уровня посвящены наиболее трудные задания, с нормой трудности в 3 балла.

Задания каждого уровня снабжены соответствующими обозначениями. Это позволяет адаптивно строить усвоение программы дисциплины, когда каждый студент по мере усвоения курса на более низком уровне будет пробовать себя на более высоком уровне.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая

перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

Для успешного освоения дисциплины, обучающийся использует следующие программные средства: пакеты для решения задач математического программирования: Mathcad, Delphi, Matlab.

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Учебные аудитории для проведения лекционных, семинарских и лабораторных занятий, компьютерные классы факультета и ИВЦ ДГУ. В университете имеется пакет необходимого лицензионного программного обеспечения.