

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Кемеровский государственный университет»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан
химического факультета

 Мороз /
« 25 » марта 2013 г.



Рабочая программа дисциплины
“Численные методы и программирование”

(Наименование дисциплины)

для специальности 020101.65-Химия (цикл ЕН.Ф5),

факультет химический
курс 5
семестр 9

лекции	28 часов	экзамен	__ семестр
практические занятия	28 часов	зачет	9 семестр
лабораторные занятия	часов	курсовая работа	__ семестр
самостоятельные занятия	69 часов		

Всего часов: 125

Составитель:

д.ф.-м.н., профессор кафедры ХТТ

Каленский А. В.

Кемерово 2013

Рабочая программа дисциплины «Численные методы и программирование» федерального компонента цикла ЕН.Ф.5 Общие математические и естественнонаучные дисциплины составлена в соответствии с требованиями Государственного образовательного стандарта второго поколения по специальности 020101.65 «Химия»

Рабочая программа дисциплины
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 12 от «12» февраля 2013 г.

/Зав. кафедрой  Ю.А. Захаров

Одобрено методической комиссией химического факультета

Протокол № 7 от «20» марта 2013 г.

Председатель  О.Н. Булгакова

Организационно-методический раздел

1. Пояснительная записка

Одними из важнейших качеств специалиста в области Химии являются: умение а) использования компьютерных баз химических данных средств телекоммуникационного доступа к источникам научной информации, сети Internet в обучении и научной работе; б) применения методов математического моделирования в химических исследованиях;

наличие навыков построения эмпирических моделей с использованием пакетов программ статистической обработки данных, имитационного моделирования при решении проблем химической технологии и экологии.

Цель курса “Численные методы и программирование” по специальности 020101 - «Химия» - дать студентам химических специальностей базовые представления о современных способах применения компьютеров в обучении и научных исследованиях.

Курс “Численные методы и программирование” для студентов 4 курса химического факультета Кемеровского Государственного университета (8 семестр) предусматривает углубленное изучение элементов программирования на одном из основных языков программирования; численных методов решения на персональном компьютере различных математических задач в химии; особенностей статистической обработки экспериментальных данных.

Рабочая программа соответствует Государственному образовательному стандарту высшего профессионального образования” по специальности 020101 - «Химия».

Задачи изучения дисциплины:

Изучить теорию информации и информационные технологии;

Овладеть навыками обработки текста и экспериментальных данных;

Научиться использовать компьютерные базы данных (химических) в научной работе.

Изучить наиболее распространенные методы приближенных вычислений,

Научиться составлять простейшие программы на одном из языков программирования,

Научиться использовать готовые прикладные программные комплексы, с выбором методов решения поставленной задачи.

Перечень дисциплин, знания по которым в объеме Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по специальности 020101 - «Химия» необходимы для успешного овладения материалом:

информатика,

линейная алгебра,

общая химия,

неорганическая химия,

общая физика.

Курс состоит из лекционной части (28 часов), на которой представляется основной теоретических материал, практических занятий (28 часа) для закрепления полученных знаний, самостоятельных занятий (69 часов) для подготовки к семинарским занятиям и овладения лекционного материала и освоения дополнительной литературы.

Контроль знаний студента осуществляется еженедельной проверкой результатов работы на семинарских занятиях, проведением контрольной работы, коллоквиума и зачета по окончании курса.

В результате изучения данного курса студент должен получить основные навыки программирования, изучить наиболее распространенные методы приближенных вычислений и ознакомиться с несколькими прикладными программными комплексами, научиться использовать готовые прикладные программные комплексы, с выбором методов решения поставленной задачи. Успешное выполнение практикума и правильный ответ на вопросы билета к зачету является критерием овладения студентом необходимых знаний и выставления ему зачета.

2. Тематический план

№	Название и содержание разделов, тем, модулей	Объем часов			Самостоятельная работа	Формы Контроля
		Общий	Аудиторная работа			
			Лекции	семинарские		
1	2	3	4	5	7	8
1	<p>Введение. Программирование. Языки низкого и высокого уровня.</p> <p>Интерпретация и трансляция текста программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем.</p> <p>Визуализация результатов расчета в системе Matlab.</p>	18	4	4	10 Практикум программирования на языке Pascal	Устный опрос
2	<p>Практикум программирования. Типы величин. Константы и переменные. Массивы переменных. Арифметические</p>	17	3	4	10 Составление программ в системе Matlab, компиляция.	Устный опрос

	выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Методы решения нелинейных алгебраического уравнений. Условия применимости и сходимости. Скорость сходимости.					
--	---	--	--	--	--	--

3	<p>Структура программы. Логические выражения. Операторы: присвоения значения переменной, ввода и вывода значений, организации циклов и разветвлений. Процедуры и функции. Формальные и фактические параметры. Параметры-значения и параметры-переменные. Локальные и глобальные переменные. Организация взаимодействия программы с внешними файлами данных.</p>	17	3	4	<p>10 Составление программ в системе Matlab, логические выражения</p>	Устный опрос
4	<p>Элементы численных методов и математического моделирования. Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Параметры модели. Особенности численного</p>	17	3	4	<p>10 Составление программ в системе Matlab, операторы присвоения, циклов и разветвлений</p>	Тест. Реферат

	(компьютерного) моделирования. Виды и цели математического моделирования.					
5	<p>Методы приближенного вычисления определенных интегралов. Порядок точности. Формулы Ньютона - Котеса и Гаусса; их частные случаи: формулы прямоугольников, трапеций. Симпсона.</p> <p>Оценка погрешности результата.</p> <p>Алгоритм интегрирования с заданной степенью точности. Сплайн-квадратура, ее свойства, интегрирование таблично заданной функции.</p>	15	3	4	8	Устный опрос
6	<p>Методы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел.</p>	15	3	4	8	Контрольная работа.

	<p>Абсолютная и относительная погрешности результатов основных арифметических операций. Потеря точности при операциях сложения и вычитания. Устойчивость вычислительных алгоритмов.</p>					
7	<p>Методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Кинетика химических реакций. Запись системы обыкновенных дифференциальных уравнений по заданному механизму химической реакции. Методы моделирования физико-химических процессов с участием тепло- и массопереноса. Разностные схемы решения системы дифференциальных уравнений в частных производных.</p>	15	3	4	8	<p>Консультация по электронной почте. Реферат</p>
	<p>Поиск минимума функции одной</p>					<p>Устный опрос.</p>

8	<p>переменной. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции.</p> <p>Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука - Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Общее представление о методах сопряженных направлений и переменной метрики. Частный случай минимизации суммы квадратов: метод Гаусса - Ньютона. Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК).</p> <p>Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели.</p>	7	3	2	2	Реферат
9	<p>Обработка данных эксперимента как решение обратной кинетической задачи математического моделирования.</p> <p>Имитационное моделирование (вычислительный эксперимент). Общая</p>	8	3	2	3	Устный опрос. Реферат
					Составление программ по теме в системе Matlab, подготовка к коллоквиуму	
					Составление программ по теме в системе Matlab, подготовка к коллоквиуму	

	схема решения обратной кинетической задачи. Методы рекурсии механизма химической реакции.					
Формы контроля						
1	Устный опрос проводится в начале занятия для проверки самостоятельной проработки лекционного материала. Для проверки работы в сети – консультация как в режиме реального времени (Chat), так и по e-mail. Предусмотрена защита рефератов. Для контроля усвоения студентами учебно-программного материала - контрольные работы, тесты и коллоквиум.					
2	Формы итогового контроля, предусмотренные учебным планом специальности по данной дисциплине: по окончании 8 семестра – зачет (тест, устный опрос по контрольным вопросам).					

3. Содержание дисциплины

Содержание лекционного курса

1. Программирование. Языки низкого и высокого уровня. Интерпретация и трансляция текста программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем. Визуализация результатов расчета в системе Matlab. 4 часа

2. Практикум программирования. Типы величин. Константы и переменные. Массивы переменных. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Методы решения нелинейных алгебраических уравнений. Условия применимости и сходимости. Скорость сходимости. 3 часа

3. Структура программы. Логические выражения. Операторы: присвоения значения переменной, ввода и вывода значений, организации циклов и разветвлений. Процедуры и функции. Формальные и фактические параметры. Параметры-значения и параметры-переменные. Организация взаимодействия программы с внешними файлами данных. 3 часа

4. Элементы численных методов и математического моделирования. Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Параметры модели. Особенности численного (компьютерного) моделирования. Виды и цели математического моделирования. 3 часа

5. Методы приближенного вычисления определенных интегралов. Порядок точности. Формулы Ньютона - Котеса и Гаусса; их частные случаи: формулы прямоугольников, трапеций. Симпсона. Оценка погрешности результата. Алгоритм интегрирования с заданной степенью точности. Сплайн-квадратура, ее свойства, интегрирование таблично заданной функции. 3 часа

6. Методы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел. Абсолютная и относительная погрешности результатов основных арифметических операций. Потеря точности при операциях сложения и вычитания. Устойчивость вычислительных алгоритмов. 3 часа

7. Методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Кинетика химических реакций. Запись системы обыкновенных дифференциальных уравнений по заданному механизму химической реакции. Методы моделирования физико-химических процессов с участием тепло- и массопереноса. Разностные схемы решения системы дифференциальных уравнений в частных производных. 3 часа

8. Поиск минимума функции одной переменной. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука - Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Общее представление о методах сопряженных направлений и переменной метрики. Частный случай минимизации суммы квадратов: метод Гаусса - Ньютона. Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК. Статистические характеристики оценок параметров модели. 3 часа

9. Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования. Имитационное моделирование (вычислительный эксперимент). Общая схема решения обратной кинетической задачи. Методы рекурсии механизма химической реакции. 3 часа

Содержание практикума

10. Алгоритм. Блок-схема решаемой задачи. Языки низкого и высокого уровня. Интерпретация и трансляция текста программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем. Визуализация результатов расчета 4 часа

11. Практикум составления блок-схем различных задач. Сходимость рядов операторы цикла. Методы решения трансцендентных уравнений, применение в химии. 4 часа

12. Практикум программирования. Функции в Матлаб. Рекурсивные функции. Массивы переменных. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций. Использование стандартных математических функций. Основные операторы. 4 часа

13. Методы приближенного вычисления определенных интегралов.

Порядок точности. Формулы Ньютона - Котеса и Гаусса; их частные случаи: формулы прямоугольников, трапеций. Симпсона. Оценка погрешности результата. Алгоритм интегрирования с заданной степенью точности. Сплайн-квадратура, ее свойства, интегрирование таблично заданной функции. 2 часа

14. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса. Математическая модель. Эмпирические, феноменологические и детальные модели. Параметры модели. Прямая и обратная задачи. Особенности численного (компьютерного) моделирования системы дифференциальных уравнений. 2 часа

15. Методы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод Рунге-Кутты. Общая структура интерполяционной квадратурной формулы, способы выбора узлов и определение весов. 4 часа

16. Практикум по решению систем обыкновенных дифференциальных уравнений численными методами системы Matlab. Запись системы обыкновенных дифференциальных уравнений по заданному механизму химической реакции. 2 часа

17. Моделирование физико-химических процессов с участием тепло- и массопереноса. Разностные схемы решения системы дифференциальных уравнений в частных производных. 2 часа

18. Методы нахождения экстремумов функции нескольких переменных. Обработка экспериментальных данных МНК. 2 часа

19. Общая схема решения обратной кинетической задачи. Методы рекурсии механизма химической реакции. Практикум по решению обратной кинетической задачи в системе Matlab. 4 часа

20. Практикум по решению задач моделирования химических процессов в системе Matlab. Контрольная работа 2 часа

21. Коллоквиум по проблемам теоретической химии. Элементы программирования и основные языки программирования; решение различных математических задач в химии; статистическая обработка экспериментальных данных. 2 часа

4. Учебно – методические материалы по дисциплине

Основная литература

1. Бахвалов, Николай Сергеевич. Численные методы [Текст] : учеб. пособие для вузов / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельников. - 7-е изд. - М. : Бинوم. Лаборатория Знаний, 2011. - 636 с.
2. <http://e.lanbook.com/view/book/378/> Срочко, В. А. Численные методы: курс лекций / В. А. Срочко. - СПб. : Лань, 2010. - 202 с.
3. Окулов С. Основы программирования Издание: 6-е изд., перераб. // БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012, 336 с.

Дополнительная литература

- 4.1 Информатика: Учебник / Под ред. проф. *Н. В.Макаровой*. – М.: Финансы и статистика. – 1997. – 768 с.
- 4.2. *Самарский, А.А.* Численные методы. / *А. А. Самарский, А. В. Гулин* – М.: Наука. – 1989. – 429 с.
- 4.3. *Дьяконов, В.* MATLAB 6: учебный курс. / *В. Дьяконов* – СПб.: Питер. – 2001. – 592 с.
- 4.4 *Тихонов, А. Н.* Компьютерные технологии в высшем образовании / *А. Н. Тихонов, В. А. Садовничий* и др. – М.: МГУ. 1994. – 319 с.
- 4.5 *Кригер, В. Г.* Численные методы и программирование. Методическое пособие для студентов химического факультета КемГУ/ *В. Г. Кригер, А. В. Каленский, М. В. Ананьева, Боровикова А. П., Звекон А. А.* – Кемерово: КемГУ. – 2008. – 63 с.
- 4.6. *Джонсон, К.* Численные методы в химии. / *К. Джонсон* – М.: Мир. – 1983. – 503 с.
- 4.7. *Александров, В. В.* Информатика: энциклопедический словарь для начинающих / *В. В. Александров, А. В. Анисимов* и др. – М.: Педагогика. – 1994. – 349 с.
- 4.8. *Каймин, В.А.* Основы компьютерной технологии. *В. А. Каймин* – М.: Финансы и статистика. – 1992. – 245 с.

Перечень пособий

4.9 Конспект лекций

4.10. *Аладьев, В.З.* Основы информатики. Учебное пособие. Издание 2-е. / *В.З. Аладьев, Ю.Л. Хукон* – М.: Финансы и статистика. – 1999. – 544 с.

4.11. *Калиткин, Н. Н.* Численные методы. Учебное пособие для вузов / *Н. Н. Калиткин, А. А. Самарский*. – М.: Наука. – 1978. – 512 с.

* Все учебно – методические материалы по дисциплине представлены в компьютерном классе на общем доступе в формате *.pdf

5. Формы текущего, промежуточного и рубежного контроля.

5.1 Вопросы к зачетному занятию

1. Алгоритм. Языки низкого и высокого уровня.
2. Интерпретация и трансляция текста программы. Разница между исходным текстом и исполняемым модулем.
3. Типы величин. Константы и переменные.
4. Массивы переменных.
5. Арифметические выражения. Порядок выполнения арифметических операций.
6. Использование стандартных математических функций.
7. Структура программы: раздел описания и раздел операторов.
8. Логические выражения. Использование операций отношения и логических операций.
9. Операторы присвоения значения переменной.
10. Операторы ввода и вывода значений.
11. Операторы организации циклов и разветвлений.
12. Процедуры и функции, их организация и использование в программах.

13. Формальные и фактические параметры. Параметры-значения и параметры-переменные.
14. Стандартные файлы ввода и вывода информации.
15. Математическая модель.
16. Эмпирические, феноменологические и детальные модели.
17. Параметры модели. Прямая и обратная задачи.
18. Виды и цели математического моделирования. Моделирование как способ проверки гипотез.
19. Обработка данных эксперимента как решение обратной задачи математического моделирования.
20. Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел.
21. Машинный ноль. Ошибки округления. Абсолютная и относительная погрешности результатов основных арифметических операций.
22. Потеря точности при операциях сложения и вычитания. Накопление ошибок.
23. Устойчивость вычислительных алгоритмов.
24. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса. Условие устойчивости вычислений.
25. Решение нелинейного алгебраического уравнения методом деления отрезка пополам. Условия применимости метода и скорость сходимости к решению.
26. Решение нелинейного алгебраического уравнения методом Ньютона. Условия применимости и сходимости.
27. Скорость сходимости. Обобщение метода Ньютона на случай системы нелинейных уравнений.
28. Обработка данных методом наименьших квадратов (МНК). Линейный МНК.
29. Приближенное вычисление определенных интегралов.
30. Формулы Котеса и Гаусса; их частные случаи: формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона.

31. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ): решение задачи Коши.

32. Понятие устойчивости решения. Явные и неявные схемы интегрирования (на примере метода Эйлера).

33. *Реализация принципов программирования и численных методов в прикладных программных комплексах.*

5.2 Темы рефератов.

1. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений. "Жесткие" уравнения. Количественный критерий жесткости.

2. Моделирование кинетики химических реакций (MatLAB .

1. 3. Расчет равновесного состава по термодинамическим свойствам веществ (СНЕТ).

4. Алгоритм интегрирования с заданной степенью точности. Сплайн-квадратура, ее свойства.

5. Интерполяционный многочлен Лагранжа. Факторы, определяющие точность интерполяции.

6. Построение кубического интерполяционного сплайна.

5.3 Вопросы на индивидуальную и самостоятельную работу.

1. Элементы программирования и основные языки программирования (исторический обзор);

2. Решение математических задач в химии;

3. Статистическая обработка экспериментальных данных.

4. Параллельное и последовательное программирование.

5. Элементы кластерного решения химических задач.

6. Принципы построения компьютерных сетей.

5.4 Задание контрольной работы.

Контрольная работа проводится по 12 вариантам.

Карточка №1.

Решение нелинейного алгебраического уравнения:

$$x^4 - 5x^3 + 2x^2 + 2 = 0$$

методом деления отрезка пополам. Построить блок-схему.

Карточка №2.

Решение трансцендентного алгебраического уравнения:

$$x = 1 - 0.01 \ln(3/x^2)$$

методом последовательных приближений. Построить блок-схему.

Карточка №3.

Приближенное вычисление определенных интегралов:

$$\int_0^1 x^2 \exp(-4x^3) dx$$

методом трапеций с $N=10, 100, 10^6$. Построить блок-схему.

Карточка №4.

Приближенное вычисление определенных интегралов:

$$\int_0^1 x \exp(x^4) dx$$

методом прямоугольников с $N=10, 100, 10^6$. Построить блок-схему.

Карточка №5.

Табулирование функции $y(z)$:

$$y(z) = \int_0^z x^2 \exp(-4x^3) dx$$

в интервале $[0, 10]$ с шагом 0.1. Построить блок-схему.

Карточка №6.

Табулирование функции $y(z)$:

$$y(z) = \int_0^z x^6 \exp(-3x^2) dx$$

в интервале $[0, 10]$ с шагом 0.1. Построить блок-схему.

Карточка №7.

Решение системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} dx/dt = 1 - 0.1x + 0.2y \\ dy/dt = 0.1x - 0.1y \end{cases}$$

с нулевыми начальными условиями в интервале $[0, 1]$. Построить блок-схему.

Карточка №8.

Найти сумму ряда:

$$Y = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

с точностью 10^{-10} . Построить блок-схему.

Карточка №9.

Найти сумму ряда:

$$Y = \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots$$

с точностью 10^{-10} . Построить блок-схему.

Карточка №10.

Найти сумму квадратов факториалов первых 10 чисел (начиная с 0):

Построить блок-схему.

Карточка №11.

Решение нелинейного алгебраического уравнения:

$$x^4 - 5x^3 + 2x^2 + 2 = 0$$

методом деления отрезка пополам. Построить блок-схему.

Карточка №12.

Решение трансцендентного алгебраического уравнения:

$$x = 1 - 0.01 \ln(3/x^2)$$

методом последовательных приближений. Построить блок-схему.
