

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна  
Должность: проректор по учебной работе  
Дата подписания: 14.09.2022 15:54:59  
Уникальный программный ключ:  
0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e943df4a4851fda56d089

## МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Юго-Западный государственный университет»  
(ЮЗГУ)

Кафедра фундаментальной химии и химической технологии



Проректор по учебной работе

О.Г. Локтионова

2016 г.

## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Методические указания  
по выполнению самостоятельной работы  
для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия  
и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Курск 2016

УДК 66.048

Составитель: А.В. Лысенко

Рецензент

Доктор химических наук, профессор *Л.М. Миронович*

**Вычислительные методы в химии:** методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2016, 36 с.: ил., табл. Библиогр.: 31 с.

Методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов предназначены для углубленного изучения дисциплины «Вычислительные методы в химии» во внеаудиторное время.

Содержат основные сведения об организации самостоятельной работы студентов. Описаны основные виды самостоятельной работы. Приведены темы для самостоятельного изучения, рекомендуемые темы рефератов и докладов, а также тестовые задания и задачи по изучаемым разделам. Представлены требования, предъявляемые к оформлению и структуре рефератов.

Методические указания предназначены для студентов направления подготовки 04.04.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать *31.05* Форма 60x84 1/16.  
Усл. печ. л. *2,1* Уч.-изд.л. *1,9* Тираж 100 экз. Заказ *573* Бесплатно  
Юго-Западный государственный университет.  
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

## Содержание

Введение	4
1 Организация самостоятельной работы студентов	5
2 Виды самостоятельной работы, их характеристика	6
3 Общие требования к оформлению реферата	9
4 Требования к структуре реферата	9
5 Порядок сдачи и защиты рефератов и докладов	11
6 Использование тестовых задания для самопроверки	12
7 Методические рекомендации по подготовке к лабораторным работам и экзамену	30
Список использованных источников	31
Приложение А Рекомендуемые темы докладов	32
Приложение Б Рекомендуемые темы рефератов	33
Приложение В Оформление титульного листа реферата	34
Приложение Г Перечень вопросов к экзамену	35

## Введение

В современный период востребованы высокий уровень знаний, академическая и социальная мобильность, профессионализм специалистов, готовность к самообразованию и самосовершенствованию. В связи с этим должны измениться подходы к планированию, организации учебно-воспитательной работы, в том числе и самостоятельной работы студентов.

Прежде всего, это касается изменения характера и содержания учебного процесса, переноса акцента на самостоятельный вид деятельности, который является не просто самоцелью, а средством достижения глубоких и прочных знаний, инструментом формирования у студентов активности и самостоятельности.

Целью методических рекомендаций является повышение эффективности учебного процесса, в том числе благодаря самостоятельной работе, в которой студент становится активным субъектом обучения, что означает:

- способность занимать в обучении активную позицию;
- готовность мобилизовать интеллектуальные и волевые усилия для достижения учебных целей;
- умение проектировать, планировать и прогнозировать учебную деятельность;
- привычку инициировать свою познавательную деятельность на основе внутренней положительной мотивации;
- осознание своих потенциальных учебных возможностей и психологическую готовность составить программу действий по саморазвитию.

Данные методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов предназначены для углубленного изучения дисциплины «Вычислительные методы в химии» во внеаудиторное время.

## 1 Организация самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа - планируемая учебная, учебно-исследовательская, научно-исследовательская работа студентов, выполняемая во внеаудиторное время по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия.

Самостоятельная работа студентов (далее СРС) является важным видом учебной и научной деятельности студента. Самостоятельная работа студентов играет значительную роль в рейтинговой технологии обучения.

Формы самостоятельной работы студентов разнообразны. Они включают в себя:

- изучение и систематизацию официальных государственных документов: методических, нормативно-технических и справочных материалов с использованием информационно-поисковых систем, в частности глобальной сети «Интернет»;

- изучение учебной, научной и методической литературы, материалов периодических изданий с привлечением электронных средств официальной, статистической, периодической и научной информации;

- подготовку докладов и рефератов;

- участие в работе студенческих конференций, научных исследованиях.

Самостоятельная работа приобщает студентов к научному творчеству, поиску и решению актуальных современных проблем.

При организации СРС важным и необходимым условием становятся формирование умения самостоятельной работы для приобретения знаний, навыков и возможности организации учебной и научной деятельности.

Содержание самостоятельной работы студентов по дисциплине «Вычислительные методы в химии» представлено в таблице 1.

Таблица 1 - Самостоятельная работа студентов по дисциплине «Вычислительные методы в химии»

№	Наименование раздела дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час
1	Классификация методов научного исследования	1-8 неделя	16
2	Величины, описывающие элемент процесса	9-10 неделя	10
3	Основы технических расчетов	11-14 неделя	16
4	Методы приближенных вычислений	15-18 неделя	12
Итого			54

В таблице 1 в столбце 1 указан номер раздела дисциплины, по которому предусмотрена СРС, а в столбце 2 указано наименование раздела. В столбце 3 указан временной интервал, в который студенту необходимо выполнить СРС по данному разделу. В столбце 4 указано время, затрачиваемое студентом на выполнение СРС, которое рассчитывается преподавателем.

## 2 Виды самостоятельной работы, их характеристика

При изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии» студентам рекомендуется самостоятельно выполнять доклады и рефераты. Данные виды интеллектуальной практической деятельности способствуют выработке умения и привычки делать что-либо правильно, а также закреплению навыков и знаний по проблеме.

**Доклад** - это вид самостоятельной работы студентов, заключающийся в разработке студентами темы на основе изучения литературы и развернутом публичном сообщении по данной проблеме.

Отличительными признаками доклада являются:

- передача в устной форме информации;
- публичный характер выступления;

- стилевая однородность доклада;
- четкие формулировки и сотрудничество докладчика и аудитории;
- умение в сжатой форме изложить ключевые положения исследуемого вопроса и сделать выводы.

Перечень тем докладов, рекомендованных студентам при изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии» представлен в приложении А.

**Реферат** - краткое изложение содержания документа или его части, научной работы, включающее основные фактические сведения и выводы, необходимые для первоначального ознакомления с источниками и определения целесообразности обращения к ним.

В учебном процессе реферат представляет собой письменный доклад по определенной теме, в котором собрана информация из одного или нескольких источников.

Рефераты пишутся обычно стандартным языком, с использованием ряда речевых оборотов: «важное значение имеет», «уделяется особое внимание», «поднимается вопрос», «делаем следующие выводы», «исследуемая проблема», «освещаемый вопрос» и т.п.

Цель реферата - не только сообщить о содержании реферируемой работы, но и дать представление о вновь возникших проблемах соответствующей отрасли науки.

В зависимости от количества реферируемых источников выделяют следующие виды рефератов:

**монографические** - рефераты, написанные на основе одного источника;

**обзорные** - рефераты, созданные на основе нескольких исходных текстов, объединенных общей темой и сходными проблемами исследования.

Рефераты оцениваются по следующим критериям:

- актуальность содержания, высокий теоретический уровень, глубина и полнота анализа фактов, явлений, проблем, относящихся к теме;
- информационная насыщенность, новизна, оригинальность изложения вопросов;

- простота и доходчивость изложения;
- структурная организованность, логичность, грамматическая правильность и стилистическая выразительность;
- убедительность, аргументированность, практическая значимость и теоретическая обоснованность предложений и выводов.

Признаки реферата:

- реферат не копирует дословно содержание первоисточника, а представляет собой новый вторичный текст, создаваемый в результате систематизации и обобщения материала первоисточника, его аналитико-синтетической переработки.

- будучи вторичным текстом, реферат составляется в соответствии со всеми требованиями, предъявляемыми к связанному высказыванию: так ему присущи следующие категории: оптимальное соотношение и завершенность (смысловая и жанрово-композиционная). Для реферата отбирается информация, объективно-ценная для всех читающих, а не только для одного автора. Автор реферата не может пользоваться только ему понятными значками или сокращениями.

- работа, проводимая автором для подготовки реферата должна обязательно включать самостоятельное мини-исследование, осуществляемое студентом.

- организация и описание исследования представляет собой очень сложный вид интеллектуальной деятельности, требующий культуры научного мышления, знания методики проведения исследования, навыков оформления научного труда и т.д.

Современные требования к реферату - точность и объективность в передаче сведений, полнота отображения основных элементов, как по содержанию, так и по форме.

При изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии» студентам рекомендованы темы рефератов, представленные в приложении Б.



### **3 Общие требования к оформлению реферата**

Рефераты должны оформляться в соответствии с действующими системами стандартов на оформление технической и отчетной документации, приведенных в СТУ 04.02.030-2015.

Изложение материала при подготовке реферата должно быть чётким, кратким и профессионально грамотным. Переписывание известных материалов из книг, справочников и других источников без ссылок на источники **не допускается**.

Каждый структурный элемент реферата нужно начинать с нового листа. Название структурного элемента в виде заголовка записывают строчными буквами, начиная с первой прописной.

Реферат должен быть написан на листах белой писчей бумаги форматом А4 (210×297 мм) с одной стороны листа с применением печатающих или графических устройств вывода ЭВМ через 1,5 интервала.

Рекомендуется использовать гарнитуру шрифта Times New Roman - 14.

При печати текстового документа следует использовать двухстороннее выравнивание.

Устанавливаемые размеры полей: левое - не менее 30 мм, правое - не менее 10 мм, верхнее и нижнее - не менее 20 мм.

Абзацный отступ выполняется одинаковым по всему тексту документа и равен пяти знакам (15-17 мм).

### **4 Требования к структуре реферата**

При оформлении реферата рекомендуется придерживаться следующей структуры:

#### **Титульный лист**

Является первой страницей и заполняется по строго определенным правилам. Оформление титульного листа реферата представлено в Приложении В.

#### **Содержание**

Содержание включает введение, заголовки всех разделов, подразделов, пунктов, заключение, список использованных

источников и наименования приложений с указанием номеров страниц, с которых начинаются эти элементы.

### **Введение**

Введение - это вступительная часть реферата, предваряющая текст. Оно должно содержать следующие элементы:

- очень краткий анализ научных, экспериментальных или практических достижений в той области, которой посвящен реферат;

- общий обзор опубликованных работ, рассматриваемых в реферате;

- цель данной работы;

- задачи, требующие решения.

Объем введения при объеме реферата 20-25 может составлять одну страницу.

### **Основная часть**

В основной части реферата студент дает письменное изложение материала по предложенному плану, используя материал из источников. В этом разделе работы формулируются основные понятия, их содержание, подходы к анализу, существующие в литературе, точки зрения на суть проблемы, ее характеристики.

Текст основной части делят на разделы, подразделы, пункты и подпункты. При этом необходимо, чтобы каждая часть содержала законченную информацию. Разделы, подразделы, пункты и подпункты нумеруются арабскими цифрами и записываются с абзацного отступа.

В соответствии с поставленной задачей делаются выводы и обобщения.

Очень важно не повторять, не копировать стиль источников, а выработать свой собственный, который соответствует характеру реферируемого материала.

### **Заключение**

Заключение подводит итог работы. Оно может включать повтор основных тезисов работы, чтобы акцентировать на них внимание читателей, содержать общий вывод, к которому пришел автор реферата, предложения по дальнейшей научной разработке вопроса и т.п. Здесь уже никакие конкретные случаи, факты, цифры

не анализируются. Заключение по объему, как правило, должно быть меньше введения.

### **Список использованных источников**

В список включают все источники, на которые имеются ссылки в реферате: официальные материалы, монографии и энциклопедии, книги и документы, журналы, брошюры и газетные статьи.

Источники в списке располагают и нумеруют в порядке их упоминания в тексте реферата арабскими цифрами без точки.

Сведения об источниках приводят в соответствии с требованиями ГОСТ 7.1 и ГОСТ 7.82.

### **Приложения**

В приложения выносятся: графический материал большого объема и формата, таблицы большого формата, методы расчетов, описания аппаратуры и приборов, описания алгоритмов и программ задач, решаемых на ЭВМ, и т. д.

В них рекомендуется включать материалы иллюстрационного и вспомогательного характера:

- таблицы и рисунки большого формата;
- дополнительные расчеты;
- описания применяемого в работе нестандартного оборудования.

## **5 Порядок сдачи и защиты рефератов и докладов**

Реферат или доклад сдается на проверку преподавателю за 2 недели до его защиты.

При защите реферата преподаватель учитывает:

- качество написания;
- степень самостоятельности студента и проявленную инициативу;
- связность, логичность и грамотность составления;
- оформление в соответствии с требованиями ГОСТ.

Защита тематического реферата может проводиться на выделенном одном занятии в рамках часов учебной дисциплины

или конференции или по одному реферату при изучении соответствующей темы, либо по договоренности с преподавателем.

Защита реферата или доклада студентом предусматривает:

- доклад продолжительностью не более 5-8 минут;
- ответы на вопросы оппонента.

На защите **запрещено** чтение текста реферата или доклада.

## **6 Использование тестовых задания для самопроверки**

Важным критерием усвоения теоретического материала является умение пройти тестирование по пройденному ранее материалу. Тестовые задания ориентированы в целом на проверку имеющихся проблем, способствуют систематизации изученного материала, проверке качества его усвоения. При использовании тестовых задания для самопроверки студент повторяет, как правило, ранее изученный материал. В этот период сыграют большую роль правильно подготовленные заранее записи и конспекты. Студенту останется лишь повторить пройденное, учесть, что было пропущено, восполнить пробелы и закрепить ранее изученный материал.

Тестовые задания для самопроверки по изучаемым темам приведены ниже.

### **Тема 1. Классификация методов научного исследования**

1. Результатом какого общенаучного метода является совершенно новое образование, свойства которого не есть только внешнее соединение свойств компонентов, но также и результат их внутренней взаимосвязи и взаимозависимости?

- |              |             |
|--------------|-------------|
| а) обобщение | б) анализ   |
| в) синтез    | г) индукция |

2. Какой общенаучный метод предназначен для определения круга тех понятий, с помощью которых описывается предмет исследования, поиск внешне хорошо различимых признаков?

- |                    |                      |
|--------------------|----------------------|
| а) обобщение       | б) логический анализ |
| в) абстрагирование | г) индукция          |

3. При каком общенаучном методе второстепенные свойства и связи исследуемого объекта отделяются от существенных свойств и связей?

- |                    |                      |
|--------------------|----------------------|
| а) индукция        | б) обобщение         |
| в) абстрагирование | г) логический анализ |

4. Степень вероятности умозаключений какого метода зависит от количества сходных признаков у сравниваемых явлений?

- |                  |                  |
|------------------|------------------|
| а) классификация | б) моделирование |
| в) обобщение     | г) аналогия      |

5. Какой метод наиболее часто применяют в теории подобия?

- |              |                  |
|--------------|------------------|
| а) аналогия  | б) моделирование |
| в) обобщение | г) индукция      |

6. При каком методе исследования для получения общего знания о каком-либо классе предметов необходимо исследовать отдельные предметы, найти в них общие существенные признаки, которые послужат основой знания об общем признаке, присущем данному классу предметов?

- |              |                  |
|--------------|------------------|
| а) обобщение | б) дедукция      |
| в) индукция  | г) моделирование |

7. Посредством каких умозаключений «выводят» определенную мысль из других мыслей?

- |                |                 |
|----------------|-----------------|
| а) дедуктивных | б) индуктивных  |
| в) логических  | г) исторических |

8. Отображение явления или предмета в знаковой форме какого-либо искусственного языка и изучение этого явления или предмета путем операций с соответствующими знаками это ...

- |                         |                     |
|-------------------------|---------------------|
| а) исторический метод   | б) формализация     |
| в) гипотетический метод | г) логический метод |

9. Как можно назвать искусственное воспроизведение явления, процесса в заданных условиях, в ходе которого проверяется выдвигаемая гипотеза?

- |                  |                |
|------------------|----------------|
| а) синтез        | б) анализ      |
| в) моделирование | г) эксперимент |

10. В результате чего исследователь получает знания о внешних свойствах и отношениях предметов и явлений?

- |               |                |
|---------------|----------------|
| а) анализ     | б) эксперимент |
| в) наблюдение | г) синтез      |

11. Способ познания, основанный на непосредственном восприятии свойств предметов и явлений при помощи органов чувств, называется ...

- а) наблюдение
- б) описание
- в) измерение
- г) сравнение

12. Метод научного познания, сущность которого заключается в замене изучаемого предмета или явления специальной аналогичной моделью, содержащей существенные черты оригинала, называется ...

- а) формализация
- б) моделирование
- в) система
- г) счёт

13. Совокупность общенаучных методологических принципов (требований), в основе которых лежит рассмотрение объектов как систем называется ...

- а) эксперимент
- б) моделирование
- в) системный подход
- г) наблюдение

14. Как называется метод философского познания и способ мышления базируются на анализе всевозможных точек зрения на исследуемый предмет?

- а) общенаучный
- б) метафизический
- в) всеобщий
- г) диалектический

15. К общенаучным подходам и методам исследования, которые получили широкое развитие и применение в науке не относятся ...

- а) анализ
- б) синтез
- в) обобщение
- г) эксперимент

16. Как называется общенаучный метод, основанный на расчленение, разложение объекта исследования на составные части, которое лежит в основе аналитического метода исследования?

- а) синтез
- б) анализ
- в) индукция
- г) обобщение

17. Разновидностью какого общенаучного метода являются классификация и периодизация?

- а) синтез
- б) анализ
- в) обобщение
- г) индукция

18. Как называется общенаучный метод, основанный на соединении отдельных сторон, частей объекта исследования в единое целое?

- |           |              |
|-----------|--------------|
| а) синтез | б) индукция  |
| в) анализ | г) обобщение |

19. Как называется выведение единичного, частного из какого-либо общего положения; движение мысли (познания) от общих утверждений к утверждениям об отдельных предметах или явлениях?

- |              |                  |
|--------------|------------------|
| а) обобщение | б) индукция      |
| в) дедукция  | г) моделирование |

20. Как называется движение мысли (познания) от фактов, отдельных случаев к общему положению?

- |              |                  |
|--------------|------------------|
| а) индукция  | б) дедукция      |
| в) обобщение | г) моделирование |

21. Как называется способ получения знаний о предметах и явлениях на основании того, что они имеют сходство с другими, рассуждение, в котором из сходства изучаемых объектов в некоторых признаках делается заключение об их сходстве и в других признаках?

- |                  |              |
|------------------|--------------|
| а) моделирование | б) аналогия  |
| в) классификация | г) обобщение |

22. Метод научного познания, сущность которого заключается в замене изучаемого предмета или явления специальной аналогичной моделью, содержащей существенные черты оригинала, называется ...

- |                  |                  |
|------------------|------------------|
| а) синтез        | б) классификация |
| в) моделирование | г) обобщение     |

23. Как называется метод научного исследования и обобщения, суть которого заключается в том, что изучаемые объекты, явления или процессы упорядочиваются в определенные группы на основе каких-либо избранных признаков?

- |              |                  |
|--------------|------------------|
| а) обобщение | б) классификация |
| в) анализ    | г) аналогия      |

24. Как называется мысленное отвлечение от некоторых свойств и отношений изучаемого предмета и выделение интересующих исследователя свойств и отношений?







12. Оценка физической величины размера в виде некоторого числа принятых для нее единиц или числа по принятой для нее шкале называется ...

- а) значением
- б) измерением
- в) оценкой
- г) индивидуальностью

13. Как называется значение физической величины, идеально отражающее свойство объекта?

- а) действительное
- б) относительное
- в) абсолютное
- г) истинное

14. Как называется значение физической величины, найденное экспериментально, достаточно близкое к истинному значению, которое можно использовать вместо него?

- а) истинное
- б) относительное
- в) действительное
- г) абсолютное

15. Набором технических операций, при которых измеряемая величина сравнивается с ее единицей или шкалой для получения значения этой величины в форме, наиболее удобной для использования называется ...

- а) значение
- б) измерение
- в) оценка
- г) индивидуальность

16. Как называется характеристика одного из свойств физического объекта, под которым понимается физическое явление или процесс, в качественном отношении общая многим физическим объектам, но в количественном отношении индивидуальная для каждого объекта?

- а) единицы измерения
- б) физическая величина
- в) размерность
- г) значение

17. К каким величинам относятся твердость?

- а) относительным
- б) абсолютным
- в) вещественным
- г) аддитивным

18. Какие физические величины могут быть выражены количественно в виде определенного числа установленных единиц измерения?

- а) измеряемые
- б) определяемые
- в) оцениваемые
- г) относительные

19. Как называется операция приписывания данной величине определенного числа, проводимая по установленным правилам?

- а) определение
- б) оценивание
- в) измерение
- г) дополнение

20. Как делятся реальные величины?

- а) идеальные и не идеальные
- б) энергетические и не энергетические
- в) физические и не физические
- г) вещественные и материальные

### Тема 3. Основы технических расчетов

1. Какие методы можно использовать в зависимости от цели и требуемой точности для математической обработки экспериментальных данных?

- а) аналитические или эмпирические
- б) графические или статистические
- в) графические или эмпирические
- г) статистические или динамические

2. Чего требует графический и аналитический метод для кривых, полученных при графическом изображении экспериментальных данных?

- а) линеаризации
- б) итерации
- в) приближения
- г) интегрирования

3. Какие методы можно использовать для определения коэффициентов эмпирических уравнений?

а) метод средних, графический метод, метод квадратных уравнений

б) графический метод, метод Ньютона, метод хорд

в) графический метод, метод средних, метод наименьших квадратов

г) метод итераций, метод наименьших квадратов, метод Симпсона

4. Как изображают на номограммах значения переменных?

- а) штрихами или метками
- б) метками или пунктиром
- в) линиями или штрихами
- г) точками, или линиями

5. Какое условие лежит в основе метод наименьших квадратов?

а) максимальной отклонений суммы квадратов экспериментально найденных величин от расчетных





а) сумме предельных относительных погрешностей делимого и делителя

б) сумме предельных относительных погрешностей делимого и делителя

в) сумме предельных абсолютных погрешностей делимого и делителя

г) сумме предельных абсолютных погрешностей делимого от делителя

17. Предельная относительная погрешность произведения нескольких приближенных чисел равна...

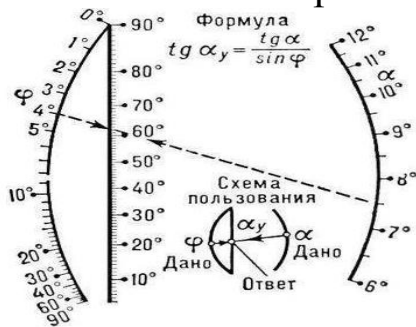
а) разности предельных относительных погрешностей сомножителей

б) сумме предельных относительных погрешностей сомножителей

в) сумме предельных относительных погрешностей разности

г) сумме предельных относительных погрешностей деления

18. Что изображено на рисунке?



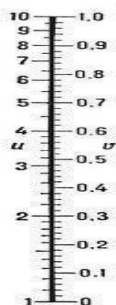
а) номограмма для вычисления площади трапеции

б) двойная шкала для вычисления логарифма

в) транспортная номограмма

г) номограмма из выравненных точек

19. Что изображено на рисунке?



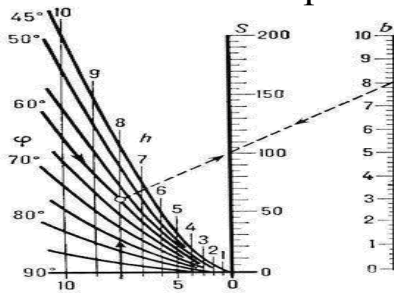
а) номограмма из выравненных точек

б) двойная шкала для вычисления логарифма

в) транспортная номограмма

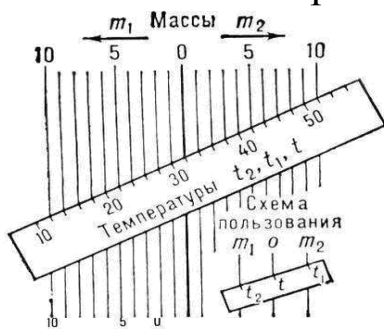
г) номограмма для вычисления площади трапеции

20. Что изображено на рисунке?



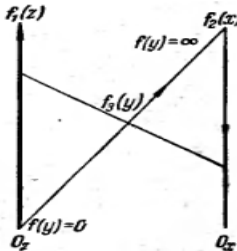
- а) номограмма из выравненных точек
- б) двойная шкала для вычисления логарифма
- в) номограмма для вычисления площади трапеции
- г) транспортная номограмма

21. Что изображено на рисунке?



- а) транспортная номограмма
- б) номограмма для вычисления площади трапеции
- в) номограмма с наклонной шкалой
- г) двойная шкала для вычисления логарифма

22. Какая номограмма изображена на рисунке?



- а) номограмма для вычисления площади трапеции
- б) транспортная номограмма
- в) номограмма из выравненных точек
- г) номограмма с наклонной шкалой

#### Тема 4. Методы приближенных вычислений

1. Предельная относительная погрешность  $n$ -й степени приближенного числа равна...

- а) разности показателя степени  $n$  на предельную относительную погрешность основания
- б) произведению показателя степени  $n$  на предельную абсолютную погрешность основания
- в) произведению показателя степени  $n$  на предельную относительную погрешность основания
- г) делению показателя степени  $n$  на предельную абсолютную погрешность основания

2. Предельная относительная погрешность корня n-й степени из приближенного числа равна предельной ...

а) относительной погрешности подкоренного числа, умноженной на показатель степени корня

б) относительной погрешности подкоренного числа, деленной на показатель степени корня

в) абсолютной погрешности подкоренного числа, умноженной на показатель степени корня

г) абсолютной погрешности подкоренного числа, деленной на показатель степени корня

3. Погрешностью, или ошибкой,  $\Delta a$  приближенного числа "a" называется...

а) разность между точным числом x и его приближенным значением "a"

б) сумма между точным числом x и его приближенным значением "a"

в) произведению между точным числом x и его приближенным значением "a"

г) делению между точным числом x и его приближенным значением "a"

4. Погрешность, или ошибка,  $\Delta a$  приближенного числа a, равна ...

а)  $\Delta a = |x \cdot a|$       б)  $\Delta a = |x / a|$       в)  $\Delta a = x + a$       г)  $\Delta a = x - a$

5. По какой формуле вычисляют определенный интеграл согласно графическому методу?

а)  $I = \int_{x_0}^{x_n} F(x) dx$  ; б)  $I = \frac{x_n - x_0}{6n} \{F(x_0) + F(x_n)\}$  ; в)  $I = F(x_0) + F(x_n)$  ; г)  $I = \int_{n-1}^n F dx$

6. Какой метод применяют для приближенного вычисления определенных интервалов наряду с методом Симпсона?

а) метод итераций

б) метод трапеций

в) метод Гаусса

г) метод Ньютона

7. Какими являются подсистемы, если в общем случае число неизвестных больше числа уравнений?

а) определёнными

б) неопределяющими

в) неопределёнными

г) неизвестными



8. На чем основан принцип графического решения уравнений, если уравнение может быть приведено к виду  $f_1(x)=C$ , где  $C$  - постоянная?

а) на построении графика функции  $y=kx+b$  и последующей аппроксимации

б) на построении графика функции  $f_1(x)$  и последующей линеаризации

в) на построении графика функции  $y=kx+b$  и нахождении точки пересечения с прямой  $y=C_1$

г) на построении графика функции  $f_1(x)$  и нахождении точки пересечения с прямой  $y=C$

9. Определить абсолютную и предельную абсолютную погрешности числа  $a=0,67$ , взятого в качестве приближенного значения числа  $x=2/3$ .

а) 0,0033 и 0,004

б) 0,033 и 0,04

в) 0,00033 и 0,0004

г) 0,33 и 0,4

10. Определить предельную относительную погрешность измерения плотности бензола при температуре  $20^\circ\text{C}$ , если в результате измерения получено  $\rho=0,88\pm 0,005$  г/см<sup>3</sup>.

а) 5,70%

б) 0,33%

в) 3,30%

г) 0,57%

11. Определить количество верных значащих цифр (в узком и широком смысле) в числе  $a = 0,04318$ , если известна его абсолютная погрешность  $\Delta=0,2\cdot 10^{-4}$ .

а) число верных значащих цифр в узком смысле  $n=2$  (4, 3)

б) число верных значащих цифр в узком смысле  $n=3$  (4, 3, 1)

в) число верных значащих цифр в узком смысле  $n=1$  (4)

г) число верных значащих цифр в узком смысле  $n=4$  (4, 3, 1, 8)

12. Масса навески, найденная взвешиванием на аналитических весах, равна  $0,6794\pm 0,0002$  г. Округлить сомнительные цифры полученного результата и определить его предельную абсолютную погрешность.

а) 6,79; 0,006

б) 0,34; 0,0003

в) 0,679; 0,0006

г) 3,40; 0,003

13. Плотность вещества равна  $0,82$  г/см<sup>3</sup>. В этом числе две верные в узком смысле цифры. Найти его предельную относительную погрешность.



21. Решите приведенную задачу.

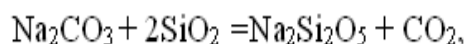
Тепловой эффект ( $\Delta H_T$ ) химической реакции образования  $n$  моль вещества, протекающей при абсолютной температуре  $T$ , равен

$$\Delta H_T = [\Delta H_{298} + \Delta c_p(T - 298,15)]n,$$

где  $\Delta H_{298}$  – тепловой эффект химической реакции образования 1 моль при 298 К;

$\Delta c_p$  – изменение теплоемкости системы в результате химической реакции.

Рассчитать тепловой эффект реакции образования 0,247 моль дисиликата натрия при  $T = 700$  К:



Считая, что  $\Delta c_p$  не зависит от температуры, и оценить погрешность результата, если известно, что

$$\Delta H_{298} = 56,1 \pm 0,2 \text{ (кДж/моль);}$$

$$\Delta c_p = -5,3 \cdot 10^{-3} \pm 0,1 \cdot 10^{-3} \text{ (кДж/моль} \cdot \text{К);}$$

$$n = 0,247 \pm 0,001; T = 700 \pm 0,1 \text{ К.}$$

- а)  $\Delta H = 13,3 \pm 0,1$  кДж                      б)  $\Delta H = 23,3 \pm 0,2$  кДж  
 в)  $\Delta H = 23,3 \pm 0,01$  кДж                    г)  $\Delta H = 13,3 \pm 0,02$  кДж

22. Определить графически корни уравнения  $e^x - x^2 = 0$

- а) корень уравнения лежит в интервале  $(-0,5; 0)$   
 б) корень уравнения лежит в интервале  $(-1,5; -1,0)$   
 в) корень уравнения лежит в интервале  $(-2,5; -2,0)$   
 г) корень уравнения лежит в интервале  $(-1; -0,5)$

23. Решите приведенную задачу.

Найти с точностью  $\varepsilon = 10^{-4}$  равновесные концентрации ионов водорода,  $\text{HC}_2\text{O}_4^-$  и  $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$  в растворе щавелевой кислоты с концентрацией  $c = 0,100$  моль/л, если первая константа диссоциации  $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HC}_2\text{O}_4^-$   $K_1 = 6,5 \cdot 10^{-2}$  моль/л, вторая константа диссоциации  $\text{HC}_2\text{O}_4^- \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{C}_2\text{O}_4^{2-}$   $K_2 = 6,1 \cdot 10^{-5}$  моль/л.

- а) 0,064 и 0,036 соответственно  
 б) 0,054 и 0,046 соответственно  
 в) 0,044 и 0,056 соответственно  
 г) 0,024 и 0,076 соответственно

24. Решить методом Ньютона задачу, приведенную ниже, с точностью до  $10^{-4}$

Найти с точностью  $\varepsilon = 10^{-4}$  равновесные концентрации ионов водорода,  $\text{HC}_2\text{O}_4^-$  и  $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$  в растворе щавелевой кислоты с концентрацией  $c = 0,100$  моль/л, если первая константа диссоциации  $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HC}_2\text{O}_4^-$   $K_1 = 6,5 \cdot 10^{-2}$  моль/л, вторая константа диссоциации  $\text{HC}_2\text{O}_4^- \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{C}_2\text{O}_4^{2-}$   $K_2 = 6,1 \cdot 10^{-5}$  моль/л.

- а) 0,053 и 0,047 соответственно
- б) 0,063 и 0,037 соответственно
- в) 0,043 и 0,057 соответственно
- г) 0,023 и 0,077 соответственно

25. Решите приведенную задачу. Методом половинного деления уточнить до  $\varepsilon = 10^{-3}$  корень уравнения, расположенный на отрезке  $[0,3; 0,4]$

В закрытом сосуде протекает реакция  $2\text{H}_2 + \text{S}_2 = 2\text{H}_2\text{S}$ .

Исходные концентрации компонентов реакции равны соответственно  $C_{\text{H}_2}, C_{\text{S}_2}, C_{\text{H}_2\text{S}}$ , константа равновесия процесса –  $K_C$ . В результате установления в системе состояния равновесия концентрация сероводорода изменилась на  $x$  моль/дм<sup>3</sup>. Уравнение, связывающее названные величины, имеет следующий вид:

$$0,5K_C x^3 + x^2(1 - K_C C_{\text{H}_2}) + x(2C_{\text{H}_2\text{S}} + 2K_C C_{\text{H}_2} C_{\text{S}_2} + 0,5K_C C_{\text{H}_2}^2) + C_{\text{H}_2\text{S}} - K_C C_{\text{H}_2}^2 C_{\text{S}_2} = 0.$$

Найти значения  $x$  с точностью  $\varepsilon = 10^{-3}$  моль/л, если

$$K_C^{800} = 113,7, C_{\text{H}_2} = 0,840 \frac{\text{моль}}{\text{л}}, C_{\text{S}_2} = 0,170 \frac{\text{моль}}{\text{л}}, C_{\text{H}_2\text{S}} = 0,005 \frac{\text{моль}}{\text{л}}.$$

- а)  $0,134 \pm 0,002$  моль/л
- б)  $0,330 \pm 0,002$  моль/л
- в)  $0,332 \pm 0,001$  моль/л
- г)  $0,231 \pm 0,001$  моль/л

26. Решите приведенную задачу. Методом хорд уточнить до  $\varepsilon = 0,001$  корень уравнения, расположенный на отрезке  $[0,3; 0,4]$

В закрытом сосуде протекает реакция  $2\text{H}_2 + \text{S}_2 = 2\text{H}_2\text{S}$ .

Исходные концентрации компонентов реакции равны соответственно  $C_{\text{H}_2}, C_{\text{S}_2}, C_{\text{H}_2\text{S}}$ , константа равновесия процесса –  $K_C$ . В результате установления в системе состояния равновесия концентрация сероводорода изменилась на  $x$  моль/дм<sup>3</sup>. Уравнение, связывающее названные величины, имеет следующий вид:

$$0,5K_C x^3 + x^2(1 - K_C C_{\text{H}_2}) + x(2C_{\text{H}_2\text{S}} + 2K_C C_{\text{H}_2} C_{\text{S}_2} + 0,5K_C C_{\text{H}_2}^2) + C_{\text{H}_2\text{S}} - K_C C_{\text{H}_2}^2 C_{\text{S}_2} = 0.$$

Найти значения  $x$  с точностью  $\varepsilon = 10^{-3}$  моль/л, если

$$K_C^{800} = 113,7, C_{\text{H}_2} = 0,840 \frac{\text{моль}}{\text{л}}, C_{\text{S}_2} = 0,170 \frac{\text{моль}}{\text{л}}, C_{\text{H}_2\text{S}} = 0,005 \frac{\text{моль}}{\text{л}}.$$

- а) 0,322 моль/л
- б) 0,134 моль/л
- в) 0,413 моль/л
- г) 0,231 моль/л

27. Решите приведенную задачу. Методом итераций уточнить до  $\varepsilon=0,001$  корень уравнения, расположенный на отрезке  $[0,3; 0,4]$

В закрытом сосуде протекает реакция  $2H_2 + S_2 = 2H_2S$ .

Исходные концентрации компонентов реакции равны соответственно  $C_{H_2}, C_{S_2}, C_{H_2S}$ , константа равновесия процесса –  $K_C$ . В результате установления в системе состояния равновесия концентрация сероводорода изменилась на  $x$  моль/дм<sup>3</sup>. Уравнение, связывающее названные величины, имеет следующий вид:

$$0,5K_C x^3 + x^2(1 - K_C C_{H_2}) + x(2C_{H_2S} + 2K_C C_{H_2} C_{S_2} + 0,5K_C C_{H_2}^2) + C_{H_2S} - K_C C_{H_2}^2 C_{S_2} = 0.$$

Найти значения  $x$  с точностью  $\varepsilon = 10^{-3}$  моль/л, если

$$K_C^{800} = 113,7, C_{H_2} = 0,840 \frac{\text{моль}}{\text{л}}, C_{S_2} = 0,170 \frac{\text{моль}}{\text{л}}, C_{H_2S} = 0,005 \frac{\text{моль}}{\text{л}}.$$

а)  $0,134 \pm 0,002$  моль/л

б)  $0,413 \pm 0,002$  моль/л

в)  $0,231 \pm 0,001$  моль/л

г)  $0,333 \pm 0,001$  моль/л

28. Решите приведенную задачу.

Экспериментатор установил, что при определённой постоянной температуре действия паров бензола (1), дихлорэтана (2) и хлорбензола (3) в однофазной системе равнозначениям, представленным в таблице. Найти значение давления пара чистых компонентов.

**Экспериментальные данные**

Состав смеси, мол. доли			Давление, Р, Па
N <sub>1</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>3</sub>	
0,80	0,10	0,10	1840
0,20	0,70	0,10	1860
0,05	0,05	0,90	236

**Ответ:**

а)  $p_1 \approx 2037$  Па;  $p_2 \approx 2070$  Па;  $p_3 \approx 34$  Па;

б)  $p_1 \approx 4037$  Па;  $p_2 \approx 4070$  Па;  $p_3 \approx 64$  Па

в)  $p_1 \approx 1037$  Па;  $p_2 \approx 1070$  Па;  $p_3 \approx 104$  Па

г)  $p_1 \approx 537$  Па;  $p_2 \approx 570$  Па;  $p_3 \approx 14$  Па

## **7 Методические рекомендации по подготовке к лабораторным работам и экзамену**

Приступая к изучению новой учебной дисциплины, студенты должны ознакомиться с учебной программой, учебной, научной и методической литературой, имеющейся в библиотеке, получить в библиотеке рекомендованные учебники и учебно-методические пособия.

При подготовке к лабораторным работам следует в полной мере использовать курсы учебников, рекомендованных преподавателем. Это даст более углубленное представление о проблемах, получивших систематическое изложение в учебнике.

Основная функция экзамена - обучающая, и только потом оценочная и воспитательная. Экзамен позволяет выработать ответственность, трудолюбие, принципиальность.

Серьезная и методически грамотная подготовка к лабораторным работам, написание докладов и рефератов значительно облегчит подготовку к экзамену.

Перечень вопросов к экзамену по дисциплине «Вычислительные методы в химии» представлен в приложении Г.

**Список использованных источников**

1. *Абасов, З.* Проектирование и организация самостоятельной работы студентов [Текст]: / Абасов, З. // Высшее образование в России. 2007. №10. С. 17.

2. *Гумеров, А.М.* Математическое моделирование химико-технологических процессов [Текст]: учебное пособие /А.М. Гумеров. Изд. 2-е, перераб. Санкт-Петербург: Лань, 2014. 176 с.

3. *Жураковский, В.В.* Управление самостоятельной работой: мировой опыт [Текст]: / В.В. Жураковский // Высшее образование в России. 2003. № 2. С. 45-50.

4. *Захарова, А.А.* Процессы и аппараты химической технологии [Текст]: / А.А. Захарова [и др.]; М., Академия. 2006. 528 с.

5. *Математическое моделирование химико-технологических процессов* [Текст]: учеб. пособие. М.: КолосС, 2008. 159 с.

6. *Процессы и аппараты химической технологии. Явления переноса, макрокинетика, подобие, моделирование, проектирование* [Текст]: учеб. пособие. / под ред. А.М. Кутепова. Т. 2: Механические и гидромеханические процессы. М.: Логос. 2002. 600 с.

7. *Скатецкий, В.Г.* Математические методы в химии [Текст]: учеб. / В.Г. Скатецкий, Д.В. Свиридов, В.И. Яшкин. М., ТетраСистемс. 2006. 368 с.

8. *Самарский, А.А.* Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры / А.А. Самарский, А.П. Михайлов; 2-е изд., испр. М.: Физматлит, 2005. 320 с.

9. *Флореа, О.* Расчёты по процессам и аппаратам химической технологии [Текст]: учеб. / О. Флореа, О. Смигельский; М.: Химия. 1971. 448 с

## Приложение А

### Рекомендуемые темы докладов

#### Классификация методов научного исследования

1. Многоуровневая концепция методологического знания.
2. Метафизический и диалектический методы.
3. Общенаучные подходы и методы исследования.
4. Теоретические методы.
5. Эмпирические методы.
6. Асимптотические методы.
7. Численные методы.
8. Алгебраические уравнения.
9. Трансцендентное уравнение.
10. Итерационные методы.

#### Основы технических расчетов

1. Графический метод.
2. Метод средних.
3. Метод наименьших квадратов (МНК).
4. Номограммы и их классификация.
5. Номограммы из выравненных точек.
6. Сетчатые номограммы.
7. Транспарантная номограмма.
8. Приближённые номограммы.
9. Номограммы с параллельными функциональными шкалами.
10. Номограммы с наклонными шкалами.



## Приложение Б

### Рекомендуемые темы рефератов

#### Величины, описывающие элемент процесса

1. Основные физические величины.
2. Метрическая система мер.
3. Системы единиц физических величин.
4. Система СГС.
5. Система МТС.
6. Система МКГСС.
7. Система МКСА.
8. Внесистемные единицы ФВ.
9. Международная система единиц.
10. Единицы, имеющие специальные наименования.

#### Методы приближенных вычислений

1. Обработка результатов измерений.
2. Оценка точности отсчета на приборах.
3. Вычисление средних погрешностей серии измерений.
4. Вычисление относительной погрешности значения, получаемого в результате расчета по формуле, включающей несколько непосредственно измеренных величин.
5. Выражение результатов физико-химических измерений в виде таблиц и графиков.
6. Составление таблиц.
7. Интерполяция и экстраполяция.
8. Ошибки измерений.
9. Метод Симпсона.
10. Метод трапеций.

## Приложение В

**Оформление титульного листа реферата**

Минобрнауки России  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Юго-Западный государственный университет»

**Кафедра фундаментальной химии и химической технологии**

**РЕФЕРАТ**

по дисциплине «\_\_\_\_\_»  
(наименование дисциплины)  
на тему «\_\_\_\_\_»  
\_\_\_\_\_»

Выполнил студент \_\_\_\_\_  
(шифр группы) (инициалы, фамилия) (подпись, дата)

Проверил \_\_\_\_\_  
(ученая степень, должность) (инициалы, фамилия) (подпись, дата)

Курск, 20\_\_ г.

## Приложение Г

### Перечень вопросов к экзамену по дисциплине «Вычислительные методы в химии»

#### 1 Классификация методов научного исследования.

1. Многоуровневая концепция методологического знания. (3 балла)
2. Классификация методов научного познания по степени общности. (3 балла)
3. Метафизический метод. (3 балла)
4. Диалектический метод. (3 балла)
5. Общенаучные подходы и методы исследования. (3 балла)
6. Анализ. (3 балла)
7. Синтез. (3 балла)
8. Логический анализ. (3 балла)
9. Обобщение. (3 балла)
10. Абстрагирование (идеализация). (3 балла)
11. Индукция. (3 балла)
12. Дедукция. (3 балла)
13. Аналогия. (3 балла)
14. Моделирование. (3 балла)
15. Исторический метод. (3 балла)
16. Логический метод. (3 балла)
17. Конкретно-научные методы. (3 балла)
18. Теоретические методы. (3 балла)
19. Аксиоматический метод. (3 балла)
20. Гипотетический метод. (3 балла)
21. Гипотетико-дедуктивный способ. (3 балла)
22. Формализация. (3 балла)
23. Системный метод (метод системного анализа). (3 балла)
24. Системный подход. (3 балла)
25. Система. (3 балла)
26. Эмпирические методы. (3 балла)
27. Наблюдение. (3 балла)
28. Описание. (3 балла)
29. Счет. (3 балла)
30. Измерение. (3 балла)
31. Сравнение. (3 балла)
32. Эксперимент. (3 балла)
33. Асимптотические методы. (3 балла)
34. Численные методы. (3 балла)
35. Алгебраические уравнения. (3 балла)
36. Трансцендентное уравнение. (3 балла)
37. Методы решения нелинейных уравнений. (3 балла)
38. Точные методы. (3 балла)
39. Итерационные методы. (3 балла)

#### 2 Величины, описывающие элемент процесса.

1. Физические величины и их измерения. (3 балла)
2. Относительные величины. (3 балла)
3. Абсолютные величины. (3 балла)
4. Аддитивные ФВ. (3 балла)
5. Размеры ФВ узнают в результате их измерения. (3 балла)
6. Понятие о физической величине. (3 балла)
7. Классификация величин по видам явлений. (3 балла)
8. Классификация величин по принадлежности к различным группам физических процессов. (3 балла)
9. Классификация величин по степени условной независимости от других величин. (3 балла)
10. Классификация величин по наличию размерности. (3 балла)
11. Основные физические величины. (3 балла)
12. Метрическая система мер. (3 балла)
13. Системы единиц физических величин. (3 балла)
14. Системы единиц. (3 балла)
15. Система СГС. (3 балла)
16. Система МТС. (3 балла)
17. Система МКГСС. (3 балла)
18. Система МКСА. (3 балла)
19. Внесистемные единицы ФВ. (3 балла)
20. Международная система единиц. (3 балла)
21. Основные единицы физических величин СИ. (3 балла)

22. Единицы, имеющие специальные наименования. (3 балла)  
 23. Размерность физической величины. (3 балла)

### 3 Основы технических расчетов.

1. Типы функций, используемых при описании химико-технологических процессов. (3 балла)
2. Построение графиков. (3 балла)
3. Определение коэффициентов эмпирических формул. (3 балла)
4. Графический метод. (3 балла)
5. Метод средних. (3 балла)
6. Метод наименьших квадратов (МНК). (3 балла)
7. Номограммы. Номография. (3 балла)
8. Номограммы и их классификация. (3 балла)
9. Изображения переменных. (3 балла)
10. Классификация номограмм. (3 балла)
11. Номограммы из выравненных точек. (3 балла)
12. Сетчатые номограммы. (3 балла)
13. Транспарантная номограмма. (3 балла)
14. Погрешности вычислений по номограммам. (3 балла)
15. Возможность представления уравнений номограммами. (3 балла)
16. Приближенные номограммы. (3 балла)
17. Построение номограмм. (3 балла)
18. Функциональная шкала. (3 балла)
19. Номограммы с параллельными функциональными шкалами. (3 балла)
20. Номограммы с наклонными шкалами. (3 балла)

### 4 Методы приближенных вычислений.

1. Элементы теории погрешностей. (3 балла)
2. Обработка результатов измерений. (3 балла)
3. Оценка погрешности измерений. (3 балла)
4. Оценка точности отсчета на приборах. (3 балла)
5. Определение абсолютной и относительной погрешности непосредственного измерения какой-нибудь величины. (3 балла)
6. Выбор необходимой точности измерения. (3 балла)
7. Вычисление средних погрешностей серии измерений. (3 балла)
8. Вычисление относительной погрешности значения, получаемого в результате расчета по формуле, включающей несколько непосредственно измеренных величин. (3 балла)
9. Выражение результатов физико-химических измерений в виде таблиц и графиков. (3 балла)
10. Составление таблиц. (3 балла)
11. Правила округления чисел. (3 балла)
12. Интерполяция. (3 балла)
13. Экстраполяция. (3 балла)
14. Построение графиков. (3 балла)
15. Выбор масштаба. (3 балла)
16. Приближенные величины и действия с ними. (3 балла)
17. Ошибки измерений. (3 балла)
18. Систематические ошибки. (3 балла)
19. Случайные ошибки. (3 балла)
20. Промахи. (3 балла)
21. Приближенные решения. (3 балла)
22. Решение уравнений. (3 балла)
23. Графическое решение уравнений. (3 балла)
24. Решение уравнений методом итераций (последовательных приближений). (3 балла)
25. Решение систем уравнений. (3 балла)
26. Вычисление определенных интегралов. (3 балла)
27. Графический метод. (3 балла)
28. Метод Симпсона. (3 балла)
29. Метод трапеций. (3 балла)