ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ

كلية **العلوم**

القسم : **الكيمياء**

السنة : **الرابعة**

اسئلة دورات محلولة

برمجة كيميائية

A 2 Z LIBRARY

Facebook Group : A to Z مكتبة

كلية العلوم (فيزياء ، كيمياء ، رياضيات ،علم الحياة)

TEL: 0931497960 بمكنكم طلب المحاضرات برسالة نصية (SMS) أو عبر (What's app) على الرقم

ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة /كيمياء / الدورة الأولى
للعام الدراسي 2024 - 2025

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: (الدرجة 8) عرف ما يلي: لكل تعريف درجة واحدة

الكيمياء الحاسوبية، الطرائق غير اختبارية، الانحراف المعياري S، معامل الارتباط الخطي R^2، الحالة الانتقالية، صلابة الجزيء، المؤشرات النيكليوفيلية والإلكتروفيلية الموضعية.

السؤال الثاني: (الدرجة 15) اختار العبارة الصحيحة، وصحح الخاطئة: لكل شطر 3 درجات

a. يمثل السطر $x = x + 0.001$ أحد الأوامر الرئيسة عند برمجة طريقة نيوتن – روفسون لحل معادلة من المرتبة الثانية.

b. عند إيجاد حل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة التكرار نستخدم العبارة $x = (-x^2 + 10)/5$ كنقطة مرجعية.

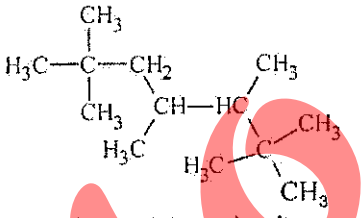
c. يستخدم الأمر # B3LYP opt=(calcfc,ts,maxcycle=100,noeigen) freq للبحث عن الحالة الانتقالية في ملف الدخل (input).

d. لحساب انتالبية التفاعل بالطرائق النظرية، نحدد البنية الهندسية لمكونات التفاعل باستخدام الأمر **opt** فقط في ملف الدخل.

e. لتحديد المؤشرات الإلكتروفيلية P_K^- لذرات كاتيون الجزيء المدروس نختار الأمر # B3LYP بحيث تكون شحنته تساوي +1 وتعدده 1.

السؤال الثالث : (الدرجة 25) اجب عن الأسئلة الآتية: لكل شطر 5 درجات

1. اشرح كيف يمكن حل المعادلتين $x + y = 2.75$ و $1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$ باستخدام برنامج Mathcad.
2. اشرح باختصار كيف يمكن حل ثلاثة معادلات بثلاثة مجاهيل بطريقة فصل غوص باستخدام برنامج exel.
3. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$، و $S = -20.89$، $T = -8.48$، $Q = -0.48$ بواحدة kJ/mol. احسب إنتالبية تشكل الجزي المبين أدناه:



4. احسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ ضمن المجال [0-1] بطريقة سيمبسون باستخدام المعطيات الآتية افترض أن $n = 6$:

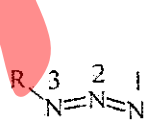
x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x)$	−0.25	−0.138	0.166	0.614	1.158	1.75

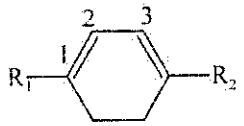
5. احسب الانتالبية القياسية لتشكل البنزن بوساطة معادلة فصل الروابط علماً أن انتالبية التفاعل تساوي $\Delta_r H^0 = 281.82$ kJ/mol، وأن $\Delta_f H^0(CH_2 = CH_2) = 52.47$ kJ/mol و $\Delta_f H^0(CH_3 - CH_3) = -83.80$ kJ/mol، و $\Delta_f H^0(CH_4) = -74.84$ kJ/mol ثم احسب النسبة المئوية للخطأ علما أن القيمة التجريبية لانتالبية البنزن القياسية هي $\Delta_f H^0(C_6H_6)_{exp} = 82.93$ kJ/mol.

السؤال الرابع: (الدرجة 22): للشطر الأول 12 درجة وللثاني 10 درجات

1. يوضح الشكل أدناه الجزيئين المتفاعلين A و B مع طاقات المدرارات HOMO و LUMO:

A B





$E_{HOMO} = -0.32931$ hartree $E_{HOMO} = -0.23518$ hartree

$E_{LUMO} = -0.04277$ hartree $E_{LUMO} = -0.01256$ hartree

والمطلوب حساب المؤشرات الالكتروفيلية ω والنيكليوفيلية N العامة لهذين الجزيئين. نظم النتائج في جدول مناسب، وناقش النتائج، هل التفاعل قطبي؟ ولماذا؟ كيف تنتقل الكثافة السبينية بين هذين الجزيئيين. استفد من القيمة الموافقة للمادة المرجعية $E_{HOMO}(TCE) = -0.39724$ hartree . علما أن 1hartree = 27.2 eV. اعرض النتائج بواحدة eV.

2. حدد طاقة جيبس الحرة لتشكل ناتجي تفاعل تحلق المادتين A وB، وللحالات الانتقالية بواحدة kcal/mol، علماً أن 1hartree = 627.5 kcal/mol. وضح النتائج بالرسم. ما المسار المفضل ترموديناميكياً والمفضل حركياً؟

Data	A	B	1,4-P	1,5-P	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{corr}$(Hartree)	-395.706	-556.696	-952.400	-952.403	-952.336	-952.352
$\Delta_r G^0$(kcal/mol)			?	?	?	?

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

أستاذ المقرر د. محمد عبد الحكيم بدوي

2025/6/17

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة /كيمياء / الدورة الثانية
للعام الدراسي 2023 – 2024

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: (الدرجة 10): عرف ما يلي:

الكيمياء الحاسوبية، الانحراف القياسي العام S، معامل التردد R، صلابة الجزيء η، المؤشر الإلكتروفيلي ω.

السؤال الثاني: (الدرجة 15): صحح العبارات الآتية:

a. يحسب الميل حسب طريقة المربعات الصغرى بالعلاقة $m = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i / \sum_{i=1}^{n} y_i^2$ لمستقيم يمر من المبدأ.

b. يستخدم التعبير MINVERSE(B3:D5) = في برنامج excel للحصول على الحلول لجملة معادلات.

c. يستخدم الأمر B3LYP # لحساب طاقة الأيون السالب في ملف الدخل (input) مع السطر 1 1 للإشارة إلى تعدد وشحنة الأيون.

d. للبحث عن الحالة الانتقالية باستخدام برنامج GAUOSSIN نكتب الأمر # B3LYP opt=(calcfc, noeigen).

e. يحسب المؤشر الإلكتروفيلي العام للجزيء من العلاقة $\omega = \omega \cdot P$.

السؤال الثالث: (الدرجة 18) اجب عن الأسئلة الآتية: لكل شطر 7 درجات

1. اكتب بلغة QB لحل المعادلة $x^2 - 10x + 5 = 0$ بطريقة ثنائي القطاع مستخدما قيمة أولية لـ x_0 (ولتكن 0.1)، وقيمة الخطأ e (وليكن 0.001).

2. احسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ ضمن المجال [0-1] بطريقة سيمبسون باستخدام المعطيات الآتية:

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x)$	−0.25	−0.138	0.166	0.614	1.158	1.75

3. اشرح كيفية حل جملة المعادلات باستخدام الأمرين Given و Find في برنامج MATHCAD.

$$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5 \quad \text{و} \quad x + y = 2.75$$

السؤال الرابع: (الدرجة 27) أجب عن الأسئلة الآتية:

1. اكتب العلاقات الموافقة للمؤشرات النيكليوفيلية (N) والإلكتروفيلية (ω) العامة لأي جزي. تؤدي عملية تحلق الأزيد مع الكيتون عبر مسارين 1,4-Path و1,5-Path لتشكيل 1,4-isomer و1,5-isomer. المطلوب:

a. أكمل الجدول الآتي مع العلم أن المؤشرات الإلكتروفيلية ω والنيكليوفيلية N العامة للأزيد والكيتون مدرجة في الجدول لحساب المؤشرات النيكليوفيلية N_k والإلكتروفيلية ω_k الموضعية لكل جزيء:

N	ω	Ketone			
4.68	0.77	Parr Function		Electrophilic	Nuclophilic
	Atom	P_k^+	P_k^-	ω_k	N_k
	C1	0.13	0.12	?	?
	C2	0.29	-0.04	?	?
N	**ω**	**Azide**			
3.11	**1.03**	P_k^+	P_k^-	ω_k	N_k
	N1	0.21	-0.06	?	?
	N2	-0.06	0.20	?	?
	N3	0.23	0.22	?	?

- ما هو المركب الأكثر نيكليوفيليا والأكثر إلكتروفيليا؟ حسب المؤشرات العامة؟ وكيف يتم الهجوم الإلكتروفيلي أو النيكليوفيلي؟
- كيف يتم التحلق بين المركبين حسب المؤشرات الإلكتروفيلية والنيكليوفيلية الموضعية؟.

b. عند استخدام السوية النظرية M06-2X/6-31+G(d) لدراسة آلية التحلق تم الحصول على النتائج المبينة في الجدول الآتي بواحدة hartree. أكمل الجدول بواحدة kcal/mol.

hartree	ketone	Azide	TS1	TS2	1,4-isomer	1,5-isomer
$E_o + H_{corr}$	-750.6659	-395.5683	-1146.2095	-1146.1877	-1146.2707	-1146.2661
$E_o + G_{corr}$	-750.7298	-395.6080	-1146.2912	-1146.2689	-1146.3733	-1146.3678
$\Delta_r H$(kcal/mol)			?	?	?	?
$\Delta_r G$(kcal/mol)			?	?	?	?

- ما المسار المفضل ترموديناميكيا وحركيا؟ ولماذا؟ وضح ذلك بالشكل. هل التفاعل ماص أم ناشر للحرارة؟

2. عند دراسة حركية تفاعل الأكسدة الجزيئية للإيتان، تم التعرف على المكونات الجزيئية الآتية: $\{C,H,O\}\{\ O_2 \quad CH_4 \quad C_2H_6 \quad H_2O \quad CH_3OH \quad CH_2O\}$

$$\text{rref}(N) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

a. ما الأمر اللازم استخدامه لاختزال هذه المصفوفة باستخدام برنامج Mathcad؟

b. استخدم المصفوفة المختزلة المبينة في الجانب الأيسر لاستنتاج آلية التفاعل.

2024/7/9 نتمنى لكم التوفيق والنجاح أستاذ المقرر: د. محمد عبد الحكيم بدوي

A to Z مكتبة

٣. نقوم بكتابة الأسطر الآتية في صفحة البرنامج:

intial Gauss

$x := 1 \quad y := 1$

Given

$x + y = 2.75$

$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$

$$\text{Find}(x,y) = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

السؤال الرابع: (الدرجة 27) أجب عن الأسئلة الآتية:

١. تعطى العلاقات الموافقة لكل مؤشر على النحو الآتي: $\omega = \mu^2/2\eta$، $N = HOMO(molecule) - HOMO(TCE)$

a. النتائج هي: العلاقات الضرورية $\omega_k = P_k^+ \omega$ و $N_k = P_k^- N$.

N	ω	Ketone			
4.68	0.77	Parr Function		Electrophilic	Nuclophilic
	No Atom	P_k^+	P_k^-	ω_k	N_k
	C1	0.13	0.12	-0.1	0.562
	C2	0.29	-0.04	0.223	-1.727
N	ω	Azide			
3.11	1.03	P_k^+	P_k^-	ω_k	N_k
	N1	0.21	-0.06	0.21	-0.187
	N2	-0.06	0.20	-0.06	0.622
	N3	0.23	0.22	0.24	0.684

- إن الجزيء الأكثر نيكليوفيليا هو الكيتون لأنه يقابله أعلى قيمة لـ N (4.68) أما الجزيء الأكثر إلكتروفيليا هو الجزيء الأزيد لأنه يقابله أعلى قيمة لـ ω (1.03). وبذلك يتم الهجوم النيكليوفيلي من قبل الأزيد.
- نلاحظ من الجدول أن أعلى قيمة للمؤشر النيكليوفيلي تأخذها الذرة C1 في الكيتون، في حين أعلى قيمة للمؤشر الإلكتروفيلي تأخذها الذرة N3 في الأزيد لذلك يتم الهجوم النيكليوفيلي من قبل الذرة N3 على الذرة C1 لتشكل الرابطة C1 – N3، وهذا يقابله أخفض طاقة ممكنة للحالة الانتقالية الموافقة.

b. النتائج هي:

	ketone	Azide	1,4-TS 1	1,5-TS 2	1,4-isomer	1,5-isomer
Eo + Ho	-750.6659	-395.5683	-1146.2095	-1146.1877	-1146.2707	-1146.2661
Eo + Go	-750.7298	-395.6080	-1146.2912	-1146.2689	-1146.3733	-1146.3678
$\Delta_r H$			15.50	29.18	-22.93	-20.02
$\Delta_r G$			29.29	43.29	-22.25	-18.80

- نلاحظ من الجدول أن الحالة الانتقالية 1,4-TS تصادف حاجز طاقي أخفض مما تواجهه الحالة الانتقالية 1,5-TS، فضلا عن ذلك نلاحظ أن تغير طاقة جيبس للناتج 1,4-isomer أخفض مما هو للناتج 1,5-isomer، وبذلك فالتفاعل يفضل المسار 1,4 حركيا وترموديناميكيا. التفاعل في كلا الحالتين ناشر للحرارة.
- بالطبع لأنه يقابله أخفض قيمة لحاجز الطاقة.

٢. تكتب المصفوفة الجزيئية على النحو الآتي مع الأمر المستخدم في برنامج Mathcad لإجاد اختزال المصفوفة:

$$N := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & 6 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{rref}(N) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

باستخدام المصفوفة المختزلة نحصل على آلية التفاعل:

$$\tfrac{1}{2}O_2 + 2CH_4 - C_2H_6 = H_2O \quad \Rightarrow \quad \tfrac{1}{2}O_2 + 2CH_4 \rightarrow H_2O + C_2H_6$$

$$\tfrac{1}{2}O_2 + CH_4 = CH_3OH \quad \Rightarrow \quad \tfrac{1}{2}O_2 + CH_4 \rightarrow CH_3OH$$

$$\tfrac{1}{2}O_2 - CH_4 + C_2H_6 = CH_2O \quad \Rightarrow \quad \tfrac{1}{2}O_2 + C_2H_6 \rightarrow CH_2O + CH_4$$

السؤال الأول: 10 درجات.

جواب السؤال الأول: التعارف:

- الكيمياء الحاسوبية: تمثل فرعا من فروع الكيمياء الذي يستخدم المحاكاة الحاسوبية للمساعدة في حل المشاكل الكيميائية بوساطة الطرائق الكيميائية المدمجة في برامج حاسوبية مثل Gaussian.
- الانحراف القياسي العام: يبين مدى تطابق القيم التجريبية مع القيم المحسوبة أو انحراف القيم المحسوبة عن القيم التجريبية، بعد تأويل القيم النظرية بمعادلة مناسبة، ويعطى بالعلاقة الآتية $S = \sum_{i=1}^{n} (\bar{y}_i - y_i)^2 / n - m$
- معامل التردد: يعطى بالعلاقة $R = 1 - SSE / SST$ ، ويأخذ قيمة الواحد عندما تتطابق القيم المحسوبة مع القيم التجريبية.
- صلابة الجزيء: يمثل مؤشر يشير إلى مقاومة الجزيء لتبادل الكثافة الإلكترونية مع المحيط.
- المؤشر الالكتروفيلي ω: تمثل المؤشر النيكليوفيلي العام للجزيء الذي يسمح بتوزيع المؤشرات الإلكتروفيلي في المراكز الذرية في الجزيء ويعطى بالعلاقة الآتية $\omega = \mu^2/2\eta$.

السؤال الثاني: (الدرجة 15): العبارات الصحيحة هي:

a. يحسب الميل حسب طريقة المربعات الصغرى بالعلاقة $m = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i / \sum_{i=1}^{n} x_i^2$ لمستقيم يمر من المبدأ.

b. يستخدم التعبير MMULT(B3:D5) = في برنامج excel للحصول على الحلول لجملة معادلات.

c. يستخدم الأمر # B3LYP لحساب طاقة الأيون السالب في ملف الدخل (input) مع السطر 1 2- للإشارة إلى تعدد وشحنة الأيون.

d. للبحث عن الحالة الانتقالية باستخدام برنامج GAUOSSIN نكتب الأمر # B3LYP opt=(calcfc,ts, noeigen).

e. يحسب المؤشر الإلكتروفيلي العام للجزيء من العلاقة $\omega = \mu^2/2\eta$.

السؤال الثالث:(الدرجة 18) اجب عن الأسئلة الآتية: لكل شطر ٧ درجات

١. البرنامج هو:

```
CLS
DEF fnf (x) = x^2 + 5*x - 10
READ a, b, c
DATA 0.0, 0.1, 0.001
5 c = (a + b)/2
PRINT c
f1 = fnf(a): f2 = fnf(b): f3 = fnf(c)
IF f1 * f3 = 0 THEN 25
IF f2 * f3 = 0 THEN 25
IF f1 * f3 < 0 THEN 10
a = c
GOTO 15
10 b = c
15 IF ABS(a-b) < e THEN 25
25 PRINT "The root is:", c
END
```

٢. نطبق العلاقة:

$$\int_0^1 f(x)dx = \left(\frac{b-a}{3n}\right)\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

$$= \left(\frac{1-0}{3\times 6}\right)\left[-0.25 - 4\times 0.138 + 2\times 0.166 + 4\times 0.614 + 2\times 1.158 + 1.75\right]$$

$$= 0.366$$

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة /كيمياء / الدورة الأولى
للعام الدراسي 2023 – 2024

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول:(الدرجة 16): وضح ما الغاية من استخدام الأوامر الآتية موضحا اسم البرنامج الذي يضم كل أمر من هذه الأوامر: (a) =MMULT(A,b)، (b) =SQR(A1)، (c) =MMUL(A:b)، (d) =C1*C2/C3، (e) =Polyroots(V)، (f) =eigenveces(H)، (g) =Find(x,y)، (h) =rref(A).

السؤال الثاني: (الدرجة 8) ضع إشارة صح للعبارة الصحيحة، وصحح الخاطئة: لكل شطر 3 درجات

a. يمثل السطر x = x + 0.001 أحد الأوامر الرئيسة عند برمجة طريقة نيوتن – روفسون لحل معادلة من المرتبة الثانية.

b. عند إيجاد حل المعادلة $x^2+5x-10=0$ بطريقة التكرار نستخدم العبارة $x=(-x^2+10)/5$ كنقطة مرجعية.

c. يستخدم الأمر B3LYP # لحساب الطاقة لأيون السالب في ملف الدخل (input) مع السطر 1 1- للإشارة إلى تعدد وشحنة الأيون.

d. لحساب انتالبية التفاعل بالطرائق النظرية، نحدد البنية الهندسية لمكونات التفاعل باستخدام الأمر **opt** فقط في ملف الدخل.

السؤال الثالث : (الدرجة 28) اجب عن الأسئلة الآتية: لكل شطر 7 درجات

1. اكتب بلغة QB لحل المعادلة $x^2-10x+5=0$ بطريقة التكرار باستخدام الأمرين DATA وRED مستخدما قيمة أولية لـ x_0 (ولتكن (0.1))، وقيمة الخطأ e (وليكن (0.001)).

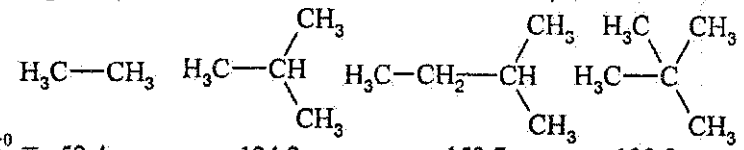
2. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $x^3+x^2-10x+2=0$ بطريقة نيوتن- روفسون:

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	-4.000				
2					
3					
4					

3. اكتب معادلة فصل الروابط للفوران C_4H_4O ثم احسب الانتاليبة القياسية لتشكله وفقاً لهذه المعادلة علماً $\Delta_r H^0=197.1$ (للتفاعل)، وان القيم التجريبية لانتالبية تشكل المواد معطاة في الجدول أدناه بواحدة kJ/mol. احسب النسبة المئوية للخطأ.

compound	Methane	Ethane	Ethylene	Methanol	Water	Furan
$\Delta_f H$(298 K)	-74.9	-84.0	52.4	-201.0	-241.8	-34.8

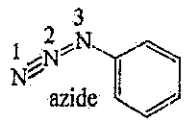
4. قم بتهيئة أربعة معادلات تبعا لطريقة بينسون استناداً إلى المركبات الأربعة المبينة أدناه مع قيم انتابيات تشكلها بواحدة kJ/mol، ثم بوضح كيف يمكن إيجاد قيمة اسهام كل مجموعة بطريقة فصل غوص باستخدام برنامج mathcad:



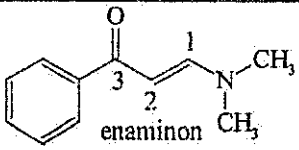
$\Delta_f H^0=$ 52.4   -134.2   -153.7   120.8

السؤال الرابع: (الدرجة 18): للشطر الأول 9 درجة وللثاني 9 درجات

1. يتحلق الأزيد مع الاينامينون تبعا لتفاعل التحلق 1,3، والمطلوب تحديد المؤشرات النيكلوفيلية والإلكتروفيلية الموضعية لكلا المركبين تبعا للمعطيات المبينة في الجدول أدناه. انقل الجدول على الدفتر وأكمله، علما أن $N=3.11$ و$\omega=1.03$ للأزيد، و$N=3.71$ و $\omega=1.03$ للاينامينون، ثم ناقش النتائج من حيث قيم هذه المؤشرات للمركبين.



المركب	الذرة ورقمها	P_k^-	P_k^+	N_k	ω_k
	N1	0.27	0.27		
	N2	0.17	0.17		
	N3	-0.05	-0.05		
	C1	0.15	0.15		
	C2	-0.01	-0.01		
	C3	0.18	0.18		



2. احسب طاقة جيبس الحرة لتشكل ناتجي تفاعل تحلق المادتين المذكورتين أعلاه وللحالات الانتقالية بواحدة kcal/mol، علما أن 1hartree = 627.51 kcal/mol. وضح النتائج بالرسم. ما المسار المفضل ترموديناميكياً والمفضل حركياً؟

Data	azide	enaminon	1,4-P	1,5-P	1,4-TS	1,5-TS
E^0+G_{corr}(Hartree)	-395.706	-556.696	-952.400	-952.404	-952.352	-952.336
$\Delta_r G^o$(kcal/mol)			?	?	?	?

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

أستاذ المقرر د. محمد عبد الحكيم بدوي

مكتبة AtoZ

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة /كيمياء / الدورة التكميلية
للعام الدراسي 2022 – 2023

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول:(الدرجة 16): وضح ما الغاية من استخدام الأوامر الآتية موضحا اسم البرنامج الذي يضم كل أمر من هذه الأوامر: **(a)** =MMULT(A,b)، **(b)** =SQR(A1)، **(c)** =MMUL(A:b)، **(d)** =C1*C2/C3، **(e)** =Polyroots(V)، **(f)** =eigenveces(H)، **(g)** =Find(x,y)، **(h)** =rref(A).

السؤال الثاني: (الدرجة 8) ضع إشارة صح للعبارة الصحيحة، وصحح الخاطئة: لكل شطر 3 درجات

a. يمثل السطر $x = x + 0.001$ أحد الأوامر الرئيسة عند برمجة طريقة نيوتن – روفسون لحل معادلة من المرتبة الثانية.

b. عند إيجاد حل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة التكرار نستخدم العبارة $x = (-x^2 + 10)/5$ كنقطة مرجعية.

c. يستخدم الأمر # B3LYP لحساب الطاقة لأيون السالب في ملف الدخل (input) مع السطر 1 1- للإشارة إلى تعدد وشحنة الأيون.

d. لحساب انتالبية التفاعل بالطرائق النظرية، نحدد البنية الهندسية لمكونات التفاعل باستخدام الأمر **opt** فقط في ملف الدخل.

السؤال الثالث : (الدرجة 28) اجب عن الأسئلة الآتية: لكل شطر 7 درجات

1. اكتب بلغة QB لحل المعادلة $x^2 - 10x + 5 = 0$ بطريقة التكرار باستخدام الأمرين DATA وRED مستخدما قيمة أولية لـ x_0 (ولتكن 0.1)، وقيمة الخطأ e (وليكن 0.001).

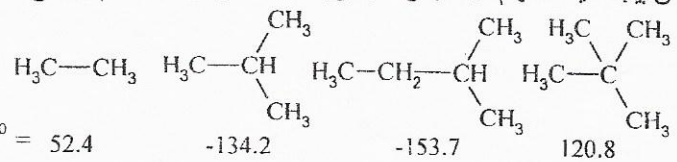
2. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $x^3 + x^2 - 10x + 2 = 0$ بطريقة نيوتن- روفسون:

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	-4.000				
2					
3					
4					

3. اكتب معادلة فصل الروابط للفوران C_4H_4O ثم احسب الانتالبية القياسية لتشكله وفقاً لهذه المعادلة علماً $\Delta_r H^0 = 197.1$ (للتفاعل)، وأن **القيم التجريبية** لانتالبية تشكل المواد معطاة في الجدول أدناه بواحدة kJ/mol. احسب النسبة المؤية للخطأ.

compound	Methane	Ethane	Ethylene	Methanol	Water	Furan
$\Delta_f H$(298 K)	-74.9	-84.0	52.4	-201.0	-241.8	-34.8

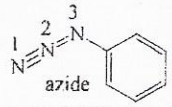
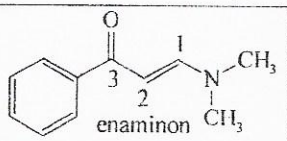
4. قم بتهيئة أربعة معادلات تبعا لطريقة بينسون استنادا إلى المركبات الأربعة المبينة أدناه مع قيم انتالبيات تشكلها بواحدة kJ/mol، ثم بوضح كيف يمكن إيجاد قيمة اسهام كل مجموعة بطريقة فصل غوص باستخدام برنامج mathcad:



$\Delta_f H^0$ = 52.4 -134.2 -153.7 120.8

السؤال الرابع: (الدرجة 18): للشطر الأول 9 درجة وللثاني 9 درجات

1. يتحلق الأزيد مع الاينامينون تبعا لتفاعل التحلق 1,3، والمطلوب تحديد المؤشرات النيكلوفيلية والإلكتروفيلية الموضعية لكلا المركبين تبعا للمعطيات المبينة في الجدول أدناه. انقل الجدول على الدفتر وأكمله، علما أن $N = 3.11$ و $\omega = 1.03$ **للأزيد**، و $N = 3.71$ و $\omega = 1.03$ **للاينامينون**، ثم ناقش النتائج من حيث قيم هذه المؤشرات للمركبين.

المركب	الذرة ورقمها	P_k^-	P_k^+	N_k	ω_k
 azide	N1	0.27	0.27		
	N2	0.17	0.17		
	N3	-0.05	-0.05		
 enaminon	C1	0.15	0.15		
	C2	-0.01	-0.01		
	C3	0.18	0.18		

2. احسب طاقة جيبس الحرة لتشكل ناتجي تفاعل تحلق المادتين المذكورتين أعلاه وللحالات الانتقالية بواحدة kcal/mol، علماً أن 1hartree = 627.51 kcal/mol. وضح النتائج بالرسم. ما المسار المفضل ترموديناميكياً والمفضل حركياً؟

Data	azide	enaminon	1,4-P	1,5-P	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{corr}$ (Hartree)	-395.706	-556.696	-952.400	-952.404	-952.352	-952.336
$\Delta_r G^o$(kcal/mol)			?	?	?	?

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

أستاذ المقرر د. محمد عبد الحكيم بدوي

سلم التصحيح لمقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للدورة التكميلية للعام 2023

جواب السؤال الأول:

a. لإيجاد الحل بطريقة فصل غوص في برنامج exel.
b. لايجاد الجذرة التربيعي في برنامج exel.
c. لإيجاد الحل بطريقة فصل غوص في برنامج exel.
d. لإيجاد جداء قيمتين ثم تقسيم الناتج على قيمة أخرى باستخدام برنامج EXECL.
e. لايجاد جذور كثيرات الحدود باستخدام برنامج mathcad.
f. لايجاد معاملات التركيب الخطي بطريقة هيوكل باستخدام برنامج mathcad.
g. لايجاد حل جملة معادلات بطريقة Find given باستخدام برنامج mathcad.
h. لايجاد اختزال مصفوفة باستخدام برنامج mathcad.

جواب السؤال الثاني:

a. خطأ يمثل سطر أساسي في عملية البرمجة بطريقة التكرار بلغة QB.
b. صح.
c. خطأ، بشحنة قدرها 1- وتعدد قدره 2.
d. خطأ، باستخدام الأمرين opt + freq.

جواب السؤال الثالث:

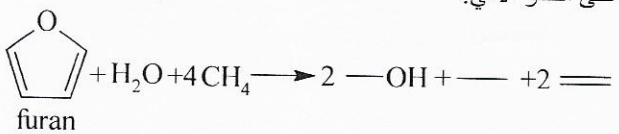
1. البرنامج هو:

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,0.0001
10 x = x +0.01
a = x ^ 2 + 5 * x - 10
PRINT a
IF a < e GOTO 10
x0 = x1:
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

2. الجواب:

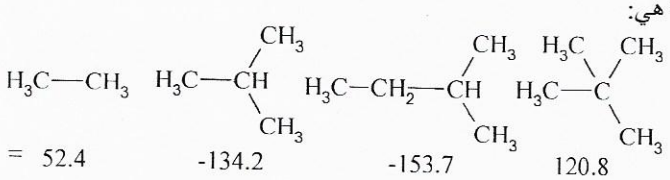
iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	-4.0000	-6.0000	30.0000	-3.8000	-5.2632
2	-3.8000	-0.4320	25.7200	-3.7832	-0.4440
3	-3.7832	-0.0029	25.3715	-3.7831	-0.0031
4	-3.7831	0.0000	25.3691	-3.7831	0.0000

3. تكتب معادلة فصل الروابط على النحو الآتي:



وبتطبيق العلاقة: $\Delta_r H = \sum_{products} \Delta_f H - \sum_{reactants} \Delta_f H$ ، وبتعويض القيم المعطاة في نص المسألة نحصل على قيمة $\Delta_f H(\text{furan}) = -36.7\ \text{kJ/mol}$ ، وتبلغ النسبة المئوية للخطأ نحو 5.2%.

4. المعادلات الأربعة هي:



$\Delta_f H^0 =$ 52.4 -134.2 -153.7 120.8

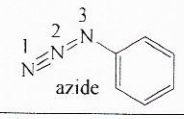
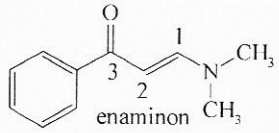
$$\Delta_f H(C_2H_6) = 2P + 0 + 0 + 0 = 52.4$$
$$\Delta_f H(C_4H_{10}) = 3P + 0 + T + 0 = -134.2$$
$$\Delta_f H(C_5H_{12}) = 3P + S + T + 0 = -153.7$$
$$\Delta_f H(C_5H_{12}) = 3P + S + T + 0 = -120.8$$

وبحل جملة هذه المعادلات بطريقة غوص نحصل على قيمة كل مجموعة.

A to Z

جوالب السؤال الرابع:

a: المؤشرات:

المركب	الذرة ورقمها	P_k^-	P_k^+	N_k	ω_k
 azide	N1	0.27	0.27	0.8397	0.2781
	N2	0.17	0.17	0.5287	0.1751
	N3	-0.05	-0.05	-0.1555	-0.0515
 enaminon	C1	0.15	0.15	0.4665	0.1545
	C2	-0.01	-0.01	-0.0311	-0.0103
	C3	0.18	0.18	0.5598	0.1854

المناقشة: إن أكثر المراكز الفعالة نيكليوفيلياً في الأزيد هي الذرة N1، في حين تكون أكثر المراكز الفعالية إلكتروفيليا في الإنامينون هي الذرة C3، ولكن لا تسمح ذرة الأوكسجين بارتباط هذه الذرة بالذرة N1، بل توجه ذرة الأكسجين الارتباط بالذرة غير فعالة إلكتروفيليا وهي الذرة C2 المجاورة مباشرة للذرة C3، وبذلك تعمل ذرة الأكسجين بتوجيه التفاعل.

b. التفاعل بين الأزيد والإنامينيون:

Data	azide	enaminon	1,4-P	1,5-P	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{corr}$ (Hartree)	-395.706	-556.696	-952.400	-952.404	-952.352	-952.336
$\Delta_r G^\circ$(kcal/mol)			1.255	-1.255	31.375	41.415

نلاحظ من النتيجة أن المسار المفضل حركيا هو نحو الناتج 1,4، في حين يكون التفاعل المفضل ترموديناميكيا هو نحو الناتج 1,5.

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة /كيمياء / الدورة الثانية
للعام الدراسي 2022 – 2023

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: (الدرجة 8)عرف ما يلي: لكل تعريف درجة واحدة

الكيمياء الحاسوبية، الطرائق غير اختبارية، الانحراف المعياري S، معامل الارتباط الخطي R^2، الحالة الانتقالية، صلابة الجزيء، المؤشرات النيكليوفيلية والإلكتروفيلية الموضعية.

السؤال الثاني: (الدرجة 15) اختار العبارة الصحيحة، وصحح الخاطئة: لكل شطر 3 درجات

a. يمثل السطر $x = x + 0.001$ أحد الأوامر الرئيسة عند برمجة طريقة نيوتن – روفسون لحل معادلة من المرتبة الثانية.

b. عند إيجاد حل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة التكرار نستخدم العبارة $x = (-x^2 + 10)/5$ كنقطة مرجعية.

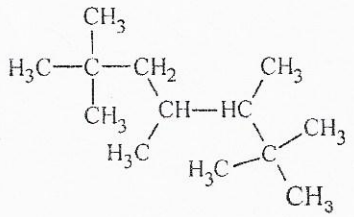
c. يستخدم الأمر B3LYP opt=(calcfc,ts,maxcycle=100,noeigen) freq # للبحث عن الحالة الانتقالية في ملف الدخل (input).

d. لحساب انتالبية التفاعل بالطرائق النظرية، نحدد البنية الهندسية لمكونات التفاعل باستخدام الأمر **opt** فقط في ملف الدخل.

e. لتحديد المؤشرات الإلكتروفيلية P_k^- لذرات كاتيون الجزيء المدروس نختار الأمر B3LYP # بحيث تكون شحنته تساوي +1 وتعدده 1.

السؤال الثالث : (الدرجة 25) اجب عن الأسئلة الآتية: لكل شطر 5 درجات

1. اشرح كيف يمكن حل المعادلتين $x + y = 2.75$ و $1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$ باستخدام برنامج Mathcad.
2. اشرح باختصار كيف يمكن حل ثلاثة معادلات بثلاثة مجاهيل بطريقة فصل غوص باستخدام برنامج exel.
3. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$، و $S = -20.89$، $T = -8.48$، $Q = -0.48$ بواحدة kJ/mol. احسب إنتالبية تشكل الجزيء المبين أدناه:



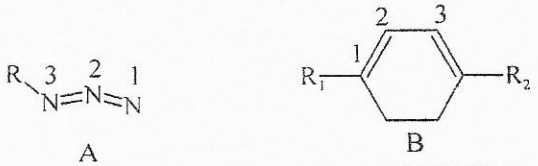
4. احسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ ضمن المجال [1-0] بطريقة سيمبسون باستخدام المعطيات الآتية افترض أن $n = 6$:

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x)$	−0.25	−0.138	0.166	0.614	1.158	1.75

5. احسب الانتالبية القياسية لتشكل البنزن بوساطة معادلة فصل الروابط علماً أن انتالبية التفاعل تساوي $\Delta_r H^0 = 281.82$ kJ/mol، وأن $\Delta_f H^0(CH_2 = CH_2) = 52.47$ kJ/mol و $\Delta_f H^0(CH_3 - CH_3) = -83.80$ kJ/mol، و $\Delta_f H^0(CH_4) = -74.84$ kJ/mol ثم احسب النسبة المئوية للخطأ علما أن القيمة التجريبية لانتالبية البنزن القياسية هي $\Delta_f H^0(C_6H_6)_{exp} = 82.93$ kJ/mol.

السؤال الرابع: (الدرجة 22): للشطر الأول 12 درجة وللثاني 10 درجات

1. يوضح الشكل أدناه الجزيئين المتفاعلتين A و B مع طاقات المدارات HOMO وLUMO:



A B

$E_{HOMO} = -0.32931$ hartree $E_{HOMO} = -0.23518$ hartree

$E_{LUMO} = -0.04277$ hartree $E_{LUMO} = -0.01256$ hartree

والمطلوب حساب المؤشرات الالكتروفيلية ω والنيكليوفيلية N العامة لهذين الجزيئين. نظم النتائج في جدول مناسب، وناقش النتائج، هل التفاعل قطبي؟ ولماذا؟ كيف تنتقل الكثافة السبينية بين هذين الجزيئين. استفد من القيمة الموافقة للمادة المرجعية $E_{HOMO}(TCE) = -0.39724$ hartree. علما أن 1hartree = 27.2 eV. اعرض النتائج بواحدة eV.

2. حدد طاقة جيبس الحرة لتشكل ناتجي تفاعل تحلق المادتين A وB، وللحالات الانتقالية بواحدة kcal/mol، علماً أن 1hartree = 627.5 kcal/mol. وضح النتائج بالرسم. ما المسار المفضل ترموديناميكياً والمفضل حركياً؟

Data	A	B	1,4-P	1,5-P	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{corr}$ (Hartree)	-395.706	-556.696	-952.400	-952.403	-952.336	-952.352
$\Delta_r G^o$(kcal/mol)			?	?	?	?

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

أستاذ المقرر د. محمد عبد الحكيم بدوي

2023/7/17

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للدورة الفصلية الثانية للعام 2023

جواب السؤال الأول (8 درجة): لكل تعريف درجتان.

الكيمياء الحاسوبية: هو احد فروع الكيمياء الفيزيائية الذي يعتمد على تقنية الحاسوب لحل المسائل المعقدة ذات الصلة بالكيمياء بوساطة برمجيات نظريات الميكانيك الكم، من ضمن هذه المسائل نذكر مثلاً دراسة آلية التفاعل، تحديد الخواص الفيزيائية والكيميائية للجزيئات، تحليل الطياف الاهتزازية، ودراسة الحالات المثارة، وغيرها.

الطرائق غير اختبارية: وهي احدى طرائق الميكانيك الكم المعروفة باسم Ab initio، وهي طرائق أساسها نظري بحت وتعمل على إيجاد الحلول التقريبية الدقيقة لمعادلة شرودينغر، ومن ضمن هذه الطرائق نذكر طرائق الاضطراب Mpn، وطرائق تابعية الكثافة DFT، وغيرها.

الانحراف المعياري: يبين مدى تطابق القيم التجريبية مع القيم المحسوبة بعد تأويل القيم التجريبية بمعادلة مناسبة، ويعطى بالعلاقة الآتية $S = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2 / n - m$.

معامل الارتباط الخطي: يبين أيضا تطابق المنحنيات التجريبية مع المنحنيات المؤولة بمعادلة مناسبة، وأكبر قيمة يأخذها تساوي 1، وهذا يعني تطابق مثالي، ويعطى بالعلاقة الآتية $R^2 = SSR/SST = 1-(SSE/SST)$ حيث $SSE = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2$ و $SST = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2$.

الحالة الانتقالية: وهي تلك الحالة التي تتشكل في احدى المراحل وتستهلك في مراحل أخرى، وقد تمثل هذه الحالة المرحلة المحددة لسرعة التفاعل.

صلابة الجزيء: وهي تمثل ممانعة الجزيء على تبادل الكثافة السبينية مع الوسطي، وتحسب من العلاقة $\eta \approx (E_{LUMO} - E_{HOMO})$.

المؤشرات النيكليوفيلية والإلكتروفيلية الموضعية: هي تلك المؤشرات التي تسمح بتوزيع المؤشرات النيكليوفيلية والإلكتروفيلية العامة على المراكز الذرية في الجزيء وتحسب تبعا للعلاقتين الآتيتين $N_k = N \cdot P_k^-$ و $\omega_k = \omega \cdot P_k^+$ على الترتيب.

جواب السؤال الثاني (15 درجة): لكل شطر 5 درجات:

a. خطأ، والصحيح هو يمثل أمر رئيسي عند البرمجة بلغة QB.
b. صح.
c. صح.
d. خطأ، والصحيح باستخدام الأمرين opt + freq.
e. خطأ، والصحيح تكون شحنته تساوي 1+ وتعدده 2.

جواب السؤال الثالث : (الدرجة 25): لكل شطر 5 درجات

1. يمكن حل جملة المعادلتين باستخدام برنامج Mathcad باستخدام الأمرين Given و Find كما يلي:

intial Gauss

$x := 1 \quad y := 1$

Given

$x + y = 2.75$

$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$

$\text{Find(x,y)} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$

2. نختار ست خلايا في برنامج exel تبعا لمصفوفة أمثال المجاهيل ولتكن A، ثم نختار العدد نفسه من الخلايا لأخذ مقلوب المصفوفة A^{-1} بكتابة الأمر MINVERSE(A1:A6)=، ثم ننقر على F2، ثم نقوم بتعليم الخلايا المختارة وننقر في الوقت نفسه CTRL+SHIFT+ENTER فنحصل على مقلوب المصفوفة، ثم نختار ثلاثة خلايا مخصصة لمصفوفة المعاليم b، وفي النهاية نخصص ثلاثة خلايا مخصصة لمصفوفة الحل، ونكتب في الخلية الأولى الأمر MMULT(A,b)=، ثم نعلم الخلايا الثلاثة جميعها ننقر على F2، ثم ننقر في الوقت نفسه CTRL+SHIFT+ENTER فنحصل على الحلول.

3. تحسب انتالبية الجزيء المطلوب حسب طريقة بينسون بالعلاقة الآتية:

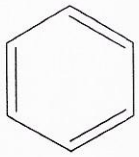
$$\Delta H^0 = 8P + S + 2T + 2Q = 6\times(-41.91) + (-20.89) + 2\times(-8.48) + 2\times(-0.48)$$
$$= -290.27 \text{ kJ/mol}$$

4. حسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ بطريقة سيمبسون تبعا للعلاقة الآتية

$$\int_0^1 f(x)dx = \left(\frac{b-a}{3n}\right)\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$
$$= \left(\frac{1-0}{3\times 6}\right)\left[-0.25 - 4\times 0.138 + 2\times 0.166 + 4\times 0.614 + 2\times 1.158 + 1.75\right]$$
$$= 0.366$$

A to Z

5. لحساب الانتالبية القياسية لتشكل البنزن نكتب أولا معادلة فصل الروابط:



$$+6\ CH_4 \longrightarrow 3\,H_2C{=}CH_2 + 3\,H_3C{-}CH_3$$

وحسب تعريف انتالبية التفاعل نكتب:

$$\Delta_r H^0 = \sum_{\text{Products}} \Delta_f H - \sum_{\text{Reactants}} \Delta_f H$$

$$= 3\Delta_f H^0(CH_2=CH_2) + 3\Delta_f H^0(CH_3-CH_3) - \Delta_f H^0(C_6H_6) - 6\Delta_f H^0(CH_4)$$

ومن هذه العلاقة نجد أن:

$$\Delta_f H^0(C_6H_6) = 3\Delta_f H^0(CH_2=CH_2) + 3\Delta_f H^0(CH_3-CH_3) - 6\Delta_f H^0(CH_4) - \Delta_r H^0$$

$$= 3\times 52.47 + 3\times(-83.80) - 4\times(-74.84) - 281.82 = 73.23\ \text{kJ/mol}$$

وتحسب النسبة المئوية للخطأ من العلاقة الآتية:

$$\%\text{erorr} = \frac{E_{\exp} - E_{cal}}{E_{\exp}}\% = \frac{82.93 + 73.23}{82.93}\% = 11.7\%$$

جواب السؤال الرابع: (الدرجة 22): للشطر الأول 12 درجة وللشطر الثاني 10 درجات

1. نكتب أولا العلاقات الضرورية:

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta},\ \eta \approx (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}),\ \mu \approx \frac{(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})}{2}$$

$$N = E_{\text{HOMO}}(\text{Nucleophile}) - E_{\text{HOMO}}(\text{TCE})$$

ونطبق هذه العلاقات بالنسبة للمكونين A وB، ويبين الجدول أدناه نتائج الحسابات بواحدة eV:

الجزيء	μ	η	ω	N
A	-5.06	7.79	1.64	1.85
B	-3.03	6.06	0.76	4.41

المناقشة: نلاحظ أن للجزيء A مؤشر نيكليوفيلي (4.41) أكبر مما هو للجزيء B (1,85)، بينما للجزيء B مؤشر إلكتروفيلي (1.64) أكبر مما هو للجزيء A (0.76)، ولذلك فإن الجزيء A يقوم بهجوم إلكتروفيلي نحو الجزيء B.

- التفاعل قطبي بسبب وجود فرق واضح في الكمون الكيميائي $\Delta\mu = 2.03$ eV.
- طالما يقوم الجزيء A بهجوم إلكتروفيلي تجاه الجزيء B لذلك فسوف تنتقل الكثافة السبينية من A إلى B.

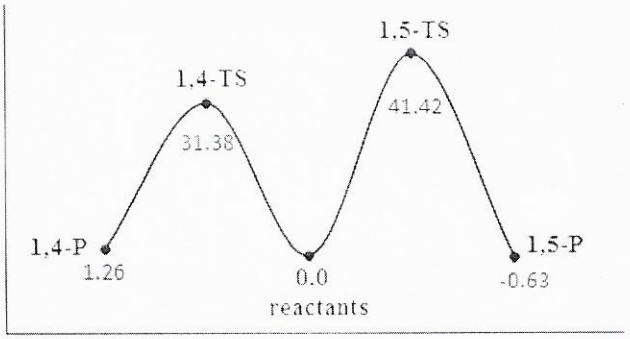
2. تحسب تغيرات طاقات جيبس الحرة للمكونات المطلوبة جميعها تبعا للعلاقة:

$$\Delta_r G = \sum_{\text{Products}} (E_0 + G_{\text{corr}}) - \sum_{\text{Reactants}} (E_0 + G_{\text{corr}})$$

نتائج الحسابات:

Data	A	B	1,4-P	1,5-P	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{\text{corr}}$ (Hartree)	-395.706	-556.696	-952.400	-952.403	-952.336	-952.352
$\Delta_f G^o$(kcal/mol)			1.26	-0.63	41.42	31.38

- نلاحظ من النتائج أن طاقة جيبس الحرة لتشكل الناتج 1.5-P (-0.63) أصغر من الصفر، في حين تكون هذه الطاقة بالنسبة إلى الناتج 1,4-P (1.26) أكبر من الصفر، لذلك يفضل التفاعل المسار 1,5 ترموديناميكياً.
- نلاحظ أيضا أن تشكل الناتج 1,5-P يصادف حاجز طاقة حرة (31.38) أقل مما يصادفه تشكل الناتج 1,4-P (41.42) لذلك يفضل المسار 1.5 حركياً ايضاً.



A to Z

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء للطلاب
السنة الرابعة /كيمياء / (الدورة الأولى)
للعام الدراسي 2022 – 2023

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: (الدرجة 20) اختار العبارة الصحيحة، وصحح الخاطئة:

a. تمثل العبارة $x1 = x0 - [(f(x))/f'(x)]$ العبارة الأساسية لحل معادلة من المرتبة الثانية أو أكثر بطريقة التكرار.

b. ويستخدم الأمر MINVERSE(D8:F10) = لتحديد مقلوب مصفوفة عناصرها تقع ضمن الخلايا D8:F10 في برنامج excel.

c. لإيجاد الحلول الخاصة (E_i) والمعاملات الخاصة (C_i) للهاملتون H الموافق لأي جزيء باستخدام برنامج MATHCAD نستخدم الأمرين evals(H) و eveces(H) على الترتيب.

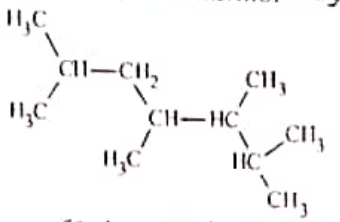
d. لحساب انثالبية التفاعل بالطرائق النظرية، نحدد البنية الهندسية لمكونات التفاعل باستخدام الأمر opt فقط في ملف الدخل (input) ثم نطبق العلاقة $\Delta_r H = \sum_{products}(E_0 + H^0) - \sum_{reactants}(E_0 + H^0)$.

e. لتحويل بنية هندسية 3D لجزيء الماء مثلاً (water) إلى ملف دخل كإحداثيات ديكارتية يتم حفظها باسم water.xyz كملف دخل.

السؤال الثاني: (الدرجة 20) اجب عن الأسئلة الآتية:

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة نيوتن-روفسون، باستخدام الأمر DATA 3,0001 من أجل x0 و e.

2. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنثالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$، $S = -20.89$، $T = -8.48$، و $Q = -0.48$ بواحدة kJ/mol. احسب إنثالبية تشكل الجزيء المبين أدناه:



3. احسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ ضمن المجال [0-1] بطريقة سيمبسون باستخدام المعطيات الآتية:

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x)$	−0.25	−0.138	0.166	0.614	1.158	1.75

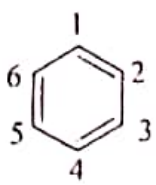
4. جرى تحليل محلول يضم أيونات الموليبدن Mo، والفناديوم V، والتيتانيوم Ti، وطلب تحديد تراكيز هذه الأيونات باستخدام مطيافية الامتصاص، وتم الحصول على المعطيات الآتية:

λ	Mo	Ti	V	محلول مجهول
330	10.4	3.25	0.00	0.284
410	1.20	15.2	3.70	0.857
460	0.05	10.25	5.10	0.718

صمم ثلاثة معادلات بثلاثة مجاهيل (Mo, Ti, V)، ثم وضح كيف يمكن حل هذه المعادلات بطريقة فصل غوص باستخدام برنامج Mathcad بأبسط طريقة.

السؤال الثالث: (الدرجة 15):

1. اشرح كيفية حل المعادلة $x^2 + 10x - 0.25 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD.
2. يتطلب تحديد القيم الخاصة والمعاملات الخاصة كتابة الهاملتون الموافق H بطريقة هيوكل، في حين يتطلب تحديد انثالبية تشكل الجزيء بطريقة فصل الروابط، ومعرفة معادلة فصل الروابط. اكتب **فقط** الهاملتون الموافق H لجزيء البنزن، ومعادلة فصل الروابط لجزيء نفسه بتطبيق قانون انحفاظ الكتلة والشحنة.



السؤال الرابع: (الدرجة 15):

1. عدد طرائق الكيمياء الحاسوبية، وعرف كل طريقة.
2. حدد طاقة جيبس الحرة لتشكل كل من 1,4-isomer و1,5-isomer، وللحالات الانتقالية لتفاعل تحلق الأزيد مع الألكن بواحدة kcal/mol، علما أن 1hartree = 627.5 kcal/mol. ناقش النتيجة موضحا بالرسم.

Data	Azide	Alkyne	1,4-isomer	1,5-isomer	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + H_{corr}$ (Hartree)	-395.61483	-347.46071	-743.16713	-743.16437	-743.02402	-743.02464
$\Delta_r G^0$(kcal/mol)	-	-	?	?	?	?

30/01/2023

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

أستاذ المقرر د. محمد عبد الحكيم بدوي

Scanned by CamScanner

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للدورة الفصلية الثانية للعام 2022

ب السؤال الأول (20 درجة): لكل شطر 4 درجات.

a. خطأ، الصحيح بطريقة نيوتن – رونسون.

b. صح.

c. خطأ، الصحيح نستخدم الأمرين eigenvecs و eigenvals.

d. خطأ، باستخدام الأمر opt + freq.

e. خطأ، يتم حفظها باسم water.mol.

جواب السؤال الثالث (20 درجة): لكل شطر 5 درجات.

1. البرنامج هو:

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 + 5 * x - 10
DEF fng (x) = 2 * x + 5
5 x1 = x0 - (fnf(x0)/fng(x0))
PRINT x1
IF (x1 - x0) < e THEN 25
X0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The root is:", x1
END
```

2. تحسب انتالبية تشكل المركب المطلوب بطريقة بيتسون تبعا للعلاقة الآتية:

$$\Delta_f H = 6P + S + 4T = -306.27 \text{ kj/mol}$$

3. يحسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ بطريقة سيمبسون تبعا للعلاقة الآتية:

$$\int_0^1 f(x)dx = \left(\frac{b-a}{3n}\right)\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

$$= \left(\frac{1-0}{3\times 6}\right)\left[-0.25 - 4\times 0.138 + 2\times 0.166 + 4\times 0.614 + 2\times 1.158 + 1.75\right]$$

$$= 0.366$$

4. تبعا لقانون بير – لامبرت يمكن تصميم ثلاث معادلات بثلاث مجاهيل تبعا للامتصاصية عند ثلاثة أطوال موجة حسب الجدول المعطى في نص المسألة :

$$\lambda = 330: \quad 10.4\,\text{Mo} + 3.25\,\text{Ti} + 0.00\,\text{V} = 0.284$$

$$\lambda = 410: \quad 1.20\,\text{Mo} + 15.2\,\text{Ti} + 3.70\,\text{V} = 0.857$$

$$\lambda = 460: \quad 0.05\,\text{Mo} + 10.25\,\text{Ti} + 5.10\,\text{V} = 0.857$$

ويمكن ايجاد المجاهيل (Mo,Ti,V) بحل جملة ثلاث معادلات تبعا لطريقة فصل غوص باستخدام برنامج Mathcad بتعريف مصفوفة أمثال المجاهيل ومصفوفة امثال المعاليم، أي:

$$A := \begin{pmatrix} 10.4 & 3.25 & 0.00 \\ 1.20 & 15.2 & 3.70 \\ 0.05 & 10.25 & 5.10 \end{pmatrix} \qquad b := \begin{pmatrix} 0.284 \\ 0.857 \\ 0.718 \end{pmatrix}$$

ثم نقوم بإجراء إحدى الطرائق للحصول على القيم العددية للمجاهيل:

a. $A^{-1}b = \begin{pmatrix} Mo \\ Ti \\ V \end{pmatrix}$ ، b. $\text{lsolve}(x,y,z) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ ، c. أو باستخدام الطريقة Given و Find(Mo,Ti,V).

Scanned by CamScanner

جواب السؤال الثالث (15 درجة):للشطر الأول 5 درجات، وللشطر الثاني 10 درجات.

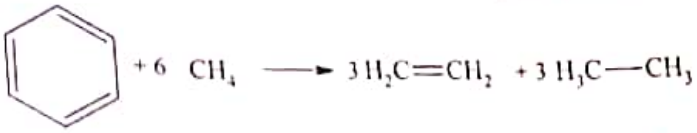
1. حل المعادلة $x^2 + 10x - 0.25 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD نكتب:

$$x^2 + 10x - 0.25 = 0 \text{ solve},(x) \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

2. يكتب الهاملتون الموافق **H** على النحو الآتي:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

أما معادلة فصل الروابط فتكتب على النحو الآتي:



جواب السؤال الرابع (15 درجة):للشطر الأول 5 درجات، وللشطر الثاني 10 درجات.

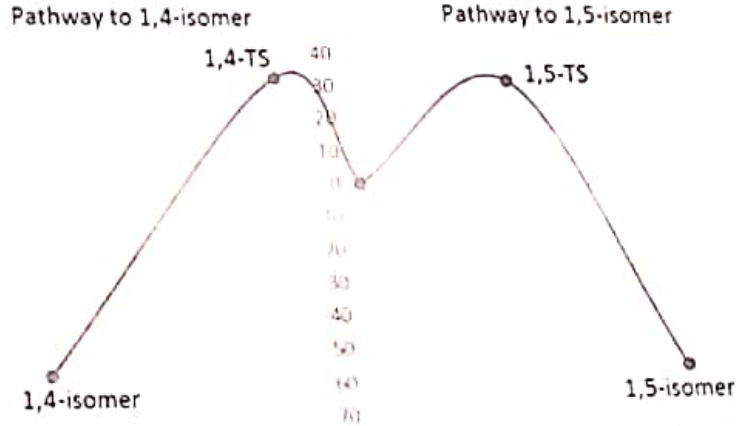
1. يوجد ثلاث طرائق للكيمياء الحاسوبية وهي:
   a. **الطرائق الاختبارية**: وهي طريقة حاسوبية لا تستند على أية نظرية، فمثلاً يمكن تفسير تغير ثابت السرعة بتغير درجة الحرارة تبعاً لمعادلة أرينوس، وهي معادلة رياضية وجدت بالصدفة لحل مسألة تغير ثابت السرعة بدرجة الحرارة.
   b. **الطرائق نصف اختبارية أو نصف تجريبية**: وهي طريقة تعتمد على المعطيات التجريبية التي يتم ربطها بمعادلات استنتجت على اساس نظري، لذلك تدعى بالطريقة نصف تجريبية.
   c. **الطرائق غير اختبارية**: وهي تلك الطرائق اساسها نظري بحت، ولا تعتمد على المعطيات، وهي أكثر الطرائق المستخدمة في الوقت الحالي، وتدعى بطرائق Ab initio، مثل DFT، MPn، وغيرها.
2. لتحديد طاقات جيبس للتفاعل وللحالات الانتقالية نستخدم العلاقة الآتية:

$$\Delta_r G = \sum_{products}(E_0 + G^0) - \sum_{reactants}(E_0 + G^0)$$

نتائج الحسابات مسجلة في الجدول الآتي:

Data	Azide	Alkyne	1,4-isomer	1,5-isomer	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{corr}$ (Hartree)	-395.61483	-347.46071	-743.16713	-743.16437	-743.02402	-743.02464
$\Delta_r G^0$(kcal/mol)	-	-	-57.47	-55.74	32.33	31.94

يمكن تمثيل النتائج بالمخطط الآتي:



نلاحظ من المخطط ومن المعطيات أن التفاعل يفضل مسار تشكل 1.4-isomer ترموديناميكياً، في حين يفضل مسار تشكل 1.5-isomer حركياً.

Scanned by CamScanner

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ الدورة الثانية
للعام الدراسي 2021 – 2022

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: (الدرجة 20) اختار العبارة الصحيحة، وصحح الخاطئة:

a. تمثل العبارة $x1 = x0 - [(f(x)/f'(x)]$ العبارة الأساسية لحل معادلة من المرتبة الثانية أو أكثر بطريقة التكرار.

b. يستخدم الأمر MINVERSE(D8:F10)= لتحديد مقلوب مصفوفة عناصرها تقع ضمن الخلايا D8:F10 في برنامج excel.

c. لإيجاد الحلول الخاصة (E_i) والمعاملات الخاصة (C_i) للهاملتون **H** الموافق لأي جزيء باستخدام برنامج MATHCAD نستخدم الأمرين evals(**H**) و cveces(**H**) على الترتيب.

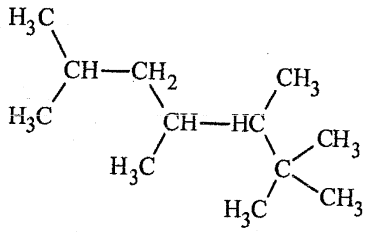
d. لحساب انتالبية التفاعل بالطرائق النظرية، نحدد البنية الهندسية لمكونات التفاعل باستخدام الأمر opt **فقط** في ملف الدخل (input) ثم نطبق العلاقة $\Delta_r H = \sum_{praducts}(E_0 + H^0) - \sum_{reactants}(E_0 + H^0)$.

e. لتحويل بنية هندسية 3D لجزيء الماء مثلاً (water) إلى ملف دخل كإحداثيات ديكارتية يتم حفظها باسم water.xyz كملف دخل.

السؤال الثاني : (الدرجة 20) اجب عن الأسئلة الآتية:

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة نيوتن-روفسون، باستخدام الأمر DATA 3,0001 من أجل x0 وe.

2. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$، و $S = -20.89$، $T = -8.48$، $Q = -0.48$ بواحدة kJ/mol. احسب إنتالبية تشكل الجزيء المبين أدناه:



3. احسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ ضمن المجال [0-1] بطريقة سيمبسون باستخدام المعطيات الآتية:

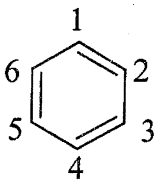
x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x)$	−0.25	−0.138	0.166	0.614	1.158	1.75

4. جرى تحليل محلول يضم أيونات الموليبدن Mo، والفناديوم V، والتيتانيوم Ti، وطلب تحديد تراكيز هذه الأيونات باستخدام مطيافية الامتصاص، وتم الحصول على المعطيات الآتية:

λ	Mo	Ti	V	محلول مجهول
330	10.4	3.25	0.00	0.284
410	1.20	15.2	3.70	0.857
460	0.05	10.25	5.10	0.718

صمم ثلاثة معادلات بثلاثة مجاهيل (Mo, Ti, V)، ثم وضح كيف يمكن حل هذه المعادلات بطريقة فصل غوص باستخدام برنامج Mathcad بأبسط وسيلة.

السؤال الثالث: (الدرجة 15):



1. اشرح كيفية حل المعادلة $x^2 + 10\,x - 0.25 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD.
2. يتطلب تحديد القيم الخاصة والمعاملات الخاصة كتابة الهاملتون الموافق **H** بطريقة هيوكل، في حين يتطلب تحديد انتالبية تشكل الجزيء بطريقة فصل الروابط معرفة معادلة فصل الروابط. اكتب **فقط** الهاملتون الموافق **H** لجزيء البنزن، ومعادلة فصل الروابط لجزيء نفسه بتطبيق قانون انحفاظ الكتلة والشحنة.

السؤال الرابع: (الدرجة 15):

1. عدد طرائق الكيمياء الحاسوبية، وعرف كل طريقة.
2. حدد طاقة جيبس الحرة لتشكل كل من 1,4-isomer و1,5-isomer، وللحالات الانتقالية لتفاعل تحلق الأزيد مع الألكن بواحدة kcal/mol، علما أن 1hartree = 627.5 kcal/mol. ناقش النتيجة موضحا بالرسم.

Data	Azide	Alkyne	1,4-isomer	1,5-isomer	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + H_{corr}$ (Hartree)	-395.61483	-347.46071	-743.16713	-743.16437	-743.02402	-743.02464
$\Delta_r G^o$(kcal/mol)	-	-	?	?	?	?

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

أستاذ المقرر د. محمد عبد الحكيم بدوي

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للدورة الفصلية الثانية للعام ٢٠٢٢

جواب السؤال الأول (20 درجة): لكل شطر ٤ درجات.

a. خطأ، الصحيح بطريقة نيوتن – روفسون.

b. صح.

c. خطأ، الصحيح نستخدم الأمرين **eigenvecs** و**eigenvals**.

d. خطأ، باستخدام الأمر **opt + freq**.

e. خطأ، يتم حفظها باسم **water.mol**.

جواب السؤال الثاني (20 درجة): لكل شطر 5 درجات.

١. البرنامج هو:

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 + 5 * x – 10
DEF fng (x) = 2 * x + 5
5 x1 = x0 – (fnf(x0)/fng(x0))
PRINT x1
IF (x1 – x0) < e THEN 25
X0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The root is:", x1
END
```

٢. تحسب انتالبية تشكل المركب المطلوب بطريقة بينسون تبعا للعلاقة الآتية:

$$\Delta_f H = 7P + S + 3T + Q = -340.18\ \text{kj/mol}$$

٣. يحسب تكامل العلاقة $f(x) = x^3 + 3x^2 - 0.25$ بطريقة سيمبسون تبعا للعلاقة الآتية:

$$\int_0^1 f(x)dx = \left(\frac{b-a}{3n}\right)\left[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\cdots+4f(x_{n-1})+f(x_n)\right]$$

$$= \left(\frac{1-0}{3\times 6}\right)\left[-0.25-4\times 0.138+2\times 0.166+4\times 0.614+2\times 1.158+1.75\right]$$

$$= 108.9$$

٤. **تبعا لقانون بير – لامبرت** يمكن تصميم ثلاث معادلات بثلاث مجاهيل تبعا للامتصاصية عند ثلاثة أطوال موجة **حسب الجدول المعطى في نص المسالة** :

$$\lambda = 330: \quad 10.4\,\text{Mo} + 3.25\,\text{Ti} + 0.00\,\text{V} = 0.284$$

$$\lambda = 410: \quad 1.20\,\text{Mo} + 15.2\,\text{Ti} + 3.70\,\text{V} = 0.857$$

$$\lambda = 460: \quad 0.05\,\text{Mo} + 10.25\,\text{Ti} + 5.10\,\text{V} = 0.857$$

ويمكن ايجاد المجاهيل (Mo,Ti,V) بحل جملة ثلاث معادلات تبعا لطريقة فصل غوص باستخدام برنامج Mathcad **بتعريف مصفوفة** أمثال المجاهيل ومصفوفة امثال المعاليم، أي:

$$A := \begin{pmatrix} 10.4 & 3.25 & 0.00 \\ 1.20 & 15.2 & 3.70 \\ 0.05 & 10.25 & 5.10 \end{pmatrix} \qquad b := \begin{pmatrix} 0.284 \\ 0.857 \\ 0.718 \end{pmatrix}$$

ثم نقوم بإجراء إحدى الطرائق للحصول على القيم العددية للمجاهيل:

a. $A^{-1}b = \begin{pmatrix} Mo \\ Ti \\ V \end{pmatrix}$ ، **b.** $\text{lsolve}(x,y,z) = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ ، **c.** أو باستخدام الطريقة Given و Find(Mo,Ti,V).

جواب السؤال الثالث (15 درجة):للشطر الأول 5 درجات، وللشطر الثاني 10 درجات.

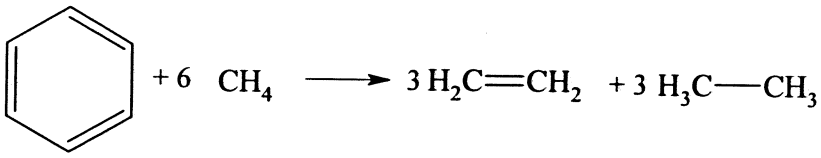
١. حل المعادلة $x^2 + 10x - 0.25 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD نكتب:

$$x^2 + 10x - 0.25 = 0 \ \text{solve},(x) \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

٢. يكتب الهاملتون الموافق **H** على النحو الآتي:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

أما معادلة فصل الروابط فتكتب على النحو الآتي:



جواب السؤال الرابع (15 درجة):للشطر الأول 5 درجات، وللشطر الثاني 10 درجات.

١. يوجد ثلاث طرائق للكيمياء الحاسوبية وهي:

a. **الطرائق الاختبارية**: وهي طريقة حاسوبية لا تستند على أية نظرية، فمثلاً يمكن تفسير تغير ثابت السرعة بتغير درجة الحرارة تبعا لمعادلة أرينوس، وهي معادلة رياضية وجدت بالصدفة لحل مسألة تغير ثابت السرعة بدرجة الحرارة.

b. **الطرائق نصف اختبارية أو نصف تجريبية**: وهي طريقة تعتمد على المعطيات التجريبية التي يتم ربطها بمعادلات استنتجت على اساس نظري، لذلك تدعى بالطريقة نصف تجريبية.

c. **الطرائق غير اختبارية**: وهي تلك الطرائق اساسها نظري بحت، ولا تعتمد على المعطيات، وهي أكثر الطرائق المستخدمة في الوقت الحالي، وتدعى بطرائق Ab initio، مثل DFT، MPn، وغيرها.

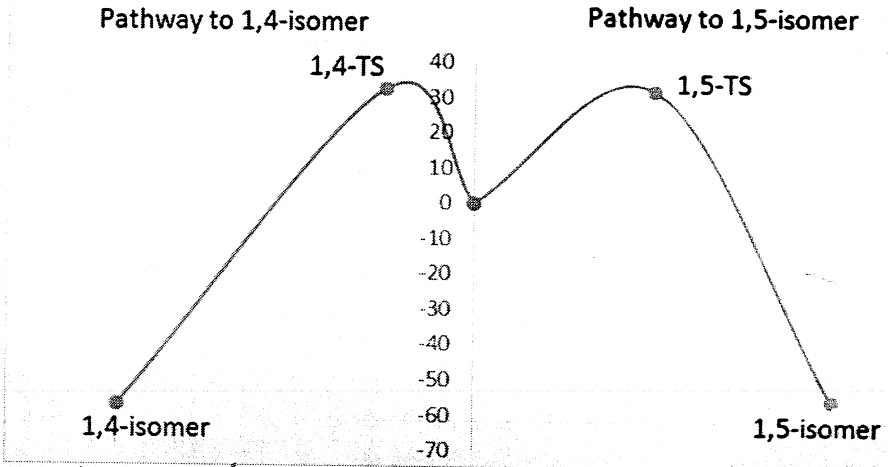
٢. لتحديد طاقات جيبس للتفاعل وللحالات الانتقالية نستخدم العلاقة الآتية:

$$\Delta_r G = \sum_{\text{praducts}} (E_0 + G^0) - \sum_{\text{reactants}} (E_0 + G^0)$$

نتائج الحسابات مسجلة في الجدول الآتي:

Data	Azide	Alkyne	1,4-isomer	1,5-isomer	1,4-TS	1,5-TS
$E^0 + G_{corr}$ (Hartree)	-395.61483	-347.46071	-743.16713	-743.16437	-743.02402	-743.02464
$\Delta_r G^o$(kcal/mol)	-	-	-57.47	-55.74	32.33	31.94

يمكن تمثيل النتائج بالمخطط الآتي:



نلاحظ من المخطط ومن المعطيات أن التفاعل يفضل مسار تشكل 1,4-isomer ترموديناميكياً، في حين يفضل مسار تشكل 1,5-isomer حركيا.

جامعة طرطوس — أسئلة امتحان مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة / الكيمياء/ الدورة الأولى للعام الدراسي 2021 – 2022 — الاسم:
كلية العلوم — المدة: ساعتان
قسم الكيمياء — الدرجة: 70

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 20):

1. لتحويل مقلوب مصفوفة في برنامج Excel نحدد مثلاً معين الخلايا (B6:D11)، ثم نحدد معين آخر مع إجراء الأمر:
(a) INVERSE(B6:D11) (b) MINVERSE(B6:D11) (c) MMULT(B6:D11) (d) الخيارات غير صحيحة

2. لإيجاد اختزال مصفوفة **A** في برنامج MATHCAD نستخدم الأمر:
(a) rref(**A**)= (b) augment(**A**)= (c) stack(**A**)= (d) الخيارات غير صحيحة

3. لإيجاد الحلول الخاصة والمعاملات الخاصة للهاملتون **H** الموافق لجذر الأليل C – C = C باستخدام برنامج MATHCAD نستخدم الأمرين على الترتيب:
(a) nveces(**H**)= و nvals(**H**)= (b) find(**H**): و nvals(**H**) (c) eigenveces(**H**)= و eigenvals(**H**)= (d) الخيارات غير صحيحة

4. لحساب إنتالبية التفاعل بالطرائق النظرية بعد الحصول على البنية الهندسية للمواد المتفاعلة وخواصها الترموديناميكية القياسية نستخدم الأمر الآتي:
(a) $\Delta_r H = \sum_{praducts} E_0 - \sum_{reactants} E_0$ ، (b) $\Delta_r H = \sum_{praducts} H^0 - \sum_{reactants} H^0$ ،
(c) $\Delta_r H = \sum_{praducts} (E_0 - H^0) - \sum_{reactants} (E_0 - H^0)$ (d) الخيارات غير صحيحة.

5. لتحديد الخواص الترموديناميكية للجزيء، بعد رسمه بصورة أولية، يتم تصميم ملف إدخال (input) بكتابة الأمر:
(a) opt (b) opt + freq (c) freq (d) الخيارات غير صحيحة.

تنبيه: يحصل الطالب على علامة الصفر في حال اختياره الخيار نفسه للعبارات الأربع.

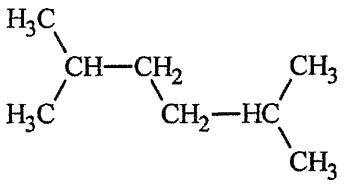
السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 20):

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة التكرار مع الأمر IF وGOTO.

2. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $x^3 + x^2 - 10x + 2 = 0$ بطريقة نيوتن:

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	-4.0000				
2					
3					
4					

3. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$ ، و $S = -20.89$ ، $T = -8.48$ ، $Q = -0.48$. احسب إنتالبية تشكل الجزيء:



4. استخدم علاقة سيمبسون لتكامل العلاقة $f(x) = 100 - x^2$ ضمن المجال [2-0] باستخدام المعطيات الآتية؛ إذ إن n = 4:

x	0	0.5	1	1.5	2
$f(x)$	100	99.75	99	97.75	96

السؤال الثالث: (الدرجة 21)

1. اشرح كيفية حل جملة المعادلات الآتية باستخدام الأمرين Given و Find في برنامج MATHCAD:
$$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5 \quad , \quad x + y = 2.75$$

2. اشرح كيفية حل المعادلة $x^3 - 10x + 2 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD.

3. عند دراسة الاحتراق الجزئي للإيتان تم التعرف على المكون الجزيئية الآتية:
$$\{O_2, CH_4, C_2H_6, H_2O, CH_3OH, CH_2O\}\{C, O, H\}$$
اكتب المصفوفة الجزيئية، ثم استنتج المعادلات المستقلة خطياً، وآلية التفاعل مستخدماً المصفوفة المختزلة N^*.

$$N^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

السؤال الرابع: (الدرجة 9):

ما الغاية من البرامج الآتية، وبأية طريقة حسابية كتبت؟

يتبع ←

Program (1):

```
CLS
DEF fna (x) =  x ^ 2 – 10 x + 2
PRINT "input limits a, and b, and the number of iterations desired n"
INPUT a, b, n
d = (b - a) / n
FOR x = a + d TO b STEP 2 * d
sum = sum + 4 * fna(x) + 2 * fna(x - d): NEXT x
PRINT : PRINT : PRINT "RUSULTS": PRINT
PRINT : PRINT "the interval is"; a; "to"; b; " "
PRINT : PRINT "the number of iteration is ="; n; " "
a = d / 3 * (fna(a) + sum - fna(b))
PRINT : PRINT "yields", a : END
```

Program (2):

```
CLS
READ x0, y0, e
DATA 3,4,.001
DEF fnf (x, y) = SQR(x * y + 7)
DEF fng (x, y) = SQR(2 * y + x)
10 x1 = fnf(x0, y0)
20 y1 = fng(x0, y0)
PRINT x1, y1
IF ABS(x1 - x0) < e AND ABS(y1 - y0) < e THEN 25
x0 = x1
y0 = y1: GOTO 10
25 PRINT "x1="; x1
PRINT "y1="; y1
END
```

Program (3):

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 4 * SIN(x)
DEF fng (x) = 2 * x - 4 * COS(x)
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

مكتبة A to Z

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر البرمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة
الدورة التكميلية للعام الدراسي 2020 – 2021

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 20):

1. لتحويل مقلوب مصفوفة في برنامج Excel نحدد مثلاً معين الخلايا (B6:D11)، ثم نحدد معين آخر مع إجراء الأمر:
(a) INVERSE(B6:D11) (b) MINVERSE(B6:D11) (c) MMULT(B6:D11) (d) الخيارات غير صحيحة

2. لإيجاد اختزال مصفوفة **A** في برنامج MATHCAD نستخدم الأمر:
(a) rref(A)= (b) augment(A)= (c) stack(A)= (d) الخيارات غير صحيحة

3. لحساب طاقة جيبس الحرة للتفاعل بالطرائق النظرية بعد الحصول على البنية الهندسية للمواد المتفاعلة وخواصها الترموديناميكية القياسية نستخدم الأمر الآتي:

(a) $\Delta_r G = \sum_{praducts} E_0 - \sum_{reactants} E_0$، (b) $\Delta_r G = \sum_{praducts} G^0 - \sum_{reactants} G^0$،

(c) $\Delta_r G = \sum_{praducts} (E_0 - G^0) - \sum_{reactants} (E_0 - G^0)$ (d) الخيارات غير صحيحة.

4. لحل المعادلتين $2x + y = 4$ و $x + 3y = 7$ باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بإجراء ما يأتي:

(a) $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ $b = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix}$ $lsolve(A,b) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

(b) $A := \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ $b := \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix}$ $lsolve(A,b) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

(c) $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix}$ $find(x,y) =$

d) كل ما سبق غير صحيح

السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 35):

1. عرف ما يلي مع كتابة العلاقات الضرورية: الانحراف المعياري أو القياسي، معامل الارتباط، الانحراف المعياري أو القياسي لميل خط مستقيم يمر من المبدأ، الكيمياء الحاسوبية، الطرائق الحاسوبية غير الاختبارية (Ab initio).

2. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2 - 56x + 252 = 0$ بطريقة نيوتن – روفسون.

3. اشرح طريقة المربعات الصغرى للإيجاد ميل مستقيم مار من المبدأ $y_i = mx_i$ مع استنتاج عبارة m.

4. استخدم علاقة سيمبسون لتكامل العلاقة $f(x) = 100 - x^2$ ضمن المجال [0-2] باستخدام المعطيات الآتية:

x	0	0.5	1	1.5	2
$f(x)$	100	99.75	99	97.75	96

5. اشرح كيفية حل المعادلة $x^3 - 10x + 2 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD.

السؤال الثالث: (الدرجة 10)

تم معالجة محلول مجهول يحتوي على أيونات من Mo، وTi، وV مع بيروكسيد الهيدروجين، ثم حدد معامل الامتصاص لكل أيون عند أطوال الموجة الموافقة لكل منها. وحددت امتصاصية العينة المجهولة عند كل طول موجة، ويمثل الجدول الآتي نتائج القياسات:

امتصاصية العينة المجهولة		λ	Mo	Ti	V
330	0.284	330	10.4	3.25	0.00
410	0.857	410	1.20	15.20	3.70
460	0.718	460	0.05	10.25	5.10

قم بتأويل هذه النتائج بمعادلات رياضية ملائمة بدلالة ثلاثة مجاهيل (ولتكن M، وT، وV)، ثم اشرح كيف يمكن حل هذه المعادلات للحصول على تركيز كل أيون في المحلول المجهول باستخدام برنامج Excel.

السؤال الرابع: (الدرجة 5): ما الغاية من البرنامج الآتي، وبأية طريقة كتب؟

```
CLS
DEF fnf (t) = 100 - t ^ 2
INPUT "low level of integral"; a
INPUT "high level of integral"; b
INPUT "No. of sub-integral"; n
h = (b - a) / n
s = 0
x = a
FOR i = 1 TO n - 1
x = x + h
s = s + fnf(x)
NEXT i
  t = h * (fnf(a) / 2 + s + fnf(b) / 2)
PRINT " Integration ="; t
END
```

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

د. محمد عبد الحكيم بدوي

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للدورة التكميلية للعام الدراسي 2021

جواب السؤال الأول (20): لكل شطر 5 درجات.

1. **(b)** 2. **(a)** rref(A)، MINVERSE(B6:D11) 3. **(d)** الخيارات غير صحيحة،

4. **(b)** $A:=\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 3\end{pmatrix}$ $b:=\begin{pmatrix}4\\ 7\end{pmatrix}$ $\text{lsolve}(A,b)=\begin{pmatrix}1\\ 2\end{pmatrix}$

جواب السؤال الثاني (20): لكل شطر 5 درجات.

1. التعاريف:

- الانحراف المعياري: يعرف الانحراف المعياري بالعلاقة الآتية:

$$S=\frac{\sum(\hat{y}_i-y_i)^2}{n-m}$$

حيث تمثل n عدد المعطيات التجريبية، وm عدد المجاهيل المطلوب تحديدها.

- معامل الارتباط R^2: يعرف بالعلاقة الآتية:

$$R^2=1-\frac{SSE}{SST}$$

حيث يمثل SSE مجموع مربع الأخطاء، و SST المجموع الكلي لمربع الانحرافات عن القيم المتوسطة. فإذا تطابقت المعطيات التجريبية مع القيم المؤولة، أي إذا كان SSE = SST، فإن $R^2 = 1$.

- الكيمياء الحاسوبية: تمثل فرعاً من فروع الكيمياء الذي يستخدم المحاكاة الحاسوبية للمساعدة في حل المشاكل الكيميائية، وكذلك الطرائق الكيمياء النظرية المدمجة في برامج حاسوبية لحساب بنى الجزيئات والمواد الصلبة وخواصها الفيزيائية والكيميائية.
- الطرائق غير اختبارية (Ab initio): وهي طرائق حاسوبية تعتمد بالكامل على الميكانيك الكم، والثوابت الفيزيائية الأساسية.

2. البرنامج هو:

```
CLS
READ x0, e
DATA 0.1,0.001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 10 * x + 5
DEF fng (x) = 2 * x - 10
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

3. استنتاج عبارة الميل m لمعادلة مستقيم يمر من المبدأ $y_i = mx_i$

نكتب أولا معادلة المستقيم بالشكل الآتي: $mx - y_i = 0$ ، ولكن قد تبرز المعطيات الحقيقية خطأ، وليكن d_i، وبالتالي فإن:

$$mx_i - y_i = d_i$$

وتبعاً لطريقة المربعات الصغرى نشتق مجموع مربع الخطأ الأخيرة بالنسبة إلى m ونجعل المشتق مساويا الصفر:

$$\frac{d}{dm}\sum_{i=1}^{n}d_i^2=\frac{d}{dm}(mx_i-y_i)^2=0\Rightarrow m=\frac{\sum_{i=1}^{m}x_iy_i}{\sum_{i=1}^{m}x_i^2}$$

4. يمكن تحديد تكامل العلاقة $f(x) = 100 - x^2$ ضمن المجال [0-2] بالعلاقة الآتية:

$$\int_0^2 f(x)dx=\left(\frac{b-a}{3n}\right)\left[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)\right]$$

$$=\left(\frac{2-0}{3\times4}\right)\left[100+4\times99.75+2\times99+4\times97.75+96\right]=197.83$$

5. يمكن حل المعادلة $x^3-10x+2=0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD كما يلي:

$$0 = x^3 - 10.x + 2 \ \text{solve(x)} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

جواب السؤال الثالث (10):

يمكن تأويل النتائج عند كل طول موجة على النحو الآتي على النحو الآتي:

$$10.4\text{Mo} + 3.25\text{Ti} + 0.0\text{V} = 0.284$$

$$1.20\text{Mo} + 15.20\text{Ti} + 3.70\text{V} = 0.857$$

$$0.05\text{Mo} + 10.25\text{Ti} + 5.10\text{V} = 0.718$$

ثم نختار خلايا في برنامج Excel تتضمن أمثال المجاهيل Mo، وTi، وV، أي نختار تسع خلايا تمثل المصفوفة A:

	A	B	C
1	10.4	3.25	0.0
2	1.20	15.20	3.7
3	0.05	10.25	5.10

ثم نختار العدد نفسه من الخلايا لتحديد مقلوب المصفوفة A^{-1} ثم نكتب في الخلية الأولى الأمر =MINVERSE((A1:C3)، ثم نعلم الخلايا التسع، وننقر على F2، ونضغط في الوقت نفسه الأزرار Ctrl+Shift+Enter، فتظهر الأرقام التي تمثل مقلوب المصفوفة.

	A	B	C
4	=MINVERSE((A1:C3)		
5			
6			

بعد ذلك نختار ثلاث خلايا في عمود واحد تمثل الامتصاصية b:

	A
7	0.284
8	0.857
9	0.718

بعد ذلك نختار عمود آخر يمثل الحل، أي يمثل $A^{-1}b$، ونكتب في أول خلية الأمر =MMULT(A4:C6,A7:A9)، ثم نعلم الخلايا الثلاث، وننقر على F2، ونضغط في الوقت نفسه الأزرار Ctrl+Shift+Enter، فتظهر الأرقام التي تمثل الحل.

	A
10	=MMULT(A4:C6,A7:A9)
11	
12	

السؤال الرابع: (الدرجة 5):

إن الغاية من هذا البرنامج هو تحديد قيمة تكامل العلاقة $f(t) = 100 - t^2$ ضمن مجال محدد (a,b)، وكتب حسب طريقة سيمبسون.

جامعة	أسئلة امتحان مقرر البرمجة الكيميائية لطلاب السنة	الاسم:
كلية العلوم	الرابعة/ كيمياء / الدورة الأولى	المدة: ساعتان
قسم الكيمياء	للعام الدراسي 2021 – 2022	الدرجة: 100

مكتبة A to Z

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 30):

1. لتحويل مقلوب مصفوفة في برنامج Excel نحدد مثلاً معين الخلايا (B6:D11)، ثم نحدد معين آخر مع إجراء الأمر:
(a) INVERSE(B6:D11) (b) MINVERSE(B6:D11) (c) MMULT(B6:D11) (d) الخيارات غير صحيحة

2. لإيجاد اختزال مصفوفة **A** في برنامج MATHCAD نستخدم الأمر:
(a) rref(**A**)= (b) augment(**A**)= (c) stack(**A**)= (d) الخيارات غير صحيحة

3. لإيجاد الحلول الخاصة والمعاملات الخاصة للهاملتون **H** الموافق لجذر الأليل C – C = C باستخدام برنامج MATHCAD نستخدم الأمرين على الترتيب:
(a) nveces(**H**)= و nvals(**H**)= (b) find(**H**): و nvals(**H**) (c) eigenveces(**H**)= و eigenvals(**H**)=
(d) الخيارات غير صحيحة

4. لحساب إنتالبية التفاعل بالطرائق النظرية بعد الحصول على البنية الهندسية للمواد المتفاعلة وخواصها الترموديناميكية القياسية نستخدم الأمر الآتي:
(a) $\Delta_r H = \sum_{praducts} E_0 - \sum_{reactants} E_0$، (b) $\Delta_r H = \sum_{praducts} H^0 - \sum_{reactants} H^0$،
(c) $\Delta_r H = \sum_{praducts}(E_0 - H^0) - \sum_{reactants}(E_0 - H^0)$ (d) الخيارات غير صحيحة.

5. لتحديد الخواص الترموديناميكية للجزيء، بعد رسمه بصورة أولية، يتم تصميم ملف إدخال (input) بكتابة الأمر:
(a) opt (b) opt + freq (c) freq (d) الخيارات غير صحيحة.

تنبيه: يحصل الطالب على علامة الصفر في حال اختياره الخيار نفسه للعبارات الخمسة.

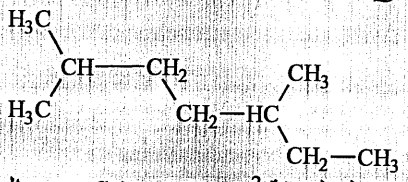
السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 40):

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة التكرار، باستخدام الأمر DATA 3,0001 من أجل x0 وe.

2. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $x^3 + x^2 - 10x + 2 = 0$ بطريقة نيوتن:

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	-4.0000				
2					
3					
4					

3. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$، و $S = -20.89$، $T = -8.48$، $Q = -0.48$ بواحدة kJ/mol. احسب إنتالبية تشكل الجزيء:



4. اكتب علاقة سيمبسون التكاملية ثم احسب تكامل العلاقة $f(x) = 100 - x^2$ ضمن المجال [0-2] باستخدام المعطيات الآتية:

x	0	0.5	1	1.5	2
$f(x)$	100	99.75	99	97.75	96

السؤال الثالث: (الدرجة 15):

1. اشرح كيفية حل جملة المعادلات باستخدام الأمرين Given و Find في برنامج MATHCAD.
$$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5 \quad و \quad x + y = 2.75$$

2. اشرح كيفية حل جملة المعادلات $x^3 - 10x + 2 = 0$ باستخدام الأمر solve في برنامج MATHCAD.

3. عند دراسة الاحتراق الجزئي للإيثان تم التعرف على المكون الجزيئية الآتية:
$$\{O_2, CH_4, C_2H_6, H_2O, CH_3OH, CH_2O\}\{C,O,H\}$$
$$N^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
اكتب المصفوفة الجزيئية، ثم استنتج المعادلات المستقلة خطياً، وآلية التفاعل مستخدماً المصفوفة المختزلة N^*.

يتبع ←

السؤال الرابع: (الدرجة 15):

ما الغاية من البرامج الآتية، وبأية طريقة حسابية كتبت؟

Program (1):

```
CLS
DEF fna (x) =  x ^ 2 – 10 x + 2
PRINT "input limits a, and b, and the number of iterations desired n"
INPUT a, b, n
d = (b - a) / n
FOR x = a + d TO b STEP 2 * d
sum = sum + 4 * fna(x) + 2 * fna(x - d): NEXT x
PRINT : PRINT : PRINT "RUSULTS": PRINT
PRINT : PRINT "the interval is"; a; "to"; b; " "
PRINT : PRINT "the number of iteration is ="; n; " "
a = d / 3 * (fna(a) + sum - fna(b))
PRINT : PRINT "yields", a : END
```

Program (2):

```
CLS
READ x0, y0, e
DATA 3,4,.001
DEF fnf (x, y) = SQR(x * y + 7)
DEF fng (x, y) = SQR(2 * y + x)
10 x1 = fnf(x0, y0)
20 y1 = fng(x0, y0)
PRINT x1, y1
IF ABS(x1 - x0) < e AND ABS(y1 - y0) < e THEN 25
x0 = x1
y0 = y1: GOTO 10
25 PRINT "x1="; x1
PRINT "y1="; y1
END
```

Program (3):

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 4 * SIN(x)
DEF fng (x) = 2 * x - 4 * COS(x)
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

2022/02/15 نتمنى لكم التوفيق والنجاح

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

A to z مكتبة

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة للفصل الأول للعام الدراسي 2022

جواب السؤال الأول: (الدرجة 20):

1. (c) **2.** (a) **3.** (c) **4.** (d) **5.** (b)

جواب السؤال الثاني:(الدرجة 20): لكل شطر 5 درجات

1. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 + 5 * x - 10
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

2. تعتمد طريقة نيوتن روفسون على العلاقة الآتية $x_i = x_0 - [f(x)/g(x)]$ ؛ إذ يمثل $g(x)$ مشتق التابع المعطى، وبذلك فإن:

iteration	x_0	f(x)	g(x)	x_i	error%
1	-4.0000	-6.0000	30.0000	-3.8000	-5.2632
2	-3.8000	-0.4320	25.7200	-3.7832	-0.4440
3	-3.7832	-0.0029	25.3715	-3.7831	-0.0031
4	-3.7831	0.0000	25.3691	-3.7831	0.0000

3. تحسب انتالبية التشكل تبعا لمساهمة كل مجموعة في البنية من العلاقة الآتية:

$$\Delta H = 4P + 2S + 2T = -226.4\ \text{kJ/mol}$$

4. تكتب علاقة سيمبسون على النحو الآتي:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{3n}\left(f(x_0) + 4\left(f(x_1) + 2\left(f(x_2) + \cdots + 4\left(f(x_1) + \left(f(x_n\right)\right)\right)\right)\right)$$

$$\int_0^2 f(x)dx = \frac{2}{3\times 4}100 + 4\times 99.75 + 2\times 99 + \cdots + 4\times 97.75 + 96 = 197.9$$

جواب السؤال الثالث: (الدرجة 21):

1. باستخدام الأمرين Given و Find:

intial Gauss

$x := 1 \quad y := 1$

Given

$x + y = 2.75$

$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$

$$\text{Find(x,y)} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

2. باستخدام الأمر solve:

$$0 = x^3 - 10x + 2\text{solve,(x)} \rightarrow = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

مكتبة A to Z

3. تكتب المصفوفة الجزيئية على النحو الآتي: $\{O_2, CH_4, C_2H_6, H_2O, CH_3OH, CH_2O\}\{C,O,H\}$

$$N=\begin{pmatrix}0&1&2&0&1&1\\2&0&0&1&1&1\\0&4&6&2&4&2\end{pmatrix}$$

وتستنتج المعادلات المستقلة خطياً وآلية التفاعل على النحو الآتي:

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\0&1&0&2&1&-1\\0&0&1&-1&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R_1\\R_2\\R_3\\R_4\\R_5\\R_6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}R_1\\R_2\\R_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\\-2&-1&1\\1&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R_4\\R_5\\R_6\end{pmatrix}$$

$$R_1=-\tfrac{1}{2}R_4-\tfrac{1}{2}R_5-\tfrac{1}{2}R_6$$
$$R_2=-2R_4-R_5+R_6$$
$$R_3=R_4-R_6$$

آلية التفاعل:

$$\tfrac{1}{2}O_2+2CH_4-C_2H_6=H_2O\Rightarrow\tfrac{1}{2}O_2+2CH_4\rightleftharpoons H_2O+C_2H_6$$
$$\tfrac{1}{2}O_2+CH_4=CH_3OH\ \text{ or }\ \tfrac{1}{2}O_2+CH_4\rightleftharpoons CH_3OH$$
$$\tfrac{1}{2}O_2-CH_4+C_2H_6=CH_2O\Rightarrow\tfrac{1}{2}O_2+C_2H_6\rightleftharpoons CH_2O+CH_4$$

جواب السؤال الرابع: (الدرجة 9):

البرنامج (1): الغاية منه إيجاد تكامل العلاقة 2 + 10 x – 2 x ^ ضمن المجال [a,b] بطريقة سيمبسون.

البرنامج (2): الغاية منه إيجاد قيمتي x وy لجعل قيمة المعادلتين SQR(x * y + 7) وSQR(2 * y + x) مساوية الصفر بطريقة التكرار.

البرنامج (3): الغاية منه إيجاد الحل الموجب للمعادلتين x ^ 2 - 4 * SIN(x) = 0 وx = 2 * x - 4 * COS(x) بطريقة التكرار.

مكتبة A to Z

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر بالبرمجة في الكيمياء
لطلاب السنة الرابعة الدورة الثانية
للعام الدراسي 2020 – 2021

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول:(الدرجة 16):

وضح ما الغاية من استخدام الأوامر الآتية موضحا اسم البرنامج الذي يضم كل أمر من هذه الأوامر:

(a) =MMULT(A,b)، **(b)** =SQR(A1)، **(c)** =A_1*B1، **(d)** =MMUL(A:b)، =C1*C2/C3، **(e)** =Polyroots(V)، **(f)** =eigenveces(H)، **(g)** =Find(x,y)، **(h)** =rref(A).

السؤال الثاني:(الدرجة 24):

1. اكتب بلغة QB لحل المعادلة $x^2 - 10x + 5 = 0$ بطريقة التكرار باستخدام الأمرين DATA وRED مستخدما قيمة أولية لـ x_0 (ولتكن 0.1)، وقيمة الخطأ e (وليكن 0.001).
2. وجد الباحث بينسون مسألة تحديد انتتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة اسهام المجموعات CH_n (أي المجموعات P، وS، وT، وQ). فإذا علمت أن $\Delta_f H\,(\text{ethane}) = -83.81$ ، و $\Delta_f H\,(\text{propane}) = -104.7$ ، و $\Delta_f H\,(\text{propane}) = -104.7$ ، و $\Delta_f H\,(\text{propane}) = -104.7$. وضح كيف يمكن تحديد مساهمة كل مجموعة بكتابة اربع معادلات بأربع مجاهيل، ووضح الحل حسب طريقة فصل خوص باستخدام الأمرين Given و Find.
3. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $3x^2 + 2x - 10 = 0$ بطريقة نيوتن مبيناً العلاقة الأساسية لهذه الطريقة:

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	0.000				
2					
3					
4					

4. عند تحديد البنية الهندسية للماء والخواص الطاقة باستخدام برنامج GAUSSIAN، اكتب الأوامر التي تتضمن تحديد كل من: عدد المعالجات، حجم الذاكرة، سطر الأوامر الذي يتضمن تحديد البنية والتواترات، الشحنة وتعدد السوية الإلكترونية على الترتيب، علما أن الاحداثيات الديكارتية لجزيء الماء هي:

O	2.27283760	0.55260362	-0.06597560
H	3.23283760	0.55260362	-0.06597560
H	1.95238301	1.45753946	-0.06597560

وأن السوية النظرية المستخدمة هي B3LYB/6-31g(d).

السؤال الثالث:(الدرجة 30):

1. عرف الكيمياء الحاسوبية، وعدد الطرائق التي يستند عليها هذا العلم موضحا كل طريقة. كيف يمكن تحويل الجزيء المرسوم بوساطة البرنامج ChemSketch إلى ملف دخل (input).
2. درست آلية تفاعل ديلز – ألدر بين الفوران وحمض المالينيك بإحدى طرائق DFT، وتم الحصول على النتائج الآتية بواحدة hartree:

	FURAN	MALEIC	EXO	ENDO
E_0	-229.922578	-379.143393	-609.095228	-609.091776
G^0	0.045585	0.028414	0.100504	0.100456
	P1(EXO)	P2(ENDO)	TS1(EXO)	TS2(ENDO)
ΔG	؟	؟	؟	؟

انقل الجدول على دفتر الإجابة، ثم اكمل الجدول بحساب ΔG لتفاعل تشكل الناتجين P1 وP2، وكذلك للحالتين الانتقاليتين T1 وT2 بواحدة kcal/mol، علما أن 1 hartree = 627 kcal/mol. وضح النتائج برسم تغير طاقة جيبس الحرة بدلالة احداثية التفاعل بدءاً من المواد المتفاعلة كنقطة صفر. وناقش النتائج ترموديناميكياً وحركياً.

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

مدرس المقرر
د. محمد عبد الحكيم بدوي

مكتبة A to Z

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للدورة الثانية للعام الدراسي 2021

السؤال الأول:(الدرجة 16): لكل شطر درجتين

(a) لإيجاد الحل بطريقة فصل غوص أي لإيجاد المقدار $X=A^{-1}b$.

(b) لإيجاد الجذر التربيعي للعدد المسجل في الخلية A_1؛ أي $\sqrt{A_1}$.

(c) لإيجاد جداء عددين مسجلين في الخليتين A1 وB1؛ أي $A1\times B1$. أما الأمر MMUL(A:b)= فهو يكافئ الأمر (a).

(d) لإيجاد ناتج جداء عددين مسجلين في الخليتين C1 وC2 مقسوم على العدد المسجل في الخلية C3؛ أي $(C1\times C2)\div C3$.

(e) لحل معادلة كثيرة الحدود من المراتب الأعلى، مثل المرتبة الثالثة أو الرابعة أو الخامسة.

(f) لإيجاد معاملات التركيب الخطي للمدارات الجزيئية حسب طريقة هيوكل.

(g) لإيجاد حل جملة معادلتين بمجهولين باستخدام الأمر Given وFind في برنامج Mathcad.

(h) لإيجاد اختزال مصفوفة.

السؤال الثاني:(الدرجة 24):

1. البرنامج هو:

```
CLS
READ x0, e
DATA 0.1,0.001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 10 * x + 5
DEF fng (x) = 2 * x - 10
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

2. نحدد اسهام كل مجموعة في الجزيئات التي انتاليات تشكلها معلومة، فنحصل على أربعة معادلات بأربعة مجاهيل، ثم تحل هذه المعادلات الأربعة باستخدام الأمر Give بإعطاء قيم أولية لكل مجموعة، ثم كتابة المعادلات الأربعة، ثم نكتب الأمر Find(P,S,T,Q) لإيجاد المجاهيل الاربعة.

3. العلاقة الأساسية المستخدمة في طريقة نيوتن هي $x1 = x0-[f(x)/g(x)]$، حيث $f(x)=3x^2+2x-10$، و $g(x)=6x+2$.

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	0.000	-10.000	2.000	5.000	100.00%
2	5.000	75.000	32.000	2.656	88.24%
3	2.656	16.479	17.938	1.738	52.87%
4	1.738	2.532	12.425	1.534	13.29%

4. إن الأوامر تكتب كما يلي على الترتيب:

```
%mem=12GB                       حجم الذاكرة
%nprocshared=8                  عدد المعالجات
# opt freq m062X/6-31+g(d)      الأوامر والطريقة المستخدمة

H2O                    الجزيء المدروس

0 1          الشحنة (0) وتعدد السوية الإلكترونية (1)
O              2.27283760    0.55260362    -0.06597560
H              3.23283760    0.55260362    -0.06597560
H              1.95238301    1.45753946    -0.06597560
```

السؤال الثالث:(الدرجة 30):

1. تمثل الكيمياء الحاسوبية فرعاً من فروع الكيمياء الذي يستخدم المحاكاة الحاسوبية للمساعدة في حل المشاكل الكيميائية، وكذلك الطرائق الكيمياء النظرية المدمجة في برامج حاسوبية الفعالة لحساب بنى الجزيئات والمواد الصلبة وخواصها الفيزيائية والكيميائية، ومن الأمثلة على هذه الخواص نذكر الطاقات المطلقة والنسبية (من أجل التفاعل الكيميائية)،

مكتبة A to Z

وتوزع كثافة الشحنة الإلكترونية، وثنائيات الأقطاب، والتواترات الاهتزازية ، والفعالية الكيميائية، والكميات الطيفية الأخرى ، وغيرها.

تصنف طرائق الكيمياء الحاسوبية إلى ثلاثة طرائق:

- الطرائق الاختبارية: وهي طرائق اختبرت بالتجربة، ولا تستند على أية أسس نظرية. فمثلاً يمكن استخدام علاقة أرينوس التي توضح تغير ثابت السرعة بدرجة الحرارة أو تغير اللزوجة بدرجة الحرارة.
- الطرائق نصف اختبارية: وهي طرائق تستند على أسس نظرية، ولكنها تستخدم معاملات تجريبية إضافية، لذلك سميت بالطرائق نصف اختبارية، وتعد هذه الطرائق من الطرائق التقريبية. من هذه الطرائق نذكر AM1، PM3، وPM6، ويمكن استخدامها من أجل الجمل الكيميائية الكبيرة نسبياً.
- الطرائق غير اختبارية: يشار في المراجع والأبحاث إلى هذه الطرائق بالجملة Ab initio (تعني باللاتيني نقطة البدء)، وهي تعتمد بالكامل على الميكانيك الكم، والثوابت الفيزيائية الأساسية، وتعد من الطرائق عالية الدقة، وعادة ما يكون استخدامها ممكناً للجمل الصغيرة فقط. من هذه الطرائق نذكر طرائق تابعية الكثافة الإلكترونية DFT، وطرائق الاضطراب MPn.

يمكن تحويل الجزيء إلى ملف input برسم الجزيء أولا على البرنامج المذكور، ثم تحويلها على شكل ثلاثي الأبعاد، ثم حفظ باسم بامتداد mol. فنحصل على ملف الدخل الذي يتضمن الاحداثيات الديكارتية لذرات الجزيء.

2. لاستكمال الحسابات يجب إضافة سطر يتضمن المقدار $E_0 + G_0$، ثم نطبق العلاقة الآتية:

$$\Delta G = \sum_{\text{Praducts}} (E_0 + G_0) - \sum_{\text{Reactants}} (E_0 + G_0)$$

من أجل كل مركب (النواتج أو الحالات الانتقالية)، فمثلا من أجل تشكل المركب EXO نجد أن:

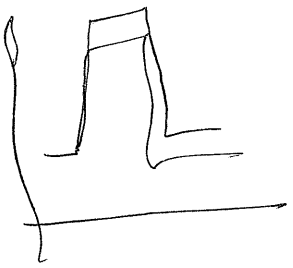
$$\Delta G(\text{EXO}) = -\sum_{\text{Praducts}} (-608.99472) - \sum_{\text{Reactants}} (-229.87699 - 379.114979)$$

$$= -0.0028 \text{ hartree}$$

$$= -0.0028 \times 627 = -1.6980 \text{ kcal/mol}$$

	FURAN	MALEIC	EXO	ENDO
E_0	-229.922578	-379.143393	-609.095228	-609.091776
G^0	0.045585	0.028414	0.100504	0.100456
$E_0 + G_0$	-229.87699	-379.114979	-608.99472	-608.99132
	P1(EXO)	P2(ENDO)	TS1(EXO)	TS2(ENDO)
ΔG(kcal)	-1.6980	0.4023	؟	؟

وبصورة مشابهة نحسب للمركب ENDO وللحالتين الانتقاليتين. نلاحظ من طاقة جيبس الحرة أن التفاعل يفضل تشكل المركب exo لأن $\Delta G < 0$، في حين يعد تشكل endo غير تلقائي، هذا من الناحية الترموديناميكية، أما من الناحية الحركية، فهذا يتعلق حسب قيمة ΔG للحالتين الانتقاليتين، فالقيمة الأقل هي المفضلة حركياً.



مكتبة آفاق

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر البرمجيات لطلاب السنة
الرابعة / كيمياء / الدورة الأولى
للعام الدراسي 2020 – 2021

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 15):

١. إذا كان رقم ما في الخلية A1 في ورقة excel، وطلب ضربه بالرقم في الخلية A2 و A3 بحيث يكون الرقم A1 ثابتاً نكتب:
(a) =$A$1*A2 و=$A$1*A3، (b) =$A$1×A2 و=$A$1×A3، (c) =$A$1.A2 و=$A$1.A3، (d) كل ما سبق غير صحيح.

٢. يحسب ميل مستقيم الذي يعبر من المبدأ و النقاط المثلى تبعاً لطريقة المربعات الصغرى بالعلاقة الآتية:
(a) $m=(y_2-y_1)/(x_2-x_1)$، (b) $m=\sum_{i=1}^{n} x_i y_i / \sum_{i=1}^{n} x_i^2$، (c) slop(x,y)، (d) الخيارات غير صحيحة.

٣. لإيجاد حلول المعادلة $f(x)=x^3-10.x+2$ باستخدام الأمر polyroots في برنامج MATCAD نكتب:
(a) $V:=\begin{pmatrix}2\\-10\\1\end{pmatrix}$ solve(V)=، (b) $V:=\begin{pmatrix}2\\-10\\1\end{pmatrix}$ polyroots(V)=، (c) $V:=\begin{pmatrix}2\\-10\\0\\1\end{pmatrix}$ polyroots(V)=، (d) الخيارات غير صحيحة.

٤. لتحديد الانحراف المعياري لمجموعة معطيات في بر نامج MATCAD نكتب:
(a) Stderr(x,V)=، (b) corr(x,V)، (c) SD(x,V):=، (d) كل ما سبق غير صحيح.

٥. تحسب إنتالبية التفاعل تبعاً لمعطيات برنامج GAUSSIAN بالعلاقة الآتية:
(a) $\Delta_r H=\sum_{products} H^0+\sum_{reactants} H^0$ (b) $\Delta_r H=\sum_{products}(E_0+H^0)+\sum_{reactants}(E_0+H^0)$
(c) $\Delta_r H=\sum_{products} E_0+\sum_{reactants} E_0$ (d) كل ما سبق غير صحيح.

تنبيه: يحصل الطالب على علامة الصفر في حال اختياره الخيار نفسه للعبارات الأربع.

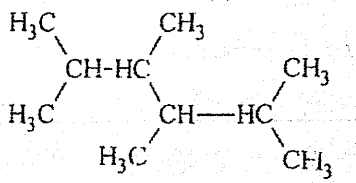
السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 24):

١. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2+5x-10=0$ بطريقة التكرار مع الأمر IF و GOTO.

٢. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $x^2-10x+2=0$ بطريقة نيوتن – روفسون (اكتب اربع ارقام بعد الفاصلة في كل خلية):

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi
1	0.0000			
2				
3				
4				

٣. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P=-41.91$، و $S=-20.89$، $T=-8.48$، $Q=-0.48$. احسب إنتالبية تشكل الجزيء:



٤. استخدم علاقة سيمبسون لتكامل العلاقة $f(x)=100-x^2$ ضمن المجال [2-0] باستخدام المعطيات الآتية، إذ إن n = 4:

x	0	0.5	1	1.5	2
$f(x)$	100	99.75	99	97.75	96

السؤال الثالث: (الدرجة 16)

١. اشرح كيفية حل جملة المعادلات الآتية باستخدام الأمرين Given و Find في برنامج MATHCAD:

$$1.5x^2+2y^2=6.5 \quad , \quad x+y=2.75$$

٢. عند دراسة الاحتراق الجزئي للإيتان تم التعرف على المكون الجزيئية الآتية:

$$\{O_2, CH_4, C_2H_6, H_2O, CH_3OH, CH_2O\}\{C,O,H\}$$

اكتب المصفوفة الجزيئية، ثم استنتج المعادلات المستقلة خطياً، وآلية التفاعل مستخدماً المصفوفة المختزلة N^*.

$$N^*=\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\0&1&0&2&1&-1\\0&0&1&-1&0&1\end{pmatrix}$$

يتبع

السؤال الرابع: (الدرجة 15):

ما الغاية من البرامج الآتية، وبأية طريقة حسابية كتبت؟

Program (1):

```
CLS
DEF fna (x) =  x ^ 2 – 10 x + 2
PRINT "input limits a, and b, and the number of iterations desired n"
INPUT a, b, n
d = (b - a) / n
FOR x = a + d TO b STEP 2 * d
sum = sum + 4 * fna(x) + 2 * fna(x - d): NEXT x
PRINT : PRINT : PRINT "RUSULTS": PRINT
PRINT : PRINT "the interval is"; a; "to"; b; " "
PRINT : PRINT "the number of iteration is ="; n; " "
a = d / 3 * (fna(a) + sum - fna(b))
PRINT : PRINT "yields", a : END
```

Program (2):

```
CLS
READ x0, y0, e
DATA 3,4,.001
DEF fnf (x, y) = SQR(x * y + 7)
DEF fng (x, y) = SQR(2 * y + x)
10 x1 = fnf(x0, y0)
20 y1 = fng(x0, y0)
PRINT x1, y1
IF ABS(x1 - x0) < e AND ABS(y1 - y0) < e THEN 25
x0 = x1
y0 = y1: GOTO 10
25 PRINT "x1="; x1
PRINT "y1="; y1
END
```

Program (3):

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 4 * SIN(x)
DEF fng (x) = 2 * x - 4 * COS(x)
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

مركز تصوير كلية العلوم

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الثانية من مقررات الفصل الثاني الدورة
الفصلية الأولى للعام الدراسي 2020 – 2021

جواب السؤال الأول (15 درجة): لكل خيار 3 درجات

الخيارات الصحيحة: 1. (d) 2. (b) 3. (c) 4. (a) 5. (b)

جواب السؤال الثاني (24 درجة): لكل جزء 6 درجات:

1. يمكن كتابة البرنامج على النحو الآتي:

```
CLS
READ x0, y0, e
DATA 3,4,.001
DEF fnf (x) = x ^ 2 + 5 * x – 10
10 x1 = fnf(x0)
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1
GOTO 10
25 PRINT "x1="; x1
END
```

2. العلاقة الأساسية المستخدمة هي $x_i = x_0 - [f(x)/g(x)]$

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi
1	0.0000	2.0000	-10.0000	0.2000
2	0.2000	0.0400	-9.6000	0.2042
3	0.2042	0.0000	-9.5917	0.2042
4	0.2042	0.0000	-9.5917	0.2042

3. وفقاً لقاعدة بينسون نجد أن:

$$\Delta_f H^0 = 6P + 4T = -(6\times 41.9 + 4\times 8.48) = -285.3 \text{ kJ/mol}$$

4. نطبق قاعدة سيمبسون:

$$\int f(x)dx = \frac{b-a}{3n}\left[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)\right]$$

$$= \frac{2}{3\times 4}\left[100+4\times 99.75+2\times 99+4\times 97.75+96\right] = 197.3$$

جواب السؤال الثالث (16 درجة): للجزء الأول 6 وللجزء الثاني 10:

1. يتم حل المعادلتين باستخدام الأمرين Given وFind على النحو الآتي:

Initial Gauss

$x := 1 \quad y := 1$

Given

$1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$

$x + y = 2.75$

$\text{Find}(x, y) = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$

2. تكتب المصفوفة الجزيئية على النحو الآتي:

$$N_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & 6 & 2 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

يمكن استنتاج المعادلات المستقلة خطياً على النحو الآتي:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{O_2} \\ R_{CH_4} \\ R_{C_2H_6} \\ R_{H_2O} \\ R_{CH_3OH} \\ R_{CH_2O} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{O_2} \\ R_{CH_4} \\ R_{C_2H_6} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 2 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{H_2O} \\ R_{CH_3OH} \\ R_{CH_2O} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} R_{O_2} \\ R_{CH_4} \\ R_{C_2H_6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -2 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{H_2O} \\ R_{CH_3OH} \\ R_{CH_2O} \end{pmatrix}$$

وبالتالي فإن:

$$R_{O_2} = -\tfrac{1}{2}R_{H_2O} - \tfrac{1}{2}R_{CH_3OH} - \tfrac{1}{2}R_{CH_2O}$$
$$R_{CH_4} = -2R_{H_2O} - R_{CH_3OH} + R_{CH_2O}$$
$$R_{C_2H_6} = R_{H_2O} - R_{CH_2O} = 22 - 19$$

أما آلية التفاعل فهي:

$$\tfrac{1}{2}O_2 + 2CH_4 - C_2H_6 = H_2O \quad \Rightarrow \quad \tfrac{1}{2}O_2 + 2CH_4 \rightarrow C_2H_6 + H_2O$$
$$\tfrac{1}{2}O_2 + C_2H_6 = CH_3OH \quad \Rightarrow \quad \tfrac{1}{2}O_2 + C_2H_6 \rightarrow CH_3OH$$
$$\tfrac{1}{2}O_2 - CH_4 + C_2H_6 = CH_2O \quad \Rightarrow \quad \tfrac{1}{2}O_2 + C_2H_6 \rightarrow CH_2O + CH_4$$

جواب السؤال الرابع (15 درجة): لكل جزء 5 درجات

1. إن الغاية من البرنامج الأول هو إيجاد التكامل العددي للمعادلة $x^2 - 10x + 2$ بطريقة سيمبسون.
2. أما الغاية من البرنامج الثاني فهو إيجاد مجهولي المعادلتين $\sqrt{xy + 7} = 0$ و $\sqrt{2y + x} = 0$ بطريقة التكرار.
3. في حين أن الغاية من البرنامج الأخير هو إيجاد حل للمعادلة $x^2 - 4\sin(x) = 0$ بطريقة نيوتن – روفسون.

د. محمد عبد الحكيم بدوي

مركز تصوير كلية العلوم

جامعة طرطوس
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة حيوية لطلاب السنة الثالثة /شعبة الكيمياء الحيوية/ الدورة الثانية
للعام الدراسي 2019 – 2020

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 70

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 15).

١. يحسب ميل مستقيم الذي يعبر من المبدأ والنقاط المثلى تبعاً لطريقة المربعات الصغرى بالعلاقة الآتية:

(a) $m = (y_2 - y_1)/(x_2 - x_1)$ ، (b) $m = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i / \sum_{i=1}^{n} x_i^2$ ، (c) slop(x,y) = ، (d) الخيارات غير صحيحة.

٢. لإيجاد الحلول الخاصة والمعاملات الخاصة للهاملتون **H** الموافق لجذر الأليل C – C = C باستخدام برنامج MATHCAD نستخدم الأمرين على الترتيب:

(a) nveces(**H**)= و nvecs(**H**)= (b) find(**H**): و nvals(**H**) (c) eigenveces(**H**)= و eigenvals(**H**)=

٣. لإيجاد حلول المعادلة $f(x) = x^3 - 10.x + 2$ باستخدام الأمر polyroots في برنامج MATCAD نكتب:

(a) $v := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 1 \end{pmatrix}$ solve(v) = (b) $v := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 1 \end{pmatrix}$ polyroots(V) = (c) $v := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ polyroots(V) = ، (d) الخيارات غير صحيحة.

٤. لإيجاد اختزال مصفوفة A في برنامج MATHCAD نستخدم الأمر:

(a) rref(A)= (b) augment(A)= (c) stack(A)= (d) الخيارات غير صحيحة

٥. تحسب إنتالبية التفاعل تبعاً لمعطيات برنامج GAUSSIAN بالعلاقة الآتية:

(a) $\Delta_r H = \sum_{products} H^0 + \sum_{reactants} H^0$ (b) $\Delta_r H = \sum_{products} (E_0 + H^0) + \sum_{reactants} (E_0 + H^0)$

(c) $\Delta_r H = \sum_{products} E_0 + \sum_{reactants} E_0$ (d) كل ما سبق غير صحيح.

تنبيه: يحصل الطالب على علامة الصفر في حال اختياره الخيار نفسه للعبارات الأربع.

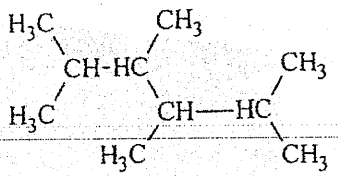
السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 28):

١. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $x^2 + 5x - 10 = 0$ بطريقة التكرار مع الأمر IF وGOTO.

٢. أكمل الجدول الآتي لحل المعادلة $x^3 + x^2 - 10x + 2 = 0$ بطريقة نيوتن:

iteration	x0	f(x)	g(x)	xi	error%
1	-4.0000				
2					
3					
4					

٣. عالج الباحث بينسون مشكلة تحديد إنتالبية تشكل الجزيء على أساس معرفة إسهام CH_n، ووجد أن $P = -41.91$ ، و $S = -20.89$ ، $T = -8.48$ ، $Q = -0.48$. احسب إنتالبية تشكل الجزيء:



٤. استخدم علاقة سيمبسون لتكامل العلاقة $f(x) = 100 - x^2$ ضمن المجال [0-2] باستخدام المعطيات الآتية؛ إذ إن n = 4:

x	0	0.5	1	1.5	2
$f(x)$	100	99.75	99	97.75	96

السؤال الثالث: (الدرجة 12):

١. اشرح كيفية حل جملة المعادلات الآتية باستخدام الأمرين Given و Find في برنامج MATHCAD:

$$x + y = 2.75 \quad ; \quad 1.5x^2 + 2y^2 = 6.5$$

٢. عند دراسة الاحتراق الجزئي للإيتان تم التعرف على المكون الجزيئية الآتية:

$$\{O_2, CH_4, C_2H_6, H_2O, CH_3OH, CH_2O\}\{C,O,H\}$$

اكتب المصفوفة الجزيئية، ثم استنتج المعادلات المستقلة خطياً، وآلية التفاعل مستخدماً المصفوفة المختزلة N^*.

$$N^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

يتبع ←

السؤال الرابع: (الدرجة 15)

ما الغاية من البرامج الآتية، وبأية طريقة حسابية كتبت؟

Program (1):

```
CLS
DEF fna (x) =  x ^ 2 – 10 x + 2
PRINT "input limits a, and b, and the number of iterations desired n"
INPUT a, b, n
d = (b - a) / n
FOR x = a + d TO b STEP 2 * d
sum = sum + 4 * fna(x) + 2 * fna(x - d): NEXT x
PRINT : PRINT : PRINT "RUSULTS": PRINT
PRINT : PRINT "the interval is"; a; "to"; b; " "
PRINT : PRINT "the number of iteration is ="; n; " "
a = d / 3 * (fna(a) + sum - fna(b))
PRINT : PRINT "yields", a : END
```

Program (2):

```
CLS
READ x0, y0, e
DATA 3,4,.001
DEF fnf (x, y) = SQR(x * y + 7)
DEF fng (x, y) = SQR(2 * y + x)
10 x1 = fnf(x0, y0)
20 y1 = fng(x0, y0)
PRINT x1, y1
IF ABS(x1 - x0) < e AND ABS(y1 - y0) < e THEN 25
x0 = x1
y0 = y1: GOTO 10
25 PRINT "x1="; x1
PRINT "y1="; y1
END
```

Program (3):

```
CLS
READ x0, e
DATA 3,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 4 * SIN(x)
DEF fng (x) = 2 * x - 4 * COS(x)
5  x1 = x0 - (fnf(x0) / fng(x0))
PRINT x1
IF ABS(x1 - x0) < e THEN 25
x0 = x1: GOTO 5
25 PRINT "The  root is:", x1
END
```

مركز تصوير كلية العلوم

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

٢٠٢٠/٠٩/٣

مدرس المقرر

د. محمد عبد الحكيم بدوي

سلم تصحيح مقرر البرمجة في الكيمياء لطلاب السنة الرابعة /كيمياء/ للعام الدراسي 2019-2020 (الدورة الثانية)

جواب السؤال الأول (الدرجة 15): لكل خيار 3 درجات:

1. (b) $m = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i / \sum_{i=1}^{n} x_i^2$ .2 (c) eigenveces(**H**)= و eigenvals(**H**)=.

3. (c) $V := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ polyroots(V) = .4 (a) rref(**A**)=.

5. (b) $\Delta_r H = \sum_{\text{prod.}} (E_0 + H^0) + \sum_{\text{react.}} (E_0 + H^0)$

جواب السؤال الثاني (الدرجة 28): لكل شطر 7 درجات:

1. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

```
PRINT "program iteration"
x = 0
5 x = x + 0.1
a = x^2 +5 * x – 10
IF a > 0 GOTO 5
PRINT a, x
END
```

2. يجب أولا تعريف الدلائل في الجدول:

$f(x) = x^3 + x^2 - 10x + 2$

$g(x) = 3x^2 + 2x - 10$

$x_1 = x_0 - [f(x)/g(x)]$

$error\% = \left| \frac{x_1 - x_0}{x_1} \right| \%$

iteration	x0	f(x)	g(x)	x1	error%
1	-4.000	-6.000	30.000	-3.800	-5.0%
2	-3.800	-0.432	25.720	-3.783	-0.4%
3	-3.783	-0.003	25.371	-3.783	0.0%
4	-3.783	0.000	25.369	-3.783	0.0%

3. إن هذا الجزيء يحقق العلاقة الآتية:

$$6P + 4T = 6 \times (-41.91) + 4 \times (-8.48) = -285.36 \text{ kJ/mol}$$

4. تبعاً للمعطيات نجد أن:

$$\int_0^2 100 - x^2 = \frac{b-a}{3n}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)]$$

$$= \frac{2}{3 \times 4}(100 + 4 \times 99.75 + 2 \times 99.00 + 4 \times 97.75 + 96) = 197.3$$

جواب السؤال الثالث (الدرجة 12): للشطر الأول 5 درجات وللشطر الثاني 7 درجات:

1. الخطوات هي:

```
Initial gauss
x:=1   y:=1
Given
x + y = 2.75
1.5x^2 + 2y^2 = 6.5
findv(x,y) = ( x )
             ( y )
```

مركز تصوير العلوم

2. تكتب المصفوفة الجزيئية على النحو الآتي:

$$N=\begin{pmatrix}0&1&2&0&1&1\\2&0&0&1&1&1\\0&4&6&2&4&2\end{pmatrix}$$

لتحديد المعادلات المستقلة خطياً نطبق العلاقة الآتية:

$$\sum N_j^* R_j=\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\0&1&0&2&1&-1\\0&0&1&-1&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R_1\\R_2\\R_3\\R_4\\R_5\\R_6\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}R_1\\R_2\\R_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\\-2&-1&1\\1&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R_4\\R_5\\R_6\end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}&R_1=-\tfrac{1}{2}R_4-\tfrac{1}{2}R_5-\tfrac{1}{2}R_6\\\Rightarrow\ &R_2=-2R_4-R_5+R_6\\&R_3=R_4-R_6\end{aligned}$$

وتكتب الآلية حسب المصفوفة المختزلة على النحو الآتي:

$$\tfrac{1}{2}O_2+2CH_4-C_2H_6=H_2O\Rightarrow\boxed{\tfrac{1}{2}O_2+2CH_4\rightleftharpoons H_2O+C_2H_6}$$

$$\boxed{\tfrac{1}{2}O_2+CH_4\rightleftharpoons CH_3OH}$$

$$\tfrac{1}{2}O_2-CH_4+C_2H_6=CH_2O\Rightarrow\boxed{\tfrac{1}{2}O_2+C_2H_6\rightleftharpoons CH_2O+CH_4}$$

جواب السؤال الرابع (الدرجة 15): لكل شطر 5 درجات:

- إن الغاية من البرنامج الأول تحديد القيمة العددية لتكامل العلاقة $x^2-10x+2$ ضمن المجال [a,b]، وكتب بطريقة سيمبسون.
- أما الغاية من البرنامج الثاني إيجاد الحلول للمعادلتين:

$$\sqrt{xy+7}=0$$

$$\sqrt{2y+x}=0$$

وكتب بطريقة التكرار.

- أما الغاية من البرنامج الثالث تحديد جذر المعادلة $x^2-4\sin(x)=0$، وكتب البرنامج بطريقة نيوتن – روفسون.

جامعة تشرين
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة حيوية لطلاب السنة الثالثة /شعبة الكيمياء الحيوية/ الدورة الأولى
للعام الدراسي 2017 - 2018

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 100

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 25):

1. يمكن حساب الجذر التربيعي للرقم 7.5 باستخدام برنامج Excel بكتابتها على النحو الآتي:
(a) =SQRT(7.5) (b) $=\sqrt{7.5}$ (c) =SQRTPI(7.5) (d) كل ما سبق غير صحيح.

2. يمكن حساب المعادلة $x^2 + 2x + 1$ عند أية قيمة لـ x باستخدام برنامج Excel بكتابتها على النحو الآتي:
(a) x^2 + 2*x + 2 (b) =x^2 + 2*x +2 (c) $=x^2+2x+1$ (d) كل ما سبق غير صحيح.

3. يعطى الخطأ في تحدد ميل مستقيم لا يمر بالمبدأ بالعلاقة الآتية:
(a) $S_m = \sqrt{d_{22}S^2}$ (b) $S_m = \sqrt{d_{11}S^2}$ (c) $S_m = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$ (d) كل ما سبق غير صحيح.

4. لإيجاد الحلول الخاصة والمعاملات الخاصة للهاملتون الموافق لجزيء جذر الأليل $C_1 = C_2 - C_3$ باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بالإجراء الآتي:
(a) $H := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ (b) $H := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{pmatrix}$ (c) $H := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ (d) كل ما سبق غير صحيح.

5. للحصول على طاقة البنية الهندسية المثلى لأي جزيء باستخدام البرنامج GaussView، بعد رسمه، نختار الأوامر الآتية:
(a) freq (b) opt (c) energy (d) كل ما سبق غير صحيح

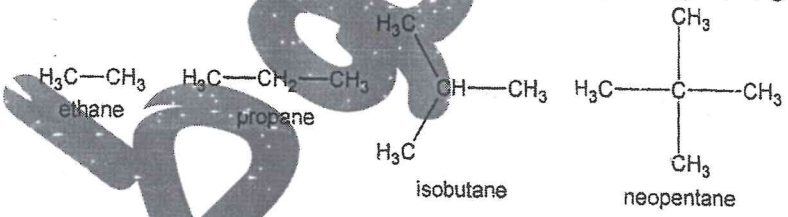
ملاحظة: إذا اختار الطالب الخيار نفسه لجميع الأسئلة، فعلامة السؤال الصفر.

السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 40):

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $y^2 - 56y + 252$ بطريقة نيوتن - رافسون.
2. وضح كيف يمكن حل المعادلات الثلاثة $3x - 2y - z = 12$ و $x + 3y + 3z = 6$ و $2x - y - 4z = 0$ باستخدام الأمر Find(x,y,z) في برنامج MATHCAD.
3. ما الخطوات اللازمة لتحويل شكل الجزيء المرسوم بالبرنامج Chemckech إلى ملف input امتداده mol*.
4. صنف الطرائق النظرية المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية، وبين أهمية هذه الطرائق.

السؤال الثالث: (الدرجة 18)

عالج الباحث بينسون مسألة تحديد انتالبية تشكل الجزيئات على أساس معرفة إسهام المجموعة CH_n برمز مجموعة الكربون الأولية بالحرف P، والثانوية بالحرف S، والثالثية بالرمز T، والرباعية بالرمز Q، أكتب المعادلات الأربعة بدلالة P، وS، وT، وQ استناداً إلى انتاليبات المركبات الأربعة الآتية:



$\Delta_f H^{298}(\text{ethane}) = -83.81$، $\Delta_f H^{298}(\text{propane}) = -104.7$ و $\Delta_f H^{298}(\text{isobutane}) = -134.2$، و $\Delta_f H^{298}(\text{neopentane}) = -168.1$. وضح كيف يمكن إيجاد هذه المجاهيل باستخدام برنامج MATHCAD.

السؤال الرابع: (الدرجة 17): ما الغاية من هذا البرنامج، ووضح كل سطر فيه.

```
DEF fnf (t) = 100 - t ^ 2
INPUT "low level of integral"; a
INPUT "high level of integral"; b
INPUT "No. of sub-integral"; n
h = (b - a) / n
s = 0
x = a
FOR i = 1 TO n - 1
x = x + h
s = s + fnf(x)
NEXT i
  t = h * (fnf(a) / 2 + s + fnf(b) / 2)
PRINT " Integration ="; t
END
```

سلم تصحيح مقرر البرمجة الحيوية لطلاب السنة الثالثة /كيمياء حيوية/ للفصل الأول للعام الدراسي 2018

جواب السؤال الأول: (الدرجة 25):

(a) .1 (b) .2 (a) .3 (c) .4 (c) .5

جواب السؤال الثاني:(الدرجة 40):

I. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

```
PRINT   QNEW_2
CLS
READ x0, e
DATA 4,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 56 * x + 252
DEF fng (x) = 2 * x - 56
5 x1 = x0-(fnf(x0)/fng(x0))
PRINT x1
IF (x1 - x0) < e THEN 25
X0 = x1: GOTO 5
25 PRINT    "The root is:", x1
END
```

2. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

Guess values:

x:=2 y:=1

Given

$x+3y+3z=6$

$3x-2y-z=12$

$2x-y-4z=0$

$\begin{pmatrix} xval \\ yval \\ zval \end{pmatrix} := Find(x,y,z)$ xval= yval= zval=

3. نرسم الجزيء، ثم ننتقل إلى optimize، ثم إلى 3D Viewer، وبعد ذلك save as، ننتقل إلى MDL molfile، ونختار أي اسم، ونكون بذلك قد قمنا بتحويل شكل الجزيء إلى ملف يحتوي على إحداثيات ذرات الجزيء بالنسبة إلى مركز ثقله.

4. تصنف طرائق الكيمياء الحاسوبية إلى ثلاث طرائق، وهي:

a) طرائق اختبارية: وهو طرائق لا تستند على أية نظرية، وتستعمل علاقات رياضية يمكننا من خلالها تفسير أية ظاهرة كيميائية أو فيزيائية.

b) طرائق نصف اختبارية: وهي طرائق نظرية تعتمد على افتراض أن بعض التكاملات التي من الصعب تقديرها أو تحديدها، يمكن أن تساوي إلى قيمة تجريبية أو تمثلك معنى فيزيائي لقيمة تجريبية، وبذلك تعد مثل هذه الطرائق نصفها نظري والنصف الآخر تجريبي.

c) طرائق غير اختبارية: وهي طرائق نظرية بحتة، وتعد من أهم طرائق الكيمياء الحاسوبية

وتكمن أهمية هذه الطرائق في ما يأتي:

1. في تحديد البنى الهندسية للجزيء، وخواصه الفيزيائية، مثل عزم ثنائي القطب، ثوابت الدوران، والطيفية، مثل IR، ورامان، والامتصاص، والفلورة.

2. دراسة الدوران الداخلي لتحديد منحنى الطاقة الكامنة للدوران، وذلك لمعرفة المماكنات التي يمكن أن يتخذها الجزيء.

3. دراسة التفاعلات الكيميائية، والتنبؤ بحدوث التفاعل قبل إجراء التجربة.

جواب السؤال الثالث:(الدرجة 18):

تكتب العلاقات الضرورية لتحديد ثلاثة مجاهيل تبعاً للمجموعات CH_n على النحو الآتي:

$$\Delta_f H^{298}(\text{ethane}) = -83.81 = 2P$$

$$\Delta_f H^{298}(\text{propane}) = -104.7 = 2P + S$$

$$\Delta_f H^{298}(\text{isobutane}) = -134.2 = 3P + T$$

$$\Delta_f H^{298}(\text{neopentane}) = -168.1 = 4P + Q$$

وتحل هذه المعادلات باستخدام برنامج MATHCAD بإجراء الآتي:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} -83.81 \\ -104.7 \\ -134.2 \\ -168.1 \end{pmatrix} \quad lsolve = \begin{pmatrix} P \\ S \\ T \\ Q \end{pmatrix}$$

جواب السؤال الرابع: (الدرجة 17):

إن الغاية من هذا البرنامج إيجاد تكامل العلاقة $f(t) = 100 - t^2$ ضمن المجال (a,b)، وكتب استناداً إلى قاعدة سيمبسون.

- يمثل السطر الأول تعريف التابع اللازم مكاملته.
- يمثل السطران الثاني والثالث والرابع إدخال حدود التكامل (a,b) وعدد التكاملات الثانوية n.
- يمثل السطر الخامس تعريف المتحول h.
- يمثل السطر السادس والسابع بداية الحساب انطلاقا من s=0 و x=a.
- يمثل السطر الثامن والتاسع والعاشر شرط عملية التكرار.
- ثم يتابع البرنامج بتغيير i إلى أن يحقق قاعدة سمبسون المذكورة من السطر الحادي عشر ويطبع النتيجة في السطر الأخير.

مكتبة الوطن

جامعة تشرين
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة حيوية لطلاب السنة الثالثة /شعبة الكيمياء الحيوية/ الدورة الإضافية
للعام الدراسي 2016 – 2017

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 100

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 30):

1. يمكن حساب المعادلة $x^2 + xy + 1$ عند أية قيمة لـ x و y باستخدام برنامج Excel بكتابتها على النحو الآتي:
(a) x^2 + x*y + 1 (b) =x^2 + x*y +1 (c) =x×x+x×y+1 (d) كل ما سبق غير صحيح.

2. لحساب تكامل تابع ما y(x) ضمن الحدود (2,6) باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بالإجراء الآتي:
(a) $\int_2^6 y(x)dx =$ (b) $\int_2^6 y(x)dx :=$ (c) $\int_2^6 y(x)dx = a,$ finde(a) = (d) كل ما سبق غير صحيح

3. لإيجاد الحلول الخاصة والمعاملات الخاصة للهاملتون الموافق لجزء البوتادايين $C_1 = C_2 - C_3 = C_4$ باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بالإجراء الآتي:

(a) $H := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ eigenvals(H) = eigenvecs(H) =

(b) eigenvals(H) = eigenvecs(H) =

(c) $H := \begin{pmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{pmatrix}$ eigenvals(H) = eigenvecs(H) =

$H := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ eigenvals(H) =

(d) كل ما سبق غير صحيح

4. لحل جملة المعادلات $x + 2y - 3z = 6,\ 3x + 2y - z = 12,\ 2x - y + 4z = 0$ باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بإجراء ما يأتي:

(a) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 3 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}$ $b = \begin{pmatrix} 6 \\ 12 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\text{lsolve}(A,b) = \begin{pmatrix} 2.85 \\ -090 \\ -1.65 \end{pmatrix}$

(b) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 3 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}$ $b = \begin{pmatrix} 6 \\ 12 \\ 0 \end{pmatrix}$ $A^{-1}b = \begin{pmatrix} 2.85 \\ -090 \\ -1.65 \end{pmatrix}$

(c) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 3 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}$ $b = \begin{pmatrix} 6 \\ 12 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\text{find}(x,y,z) = \begin{pmatrix} 2.85 \\ -090 \\ -1.65 \end{pmatrix}$

(d) كل ما سبق غير صحيح

5. للحصول على البنية الهندسية المثلى لأي جزيء وطيفه الاهتزازي باستخدام البرنامج GaussView، بعد رسمه، نختار الأوامر الآتية: (a) freq (b) opt (c) energy (d) كل ما سبق غير صحيح

ملاحظة: إذا اختار الطالب الخيار نفسه لجميع الخيارات، فعلامة السؤال الصفر.

السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 40):

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $(210 - 42x)(12 - 2x) - (42 - 9x)^2 = 0$ بطريقة التكرار.
1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $y^2 - 56y + 252$ بطريقة نيوتن - رافسون.
3. وضح كيف يمكن حل المعادلتين $y^2 + x^2 = 0$ و $y - x = 2$ باستخدام برنامج MATHCAD.
4. استخدم الآلة الحاسبة لإيجاد ميل الخط المستقيم الذي يعبر المبدأ والنقاط الآتية:

x	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0
y	1.1	1.9	2.9	4.0	4.8

السؤال الثالث: (الدرجة 18)
عالج الباحث بينسون مسألة تحديد انتالبية تشكل الجزيئات على أساس معرفة إسهام المجموعة CH_n برمز مجموعة الكربون الأول بالحرف P، والثاني بالحرف S، والثالث بالرمز T، والرابع بالرمز Q، أكتب المعادلات الأربعة بدلالة P، و S، و T، و Q استناداً إلى انتاليبات المركبات الأربعة الآتية: $\Delta_f H^{298}(\text{ethane}) = --83.81$، و $\Delta_f H^{298}(\text{propane}) = -104.7$، و $\Delta_f H^{298}(\text{isobutane}) = -134.2$، و $\Delta_f H^{298}(\text{neopentane}) = -168.1$. ثم وضح كيف يمكن إيجاد هذه المجاهيل باستخدام برنامج MATHCAD.

السؤال الرابع: (الدرجة 12): ما الغاية من البرنامج الآتي، وبأية طريقة كتبت؟

```
CLS
DEF fnf (t) = 100 - t ^2
INPUT "low level of integral"; a
INPUT "high level of integral"; b
INPUT "No. of sub-integral"; n
h = (b - a) / n
s = 0
x = a
FOR i = 1 TO n - 1
x = x + h
s = s + fnf(x)
NEXT i
  t = h * (fnf(a) / 2 + s + fnf(b) / 2)
PRINT " Integration ="; t
END
```

قاعدة سيمبسون

د. محمد عبد الحكيم بدوي

نتمنى لكم التوفيق والنجاح

2017/07/27

سلم تصحيح مقرر البرمجة الحيوية لطلاب السنة الثالثة /كيمياء حيوية/ للفصل الثاني للعام الدراسي 2017

جواب السؤال الأول: (الدرجة 30):

1. (b) 2. (a) 3. (c) 4. (a) أو (b) 5. (d)

جواب السؤال الثاني:(الدرجة 40):

1. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

```
PRINT "Program QROOT"
x = 0
20 x = x + 1
a = (210-42 * x) * (12-2 * x) – (42 -9 * x) ^ 2
IF a > 0 GOTO 20
PRINT a, x
END
```

2. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

```
PRINT    QNEW_2
CLS
READ x0, e
DATA 4,0.0001
DEF fnf (x) = x ^ 2 - 56 * x + 252
DEF fng (x) = 2 * x - 56
5 x1 = x0-(fnf(x0)/fng(x0))
PRINT x1
IF (x1 - x0) < e THEN 25
X0 = x1: GOTO 5
25 PRINT    "The root is:", x1
END
```

3. يمكن حل المعادلين بإجراء المراحل الآتية:

Guess values:

x:=2 y:=1

Given

$y^2 + x^2 = 0$

$y - x = 2$

$\begin{pmatrix} yval \\ xval \end{pmatrix} := Find(y,x)$ yval= xval=

4. لإيجاد ميل نقطة نطبق العلاقة الآتية:

$$\sum_1^5 x_i y_i = 53.6, \quad \sum_1^5 x_i^2 = 55.0, m = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2} = 0.97$$

جواب السؤال الثالث:(الدرجة 18):

تكتب العلاقات الثلاثة الضرورية لتحديد ثلاثة مجاهيل تبعاً لقانون بير – لامبرت على النحو الآتي:

$$\Delta_f H^{298}(\text{ethane}) = -83.81 = 2P$$

$$\Delta_f H^{298}(\text{propane}) = -104.7 = 2P + S$$

$$\Delta_f H^{298}(\text{isobutane}) = -134.2 = 3P + T$$

$$\Delta_f H^{298}(\text{neopentane}) = -168.1 = 4P + Q$$

وتحل هذه المعادلات باستخدام برنامج MATHCAD بإجراء الآتي:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} -83.81 \\ -104.7 \\ -134.2 \\ -168.1 \end{pmatrix} \quad lsolve = \begin{pmatrix} -41.905 \\ -20.89 \\ -8.485 \\ -0.48 \end{pmatrix}$$

جواب السؤال الرابع: (الدرجة 12):

إن الغاية من هذا البرنامج إيجاد تكامل العلاقة $f(t) = 100 - t^2$ ضمن المجال (a,b)، وكتب استناداً إلى قاعدة سيمبسون.

جامعة تشرين
كلية العلوم
قسم الكيمياء

أسئلة امتحان مقرر برمجة حيوية لطلاب السنة الثالثة /شعبة الكيمياء الحيوية/ الدورة الثانية للعام الدراسي 2016 – 2017

الاسم:
المدة: ساعتان
الدرجة: 100

السؤال الأول: اختار الجواب الصحيح (الدرجة 40):

1. يمكن حساب المعادلة $x^2 + 2x + 1$ عند أية قيمة لـ x باستخدام برنامج Excel بكتابتها على النحو الآتي:
(a) x^2 + 2*x + 2 (b) =x^2 + 2*x +2 (c) =x^2+2x+1 (d) كل ما سبق غير صحيح.

2. لإيجاد حلول المعادلة $f(x) = y^3 - 10.y + 2$ باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بالإجراء الآتي:

(a) $V := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ polyroots(V) = (b) $V := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ lsolve(V) = (c) $V := \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ Find(V) = (d) كل ما سبق غير صحيح

3. لإيجاد الحلول الخاصة والمتعامدات الخاصة للهاملتون الموافق لجذر الأليل C – C = C باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بالإجراء الآتي:

(a) $H := \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ eigenvecs(H) = eigenvals(H) =
(b) $H := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ eigenvecs(H) = eigenvals(H) =
(c) $H := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ eigenvecs(H) = eigenvals(H) =
(d) كل ما سبق غير صحيح

4. لحل المعادلتين $2x + y = 4$ و $x + 3y = 7$ باستخدام برنامج MATHCAD نقوم بإجراء ما يأتي:

(a) $A := \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ $b := \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix}$ lsolve(A, b) = $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$
(b) $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ $b = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix}$ lsolve(A, b) = $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$
(c) $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix}$ find(x, y) =
(d) كل ما سبق غير صحيح

5. للحصول على البنية الهندسية المثلى لأي جزيء وظيفه الاهتزازي باستخدام البرنامج GaussView، بعد رسمه، نختار الأوامر الآتية: (a) opt + freq (b) opt (c) freq (d) كل ما سبق غير صحيح

السؤال الثاني: أجب عن الأسئلة الآتية (الدرجة 40):

1. اكتب بلغة QBASIC برنامجاً لحل المعادلة $e^{-x} + x/5 = 1$ بطريقة التكرار.
2. اشرح طريقة نيوتن – رونسون لحل المعادلة $x^2 - 56x + 252 = 0$ عددياً.
3. اشرح طريقة المربعات الصغرى لإيجاد ميل مستقيم مار من المبدأ $y_i = mx_i$ مع استنتاج عبارة m.
4. ما الخطوات اللازمة لتحويل شكل الجزيء المرسوم بالبرنامج Chemckech إلى ملف input امتداده mol.*.
5. صنف الطرائق النظرية المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية، وبين أهمية ودقة كل صنف.

السؤال الثالث: (الدرجة 10)

تم معالجة محلول مجهول يحتوي على أيونات من Mo، وTi، وV مع بيروكسيد الهيدروجين، ثم حدد معامل الامتصاص لكل أيون عند أطوال الموجة الموافقة لكل منها، وحددت امتصاصية العينة المجهولة عند كل طول موجة، ويمثل الجدول الآتي نتائج القياسات:

λ	Mo	Ti	V	امتصاصية العينة المجهولة
330	10.4	3.25	0.00	0.284
410	1.20	15.20	3.70	0.857
460	0.05	10.25	5.10	0.718

قم بتأوين هذه النتائج بمعادلات رياضية ملائمة بدلالة ثلاثة مجاهيل (ولتكن M، وT، وV)، ثم اشرح كيف يمكن حل هذه المعادلات الحصول على تركيز كل أيون في المحاول المجهول باستخدام برنامج MATHCAD.

السؤال الرابع: (الدرجة 10): ما الغاية من البرنامج الآتي، وعلى أية طريقة كتب هذا البرنامج، وكيف يمكن تحسين النتيجة؟

```
READ y0, e
DATA 4,0.1
DEF fnf (y) = y ^ 2 - 56 * y + 252
DEF fng (y) = 2 * y - 56
25  y1 = y0 - (fnf(y0)/fng(y0))
PRINT y1
IF (y1 - y0) < e THEN 25
y0 = y1: GOTO 5
25 PRINT "The root is:", y1
END
```

د. محمد عبد الحكيم بدوي — نتمنى لكم التوفيق والنجاح — 2017/07/8

سلم تصحيح مقرر البرمجة الحيوية لطلاب السنة الثالثة /كيمياء حيوية/ للفصل الثاني للعام الدراسي 2017

جواب السؤال الأول: (الدرجة 40):

1. (d) 2. (a) 3. (c) 4. (b) 5. (a)

جواب السؤال الثاني:(الدرجة 40):

1. يكتب البرنامج على النحو الآتي:

```
PRINT    Program iteration
x = 1
10 x = x + .1
a = EXP(- x) + (x / 5)
IF (a - 1) < 0 THEN 10
PRINT a, x
END
```

2. تعتمد طريقة نيوتن – رونسون على إجراء عملية اشتقاق التابع، وتطبيق العلاقة الآتية مرات عدة:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x)}$$

فمن أجل حل المسألة المعطى نقدم قيمة أولية لـ x، ولتكن $x_0 = 0$، ونحدد قيمة التابع ومشتقه: $f(0) = 252$، $f'(0) = -56$، وبالتعويض في العلاقة السابقة نحصل على الحل الأولي:

$$x_1 = 0 - \left(-\frac{252}{56}\right) = 4.5$$

ومن أجل المرحلة الثانية نأخذ هذه النتيجة كقيمة أولية، ونحدد قيمة التابع ومشتقه بالنسبة إلى هذه القيمة، وبالتعويض في العلاقة السابقة نحصل على نتيجة ثانية:

$$x_2 = 4.5 - \left(-\frac{20.25}{47}\right) = 4.593085$$

ونكرر هذه العملية إلى أن نحصل على قيمة ثابتة تقريباً

3. نقوم أولا بإعادة كتابة العلاقة على النحو الآتي:

$$mx_i - y_i = 0$$

وإذا كانت المعطيات التجريبية منحرفة عن الخط المستقيم بمقدار d_i، فيمكن كتابة العلاقة الأخيرة كما يأتي:

$$mx_i - y_i = d_i$$

يمكن جعل مربع الانحراف أصغرياً، وذلك بجعل مشتق مربع طرفي العلاقة السابقة بالنسبة إلى m مساوياً الصفر، ويدعى هذا الإجراء بطريقة أصغر المربعات:

$$\frac{d}{dm}\sum^{n} d_i = \frac{d}{dm}\sum_{i=1}^{n}(mx_i - y_i)^2 = 0$$

ومن هذه العلاقة نحصل على الميل m:

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$$

4. ننتقل إلى optimize، ثم إلى 3D Viewer، وبعد ذلك save as، ننتقل إلى MDL molfile، ونختار أي اسم، ونكون بذلك قد قمنا بتحويل شكل الجزيء إلى ملف يحتوي على إحداثيات ذرات الجزيء بالنسبة إلى مركز ثقله.

5. تصنف طرائق الكيمياء الحاسوبية إلى ثلاث طرائق، وهي:

a) طرائق اختبارية: وهو طرائق لا تستند على أية نظرية، وتستخدم علاقات رياضية يمكننا من خلالها تفسير أية ظاهرة كيميائية أو فيزيائية.

b) طرائق نصف اختبارية: وهي طرائق نظرية تعتمد على افتراض أن بعض التكاملات التي من الصعب تقديرها أو تحديدها، يمكن أن تساوي إلى قيمة تجريبية أو تمتلك معنى فيزيائي لقيمة تجريبية، وبذلك تعد مثل هذه الطرائق نصفها نظري والنصف الآخر تجريبي.

c) طرائق غير اختبارية: وهي طرائق نظرية بحتة، وتعد من أهم طرائق الكيمياء الحاسوبية

وتكمن أهمية هذه الطرائق في ما يأتي:

1. في تحديد البنى الهندسية للجزيء، وخواصه الفيزيائية، مثل عزم ثنائي القطب، ثوابت الدوران، والطيفية، مثل IR، ورامان، والامتصاص، والفلورة.
2. دراسة الدوران الداخلي لتحديد منحني الطاقة الكامنة للدوران، وذلك لمعرفة المماكبات التي يمكن أن يتخذها الجزيء.
3. دراسة التفاعلات الكيميائية، والتنبؤ بحدوث التفاعل قبل إجراء التجربة.

جواب السؤال الثالث:(الدرجة 10):

تكتب العلاقات الثلاثة الضرورية لتحديد ثلاثة مجاهيل تبعاً لقانون بير – لامبرت على النحو الآتي:

$$a_{1M}M + a_{1T}T = 0.284$$
$$a_{2M}M + a_{2T}T + a_{2V}V = 0.857$$
$$a_{3M}M + a_{3T}T + a_{3V}V = 0.718$$

وتصبح هذه المعادلات بعد تعويض معاملات الامتصاص الموافقة لكل أيون على النحو الآتي:

$$10.4M + 3.25T = 0.284$$
$$1.20M + 15.2T + 3.70V = 0.857$$
$$0.050M + 10.25T + 5.10V = 0.718$$

ويمكن تحويل هذه المعادلات على شكل مصفوفة:

$$\begin{pmatrix} 10.40 & 3.25 & 0.00 \\ 1.20 & 15.2 & 3.70 \\ 0.050 & 10.25 & 5.10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M \\ T \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.284 \\ 0.857 \\ 0.718 \end{pmatrix}$$

وتحل هذه المصفوفة باستخدام برنامج MATHCAD باجراء الآتي:

$$A := \begin{pmatrix} 10.40 & 3.25 & 0.00 \\ 1.20 & 15.2 & 3.70 \\ 0.050 & 10.25 & 5.10 \end{pmatrix} \quad b := \begin{pmatrix} 0.284 \\ 0.857 \\ 0.718 \end{pmatrix} \quad \text{lsolve}(A,b) = \begin{pmatrix} M \\ T \\ V \end{pmatrix}$$

إذ تظهر مكان M، وT، وV القيمة الموافقة.

جواب السؤال الرابع: (الدرجة 10):

إن الغاية من هذا البرنامج إيجاد جذر المعادلة $y^2 - 56y + 252 = 0$، وكتب على أساس طريقة نيوتن – روفسون، ويمكن تحسين النتيجة بتصغير العدد الموافق لـ e؛ أي نكتب 0.0001 بدلاً من 0.1.