

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
профессор РАН



/С.С. Карлов/

«30» августа 2025 г.

ОЦЕНОЧНЫЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ (ФОС)

для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю):

Информатика

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Аналитическая химия, Биохимия и биотехнология, Медицинская химия,
Молекулярная биология и биоорганическая химия, Нефтехимия, Органическая химия,
Радиохимия, Теория и методика обучения химии, Физическая химия,
Химия неорганических веществ и материалов, Химия и технология
композиционных и полимерных материалов, Экологическая химия
и экоадаптивные технологии

Форма обучения:

очная

ФОС рассмотрен и одобрен
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №16 от 07.06.2023, №23 от 25.03.2025 г.)

Москва 2025

ФОС дисциплины разработан в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019, № 609 от 10 июня 2021 года, № 700 от 29 мая 2023 года, № 1108 от 30 августа 2024 года, № 476 от 07 апреля 2025 года, решения Ученого совета МГУ от 25 апреля 2023 года).

1. Требования к результатам освоения дисциплины Информатика.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>ОПК-7 (на уровне специалитета). Способен собирать, анализировать, обрабатывать и представлять информацию с использованием современных компьютерных технологий, общих и профессиональных баз данных.</p>	<p>ОПК-7.1 Использует современные компьютерные технологии при сборе информации химического профиля с использованием общих и профессиональных баз данных</p>	<p>Уметь: находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации Уметь: сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность Владеть: навыком создания алгоритма по формулировке задачи</p>
<p>ОПК-8 (на уровне специалитета). Способен применять стандартные и разрабатывать оригинальные программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>ОПК-8.1 Применяет стандартное программное обеспечение для решения профессиональных задач</p>	<p>Знать: современные библиотеки Python для выполнения научных расчётов Знать: основные численные методы Знать: варианты применения конкретных численных методов в различных областях химии Уметь: составлять алгоритмы и затем программу на языке Python, решающую предложенную проблему Уметь: находить необходимую информацию по языку программирования и его библиотекам в открытых источниках Уметь: применять изученные численные методы в различных областях химии Владеть: навыками программирования на Python Владеть: навыками использования изученных библиотек Владеть: навыками решения практических задач обработки данных их различных областей химии</p>

2. Оценочные средства для текущего контроля и самостоятельной работы

2.1. Текущий контроль

Примеры заданий:

4. Электронная конфигурация атома — формула расположения электронов по атомным орбиталям. Каждая орбиталь характеризуется главным квантовым числом $n = 1, 2, 3, \dots$, определяющим номер уровня. Каждый уровень состоит из одного или нескольких подуровней, определяемых побочным квантовым числом, $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Значения $l = 0, 1, 2, 3, 4$ обозначаются буквами s, p, d, f, g соответственно. Таким образом, каждый уровень имеет n подуровней. На заданном подуровне максимально может находиться $2(2l + 1)$ электронов. Согласно правилу Маделунга, N электронов заполняют орбитали в порядке возрастания $n + l$, при этом, если две орбитали имеют одинаковое значение $n + l$, они заполняются в порядке возрастания n . Например, основным состоянием атома титана ($N = 22$) является $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$. Напишите программу, запрашивающую N ($N \leq 118$, Оганесон) и выводящую электронную формулу элемента. Например, для титана программа должна вывести:

```
1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s2 3d2
```

1. Ниже приведены типы кристаллических решёток металлов первого ряда d-элементов. Некоторые элементы имеют разные кристаллические структуры при разных значениях температуры и давления. Задав соответствующие множества Python, определите, какие металлы: (a) существуют только в гранецентрированной кубической (ГЦК, FCC), объемноцентрированной кубической (ОЦК, BCC) или гексагональной плотноупакованной (ГПУ, HCP) структурах; (b) существуют в двух из этих структур; (c) не образуют ГПУ структуру; (d) существуют ли какие-либо из них во всех трёх структурах?

- fcc: Cu, Co, Fe, Mn, Ni, Sc
- bcc: Cr, Fe, Mn, Ti, V
- hcp: Co, Ni, Sc, Ti, Zn

1. Согласно теории теплоёмкости Эйнштейна зависимость теплоёмкости кристалла $C_{V,m}$ от температуры выражается соотношением:

$$C_{V,m} = 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Theta_E}{T}\right) - 1 \right]^2}$$

где температура Эйнштейна, Θ_E , является константой для данного материала. Напишите функцию `CV_Einstein(T, ThetaE)` и с её помощью вычислите $C_{V,m}$ при 298 К для (a) лития ($\Theta_E = 469.4$ К) и (b) рубидия ($\Theta_E = 65.1$ К).

```
from math import exp
```

4. Проведите интерполяцию кубическими сплайнами с различными граничными условиями функции $f(x) = \sin x$ на интервале $0 \leq x \leq 2\pi$ на равномерной сетке из 6 узлов. Постройте график функции $f(x)$ и сплайнов на интервале $-\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{5\pi}{2}$. Оцените качество интерполяции и экстраполяции. (☆☆☆)



1

5. Вычислите значение проинтерполированной функции $f(x) = \sin x$ в точке $x = \frac{\pi}{6}$ сплайнами с разными граничными условиями и сделайте выводы: какой способ в данном случае лучше и почему. (☆☆☆)



1

6*. Функция Леннарда-Джонса задаётся уравнением: $U(r) = r^{-12} - r^{-6}$. Постройте график функции на интервале $1 \leq x \leq 5$ и проинтерполируйте её наиболее подходящим способом. (☆☆☆)



1

7. Напишите функцию `Euler3()`, которая путём интегрирования по Эйлера решает систему из трёх дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} y_1' = F_1(x, y_1, y_2, y_3) \\ y_2' = F_2(x, y_1, y_2, y_3) \\ y_3' = F_3(x, y_1, y_2, y_3) \end{cases} \text{ от } x_0 \text{ до } x_{max} \text{ с шагом } h \text{ (☆☆☆).}$$

```

1 def Euler3(dy1, dy2, dy3, x0, y01, y02, y03, x_max, h=1.0e-4):
2     # проводит интегрирование по Эйлера от x0 до x_max с шагом h.
3     # dyN(x, y1, y2, y3) – производная N-й функции,
4     # y0N – начальное условие: yN(x0) = y0N
5
6
7
8     # функция возвращает массив значений xi от x0 до x_max с шагом h
9     # и массивы значений функций yi1 = y1(xi), yi2 = y2(xi), yi3 = y3(xi)
10    return xi, yi1, yi2, yi3

```

8. Рассмотрим систему, в которой протекают обратимые реакции: $2\text{NO} + \text{Br}_2 \xrightarrow{k_1} 2\text{NOBr}$ и $2\text{NOBr} \xrightarrow{k_2} 2\text{NO} + \text{Br}_2$. Считая $y_1 = [\text{NO}]$, $y_2 = [\text{Br}_2]$ и $y_3 = [\text{NOBr}]$, составьте систему дифференциальных уравнений для этого случая. Приняв $k_1 = 0.42$, $k_2 = 0.17$, начальные концентрации: $[\text{NO}]_0 = 1.0$, $[\text{Br}_2]_0 = 1.0$ и $[\text{NOBr}]_0 = 0.0$, решите систему в интервале x (в данном случае — это время) от 0 до 10 с подходящим шагом. Постройте кинетические кривые. (☆☆☆)

1

2.2 Самостоятельная работа

3. Оценочные средства для промежуточной аттестации

3.1. Пример задания для зачета:

2. Числа изомерных алкильных углеводородных радикалов с n атомами углерода A_n составляют последовательность, в которой первые 4 члена заданы в явном виде, а следующие можно вычислить пользуясь **рекуррентной формулой** :

$$A_0 = 1, A_1 = 1, A_2 = 1, A_3 = 2, A_{n+1} = \frac{1}{6} \left(\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (A_i A_j A_{n-i-j}) + 3 \sum_{i=0}^{n/2} (A_i A_{n-2i}) + 2A_{n/3} \right)$$

Напишите программу, которая запрашивает число k и вычисляет и выводит A_k — число изомерных углеводородных радикалов с k атомами углерода. Например, для $k = 10$ программа должна вернуть 507.

```
# A — Алкильные радикалы
A = [1,1,1,2]
```

3.2. Вопросы для подготовки к экзамену:

1. Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Представление чисел с плавающей точкой. Диапазон и точность машинных чисел. Нормализованные и субнормализованные (денормализованные) числа. Машинный нуль. Машинное эpsilon и способы его практического определения.
2. Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Ошибки округления. Абсолютная и относительная погрешности результатов основных арифметических операций. Потеря точности при операциях сложения и вычитания. Накопление ошибок. Устойчивость вычислительных алгоритмов.
3. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса. Условие устойчивости вычислений. Варианты с частичным выбором ведущего элемента (по столбцу) и полным выбором по всей матрице.
4. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса. Приведение к треугольной форме с единичной диагональю и к диагональной форме (метод Гаусса-Жордана). Оценка количества арифметических операций, затрачиваемых на прямой и обратный ход. Матричная формулировка метода Гаусса, его связь с LU-факторизацией матрицы коэффициентов. Вычисление обратной матрицы A^{-1} .
5. Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка (бисекции). Условия применимости метода и скорость сходимости к решению.

6. Решение нелинейных уравнений методом простой итерации. Условия сходимости к решению: сжимающие отображения и неподвижная точка. Варианты выбора итерационной функции. Решение систем уравнений.
7. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона. Условия применимости. Выбор начального приближения. Достаточное условие сходимости. Скорость сходимости. Метод Ньютона как частный случай простой итерации. Обобщение метода Ньютона на случай системы нелинейных уравнений.
8. Интерполяция таблично заданной функции. Единственность интерполяционного многочлена. Многочлены в форме Лагранжа. Выражение для ошибки интерполяции (без вывода).
9. Интерполяция таблично заданной функции. Сходимость интерполяции. Формулировки теорем Фабера и Марцинкевича. Свойства многочленов Чебышёва $T_n(x)$ в связи с задачей интерполяции.
10. Интерполяция сплайнами. Недостатки интерполяции многочленами. Понятие сплайна. Общий принцип построения кубического сплайна. Необходимость и примеры граничных условий.
11. Численное дифференцирование. Суммарная погрешность и её составляющие: ошибка дискретизации (усечения) и ошибка округления. Оптимальный выбор шага.
12. Численное дифференцирование. Порядок точности формулы дифференцирования. Способы уменьшения суммарной погрешности. Вывод формул произвольного порядка точности. Формулы для высших производных.
13. Приближённое вычисление определенных интегралов. Общая структура квадратурной формулы, способы выбора узлов и определение весов. Формулы Ньютона-Котеса, их частные случаи (формулы трапеций, Симпсона, Ньютона). Выражения для ошибки квадратурных формул.
14. Приближённое вычисление определенных интегралов. Порядок точности. Формулы наивысшего порядка точности (формулы Гаусса). Применение формул Гаусса для произвольного отрезка. Весовые функции; их использование при вычислении интегралов с особенностями в подынтегральной функции и несобственных интегралов. Алгоритм интегрирования с контролем точности (с автоматическим выбором шага).
15. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Формулировка задачи Коши. Численные методы решения задачи Коши. Локальная и глобальная ошибки, устойчивость. Явный и неявный методы Эйлера, их устойчивость.
16. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Порядок метода решения ОДУ. Модифицированный метод Эйлера. Метод Рунге-Кутты. Многошаговые методы. Методы прогноза и коррекции. Контроль точности решения. Алгоритмы с фиксированным и переменным шагом.
17. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Решение систем ОДУ. Понятие жёсткости систем ОДУ. Методы интегрирования жёстких систем уравнений.
18. Проблема собственных значений. Понятие собственных значений и собственных векторов. Собственные значения диагональных и подобных матриц. Матрицы ортогональных преобразований. Метод Якоби. QR- и QL-алгоритмы.
19. Проблема собственных значений. Методы решения частичной проблемы собственных значений: прямые итерации, обратные итерации, Последовательность Штурма и метод бисекции.

20. Методы оптимизации. Постановка задачи. Виды оптимизации. Виды минимумов. Минимизация функций одной переменной. Локализация минимума. Метод золотого сечения.
21. Методы оптимизации. Квадратичная интерполяция. Метод Брента. Кубическая интерполяция (метод Дэвидона).
22. Методы оптимизации. Классификация методов многомерной минимизации. Метод покоординатного спуска. Метод Пауэлла. Метод Хука-Дживса. Метод деформируемого многогранника Нелдера-Мида.
23. Методы оптимизации Метод скорейшего спуска. Метод Ньютона. Метод сопряжённых градиентов (Флетчера-Ривса). Основная идея и примеры квазиньютоновских методов.

3.3. Шкала и критерии оценивания

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

Критерии оценивания устного ответа на экзамене

Критерии оценки	Характеристика требований к результатам аттестации
Полнота знаний программного материала	Обучающийся дал полный и правильный ответ, который изложен в определенной логической последовательности. Правильно и полно давал ответы на дополнительные вопросы ИЛИ допустил незначительные ошибки.
	Обучающийся продемонстрировал достаточную полноту знаний, при наличии несущественных неточностей, ответ изложен в логической последовательности. При ответе на дополнительные вопросы допустил незначи-

	<p>тельные ошибки.</p> <p>Обучающийся продемонстрировал фрагментальные знания и допускает неточности в определении понятий. При ответах на дополнительные вопросы допускал ошибки.</p> <p>Обучающийся продемонстрировал незнание значительной части материала. Не смог дать ответы на дополнительные вопросы.</p>
Системность и обобщенность знаний	Обучающийся продемонстрировал полное понимание материала, изложение материала системное, раскрыл вопрос с опорой на аргументы, которые сформулированы четко
	Обучающийся продемонстрировал достаточно глубокое понимание материала, изложение материала системное, приводятся е связанные между собой и другими компонентами аргументации понятия или положения
	Обучающийся допустил ошибки, нарушил системность изложения материала, использовал определения, положения и выводы, не связанные непосредственно с раскрываемым вопросом
	Обучающийся продемонстрировал непонимание материала, не смог обосновать свои суждения и привести свои примеры
Корректность употребления терминологического аппарата дисциплины	Обучающийся продемонстрировал хорошее знание терминов дисциплины, корректность их употребления при ответах на вопросы, в том числе дополнительные.
	Обучающийся продемонстрировал знание основных терминов дисциплины. Допущено не более 2-3-х ошибок в употреблении терминов при ответах на вопросы, в том числе дополнительные
	Обучающийся продемонстрировал знание основных терминов дисциплины. Допущено некорректное их употребление при ответах на вопросы.
	Обучающийся продемонстрировал незнание основных терминов дисциплины. Допущены серьезные ошибки при их употреблении в ответах на вопросы
Самостоятельные оценочные суждения	Обучающийся продемонстрировал способность обосновывать и излагать свои оценочные суждения, доказывать, отстаивать свою точку зрения
	Обучающийся продемонстрировал способность излагать свои оценочные суждения, доказывать, отстаивать свою точку зрения
	Обучающийся продемонстрировал умение излагать свои оценочные суждения, неубедительно доказывает свою точку зрения
	Обучающийся не продемонстрировал умение излагать свои оценочные суждения, не доказывает и не отстаивает свою точку зрения

Соответствие оценок и критериев ответа на экзамене

Оценка	Характеристика требований к результатам аттестации
--------	--

«Отлично»	Теоретическое содержание освоено полностью без пробелов, системно и глубоко. Необходимые умения и практические навыки работы с освоенным материалом сформированы. Все задания выполнены безупречно, качество их выполнения оценено числом баллов близким к максимуму.
«Хорошо»	Теоретическое содержание освоено в целом без пробелов. Необходимые умения и практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы. Все задания выполнены с отдельными неточностями, качество выполнения большинства заданий оценено числом баллов близким к максимуму.
«Удовлетворительно»	Теоретическое содержание освоено большей частью, но пробелы не носят существенного характера. Необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы. Большинство заданий выполнены, отдельные из выполненных заданий содержат ошибки. .
«Неудовлетворительно»	Теоретическое содержание освоено частично. Необходимые умения и навыки работы не сформированы или сформированы отдельные из них.

Критерии оценивания ответа на зачете

Критерии оценки	Характеристика требований к результатам аттестации
Выполнение практико-ориентированного задания на основе приобретенных знаний, умений	Обучающийся продемонстрировал практическое применение знаний. Практико-ориентированное задание выполнено безупречно: ответ на вопрос задачи дан правильный, объяснение хода ее решения подробное, последовательное, грамотное, с теоретическими обоснованиями
	Обучающийся продемонстрировал практическое применение знаний. Практико-ориентированное задание выполнено с отдельными неточностями: ответ на вопрос задачи дан правильный, объяснение хода ее решения подробное, но недостаточно логичное, с единичными ошибками в деталях, некоторыми затруднениями в теоретическом обосновании
	Обучающийся продемонстрировал низкий уровень практического применения знаний. Практико-ориентированное задание выполнено не полностью: ответ на вопрос задачи дан правильный, объяснение хода ее решения недостаточно полное, непоследовательное, с ошибками, слабым теоретическим обоснованием, со значительными затруднениями и ошибками.
	Обучающийся не продемонстрировал практическое применение знаний. Практико-ориентированное задание не выполнено: ответ на вопрос задачи дан неправильный, объяснение хода ее решения дано неполное, непоследовательное, с грубыми ошибками, без теоретического обоснования.

Соответствие оценок и критериев ответа на зачете

Оценка	Характеристика требований к результатам аттестации
«Зачтено»	Теоретическое содержание освоено полностью без пробелов или в целом, или большей частью. Необходимые умения и практические навыки работы с освоенным материалом сформированы или в основном сформированы.
«Не зачтено»	Теоретическое содержание освоено частично. Необходимые умения и навыки работы не сформированы или сформированы отдельные из них.