

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.

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

### **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

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №16 от 07.06.2023, №23 от 25.03.2025 г.)

Москва 2025

Рабочая программа дисциплины разработана 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 ).

Год (годы) приема на обучение 2023, 2024, 2025

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП, блок МЕН, модуль «Математика и информатика».
2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.  
Обучающийся должен  
**Знать:** математику в объёме школьной программы  
**Уметь:** пользоваться компьютером на базовом уровне  
**Владеть:** базовым аппаратом математики и информатики в рамках школьной программы
3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

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

4. Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачётных единицы, всего 144 часа, из которых 100 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 72 часов – занятия семинарского типа (практические занятия), 10 часов – промежуточный контроль успеваемости), 44 часа составляет самостоятельная работа студента.

Преподавание курса проводится в форме лекционных и семинарских занятий с использованием мультимедийных презентаций. Часть материала подается в форме задач и примеров. Каждая тема закрепляется практическим занятием в среде Jupyter. Дисциплина реализуется с частичным применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы					Самостоятельная работа обучающегося, часы			
		из них					из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
1. Введение в Python. Типы данных в Python	7	2	4				6	1		1
2. Сложные типы данных. Управляющие конструкции Python	7	2	4				6	1		1

3. Типы данных III. Функции и библиотеки	<b>7</b>	2	4				<b>6</b>	1		<b>1</b>
4. Ввод и вывод в Python	<b>7</b>	2	4				<b>6</b>	1		<b>1</b>
5. Библиотека NumPy	<b>10</b>	3	6				<b>9</b>	1		<b>1</b>
6. Библиотека Matplotlib	<b>10</b>	3	6				<b>9</b>	1		<b>1</b>
7. Библиотека SymPy	<b>7</b>	2	4				<b>6</b>	1		<b>1</b>
8. Работа с Jupyter Notebook	<b>7</b>	2	4				<b>6</b>	1		<b>1</b>
9. Машинная арифметика и погрешности вычислений	<b>4</b>		4				<b>4</b>			
10. Решение систем линейных алгебраических уравнений	<b>4</b>		4				<b>4</b>			
11. Решение нелинейного уравнения. Методы деления отрезка и простой итерации	<b>2</b>		2				<b>2</b>			
12. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона	<b>2</b>		2				<b>2</b>			
13. Интерполяция многочленами	<b>4</b>		4				<b>4</b>			
14. Интерполяция сплайнами	<b>2</b>		2				<b>2</b>			
15. Численное дифференцирование	<b>2</b>		2				<b>2</b>			
16. Численное интегрирование	<b>4</b>		4				<b>4</b>			

17. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений	4		4				4			
18. Проблема собственных значений	4		4				4			
19. Методы оптимизации	4		4				4			
Промежуточная аттестация <u>зачет, экзамен</u>	46				4	6	10			36
<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>18</b>	<b>72</b>		<b>4</b>	<b>6</b>	<b>100</b>	8		<b>44</b>

Содержание тем:

*1. Введение в Python. Типы данных в Python*

Краткая история Python. Типизация в Python. Имена переменных. Целые числа (int). Вещественные числа (float). Комплексные числа (complex). Основные арифметические операции. Логический тип данных (bool). Операторы сравнения и логические операции. Конструкция if ... elif ... else.

*2. Сложные типы данных. Управляющие конструкции Python*

Списки (list). Методы списков. Срезы списков (List Slicing). Кортежи (tuple). Строки (str). Цикл while. Цикл for. Дополнительные управляющие конструкции: break, continue, pass, else.

*3. Типы данных III. Функции и библиотеки*

Словари (dict). Множества (set), операции над множествами. Функции, определение функций. Область видимости переменных. Аргументы функций: позиционные, именованные, необязательные, переменной длины. Передача аргументов по значению и по ссылке. Анонимные (lambda) функции. Библиотеки. Функции библиотеки math.

*4. Ввод и вывод в Python*

Вывод данных в консоль. Форматированный вывод. Примеры строк форматирования. Ввод данных. Функция input(). Метод str.split() и функция map(). Работа с файлами. Обработка исключений. Виды исключений.

*5. Библиотека NumPy*

Массив numpy, его сравнение со списком Python. Создание массива numpy различными способами. Индексы и срезы массива. Изменение формы массива. Выбор данных по условию. Операции с массивами.

### 6. Библиотека Matplotlib

Введение. Жизненный цикл рисунка. Элементы рисунка Matplotlib. Элементы рисунка Matplotlib. Создание объекта Plot. Цветовые модели Matplotlib. Собственные названия цветов в X11/CSS4. Стили линий. Стили маркеров. Изменение вида графика. Сохранение рисунка в файл. Форматы изображений. Matlab и объектно-ориентированный интерфейс. График аппроксимации таблично заданной функции.

### 7. Библиотека SymPy

Введение. Символьные переменные. Выражения. Вывод выражений. Вычисление значений выражений. Алгебраические преобразования. Парсинг и лямбдификация. Дифференцирование и интегрирование. Задание неопределённых функций интегралов и производных. Пределы и ряды. Сумма и произведение членов ряда. Решение уравнений и систем уравнений. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Работа с матрицами.

### 8. Работа с Jupyter Notebook

Инструмент Jupyter Notebook. Меню Jupyter. Типы ячеек. Markdown ячейки. Математические формулы в LaTeX. Химические уравнения в LaTeX. Магия Jupyter.

### 9. Машинная арифметика и погрешности вычислений

Машинное представление вещественных чисел. Множество нормализованных машинных чисел. Машинное эpsilon. Определение машинного эpsilon. Константы машинной точности в Python. Абсолютные погрешности суммы и разности. Потеря точности при сложении и вычитании. Погрешности произведения и частного. Способы минимизации ошибок округления. Анализ ошибок в сложных вычислениях. Потеря точности при суммировании знакопеременных рядов. Устойчивость вычислений.

### 10. Решение систем линейных алгебраических уравнений

Постановка задачи. Объём вычислений в методе Крамера. Возможности современных суперкомпьютеров. Методы последовательного исключения неизвестных. Упрощённая схема метода Гаусса. Устойчивость метода Гаусса. Объём вычислений в методе Гаусса. Варианты метода Гаусса. Решение СЛАУ с использованием numpy. Нахождение обратной матрицы. Метод Гаусса и LU-разложение. Решение систем уравнений при помощи LU-разложения

### 11. Решение нелинейного уравнения. Методы деления отрезка и простой итерации

Методы решения уравнений. Постановка задачи решения уравнения с одним неизвестным. Метод деления отрезка. Вычислительные особенности метода. Скорость сходимости. Метод простой итерации. Сходимость итераций. Условие сходимости метода простой итерации. Общий способ построения итерационной функции. Решение систем уравнений методом простой итерации.

### 12. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона

Метод Ньютона в случае одного уравнения. Понятие сходимости итераций. Скорость сходимости метода Ньютона. Зависимость сходимости от выбора начального приближения. Достаточные условия сходимости метода Ньютона. Связь метода Ньютона с методом простой итерации. Решение нелинейного уравнения с использованием scipy. Решение системы нелинейных уравнений.

### 13. Интерполяция многочленами

Постановка задачи. Единственность интерполяционного многочлена. Интерполяционная формула Лагранжа. Погрешность интерполяционного многочлена. Сходимость процесса интерполяции многочленами. Формулировки теорем Фабера и Марцинкевича. Использование сеток из корней многочленов Чебышёва для задачи интерполяции.

### 14. Интерполяция сплайнами

Недостатки интерполяции многочленами. Понятие сплайна. Построение кубического сплайна. Граничные условия. Интерполяция с использованием `scipy`.

### 15. Численное дифференцирование

Погрешность численного дифференцирования. Ошибка усечения и ошибка округления. Порядок точности численного дифференцирования. Получение формул произвольного порядка точности. Формулы для высших производных. Численное дифференцирование с использованием `scipy`.

### 16. Численное интегрирование

Общий принцип построения квадратурных формул. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса. Вычисление весов для формул трапеций и Симпсона. Погрешность квадратурной формулы. Оценка погрешности формул прямоугольников, трапеций и Симпсона. Порядок точности квадратурной формулы. Формулы наивысшего порядка точности (Гаусса). Интегрирование с весовой функцией. Примеры весовых функций. Способы уменьшения погрешности. Формула Рунге для погрешности интегрирования. Алгоритм интегрирования с контролем точности. Численное интегрирование с использованием `scipy`.

### 17. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Виды дополнительных условий. Численные методы решения задачи Коши. Метод Эйлера. Локальная и глобальная ошибки. Устойчивость. Устойчивость метода Эйлера. Варианты метода Эйлера, их глобальная ошибка и устойчивость. Неявные схемы решения ОДУ. Метод Рунге-Кутты. Многошаговые методы. Методы прогноза и коррекции. Контроль точности решения. Решение систем ОДУ. Понятие жёсткости систем ОДУ. Методы интегрирования жёстких уравнений. Решение ОДУ с использованием `scipy`

### 18. Проблема собственных значений

Собственные значения и собственные векторы. Численные методы решения проблемы собственных значений. Метод Якоби. QR- и QL-алгоритмы. Метод прямых итераций. Метод обратных итераций. Последовательность Штурма и метод бисекции. Решение проблемы собственных значений с использованием `scipy.linalg`

### 19. Методы оптимизации

Виды оптимизации. Виды минимумов. Минимизация функций одной переменной. Поиск методом золотого сечения. Квадратичная интерполяция. Метод Брента. Кубическая интерполяция (метод Дэвидона). Одномерная минимизация с использованием `scipy`. Классификация методов многомерной минимизации. Метод покоординатного спуска. Метод Пауэлла. Метод Хука-Дживса. Метод деформируемого многогранника Нелдера-Мида. Метод скорейшего спуска. Метод Ньютона. Метод сопряжённых градиентов (Флетчера-Ривса). Квазиньютоновские методы (Дэвидона-Флетчера-Пауэлла и Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно). Многомерная минимизация с использованием `scipy`.

**6. Ресурсное обеспечение:****Основная литература**

Методическое пособие курса в электронном виде

**Дополнительная литература**

1. Hill C. Python for Chemists. Cambridge University Press; 2023.

7. Язык преподавания – русский

8. Разработчик:

доцент к.ф.-м.н. Фирсов Денис Аркадьевич