

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

**Программа дисциплины**  
**Математические методы в химии M2.B.8**

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Лернер Э.Ю.

**Рецензент(ы):**

Миссаров М.Д.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Миссаров М. Д.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_г

Регистрационный No 711015

Казань  
2014

## **Содержание**

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Лернер Э.Ю. кафедра анализа данных и исследования операций отделение фундаментальной информатики и информационных технологий , Eduard.Lerner@gmail.com

## 1. Цели освоения дисциплины

Данная учебная дисциплина реализуется как цикл лекционных и лабораторных занятий, которые знакомят студентов с основными математическими структурами необходимыми для прикладной химии и хемоинформатики в особенности. Особое внимание уделяется обучению студентов использованию программы MATLAB для проведения математических расчетов.

## 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.В.8 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Цикл: М2.Р.8.

Дисциплина "Математические методы в химии" изучается в первом семестре первого курса обучающихся по направлению 020100 "Химия", профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование". Форма обучения - очная. Дисциплина относится к циклу М.2 профессиональных дисциплин, его вариативной части.

Данный курс является базовым для других учебных дисциплин, предусмотренных учебным планом.

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-2 (общекультурные компетенции)	умением принимать нестандартные решения
ОК-3 (общекультурные компетенции)	владением иностранным (прежде всего английским) языком в области профессиональной деятельности и межличностного общения
ОК-5 (общекультурные компетенции)	владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований
ПК-10 (профессиональные компетенции)	способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные алгебраические структуры, применяемые в химических приложениях

- основы анализа и геометрические методы исследования асимптотического поведения дифференциального уравнения;
- статистические методы обработки информации, в частности, метод главных компонент и методы исследования зависимостей.

2. должен уметь:

- оперировать с алгебраическими и аналитическими объектами, встречающимися в химических приложениях;
- понимать геометрический смысл многомерных алгебраических объектов и математических аналитических структур;
- провести первичную статистическую обработку данных и понимать их вероятностную природу;
- понижать размерность исходных данных без существенной потери информации;
- исследовать (математическими статистическими методами) эмпирические зависимости.

3. должен владеть:

- навыками алгебраической, функционально-аналитической и статистической грамотности;
- умением применять свои навыки в рамках существующих программных средств (пакетов аналитических вычислений).

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Решать поставленные задачи.

#### **4. Структура и содержание дисциплины/ модуля**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### **4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю**

##### **Тематический план дисциплины/модуля**

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Множество: конечное, бесконечное; отображения: в, на (инъекция, сюръекция), понятие взаимно-однозначного отображения (биекции). Понятие группы, нейтральный, обратный элемент группы, понятие коммутативной группы. Примеры: группа подстановок, отображений, целых чисел (по сложению), рациональных (без нуля) по умножению. Группы на множестве вещественных чисел. Понятие поля, поля рациональных и вещественных чисел, другие поля (конечные и комплексные). Основы работы в среде MATLAB (Matlab как научный калькулятор. Командное окно. Операции с числами. Типы данных. Простейшие операции с массивами. Ввод массивов, индексы	1	1	2	2	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Линейное пространство, примеры линейных пространств над вещественным полем (пространство векторов, матриц, классов специальных матриц). Линейная комбинация, базис и размерность линейного пространства. Теорема об эквивалентности любого конечномерного линейного пространства над полем вещественных чисел пространству $R^n$ . Операции по работе с матрицами среде MATLAB (операторы поэлементного сложения/вычитания матриц, операторы поэлементного деления/умножения матриц, Операторы умножения матрицы на вектор, матрицы на матрицу, операторы правого/левого деления матриц.	1	2,3	2	2	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Подпространства линейного пространства. Соотношение размерностей исходного пространства и подпространства. Геометрический смысл, примеры. Линейные отображения в фиксированном базисе, соответствие между линейными отображениями и матрицами. Композиция линейных отображений и произведение матриц. Системы линейных уравнений с невыврожденными матрицами и общие способы их решения. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла.	1	3,4	2	2	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Обратное отображение и обратная матрица. Совокупность невырожденных матриц и линейных отображений как группы. Примеры их подгрупп. Понятие скалярного произведения, ортогонального и ортонормированного базиса. Угол между векторами, площадь и объём в $R^n$ . Встроенные функции в среде Matlab. Оператор двоеточие	1	5	2	2	0	домашнее задание
5.	Тема 5. Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений.) Частные каталоги. М-файлы.	1	6,7	2	2	0	домашнее задание



N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Основы анализа. Понятие произвольной и интеграла и их геометрический смысл. Обобщение на многомерный случай. Градиент как основное направление убывания. Понятие дифференциального уравнения и геометрические методы исследования асимптотического поведения решения дифференциального уравнения. Программирование в среде MATLAB. Создание собственных функций	1	7,8	2	2	0	контрольная работа
7.	Тема 7. Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Плотность и функция распределения случайной величины. Примеры: равномерное, нормальное, показательное распределения. Визуализация расчетов в среде MATLAB. Анализ результатов.	1	9,10	2	2	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
8.	Тема 8. Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных. Выборочное среднее и дисперсия. Нормировка выборочных данных и её геометрический смысл. Ковариация как скалярное произведение и корреляция как косинус угла между векторами. Реализация методов обработки экспериментальных данных в среде Matlab	1	10,11	2	2	0	домашнее задание
9.	Тема 9. Метод наименьших квадратов и его геометрический смысл в пространстве признаков и в пространстве размерности количества наблюдений. Вывод основной формулы множественной регрессии исходя из проекции на подпространство, порождённое векторами-признаками. Итерационные методы решения задач.	1	12	2	2	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
10.	Тема 10. Выборочная ковариационная и Выборочная ковариационная и корреляционные матрицы и их свойства. Метод сингулярных разложений. Использование метода сингулярных разложений - главных компонент для понижения размерности признаков и для классификации наблюдений. Реализация итерационных методов решения задач в среде MATLAB	1	13,14	2	4	0	контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	экзамен
	Итого			20	22	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Множество: конечное, бесконечное; отображения: в, на (инъекция, сюръекция), понятие взаимно-однозначного отображения (биекции). Понятие группы, нейтральный, обратный элемент группы, понятие коммутативной группы. Примеры: группа подстановок, отображений, целых чисел (по сложению), рациональных (без нуля) по умножению. Группы на множестве вещественных чисел. Понятие поля, поля рациональных и вещественных чисел, другие поля (конечные и комплексные). Основы работы в среде MATLAB (Matlab как научный калькулятор. Командное окно. Операции с числами. Типы данных. Простейшие операции с массивами. Ввод массивов, индексы лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Множество: конечное, бесконечное; отображения: в, на (инъекция, сюръекция), понятие взаимно-однозначного отображения (биекции). Понятие группы, нейтральный, обратный элемент группы, понятие коммутативной группы. Примеры: группа подстановок, отображений, целых чисел (по сложению), рациональных (без нуля) по умножению. Группы на множестве вещественных чисел. Понятие поля, поля рациональных и вещественных чисел, другие поля (конечные и комплексные).

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Основы работы в среде MATLAB (Matlab как научный калькулятор. Командное окно. Операции с числами. Типы данных. Простейшие операции с массивами. Ввод массивов, индексы

**Тема 2. Линейное пространство, примеры линейных пространств над вещественным полем (пространство векторов, матриц, классов специальных матриц). Линейная комбинация, базис и размерность линейного пространства. Теорема об эквивалентности любого конечномерного линейного пространства над полем вещественных чисел пространству  $R^n$ . Операции по работе с матрицами среде MATLAB (операторы поэлементного сложения/вычитания матриц, операторы поэлементного деления/умножения матриц, Операторы умножения матрицы на вектор, матрицы на матрицу, операторы правого/левого деления матриц.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Линейное пространство, примеры линейных пространств над вещественным полем (пространство векторов, матриц, классов специальных матриц). Линейная комбинация, базис и размерность линейного пространства. Теорема об эквивалентности любого конечномерного линейного пространства над полем вещественных чисел пространству  $R^n$ .

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Операции по работе с матрицами среде MATLAB (операторы поэлементного сложения/вычитания матриц, операторы поэлементного деления/умножения матриц, Операторы умножения матрицы на вектор, матрицы на матрицу, операторы правого/левого деления матриц

**Тема 3. Подпространства линейного пространства. Соотношение размерностей исходного пространства и подпространства. Геометрический смысл, примеры. Линейные отображения в фиксированном базисе, соответствие между линейными отображениями и матрицами. Композиция линейных отображений и произведение матриц. Системы линейных уравнений с невырожденными матрицами и общие способы их решения. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Подпространства линейного пространства. Соотношение размерностей исходного пространства и подпространства. Геометрический смысл, примеры. Линейные отображения в фиксированном базисе, соответствие между линейными отображениями и матрицами. Композиция линейных отображений и произведение матриц. Системы линейных уравнений с невырожденными матрицами и общие способы их решения

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение систем линейных алгебраических уравнений. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла

**Тема 4. Обратное отображение и обратная матрица. Совокупность невырожденных матриц и линейных отображений как группы. Примеры их подгрупп. Понятие скалярного произведения, ортогонального и ортонормированного базиса. Угол между векторами, площадь и объём в  $R^n$ . Встроенные функции в среде Matlab. Оператор двоеточие**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Обратное отображение и обратная матрица. Совокупность невырожденных матриц и линейных отображений как группы. Примеры их подгрупп. Понятие скалярного произведения, ортогонального и ортонормированного базиса. Угол между векторами, площадь и объём в  $R^n$ .

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Встроенные функции в среде Matlab. Оператор двоеточие

**Тема 5. Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений.) Частные каталоги. М-файлы.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений. Функции нахождения собственных векторов и матриц в среде Matlab. (eig) Частные каталоги. М-файлы.

**Тема 6. Основы анализа. Понятие произвольной и интеграла и их геометрический смысл. Обобщение на многомерный случай. Градиент как основное направление убывания. Понятие дифференциального уравнения и геометрические методы исследования асимптотического поведения решения дифференциального уравнения. Программирование в среде MATLAB. Создание собственных функций**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Основы анализа. Понятие произвольной и интеграла и их геометрический смысл. Обобщение на многомерный случай. Градиент как основное направление убывания. Понятие дифференциального уравнения и геометрические методы исследования асимптотического поведения решения дифференциального уравнения.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Программирование в среде MATLAB. Создание собственных функций

**Тема 7. Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Плотность и функция распределения случайной величины. Примеры: равномерное, нормальное, показательное распределения. Визуализация расчетов в среде MATLAB. Анализ результатов.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Плотность и функция распределения случайной величины. Примеры: равномерное, нормальное, показательное распределения

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Визуализация расчетов в среде MATLAB. Анализ результатов.

**Тема 8. Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных. Выборочное среднее и дисперсия. Нормировка выборочных данных и её геометрический смысл. Ковариация как скалярное произведение и корреляция как косинус угла между векторами. Реализация методов обработки экспериментальных данных в среде Matlab**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных. Выборочное среднее и дисперсия. Нормировка выборочных данных и её геометрический смысл. Ковариация как скалярное произведение и корреляция как косинус угла между векторами

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Реализация методов обработки экспериментальных данных в среде Matlab

**Тема 9. Метод наименьших квадратов и его геометрический смысл в пространстве размерности признаков и в пространстве размерности количества наблюдений. Вывод основной формулы множественной регрессии исходя из проекции на подпространство, порождённое векторами-признаками. Итерационные методы решения задач.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Метод наименьших квадратов и его геометрический смысл в пространстве размерности признаков и в пространстве размерности количества наблюдений. Вывод основной формулы множественной регрессии исходя из проекции на подпространство, порождённое векторами-признаками.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Итерационные методы решения задач.

**Тема 10. Выборочная ковариационная и Выборочная ковариационная и корреляционные матрицы и их свойства. Метод сингулярных разложений. Использование метода сингулярных разложений - главных компонент для понижения размерности признаков и для классификации наблюдений. Реализация итерационных методов решения задач в среде MATLAB**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Выборочная ковариационная и Выборочная ковариационная и корреляционные матрицы и их свойства. Метод сингулярных разложений. Использование метода сингулярных разложений ? главных компонент для понижения размерности признаков и для классификации наблюдений.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Реализация итерационных методов решения задач в среде MATLAB

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Множество: конечное, бесконечное; отображения: в, на (инъекция, сюръекция), понятие взаимно-однозначного отображения (биекции). Понятие группы, нейтральный, обратный элемент группы, понятие коммутативной группы. Примеры: группа подстановок, отображений, целых чисел (по сложению), рациональных (без нуля) по умножению. Группы на множестве вещественных чисел. Понятие поля, поля рациональных и вещественных чисел, другие поля (конечные и комплексные). Основы работы в среде MATLAB (Matlab как научный калькулятор. Командное окно. Операции с числами. Типы данных. Простейшие операции с массивами. Ввод массивов, индексы	1	1	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Линейное пространство, примеры линейных пространств над вещественным полем (пространство векторов, матриц, классов специальных матриц). Линейная комбинация, базис и размерность линейного пространства. Теорема об эквивалентности любого конечномерного линейного пространства над полем вещественных чисел пространству $R^n$ . Операции по работе с матрицами среде MATLAB (операторы поэлементного сложения/вычитания матриц, операторы поэлементного деления/умножения матриц, Операторы умножения матрицы на вектор, матрицы на матрицу, операторы правого/левого деления матриц.	1	2,3	подготовка домашнего задания	8	домашнее задание



N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Подпространства линейного пространства. Соотношение размерностей исходного пространства и подпространства. Геометрический смысл, примеры. Линейные отображения в фиксированном базисе, соответствие между линейными отображениями и матрицами. Композиция линейных отображений и произведение матриц. Системы линейных уравнений с невырожденными матрицами и общие способы их решения. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла.	1	3,4	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
4.	Тема 4. Обратное отображение и обратная матрица. Совокупность невырожденных матриц и линейных отображений как группы. Примеры их подгрупп. Понятие скалярного произведения, ортонормированного базиса. Угол между векторами, площадь и объем в $R^n$ . Встроенные функции в среде Matlab. Оператор двоеточие	1	5	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание



N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений.) Частные каталоги. М-файлы.	1	6,7	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
				Подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
6.	Тема 6. Основы анализа. Понятие произвольной и интеграла и их геометрический смысл. Обобщение на многомерный случай. Градиент как основное направление убывания. Понятие дифференциального уравнения и геометрические методы исследования асимптотического поведения решения дифференциального уравнения. Программирование в среде MATLAB. Создание собственных функций	1	7,8	подготовка домашнего задания	6	контрольная работа
7.	Тема 7. Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Плотность и функция распределения случайной величины. Примеры: равномерное, нормальное, показательное распределения. Визуализация расчетов в среде MATLAB. Анализ результатов.	1	9,10	подготовка домашнего задания	8	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
8.	Тема 8. Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных. Выборочное среднее и дисперсия. Нормировка выборочных данных и её геометрический смысл. Ковариация как скалярное произведение и корреляция как косинус угла между векторами. Реализация методов обработки экспериментальных данных в среде Matlab	1	10,11	подготовка домашнего задания	8	домашнее задание
9.	Тема 9. Метод наименьших квадратов и его геометрический смысл в пространстве признаков и в пространстве размерности количества наблюдений. Вывод основной формулы множественной регрессии исходя из проекции на подпространство, порождённое векторами-признаками. Итерационные методы решения задач.	1	12	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
10.	Тема 10. Выборочная ковариационная и Выборочная ковариационная и корреляционные матрицы и их свойства. Метод сингулярных разложений. Использование метода сингулярных разложений - главных компонент для понижения размерности признаков и для классификации наблюдений. Реализация итерационных методов решения задач в среде MATLAB	1	13,14	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
	Итого				66	

### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Дисциплина представляет собой цикл лекционных и лабораторных занятий. Лабораторные занятия посвящены выработке базовых навыков создания и использования программ в пакете аналитических вычислений MATLAB для решения различных задач хемоинформатики. Практические занятия проходят в компьютерных классах с использованием интерактивной доски для наглядного представления алгоритмов и разработки программ на всех этапах ее создания и компиляции. Практические занятия проходят в интерактивной форме обсуждения решения различных задач или в активной форме самостоятельного решения задач студентами. Контроль за выполнением самостоятельной работы проявляется в функциональном тестировании выполненных студентами заданий на примерах, предложенных преподавателем.

### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

**Тема 1. Множество: конечное, бесконечное; отображения: в, на (инъекция, сюръекция), понятие взаимно-однозначного отображения (биекции). Понятие группы, нейтральный, обратный элемент группы, понятие коммутативной группы. Примеры: группа подстановок, отображений, целых чисел (по сложению), рациональных (без нуля) по умножению. Группы на множестве вещественных чисел. Понятие поля, поля рациональных и вещественных чисел, другие поля (конечные и комплексные). Основы работы в среде MATLAB (Matlab как научный калькулятор. Командное окно. Операции с числами. Типы данных. Простейшие операции с массивами. Ввод массивов, индексы домашнего задания, примерные вопросы:**

Имеются числа от  $\{1, \dots, n-1\}$ . На этом множестве операций над двумя элементами определяется по формуле:  $a*b=(axb) \bmod n$  (1) (\* - наша операция,  $x$  - обычное умножение). При каких  $n$  это множество будет образовывать группу? Если доопределить умножение по формуле (1) на множество  $\{0, \dots, n-1\}$  и ещё ввести на этом же множестве операцию сложения по формуле  $(a+b) \bmod n$  то будет ли оно (множество  $\{0, \dots, n-1\}$ ) с введёнными так операциями сложения и умножения образовывать поле?

**Тема 2. Линейное пространство, примеры линейных пространств над вещественным полем (пространство векторов, матриц, классов специальных матриц). Линейная комбинация, базис и размерность линейного пространства. Теорема об эквивалентности любого конечномерного линейного пространства над полем вещественных чисел пространству  $R^n$ . Операции по работе с матрицами среде MATLAB (операторы поэлементного сложения/вычитания матриц, операторы поэлементного деления/умножения матриц, Операторы умножения матрицы на вектор, матрицы на матрицу, операторы правого/левого деления матриц.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Описать все возможные матрицы  $A$  размерности  $2 \times 2$ , которые обладают таким свойством, что их квадрат совпадает с их исходной матрицей. (Указание: Попробуйте записать систему уравнений и решить её.) Далее, исследуйте как действуют такие матрицы  $A$  на вектора  $(x, y)$ : а) будет ли отображение взаимно однозначным или нет; б) куда отобразятся все точки плоскости в том случае, если отображение не взаимно-однозначно; в) после ответа на вопросы а) и б) для различных матриц  $A$ , выдвинуть гипотезы, как устроено отображение  $A$  в случае если оно не взаимно однозначно.

**Тема 3. Подпространства линейного пространства. Соотношение размерностей исходного пространства и подпространства. Геометрический смысл, примеры. Линейные отображения в фиксированном базисе, соответствие между линейными отображениями и матрицами. Композиция линейных отображений и произведение матриц. Системы линейных уравнений с невырожденными матрицами и общие способы их решения. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Имеются карточки с написанными на них числами  $1, 2, \dots, n^2$ . Двое по очереди заполняют этими карточками свободные места в таблице  $n$  на  $n$ . После заполнения таблицы считается определитель матрицы  $n$  на  $n$ . Если определитель  $> 0$ , то выигрывает первый, если  $< 0$ , то второй, если  $0$  - ничья. Кто выигрывает при правильной игре, если  $n=2$  (матрица  $2 \times 2$ ) или  $n=3$  (матрица  $3 \times 3$ ). Пример игры:  $n=2$ : Антон взял карточку с двойкой и поставил её в левый верхний угол. Преподаватель (потирая руки) взял карточку с единицей и поставил её в правый нижний угол. Потом Антон поставил в левый нижний угол тройку. После вставки четвёрки в оставшееся место образовалась матрица с отрицательным определителем. Преподаватель долго радовался своему выигрышу. Примечание по условию: правильной называется игра, когда каждый из соперников играет наилучшим для себя образом. Например, при правильной игре в крестики нолики никто не выигрывает ? получается ничья.

**Тема 4. Обратное отображение и обратная матрица. Совокупность невырожденных матриц и линейных отображений как группы. Примеры их подгрупп. Понятие скалярного произведения, ортогонального и ортонормированного базиса. Угол между векторами, площадь и объём в  $R^n$ . Встроенные функции в среде Matlab. Оператор двоеточие**

домашнее задание , примерные вопросы:

Какие дополнительные ограничения надо наложить на матрицу два на два с целочисленными элементами, чтобы обратная к ней также имела целочисленные элементы. Образуют ли все такие матрицы группу по умножению? Если да, то выделите в этой группе часть, состоящую из бесконечного количества матриц также являющуюся группой с той же операцией умножения.

**Тема 5. Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений.) Частные каталоги. М-файлы.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Если матрица  $A$  является симметричной, то все ее собственные числа вещественные. Доказать это для  $n=2$ . Напоминание: Собственные числа определяются как корни уравнения  $\det(A-\lambda I)=0$ .

контрольная работа , примерные вопросы:

1) Имеются одинаковые объёмы двух хорошо растворяющихся друг в друге жидкостей. Малое (по сравнению с общим объёмом) количество первой жидкости перелили во вторую, раствор тщательно перемешали, после чего ровно такое же получившегося раствора перелили обратно в первую жидкость. Спрашивается чего теперь больше: первой жидкости во втором растворе или второй жидкости в первом получившемся растворе? Замечание: вопрос можно понимать как вопрос о процентном соотношении, так и вопрос об абсолютном объёме, эти вопросы эквивалентны, поскольку после всех переливаний объёмы двух растворов, очевидно, стали одинаковыми. 2) Доказать, что если симметричная матрица  $A$  обладает свойством  $A^2=A$ , то собственные числа матрицы  $A$  равны либо 0, либо 1. 3) Докажите, что для произведения векторов  $x$  и  $y$  скалярное произведение  $\langle Ax, y \rangle$  совпадает со скалярным произведением  $\langle x, Ay \rangle$ , где  $A^T$  - транспонированная матрица  $a_{ij}=a_{ji}$ . 4) Докажите, что для любой строго монотонной (возрастающей или же убывающей) функции  $f(x)$  уравнение  $f(f(x))=x$  имеет в точности то же множество решений, что и уравнение  $f(x)=x$ .

**Тема 6. Основы анализа. Понятие произвольной и интеграла и их геометрический смысл. Обобщение на многомерный случай. Градиент как основное направление убывания. Понятие дифференциального уравнения и геометрические методы исследования асимптотического поведения решения дифференциального уравнения.**

**Программирование в среде MATLAB. Создание собственных функций**

контрольная работа , примерные вопросы:

В какой точке мы окажемся при минимизации функции  $2x^2+xy+2y^2+2yz+2z^2+22x$ , если начнём с точки  $(x,y,z)=(0,0,0)$  и сделаем пару шагов градиентного спуска.

**Тема 7. Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Плотность и функция распределения случайной величины. Примеры: равномерное, нормальное, показательное распределения. Визуализация расчетов в среде MATLAB. Анализ результатов.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Докажите что минус логарифм равномерно распределённого числа из отрезка  $[0,1]$  распределён по показательному закону с матожиданием единица.

**Тема 8. Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных. Выборочное среднее и дисперсия. Нормировка выборочных данных и её геометрический смысл. Ковариация как скалярное произведение и корреляция как косинус угла между векторами. Реализация методов обработки экспериментальных данных в среде Matlab**

домашнее задание , примерные вопросы:

Рассмотрите выборочный коэффициент корреляции между набором значений  $(x,y)$ : Найти его геометрический смысл. Для этого представьте числитель этой дроби как скалярное произведение векторов, а знаменатель как произведение этих векторов самих на себя (квадрат длины вектора) и воспользуйтесь школьной формулой для скалярного произведения. Подсказка: геометрический смысл коэффициента корреляции - это  $\cos$  некоторого угла. Исходя из геометрического смысла попробуйте оценить к какому диапазону изменяется корреляция.

**Тема 9. Метод наименьших квадратов и его геометрический смысл в пространстве размерности признаков и в пространстве размерности количества наблюдений. Вывод основной формулы множественной регрессии исходя из проекции на подпространство, порождённое векторами-признаками. Итерационные методы решения задач.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Методом наименьших квадратов построили регрессию  $y$  на  $x$  и регрессию  $x$  на  $y$ . Несмотря на то что обе линии регрессии лежат "как можно ближе к экспериментальным точкам в системе координат  $(x,y)$  они не совпадают. Почему? Доказать, что совпадение происходит в том и только в том случае, когда все точки лежат на одной прямой.



## Тема 10. Выборочная ковариационная и Выборочная ковариационная и корреляционные матрицы и их свойства. Метод сингулярных разложений. Использование метода сингулярных разложений - главных компонент для понижения размерности признаков и для классификации наблюдений. Реализация итерационных методов решения задач в среде MATLAB

контрольная работа , примерные вопросы:

1) Вычислите с помощью определённого интеграла объём конуса с радиусом  $R$  и высотой  $h$ . 2) Известно, что плотность распределения значения скорости молекулы газа вдоль оси абсцисс  $v_X$  и вдоль оси ординат  $v_Y$  описываются одним и тем же нормальным распределением с нулевым средним, причём распределения вдоль осей абсцисс и ординат независимы друг от друга, так что плотность совместного распределения скоростей представляет собой функцию от двух аргументов, равную произведению плотностей вдоль осей  $x$  и  $y$ . Проверьте, что квадрат скорости молекулы  $v^2_x + v^2_y$  описывается показательным законом. Указание: вычислите вероятность того, что случайная величина, распределённая по показательному закону, примет значение меньше  $z$  и сравните с вероятностью того, что наш квадрат будет меньше  $z$ . Вычисление последней вероятности сводится к двумерному интегралу, для его вычисления полезна полярная система координат (как с ней работать посмотрите самостоятельно). 3) Обоснуйте следующий способ генерации на компьютере стандартной нормально распределённой случайной величины: независимо генерируются 12 чисел, равномерно распределённых на отрезке  $[0,1]$ , затем из их суммы вычитается 6. Почему матожидание полученной случайной величины будет равно нулю, а дисперсия будет равна единице. 4) Докажите, что точка со средними значениями всех параметров лежит на гиперплоскости регрессии.

### Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Текущий контроль успеваемости производится с помощью выполнения студентами самостоятельных работ.

Задания на самостоятельную работу

- 1) Найдите прямоугольник наибольшей площади фиксированного периметра.
- 2) Вычислите пятимерный интеграл от функции  $(1+s)/(5+s+t+x+y+z)$  по переменным  $s,t,x,y,z$ , где каждая переменная меняется от 0 до 1.
- 3) Пусть многочлен в точке 2 имеет локальный минимум, 1 и 3 являются его корнями, причём на участке (1,2) он убывает, а на (2,3) возрастает. Может ли степень этого многочлена быть равной двум? А трём?
- 4) В нормальных условиях скорость роста концентрации некоторого вещества пропорциональна текущему её значению и отлнчию концентрации от уровня насыщения  $A$ , коэффициент пропорциональности пусть равен 1. То есть, дифференциальное уравнение для концентрации  $x$  в зависимости от времени  $t$  имеет вид  $dx/dt = x(t)(A-x(t))$ , в начальный момент времени  $x(0) < A$  (заметим, что при  $t \rightarrow \infty$  имеем  $x(t) \rightarrow A$ ). Однако, из-за постоянного отвода результатов реакции со скоростью  $v$  концентрация  $x(t)$  растёт вовсе не так (а при больших  $v$  и вовсе начинает падать): дифференциальное уравнение для концентрации на самом деле имеет вид  $dx/dt = x(t)(A-x(t))-vx(t)$ . Тем не менее, если  $v$  будет неизменна, то, в конце концов, всё стабилизируется, концентрация вещества станет практически постоянной. Спрашивается, каким сделать  $v$ , чтобы количество нашего вещества в отводимых продуктах реакции в единицу времени (оно вычисляется как произведение  $v x(t)$ ) было как можно больше?

### 7.1. Основная литература:

1. Вуколов Э.А. Основы статистического анализа. Практ. по стат. мет. и исслед. операций с исп. пакетов STATISTICA и EXCEL: Уч.пос./ Э.А.Вуколов - 2 изд., испр. и доп. - М.: Форум:НИЦ Инфра-М, 2013. - 464 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=369689>

2. Балдин, К. В. Теория вероятностей и математическая статистика [Электронный ресурс] : Учебник / К. В. Балдин, В. Н. Башлыков, А. В. Рукосуев. - 2-е изд. - М.: Дашков и К, 2010. - 473 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=414902>
3. Козлов А.Ю. Статистический анализ данных в MS Excel: Учебное пособие / А.Ю. Козлов, В.С. Мхитарян, В.Ф. Шишов. - М.: ИНФРА-М, 2014. - 320 с.: <http://znanium.com/bookread.php?book=429722>

## **7.2. Дополнительная литература:**

1. Поршнев, Сергей Владимирович. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB: учебное пособие: [для студентов вузов, обучающихся по специальностям Математика, Информатика, Физика] / С. В. Поршнев.-Издание 2-е, исправленное.-Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2011.-736 с. [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=650](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=650)
2. Будникова И. К. Статистические методы прогнозирования: учебно-методическое пособие для практических занятий. Казань [Казанский государственный энергетический университет], 2011. 99 с.
3. Чашкин Ю. Р. (Юрий Романович). Математическая статистика: анализ и обработка данных: учебное пособие для студентов высших учебных заведений. Изд. 2-е, перераб. и доп. Ростов-на-Дону Феникс, 2010. 236 с.

## **7.3. Интернет-ресурсы:**

Библиотека свободно-распространяемых книг по математике - <http://www.mccme.ru/free-books/>  
Видеолекции по различным разделам математики - [http://www.mathnet.ru/php/presentation.phtml?eventID=15&option\\_lang=rus#PRELIST15](http://www.mathnet.ru/php/presentation.phtml?eventID=15&option_lang=rus#PRELIST15)  
Портал электронных образовательных ресурсов Казанского федерального университета - <http://e.kpfu.ru/>  
Сообщество пользователей Matlab и Simulink - <http://matlab.exponenta.ru/>  
Электронные образовательные ресурсы Института ВМиИТ-ВМК - <http://kek.ksu.ru>  
Электронные образовательные ресурсы Института ВМиИТ-ВМК - [http://kpfu.ru/main\\_page?p\\_sub=7046](http://kpfu.ru/main_page?p_sub=7046)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Математические методы в химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Для проведения практических занятий требуется компьютерный класс с предустановленным программным обеспечением (MATLAB). Соответствующая учебная лицензия у КФУ имеется.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .



Автор(ы):

Лернер Э.Ю. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Миссаров М.Д. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.