

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



УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Д.А. Гаюровский  
01 » июня 2021 г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Математические методы в химии

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия  
Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование  
Квалификация выпускника: магистр  
Форма обучения: очное  
Язык обучения: русский  
Год начала обучения по образовательной программе: 2022

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
  - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
  - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

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

### 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач
ПК-4	Способен объективно оценивать полученные результаты исследований и обосновывать перспективы проведенных исследований в выбранной области химии

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

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.

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.

Должен владеть:

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

Должен демонстрировать способность и готовность:

Решать поставленные задачи.

### 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.05 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 1 курсе в 1 семестре.

### 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

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

Контактная работа - 39 часа(ов), в том числе лекции - 0 часа(ов), практические занятия - 38 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 51 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 54 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 1 семестре.

#### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

##### 4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тель-ная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Множество. Понятие группы. Понятие поля. Основы работы в среде Wolfram MATHEMATICA	1	0	0	4	0	0	0	
2.	Тема 2. Линейное пространство	1	0	0	4	0	0	0	6
3.	Тема 3. Подпространства линейного пространства	1	0	0	4	0	0	0	6
4.	Тема 4. Обратное отображение и обратная матрица	1	0	0	4	0	0	0	6
5.	Тема 5. Собственные числа и собственные вектора матриц. Основы анализа.	1	0	0	6	0	0	0	12
6.	Тема 6. Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных.	1	0	0	8	0	0	0	12
7.	Тема 7. Метод наименьших квадратов	1	0	0	4	0	0	0	4
8.	Тема 8. Выборочная ковариационная и корреляционная матрицы и их свойства	1	0	0	4	0	0	0	5
	Итого		0	0	38	0	0	0	51

##### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

###### Тема 1. Множество. Понятие группы. Понятие поля. Основы работы в среде Wolfram MATHEMATICA

Множество: конечное, бесконечное; отображения: в, на (инъекция, сюръекция), понятие взаимно-однозначного отображения (биекция). 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 Wolfram MATHEMATICA: особенности интерфейса; операции с числами; ввод данных.

###### Тема 2. Линейное пространство

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 в среде Wolfram MATHEMATICA (операторы поэлементного сложения/вычитания матриц, операторы поэлементного деления/умножения матриц, Операторы умножения матрицы на вектор, матрицы на матрицу).

###### Тема 3. Подпространства линейного пространства

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 в пакетах. Управляющие операторы. Логические операторы. Операторы цикла.

###### Тема 4. Обратное отображение и обратная матрица

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  $\mathbb{R}^n$ . Функции в среде Mathematica для нахождения обратных матриц, определителей и скалярного умножения.

#### **Тема 5. Собственные числа и собственные вектора матриц. Основы анализа.**

Собственные числа и собственные вектора матриц. Теорема о вещественности собственных чисел симметричных матриц и ортогональности собственных векторов для различных собственных значений.) Нахождение собственных чисел и векторов в среде пакета. 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. Операции анализа в среде wolfram Mathematica

#### **Тема 6. Основные законы распределения случайных величин и способы их задания. Выборка, гистограмма, соотношение между вероятностными и статистическими объектами. Методы обработки экспериментальных данных.**

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

#### **Тема 7. Метод наименьших квадратов**

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. Операции метода наименьших квадратов и регрессионного анализа в среде Wolfram Mathematica.

#### **Тема 8. Выборочная ковариационная и корреляционная матрицы и их свойства**

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 метода главных компонент в среде Wolfram Mathematica

### **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

### **6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)**

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

### 7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

### 8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Mathematical Python - <https://www.math.ubc.ca/~pwalls/math-python/>

Библиотека свободно-распространяемых книг по математике - <https://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)

Математика и Python для анализа данных - <https://ru.coursera.org/learn/mathematics-and-python>

Сообщество пользователей Matlab и Simulink - <http://matlab.exponenta.ru/>

### 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	Поскольку времени, отводимого для компьютерных занятий, абсолютно недостаточно для выполнения заданий, студенты занимаются их выполнением также в рамках самостоятельной работы. Таким образом, аудиторные практические занятия предназначены, прежде всего, для того чтобы студенты задавали вопросы преподавателю и сдавали этапы задания. Остальная работа выполняется самостоятельно.

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;</li> <li>- подготовку к практическим занятиям, устным опросам и контрольной работе;</li> <li>- работу с Интернет-источниками;</li> <li>- подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена, выполнение домашнего задания.</li> </ul> <p>Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, разобранный на занятиях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.</p>
экзамен	<p>Подготовка к экзамену способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к экзамену, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. При подготовке к экзамену необходимо опираться на лекции и рекомендованную литературу. Вначале следует просмотреть весь материал по сдаваемой дисциплине, отметить для себя трудные вопросы. Обязательно в них разобраться. В заключение еще раз целесообразно повторить основные положения.</p>

**10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

**11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

**12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;

- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;

- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;

- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".



### Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2022

#### Основная литература:

1. Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций : учебник / Ю. Г. Марков, И. В. Маркова. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 192 с. - ISBN 978-5-8114-1483-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/168610> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Рубашкина, Е. В. Линейная алгебра. Линейные операторы. Квадратичные формы. Комплексные числа: учебное пособие / Рубашкина Е.В. - Москва : НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 38 с. (Высшее образование). - ISBN 978-5-16-011858-1. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/544419> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
3. Козлов, А. Ю. Статистический анализ данных в MS Excel : учебное пособие / А.Ю. Козлов, В.С. Мхитарян, В.Ф. Шишов. - Москва : ИНФРА-М, 2021. - 320 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - DOI 10.12737/2842. - ISBN 978-5-16-004579-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1684740> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
4. Бортаковский, А. С. Линейная алгебра в примерах и задачах : учебное пособие / А. С. Бортаковский, А. В. Пантелеев. - 3-е изд., стер. - Москва : ИНФРА-М, 2020. - 592 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-010586-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1045621> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
5. Элементы линейной алгебры: учебное пособие / Гулай Т.А., Долгополова А.Ф., Жукова В.А. - Ставрополь: Сервисшкола, 2017. - 88 с. : ISBN. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/976992> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа : по подписке.

#### Дополнительная литература:

1. Балдин, К. В. Основы теории вероятностей и математической статистики : учебник / К. В. Балдин, В. Н. Башлыков, А. В. Рукосуев. - 5-е изд., стер. - Москва : ФЛИНТА, 2021. - 489 с. - ISBN 978-5-9765-2069-1. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1588066> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа : по подписке.
2. Буре, В. М. Теория вероятностей и математическая статистика : учебник / В. М. Буре, Е. М. Парилина. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 416 с. - ISBN 978-5-8114-1508-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/168536> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Левин, В. А. Элементы линейной алгебры и аналитической геометрии на базе пакета 'Matematica' : учебное пособие / В. А. Левин, В. В. Калинин, Е. В. Рыбалка. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2007. - 192 с. - ISBN 978-5-9221-0799-0. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/2250> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Титов, К. В. Функции комплексной переменной, ряды и операционное исчисление: Компьютерные технологии решения задач и примеров в Wolfram Mathematica : учебное пособие / К.В. Титов, Н.Д. Горелов. - Москва : РИОР : ИНФРА-М, 2019. - (Высшее образование). - 238 с. - <https://doi.org/10.12737/25089>. - ISBN 978-5-16-105087-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1021442> (дата обращения: 21.05.2021). - Режим доступа : по подписке.

**Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2022

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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, учебно-методические комплексы, 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 образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.