

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



*подписано электронно-цифровой подписью*

## **Программа дисциплины**

Интеллектуальный анализ данных 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: 2024

## 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): младший научный сотрудник, б/с Фатыхова А.А. (НИЛ Интеллектуальная химическая робототехника, Отдел органической химии), AdAFatyhova@kpfu.ru

### 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-4	Способен объективно оценивать полученные результаты исследований и обосновывать перспективы проведенных исследований в выбранной области химии

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные методы интеллектуального анализа данных;
- математические основы методов линейной регрессии, частичных наименьших квадратов, поддерживающих векторов, искусственных нейронных сетей, методов Байеса;
- алгоритмы работы методов интеллектуального анализа данных;
- ограничения, которые накладываются на данные, при использовании различных методов анализа.

Должен уметь:

- строить различные регрессионные и классификационные модели с использованием методов интеллектуального анализа данных;
- подбирать оптимальные значения подгоночных параметров модели;
- подбирать методы для решения конкретных задач;
- валидировать и определять статистическую значимость моделей;
- использовать методы интеллектуального анализа данных в различных приложениях химии.

Должен владеть:

- основными программами, предназначенными для интеллектуального анализа данных.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- анализировать базы данных; сопоставлять информацию из различных источников.
- использовать методы интеллектуального анализа данных для решения тех или иных проблем химии.

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

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.03.01 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 2 курсе в 3 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 5 зачетных(ые) единиц(ы) на 180 часа(ов).

Контактная работа - 40 часа(ов), в том числе лекции - 20 часа(ов), практические занятия - 20 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 86 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 3 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. Основы теории статистического обучения	3	2	0	2	0	0	0	
2.	Тема 2. Множественная линейная регрессия	3	2	0	2	0	0	0	8
3.	Тема 3. Метод главных компонент. Метод частичных наименьших квадратов	3	2	0	2	0	0	0	10
4.	Тема 4. Искусственные нейронные сети.	3	2	0	2	0	0	0	10
5.	Тема 5. Деревья принятия решений.	3	2	0	2	0	0	0	10
6.	Тема 6. Метрические методы обучения.	3	2	0	2	0	0	0	10
7.	Тема 7. Метод опорных векторов (SVM).	3	4	0	4	0	0	0	10
8.	Тема 8. Байесов подход к машинному обучению. Наивный байесов классификатор.	3	2	0	2	0	0	0	10
9.	Тема 9. Обучение без учителя. Кластеризация.	3	2	0	2	0	0	0	18
	Итого		20	0	20	0	0	0	86

**4.2 Содержание дисциплины (модуля)**

**Тема 1. Основы теории статистического обучения**

Введение в дисциплину. Интеллектуальный анализ данных, машинное обучение и статистическое обучение. Основные принципы машинного обучения. Задачи машинного обучения. Основные принципы машинного обучения. Принципы построения моделей в классической статистике. Функция правдоподобия и метод наименьших квадратов (МНК). Понятие об оверфиттинге, об обучающих и контрольных выборках, внутреннем и внешнем, перекрестном и скользящем контроле. Основные понятия статистической теории обучения Вапника-Червонинкиса. Информационный подход к машинному обучению. Принцип минимальной длины описания моделей.

**Тема 2. Множественная линейная регрессия**

Линейная регрессия. Множественная линейная регрессия (MLR). Основы метода. Проблема скоррелированности и значимости дескрипторов. Отбор дескрипторов. Пошаговая MLR. Быстрая постадийная множественная линейная регрессия. Построение линейных моделей с регуляризацией. Понятие о регуляризации. Основы метода гребневой регрессии. Определение оптимального значения коэффициента регуляризации для гребневой регрессии.

**Тема 3. Метод главных компонент. Метод частичных наименьших квадратов**

Понятие о многомерном анализе данных. Метод главных компонент (PCA). Построение PCA. Алгоритм NIPALS. Метод частичных наименьших квадратов (PLS). Оценка статистической значимости моделей PLS. Модификация алгоритма NIPALS для PLS. Геометрический смысл. Визуализация результатов. Использование метода главных компонент и метода частичных наименьших квадратов для снижения размерности дескрипторного пространства.

**Тема 4. Искусственные нейронные сети.**

Искусственные нейронные сети. Основные понятия: нейрон, входной, скрытый выходной, слой, вес, функция ошибки сети. Основы подхода. Сети обратного распространения. Методы обучения нейронной сети. Методы оптимизации весов. Самоорганизующиеся карты Кохонена. Сети встречного распространения. Сети с радиальной базисной функцией (RBF-, GR-, P- нейросети). Сети на основе теории адаптивного резонанса. Индуктивное обучение с использованием нейронных сетей.

**Тема 5. Деревья принятия решений.**

Деревья принятия решений. Основы подхода. Структура дерева принятия решений. Энтропия и прирост информации. Индекс Джини. Выращивание, переобучение и обрезка дерева. Деревья CART, C4.5. Преимущества использования деревьев решений. Недостатки метода. Области применения деревьев решений. Метод случайного леса.

#### **Тема 6. Метрические методы обучения.**

Метрические методы прогнозирования. Идеология метрических методов. Метод k ближайших соседей (kNN) и его обобщения. Проблема быстрого поиска ближайших соседей. kd-деревья. Проблема "проклятия размерности" и методы ее решения: проецирование данных на пространство меньшей размерности, отбор признаков с использованием методов комбинаторной оптимизации.

#### **Тема 7. Метод опорных векторов (SVM).**

Метод опорных векторов (SVM). Идеология метода опорных векторов. Математические основы метода. Поиск разделяющей гиперплоскости, метод Лагранжа. Прямая и дуальная формулировка. Ядра скалярного произведения. Пространство признаков. Kernel trick. Решение регрессионных задач (SVR). Метод одноклассовой классификации (1-SVM, SVDD).

#### **Тема 8. Байесов подход к машинному обучению. Наивный байесов классификатор.**

Байесов подход к машинному обучению. Основы Байесова подхода. Приорное и постериорное распределение вероятности. "Наивный" Байесов классификатор. Лапласовское смягчение. Гауссовы процессы для регрессии. Использование ядра сходства для построения нелинейных зависимостей. Генеративные топографические карты (GTM).

#### **Тема 9. Обучение без учителя. Кластеризация.**

Обучение без учителя. Кластеризация. Классификация методов кластеризации. Методы иерархической кластеризации: аггломеративные и дивизимные методы. Методы неиерархической кластеризации: метод единичного прохода, метод ближайшего соседа, метод релокаций. Монотенические методы. Политенические методы. Синглтоны.

### **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)

Virtual Computational Chemistry Laboratory - <http://www.vcclab.org/>

Машинное обучение - <http://www.machinelearning.ru>

Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов) -

[http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Машинное\\_обучение\\_\(курс\\_лекций%2C\\_К.В.Воронцов\)](http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Машинное_обучение_(курс_лекций%2C_К.В.Воронцов))

Программа ISIDA-QSPR - <http://www.vpsolovev.ru/programs/>

Программа Weka (Waikato Environment for Knowledge Analysis) - <http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.
практические занятия	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.

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, законспектированный на лекциях, 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> <p>Работа с конспектом лекций          Просмотрите конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p>
экзамен	<p>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. Каждый экзаменационный билет содержит два вопроса.</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: 2024

#### Основная литература:

1. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек . - Казань : [Казанский университет], 2013 . - ; 20. Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т . - Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 . - 302 с.
2. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек . - Казань : [Казанский университет], 2013 . - ; 20. Ч. 4: Методы машинного обучения / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т . - Казань : [Издательство Казанского университета], 2016 . - 329 с.
3. Кохонен, Т. Самоорганизующиеся карты : учебное пособие / Т. Кохонен ; перевод с английского В. Н. Агеева ; художник Н. А. Лозинская. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 660 с. - ISBN 978-5-00101-179-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/176447> (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
4. Макшанов, А. В. Технологии интеллектуального анализа данных : учебное пособие / А. В. Макшанов, А. Е. Журавлев. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 212 с. - ISBN 978-5-8114-4493-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/206711> (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

#### Дополнительная литература:

1. Маджидов, Т.И. Введение в хемоинформатику: учебное пособие. Ч.1. Компьютерное представление химических структур / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Казанский университет, 2013. - 174 с.
2. Буховец, А. Г. Алгоритмы вычислительной статистики в системе R : учебное пособие / А. Г. Буховец, П. В. Москалев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 160 с. - ISBN 978-5-8114-1802-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/212195> (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Гусева, Е. Н. Теория вероятностей и математическая статистика : учебное пособие / Е. Н. Гусева. - 7-е изд., стер. - Москва : Флинта, 2021. - 220 с. - ISBN 978-5-9765-1192-7. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1843158> (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: по подписке.
4. Николенко, С. И. Самообучающиеся системы : монография / С. И. Николенко, А. Л. Тулупев. - Москва : МЦНМО, 2009. - 288 с. - ISBN 978-5-94057-506-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/9378> (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

**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: 2024

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.