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
Е.А. Турилова
17 февраля 2023 г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Хемометрика

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

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Программу дисциплины разработал(а)(и): заведующий кафедрой, д.н. (профессор) Евтюгин Г.А. (Кафедра аналитической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Gennady.Evtugyn@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:

- принципы методов исследования в химии;
- основные методы химического анализа;
- основные методы планирования и организации эксперимента;
- основные методы инновационного развития аналитического контроля природных и техногенных объектов;
- взаимосвязь состава, структуры и свойств веществ, сырья и материалов;
- основные принципы химического анализа в аналитических лабораториях.

Должен уметь:

- Использовать основные понятия и терминологию химического анализа в аналитических лабораториях;
- Использовать математический аппарат статистики в организации эксперимента;
- Использовать методы оценки показателей точности;
- Выполнять расчеты показателей аналитического контроля природных и техногенных объектов.

Должен владеть:

- метрологическими основами обработки данных химического анализа;
- методологией выбора методики математической обработки данных химического анализа.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- анализировать экспериментальные данные с использованием подходов хемометрики.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.03.02 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

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Самостоятельная работа
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практические занятия, всего	Практические в эл. форме	Лабораторные работы, всего	Лабораторные в эл. форме	
1.	Тема 1. Хемометрика. Предмет и задачи хемометрики.	3	2	0	2	0	0	0	12
2.	Тема 2. Метрологические основы химического анализа.	3	4	0	4	0	0	0	12
3.	Тема 3. Дисперсионный анализ.	3	2	0	2	0	0	0	12
4.	Тема 4. Метод наименьших квадратов.	3	2	0	2	0	0	0	12
5.	Тема 5. Основы теории планирования эксперимента.	3	4	0	2	0	0	0	13
6.	Тема 6. Обработка аналитического сигнала.	3	2	0	2	0	0	0	
7.	Тема 7. Многокомпонентный анализ.	3	2	0	2	0	0	0	12
8.	Тема 8. Интеллектуальный анализ данных и его использование в хемометрике.	3	2	0	4	0	0	0	13
	Итого		20	0	20	0	0	0	86

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Хемометрика. Предмет и задачи хемометрики.

Предмет и задачи хемометрики. История развития хемометрики как науки в работах российских и зарубежных ученых. Распознавание образов. Искусственный интеллект. Анализ исследовательских данных. Отличие исследовательского анализа данных от проверки статистических гипотез. Взаимосвязь между отдельными стадиями химического анализа.

Тема 2. Метрологические основы химического анализа.

Химический анализ как метрологическая процедура. Результат анализа как случайная величина. Погрешности, способы их классификации. Основные источники погрешностей в химическом анализе. Статистические критерии: математическое ожидание (генеральное среднее) и генеральная дисперсия случайной величины, выборочное среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительная вероятность и доверительный. интервал. Первичная обработка экспериментальных результатов. Построение полигона и гистограммы распределения экспериментальных результатов. Нормальное распределение. Критерий Пирсона. Статистические гипотезы. Проверка гипотезы о нормальном распределении результатов анализа. Применение статистических гипотез в анализе. Промахи и методы их исключения. Систематические погрешности в химическом анализе. Правильность и способы проверки правильности. Погрешности косвенных измерений.

Тема 3. Дисперсионный анализ.

Визуализация данных, форматы представления данных.Определение источника вариации данных. Однофакторный дисперсионный анализ (на примере проверки влияния различных методик проведения химического анализа в разных лабораториях). Ошибка сопоставимости. Ход простого дисперсионного анализа: распределение цифрового материала на группы, определение случайных ошибок внутри групп, расчет степеней свободы и дисперсий. Зависимость точности данных от числа участвующих в анализе лабораторий. Источники случайной ошибки. Устранение ошибок. Двухфакторный дисперсионный анализ.

Тема 4. Метод наименьших квадратов.

Метод наименьших квадратов. Суть метода наименьших квадратов. Использование метода наименьших квадратов в аналитической химии. Метод наименьших квадратов в в регрессионном анализе (аппроксимация данных). Взвешенный метод наименьших квадратов. Погрешность анализа с использованием метода наименьших квадратов.

Тема 5. Основы теории планирования эксперимента.

Однофакторный эксперимент. Критерии выбора вида математической модели химического процесса. Требования к математической модели. Оценка адекватности математической модели. Регрессионный анализ. Применение регрессионного анализа для построения градуировочных зависимостей. Коэффициент корреляции. Метод наименьших квадратов. Многофакторный эксперимент. Поверхность отклика. Методы определения вида и параметров математической модели химического процесса по экспериментальным данным. Метод Брандона. Математическое планирование аналитического эксперимента. Полный факторный эксперимент. Оценка значимости факторов математической модели. Повышение эффективности эксперимента. Дробные реплики. Центральное композиционное планирование. Контурно-графический анализ. Латинские квадраты и прямоугольники. Методы нахождения экстремума функции одной переменной. Линейное программирование. Симплекс-метод. Нелинейное программирование. Методы нелинейного программирования. Методы нахождения функции нескольких переменных. Метод деформируемого многогранника.

Тема 6. Обработка аналитического сигнала.

Методы численного интегрирования. Дифференциальная спектроскопия. Повышение информационного содержания аналитического сигнала. Оценка параметров сигнала. Разрешение сложных аналитических сигналов. Дифференциальная спектроскопия. Выделение отдельных компонент сигнала. Методы численного интегрирования

Тема 7. Многокомпонентный анализ.

Сбор, обработка, хранение и отображение результатов анализа, планирование и оптимизация экспериментов. Базы данных, основные принципы их построения и использования. Обработка многомерных данных: центрирование, нормирование, взвешивание. Понятие о факторном анализе. Общие сведения о методах оптимизации и планирования эксперимента. Основные

понятия и определения: факторы (параметры или входы), выход (оптимизируемый параметр

или функция отклика); факторное пространство, поверхность отклика; математическое

описание процесса или математическая модель. Систематический ход процедуры

оптимизации: выбор целевой функции, выбор наиболее значимых факторов, оптимизация

(стратегии одновременной и последовательной оптимизации). Графическая зависимость

отклика от влияющих факторов. Основные принципы планирования экспериментов:

принцип "прочих равных", повторные измерения, рандомизация, группировка

экспериментов в блоки, факторный эксперимент, смешанные оценки, симметрия плана.

Методы полного факторного эксперимента и дробных реплик. Матрица планирования

эксперимента. Дробный факторный эксперимент. Оптимизация по методу крутого

восхождения.

Тема 8. Интеллектуальный анализ данных и его использование в хемометрике.

Основные методы интеллектуального анализа данных: метод опорных векторов, искусственных нейронных сетей, метод частичных наименьших квадратов. Визуализация многомерных данных с использованием методов интеллектуального анализа: анализ главных компонент, карты Кохонена, генеративные топографические карты. Алгоритм NIPALS.

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 №14-55-996ин/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)

основы хемометрики и химической метрологии. Гармаш А.В. - http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-analyt/2.html

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

Российское Хемометрическое Общество - http://rcs.chemometrics.ru/

Хемометрика: достижения и перспективы - http://rcs.chemometrics.ru/papers/UspKhim75_302.pdf

Хемометрическая группа в Институте химической физики РАН (ИХФ РАН) - http://chemometrics.chph.ras.ru/

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	Рабочей программой дисциплины предусмотрено два вида практических занятий: семинар и выполнение практического задания с использованием персонального компьютера. Подготовка к семинару включает 2 этапа: 1й - организационный; 2й - закрепление и углубление теоретических знаний. На первом этапе студент планирует свою самостоятельную работу, которая включает: - уяснение задания на самостоятельную работу; - подбор рекомендованной литературы; - составление плана работы, в котором определяются основные пункты предстоящей подготовки. Составление плана дисциплинирует и повышает организованность в работе. Второй этап включает непосредственную подготовку студента к семинару. Начинать надо с изучения рекомендованной литературы. Необходимо помнить, что на лекции обычно рассматривается не весь материал, а только его часть. Остальная его часть восполняется в процессе самостоятельной работы. В связи с этим работа с рекомендованной литературой обязательна. Особое внимание при этом необходимо обратить на содержание основных положений и выводов, объяснение явлений и фактов, уяснение практического приложения рассматриваемых теоретических вопросов. В процессе этой работы студент должен стремиться понять и запомнить основные положения рассматриваемого материала, примеры, поясняющие его, а также разобраться в иллюстративном материале. Заканчивать подготовку следует составлением плана (конспекта) по изучаемому материалу (вопросу). Это позволяет составить концентрированное, сжатое представление по изучаемым вопросам. Рекомендации при выполнении практического задания с использованием персонального компьютера: Каждый обучающийся должен заранее подготовиться к очередному занятию и явиться с тетрадью для ведения протокола исследований (черновиком). Неподготовленные студенты к работе не допускаются. К следующему занятию каждый обучающийся должен представить отчет о предыдущей выполненной работе по установленной форме (в отчете следует указать номер работы, ее название, цели, задачи, кратко описать ход работы, полученные результаты и выводы).
самостоя-тельная работа	Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, устным опросам и контрольной работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена, выполнение домашнего задания. 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. 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.
экзамен	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.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.03.02 Хемометрика

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. Вершинин, В. И. Аналитическая химия : учебник для вузов / В. И. Вершинин, И. В. Власова, И. А. Никифорова. - 4-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 428 с. - ISBN 978-5-8114-9166-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/187750 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Аналитическая химия: химические методы анализа : учебник / Е. Г. Власова, А. Ф. Жуков, И. Ф. Колосова [и др.] ; под редакцией О. М. Петрухина, Л. Б. Кузнецовой. - 2-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 467 с. - ISBN 978-5-93208-502-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/166725 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

3.Методы и достижения современной аналитической химии : учебник для вузов / Г. К. Будников, В. И. Вершинин, Г. А. Евтюгин [и др.] ; Под редакцией проф. В. И. Вершинина. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 588 с. - ISBN 978-5-8114-7962-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/169809 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Вершинин, В. И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента : учебное пособие для вузов / В. И. Вершинин, Н. В. Перцев. - 5-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 236 с. - ISBN 978-5-8114-9167-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/187754 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Муравьева, И. В. Методы контроля и анализа веществ. Потенциометрический метод контроля и анализа веществ : учебное пособие / И. В. Муравьева, О. Л. Скорская. - Москва : МИСИС, 2012. - 45 с. - ISBN 978-5-87623-589-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/47430 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Смагунова, А. Н. Математическое планирование эксперимента в методических исследованиях аналитической химии : учебное пособие для вузов / А. Н. Смагунова, Г. В. Пашкова, Л. И. Белых. - 4-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 120 с. - ISBN 978-5-8114-9176-6. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/187782 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Адлер, Ю. П. Методология и практика планирования эксперимента в России : монография / Ю. П. Адлер, Ю. В. Грановский. - Москва : МИСИС, 2016. - 182 с. - ISBN 978-5-87623-990-7. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: https://e.lanbook.com/book/93686 (дата обращения: 13.02.2024). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.03.02 Хемометрика

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.