

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р

Програма навчальної дисципліни

ХЕМОІНФОРМАТИКА ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ
ДЛЯ ХІМІКІВ

напряом 6.040101 – «Хімія»

хімічний факультет

2015 / 2016 навчальний рік

Програму обговорено та рекомендовано до затвердження Вченою радою хімічного факультету

“ 27 ” серпня 2015 року, протокол № 7

Зі змінами та доповненнями затверджено Вченою радою хімічного факультету

“25” вересня 2015 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Холін Юрій Валентинович, д.х.н., професор, в.о. завідувача кафедри хімічного матеріалознавства,

Іванов Володимир Венедиктович, д.х.н., професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства,

Христенко Інна Василівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри хімічного матеріалознавства,

Пантелеймонов Антон Віталійович, к.х.н., доцент, доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

“26” серпня 2015 року, протокол № 1.

Зі змінами та доповненнями схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства;

21 вересня 2015 року, протокол № 2

В.о. завідувача кафедри хімічного матеріалознавства

Холін Ю.В.

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

“24” серпня 2015 року, протокол № 2.

Голова методичної комісії хімічного факультету

Юрченко О.І.

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Хемоінформатика та інформаційні технології для хіміків” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки бакалавра напряму 6.040101 – «Хімія»

Предметом вивчення навчальної дисципліни є

Хемоінформатика як міждисциплінарна наукова концепція на границі хімії та інформатики та основи інформаційних технологій для хіміків

Програма навчальної дисципліни складається з таких розділів:

1. Мета та завдання навчальної дисципліни.
2. Опис навчальної дисципліни.
3. Виклад змісту навчальної дисципліни.
4. Структура навчальної дисципліни.
5. Теми лабораторних занять.
6. Самостійна робота.
7. Індивідуальні завдання.
8. Методи навчання.
9. Методи контролю.
10. Розподіл балів, які отримують студенти.
11. Методичне забезпечення.

1. Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є

надання студентам, які навчаються за напрямом „Хімія” за ОКР бакалавр базових навичок використання комп’ютерів. Студенти навчаються як кваліфіковані користувачі персонального комп’ютера та використовують комп’ютерні технології для розв’язання типових навчальних та наукових задач, працюють з текстами, оволодівають основами роботи в Інтернет, вивчають програмні пакети, що використовуються для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є

- вивчення основ комп’ютерної грамотності;
- знайомство студентів із комп’ютерними технологіями для розв’язання типових навчальних та наукових задач;
- оволодіння програмними засобами для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.3. Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати: теоретичні засади інформаційних технологій та їх поєднання з актуальними хімічними задачами, принципи роботи електронно-обчислювальних машин, загальне підґрунтя побудови програмного забезпечення, основи роботи глобальних і локальних комп’ютерних мереж, спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи, принципи комп’ютерних обчислень, основні розрахункові методи, основи матричної алгебри, засади застосування матриць в опису хімічних реакцій, стехіометрію хімічних реакцій, методи розрахунку матеріального балансу, основи регресійного аналізу, теорію інформації в хімії, теорію графів у хімії, метод адитивних схем, засоби розв’язання некоректних задач в хімічних розрахунках.

вміти: користуватися наявними програмними пакетами та пропонувати власні алгоритми для розв'язання хімічних задач, створювати документи за допомогою текстових процесорів, застосовувати редактори хімічних формул для відображення молекул і реакцій, створювати електронні презентації, створювати та обробляти таблиці даних, працювати з математичними та логічними функціями, масивами, будувати діаграми та графіки, апроксимувати експериментальні залежності фізико-хімічними закономірностями, чисельно диференціювати та інтегрувати, проводити матричні операції, розв'язувати системи лінійних рівнянь, застосувати матричний підхід до опису хімічних реакцій, використовувати рівняння матеріального балансу, застосувати регресійний аналіз для обробки експериментальних даних, використати теорію графів, топологічні індекси та адитивні схеми для розв'язання задач QSAR- та QSPR-аналізу.

2. Опис навчальної дисципліни

Найменування показника	Галузь знань (предметна область), напрям, спеціальність, рівень вищої освіти / освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів 4	Галузь знань (предметна область) <u>0401 – “Природничі науки”</u>	Нормативна	
Індивідуальне науково-дослідне завдання	Напрямок: <u>6.040101 “хімія”</u>	Рік підготовки	
Загальна кількість годин 120	Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) бакалавр	2-й	2-й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 72 самостійної роботи студента – 48		Семестр	
		3-й	3-й
		Лекції	
		36 год.	4 год.
		Практичні, семінарські	
		0 год.	8 год.
		Лабораторні	
		36 год.	0 год.
		Самостійна робота	
		48 год.	108 год.
		Індивідуальні завдання:	
		0 год.	
Вид контролю:			
підсумковий семестровий контроль: екзамен	контрольна робота; підсумковий семестровий контроль екзамен		

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить (%):

для денної форми навчання – 150%
для заочної форми навчання – 11%

3. Виклад змісту навчальної дисципліни

Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

Тема 1. Загальне уявлення про хімічну інформатику

Поняття інформації, отримання, передача та збереження інформації. Кодування інформації. Двійкове кодування інформації в комп'ютері. Одиниці вимірювання інформації.

Тема 2. Принципи роботи електронно-обчислювальних машин

Архітектура комп'ютера. Загальна схема пристроїв: системний блок, пристрої вводу та виводу інформації. Склад, принципи роботи та характеристики процесора. Пам'ять, різновиди пам'яті. Запам'ятовуючі пристрої (накопичувачі на жорстких та гнучких дисках, вінчестер, носії інформації).

Тема 3. Загальне програмне забезпечення

Програмне забезпечення роботи комп'ютера. Класифікація програмного забезпечення: системне, прикладне, інструментальне. Системне програмне забезпечення. Поняття, функції, характеристики операційних систем. Типи операційних систем. Поняття файлу, файлової системи.

Тема 4. Глобальні та локальні комп'ютерні мережі

Комп'ютерні мережі. Призначення та типи комп'ютерних мереж. Апаратне забезпечення мережі. Глобальна мережа Internet. Поняття протоколу. Правила адресації Internet. Основні служби Internet.

Тема 5. Спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи

Програмне забезпечення для хіміків. Пошукові системи. Бази даних для хіміків. Сучасні редактори для хімічних текстів. Візуальне відображення молекул, структур та експериментальних даних. Спеціалізовані хімічні програми.

Тема 6. Принципи комп'ютерних обчислень

План побудови розрахункового експерименту. Джерела похибок результатів. Формати представлення даних, точність запису. Основи програмування. Поняття машинного епсилон.

Тема 7. Огляд основних розрахункових методів

Оптимізація. Апроксимація. Лінеаризація функцій. Чисельні методи. Застосування розрахункових методів для розв'язання прикладних хімічних задач.

Тема 8. Основи матричної алгебри

Основи матричної алгебри. Алгебра векторів. Матриця як лінійне перетворення векторів. Спеціальні матриці (нульова, одинична, скалярна). Операції з матрицями. Функції від матриць. Ранг матриці. Вироджені матриці. Норма матриці. Детермінант матриці. Обернена матриця. Розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Матричне представлення. Числа обумовленості матриці. Задача на власні значення. Матриці проектування та спектральний розклад.

Тема 9. Матриці в опису хімічних реакцій

Використання матриць для опису будови хімічної речовини. Представлення брутто-формули речовини у вигляді векторів. Атомна матриця. Теорема про ранг атомної матриці. Побудова атомних матриць молекулярних та іон-молекулярних сумішей. Узагальнена атомна матриця яка ураховує структурну будову речовини на прикладі насичених вуглеводнів.

Тема 10. Стехіометрія хімічних реакцій

Матриці у хімічних реакціях. Зображення реакцій у алгебраїчній формі. Кількість лінійно незалежних реакцій, що описують задану реакційну суміш. Ранг стехіометричної матриці. Стехіометричне правило Гіббса. Вибір незалежних компонент у розрахунках стехіометричних коефіцієнтів. Приклади розрахунків реакційних сумішей.

Тема 11. Розрахунки матеріального балансу

Рівняння матеріального балансу. Побудова стехіометричної матриці методом прямого обернення субматриць. Кількість речовини у ході реакції. Повнота реакції.

Розрахунок матеріального балансу за допомогою стехіометричних співвідношень. Параметричне рівняння простої та складної реакції. Ліва обернена матриця. Ключові речовини. Інваріант хімічної реакції. Теореми про змінення хімічного складу під час реакцій.

Тема 12. Основи регресійного аналізу

Регресійний аналіз у хімії. Уявлення про рівняння регресії. Полілінійна (множинна лінійна) регресія. Метод найменших квадратів. Стандартне відхилення та коефіцієнт кореляції. Методики перехрестного оцінювання (LOO). Метод найменших модулів.

Тема 13. Теорія інформації в хімії

Теорія інформації та її використання у хімії. Загальне поняття про інформацію. Формула Шеннона. Зв'язок інформації з ймовірністю. Одиниці виміру інформації. Використання інформації у хімії. Зв'язок інформації з ентропією. Інформаційні структурні індекси. ID, IC0, IC1, IC2 та інші похідні індекси. Проблема прогнозу біологічної активності молекул.

Тема 14. Теорія графів у хімії

Елементи теорії графів. Поняття про граф. Задача Ейлера. Орієнтований та неорієнтований граф. Двудольний граф. Маршрут у графі, ланцюг, цикл. Топологічна матриця. Матриця інцидентії та матриця дистанцій. Деякі теореми з теорії графів. Проблема перерахування ізомерів. Уявлення про теорію Пойа. Топологічні інваріанти графа. Структурні індекси молекул (індекс Вінера, індекс Рандіча). Застосування графів у дослідженні хімічних реакцій.

Тема 15. Метод адитивних схем

Адитивні схеми у проблемі розрахунків фізико-хімічних характеристик молекул. Методи розкладення структури молекул на фрагменти. Матричне формулювання розрахунків структурних інкрементів. Метод Татєвського. Температури атомізації та ізомерізації насичених вуглеводнів. Ліпофільність вуглеводнів та октанові числа. Еквівалентність та нееквівалентність різноманітних адитивних схем. Проекційний та статистичний метод оцінювання адитивних схем. Матрична формулювання методу найменших квадратів.

Тема 16. Некоректні задачі в хімічних розрахунках

Методи вирішення некоректних задач регресійного аналізу. Загальне уявлення про коректні та некоректні фізико-хімічні задачі. Некоректність за Адамаром та Тихоновим. Число обумовленості матриці. Псевдообернена матриця. Рівняння Пуассона. Розрахунки псевдооберненої матриці. Псевдовирішення прикладної матричної задачі. Метод регуляризації за Тихоновим. Функціонал Тихонова. Нормальне рівняння. Вибір параметру регуляризації.

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 17. Створення документів за допомогою текстових процесорів.

Тема 18. Знайомство з редактором хімічних формул.

Тема 19. Створення презентацій.

Тема 20. Знайомство з електронними таблицями.

Створення таблиці даних. Робота з математичними та логічними функціями. Робота з масивами. Побудова діаграм та графіків.

Тема 21. Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.

Створення таблиці даних. Побудова графіків. Апроксимація залежностей.

Тема 22. Знайомство з програмами математичного моделювання.

Основні арифметичні операції. Диференціювання. Інтегрування. Побудова графіків. Операції з матрицями. Розв'язання системи лінійних рівнянь.

Тема 23. Застосування матриць при описі хімічних реакцій.

Тема 24. Рівняння матеріального балансу.

Тема 25. Регресійний аналіз.

Тема 26. Теорія графів та топологічні індекси.

Тема 27. Адитивні схеми.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с.р.		л	п	лаб.	інд.	с.р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу												
Тема 1. Загальне уявлення про хімічну інформатику	3	2				1						4
Тема 2. Принципи роботи електронно-обчислювальних машин	3	2				1						4
Тема 3. Загальне програмне забезпечення	3	2				1						4
Тема 4. Глобальні та локальні комп'ютерні мережі	3	2				1						4
Тема 5. Спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи	3	2				1						4
Тема 6. Принципи комп'ютерних обчислень	3	2				1						4
Тема 7. Огляд основних розрахункових методів	3	2				1						4
Тема 8. Основи матричної алгебри	3	2				1						4
Тема 9. Матриці в опису хімічних реакцій	3	2				1						4
Тема 10. Стехіометрія хімічних реакцій	3	2				1		1				4
Тема 11. Розрахунки матеріального балансу	6	4				2		1				4
Тема 12. Основи регресійного аналізу	6	4				2		1				4
Тема 13. Теорія інформації в хімії	3	2				1		1				4
Тема 14. Теорія	3	2				1						4

графів у хімії											
Тема 15. Метод адитивних схем	3	2			1						4
Тема 16. Некоректні задачі в хімічних розрахунках	3	2			1						4
Разом за розділом 1	54	36			18		4				64
Розділ 2. Лабораторні заняття											
Тема 17. Створення документів за допомогою текстових процесорів	3			1	2						4
Тема 18. Знайомство з редактором хімічних формул	3			1	2						4
Тема 19. Створення презентацій	4			2	2						4
Тема 20. Знайомство з електронними таблицями.	7			4	3		2				4
Тема 21. Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.	7			4	3						4
Тема 22. Знайомство з програмами математичного моделювання.	7			4	3						4
Тема 23. Застосування матриць при описі хімічних реакцій	7			4	3		2				4
Тема 24. Рівняння матеріального балансу	7			4	3		2				4
Тема 25. Основи регресійного аналізу	7			4	3		2				4
Тема 26. Теорія графів та топологічні індекси	7			4	3						4
Тема 27. Адитивні схеми	7			4	3						4
Разом за розділом 2	66			36	30						64
Усього годин	120	36		36	48	120	4	8			108

5. Темі лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
Тема 15.	Створення документів за допомогою текстових процесорів.	1

Тема 16.	Знайомство з редактором хімічних формул.	1
Тема 17.	Створення презентацій.	2
Тема 18.	Знайомство з електронними таблицями.	4
Тема 19.	Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.	4
Тема 20.	Знайомство з програмами математичного моделювання.	4
Тема 21.	Застосування матриць при описі хімічних реакцій.	4
Тема 22.	Рівняння матеріального балансу.	4
Тема 23.	Основи регресійного аналізу.	4
Тема 24.	Теорія графів та топологічні індекси.	4
Тема 25.	Адитивні схеми	4

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	Форма контролю
Тема 1. Загальне уявлення про хімічну інформатику	1	Поточний контроль на лекціях. Виконання контрольних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).
Тема 2. Принципи роботи електронно-обчислювальних машин	1	
Тема 3. Загальне програмне забезпечення	1	
Тема 4. Глобальні та локальні комп'ютерні мережі	1	
Тема 5. Спеціалізоване програмне забезпечення та пошукові системи	1	
Тема 6. Принципи комп'ютерних обчислень	1	
Тема 7. Огляд основних розрахункових методів	1	
Тема 8. Основи матричної алгебри	1	
Тема 9. Матриці в опису хімічних реакцій	1	
Тема 10. Стехіометрія хімічних реакцій	1	
Тема 11. Розрахунки матеріального балансу	2	
Тема 12. Основи регресійного аналізу	2	
Тема 13. Теорія інформації в хімії	1	
Тема 14. Теорія графів у хімії	1	
Тема 15. Метод адитивних схем	1	
Тема 16. Некоректні задачі в хімічних розрахунках	1	
Тема 17. Створення документів за допомогою текстових процесорів	2	
Тема 18. Знайомство з	2	

редактором хімічних формул		
Тема 19. Створення презентацій	2	
Тема 20. Знайомство з електронними таблицями.	3	
Тема 21. Знайомство з програмами чисельного аналізу даних і наукової графіки.	3	
Тема 22. Знайомство з програмами математичного моделювання.	3	
Тема 23. Застосування матриць при описі хімічних реакцій	3	
Тема 24. Рівняння матеріального балансу	3	
Тема 25. Регресійний аналіз	3	
Тема 26. Теорія графів та топологічні індекси	3	
Тема 27. Адитивні схеми	3	

7. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

8. Методи навчання

Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота.

9. Методи контролю

Поточний контроль на лекціях. Виконання контрольних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

10. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота					Разом	Екзамен	Сума
Розділ 1	Розділ 2				60	40	100
T1–T16	T17–T20	T21–T22	T23–T25	T26–T27			
10	10	10	15	15			

T1, T2 ... T27 – теми розділів.

Якщо студент протягом семестру виконав всі заплановані лабораторні роботи і набрав при цьому не менше 55 балів, одержати 40 додаткових (заохочувальних) балів та бути звільненим від семестрового екзамену з одержанням оцінки „відмінно”.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка за національною шкалою
90-100	відмінно
70-89	добре
50-69	задовільно
1-49	незадовільно

11. Рекомендоване методичне забезпечення

- Програма навчальної дисципліни.
- Підручники.
- Навчальні посібники.
- Описи лабораторних робіт.
- Набори контрольних питань для поточного контролю знань.
- Завдання для контрольних робіт.
- Екзаменаційні білети.

Базова література

1. Вступ до інформаційних технологій. Методичний посібник для викладачів і студентів. Під ред. Зарецької І.Т., Владимирової М.В. – Харків: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2006. – 364 С.
2. Информатика. Базовый курс / Под ред. Симонович С.В. и др. – СПб.: Питер, 2001. – 640 с.
3. Таненбаум Э. Архитектура компьютера. – СПб.: : Питер, 2003. – 698 с.
4. Яшкин В.И. Численные методы в химии. Аппаратное и программное обеспечение. – Мн.: БГУ, 2002. – 95 с.
5. Савчук Л.О., Гримпінюк О.В. Информатика та комп'ютерна техніка. – К.:Професіонал, 2004. – 160 с.
6. Кристиан К. Введение в операционную систему UNIX.-М.: Финансы и статистика, 1985. – 318 с.
7. Персональный компьютер: диалог и программные средства: Учеб.пособие : / В.М. Матюшок, С.Т. Усачев, И.Л. Афанасьев и др. . - М., 1991 . - 312 с
8. Персональный компьютер фирмы IBM и операционная система MS-DOS : перевод с : англ. / Питер Нортон ; Пер. А.А. Батнер ; Под ред. А.В. Козлов . - М. : Радио и связь, 1992 . - 416 с.
9. Программное обеспечение и "неотложка" для компьютера:/ Виктор Борисович Марысаев . - М. : ТЕРРА - Книжный клуб, 2001 . – 383 с.
10. Системное программное обеспечение: Учебник для вузов : / Александр Владимирович Гордеев и Алексей Юрьевич Молчанов; Гл.ред. Е.Н. Строганова . - СПб.; М.; Х.; Минск : Питер, 2003 . - 736 с.
11. В.Л. Бройдо Вычислительные системы, сети и телекоммуникации. 2-е изд. – СПб.: Питер, 2005
12. Компьютерные сети и сетевые технологии: перевод с англ. / Марк А. Спортак, Френк Чарльз Паппас, Ричард Пит и Эмиль Рензинг . - М.; СПб.; К. : ДиаСофт, 2002 .
13. Зимянин, Леонид Федорович Компьютерные сети: курс лекций / Леонид Федорович Зимянин . - Минск : Издательство Белорусского университета, 2006 . - 336 с.
14. Таненбаум, Эндрю Компьютерные сети: перевод с англ. В. Шрага . - 4-е изд.. - СПб.; М.; Х.; Минск : Питер, 2005 . - 992 с.
15. Столлингс, Вильям Компьютерные сети, протоколы и технологии Интернета: перевод с англ. / Пер. А. Никифоров. - СПб. : БХВ-Петербург, 2005
16. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. Київ: Либідь, 2005.- 256 с.
17. Химические приложения топологии и теории графов. – М.: Мир, 1987.
18. Иванов В.В., Слета Л.А., Расчетные методы прогноза биологической активности органических соединений. Учебное издание. – Харьков, ЧП Азамаев В.Р. 2003. – 75 с.
19. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии. – М. Финансы и статистика, 1981. – 302 с.
20. Степанов Н.Ф., Ерлыкина М.Е., Филиппов Г.Г., Методы линейной алгебры в физической химии. – М.: из-во московского университета, 1976. – 360с.
21. Беклемишев Д.В., Дополнительные главы линейной алгебры, М.:Наука, 1983. – 335 с.
22. Джонсон К, Численные методы в химии. – М.Мир, 1983. – 503 с.
23. Руданський Ю.К. Мокрий Є.М., Піх З.Г., Чип М.М., Куриляк І.Й. Математичні методи в хімії та хімічній технології. – Львів: Світ, 1993.– 203 с.

24. Шараф М.А. Иллмен Д.П., Ковальски Б.Р., Хемометрика. – Л. Химия, Ленинградское отделение, 1989. – 269 с.
25. А. В. Пантелеймонов, І. В. Христенко, В. В. Иванов, Ю. В. Холін. Інформатика та інформаційні технології для хіміків : Навчальний посібник. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2011. – 60 с.

Допоміжна література

1. Лоусон Ч., Хенсон Р., Численное решение задач метода наименьших квадратов. – М.:Наука, 1986, 230 с.
2. Загоруйко Н.Г., Елкина В.Н., Лбов Г.С., Алгоритмы обнаружения эмпирических закономерностей. – Новосибирск, из-во Наука. Сибирское отделение, 1985.
3. Лбов Г.С., Методы обработки разнотипных экспериментальных данных. – Новосибирск, из-во Наука. Сибирское отделение, 1981.
4. Meintjes K., Morgan A., A methodology for solving Chemical Equilibrium Systems, Applied Mathematics and Computation, 1987, **22**, p.333-361
5. Статистические методы для ЭВМ/под ред. К.Энслейна, Э.Релстона, Г.С.Уилфа. – М.Наука, 1986. – 460 с.
6. Мудров В.И., Кушко В.Л., Метод наименьших модулей.– М.: Знание, 1971.– 60 с.
7. Мудров В.И., Кушко В.Л., Методы обработки измерений.– М.: Советское радио, 1976.– 190 с.
8. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я., Методы решения некорректных задач.–М: Наука, 1986.– 287.
9. Морозов В.А., Регулярные методы решения некорректно поставленных задач.– М:Наука.–1987.– 239 с.

Інформаційні ресурси

1. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна:
<http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk>
2. Сайт кафедри хімічного матеріалознавства
<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/>