

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. Таюрский

» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Хеометрика

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хеоминформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

## 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) 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
ОК-3	владением иностранным (прежде всего английским) языком в области профессиональной деятельности и межличностного общения
ПК-4	умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования
ПК-5	способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения

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 хеометрики.

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

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.3 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к дисциплинам по выбору.

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 3 зачетных(ые) единиц(ы) на 108 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 - 68 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет 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	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Хеометрика. Предмет и задачи хеометрики.	3	2	2	0	8
2.	Тема 2. Метрологические основы химического анализа.	3	4	4	0	14
3.	Тема 3. Дисперсионный анализ.	3	2	2	0	0
4.	Тема 4. Метод наименьших квадратов.	3	2	2	0	8
5.	Тема 5. Основы теории планирования эксперимента.	3	4	2	0	8
6.	Тема 6. Обработка аналитического сигнала.	3	2	2	0	
7.	Тема 7. Многокомпонентный анализ.	3	2	2	0	12
8.	Тема 8. Интеллектуальный анализ данных и его использование в хеометрике.	3	2	4	0	18
	Итого		20	20	0	68

##### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

###### Тема 1. Хеометрика. Предмет и задачи хеометрики.

Предмет и задачи хеометрики. Распознавание образов. Искусственный интеллект. Анализ исследовательских данных. 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.

Определение источника вариации данных. Однофакторный дисперсионный анализ (на примере проверки влияния различных методик проведения химического анализа в разных лабораториях). Двухфакторный дисперсионный анализ.

###### Тема 4. Метод наименьших квадратов.

Метод наименьших квадратов. Использование метода наименьших квадратов в аналитической химии. 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.

#### **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 образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

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)**

Введение в хемометрику. Дребушак Т.Н. - [http://window.edu.ru/resource/874/74874/files/Posobie\\_Chemometr.pdf](http://window.edu.ru/resource/874/74874/files/Posobie_Chemometr.pdf)

Материалы ресурса - <http://www.chemometrics.ru/chemometrics/>

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) - <http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>

Хемометрика в аналитической химии - [http://www.chemometrics.ru/materials/articles/chemometrics\\_review.pdf](http://www.chemometrics.ru/materials/articles/chemometrics_review.pdf)

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

Методические указания по подготовке к устным опросам:

При самостоятельной работе по подготовке к устному опросу необходимо ознакомиться с темой и списком вопросов по теме. Повторите лекционный материал по теме, отметьте 'проблемные' точки. Определите необходимую литературу из рекомендованной к курсу, можно воспользоваться интернет-источниками. При работе с источниками, учебниками и методическими пособиями, выполняйте общие рекомендации по самостоятельной работе. Сформируйте тезисный список ответов на вопросы, со своими замечаниями и комментариями. Студент должен быть готов ответить на поставленные вопросы, аргументировать свой вариант ответа, ответить на дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя. После окончания опроса оценить степень правильности своих ответов, уяснить суть замечаний и комментариев преподавателя.

Методические указания по подготовке к дискуссиям:

После прослушивания лекции или самостоятельного изучения литературы по заданной теме, обучаемые начинают подготовку к семинару в соответствии с его планом. Работа обучаемых по подготовке к семинару обычно осуществляется в следующей последовательности. Вначале уясняется тема и содержание учебных вопросов. Затем обучаемые подбирают, просматривают и изучают литературу. Перед просмотром литературы на каждый учебный вопрос заготавливается карточка, озаглавленная наименованием вопроса, на которой записываются относящиеся к нему источники информации. Цель изучения литературы состоит в том, чтобы сформировать собственное суждение по данному вопросу, определить структуру и содержание ответов (реферата). В зависимости от требований плана семинара, сложности вопроса и уровня подготовки обучаемых результат изучения литературы может быть оформлен в виде плана ответа, тезисов ответа или полного текста доклада. При недостаточном опыте выступлений на семинарах, студентам полезно перед занятием воспроизвести свое выступление в устной форме.

Методические указания по выполнению контрольных работ:

При подготовке к контрольной работе следует повторно разобрать задания, которые были разобраны на семинарских занятиях и выполнены самостоятельно.

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- контрольная работа выполняется на листах формата А4;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- контрольная работа должна быть выполнена студентом самостоятельно; при выполнении контрольной работы не допускается использовать мобильные устройства;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля;
- в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания;
- время, отведенное на выполнение контрольной работы, определяется преподавателем. По окончании отведенного на выполнение контрольной работы времени контрольная работа сдается преподавателю для проверки.

Методические указания к подготовке и решению тестов:

Прежде всего, следует внимательно изучить структуру теста, оценить объем времени, выделяемого на данный тест, увидеть, какого типа задания в нем содержатся. Это поможет настроиться на работу.

- Лучше начинать отвечать на те вопросы, в правильности решения которых нет сомнений, пока не останавливаясь на тех, которые могут вызвать долгие раздумья. Это позволит успокоиться и сосредоточиться на выполнении более трудных вопросов.
- Очень важно всегда внимательно читать задания до конца, не пытаясь понять условия 'по первым словам' или выполнив подобные задания в предыдущих тестированиях. Такая спешка нередко приводит к досадным ошибкам в самых легких вопросах.
- Если вы не знаете ответа на вопрос или не уверены в правильности, следует пропустить его и отметить, чтобы потом к нему вернуться.
- Психологи также советуют думать только о текущем задании. Как правило, задания в тестах не связаны друг с другом непосредственно, поэтому необходимо концентрироваться на данном вопросе и находить решения, подходящие именно к нему. Кроме того, выполнение этой рекомендации даст еще один психологический эффект - позволит забыть о неудаче в ответе на предыдущий вопрос, если таковая имела место.
- Рассчитывать выполнение заданий нужно всегда так, чтобы осталось время на проверку и доработку (примерно 1/3-1/4 запланированного времени). Тогда вероятность опечаток сводится к нулю и имеется время, чтобы набрать максимум баллов на легких заданиях и сосредоточиться на решении более трудных, которые вначале пришлось пропустить.
- В составе теста могут встречаться как вопросы с одним правильным вариантом ответа, так и с несколькими.

Методические указания по подготовке к зачету:

Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшее затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

Список контрольных вопросов для самопроверки и подготовки к устным опросам, тестированию и зачетам:

1. Дайте классификацию погрешностям в химическом анализе.
2. Предмет и задачи хемотрики.
3. Основоположники хемотрики.

4. Что такое стандартное отклонение для выборочной совокупности?
5. Что такое доверительный интервал?
6. Q-тест для оценки выбросов.
7. Роль выбросов в анализе объектов окружающей среды.
8. Какова формула t-критерия при сравнении средних?
9. v-критерий для оценки выбросов.
10. Дисперсия выборки. Отличие от дисперсии генеральной совокупности.
11. Применение критерия Фишера.
12. Какова формула критерия Кайзера?
13. Что такое коэффициент вариации?
14. Относительное стандартное отклонение.
15. Критерий Кохрена. Условия его применения.
16. Дайте понятие асимметрии и эксцесса распределения случайной величины.
17. Приведите формулу функции нормального распределения Гаусса.
18. Свойства нормального распределения.
19. Что такое доверительная вероятность?
20. Дайте понятия доверительных границ и доверительного интервала.
21. Что такое точность результатов анализа?
22. В чем отличие понятий сходимость и воспроизводимость результатов измерений?
23. Дайте понятие 'принятое опорное значение'.
24. Что такое условия повторяемости?
25. Сформулируйте условия воспроизводимости?
26. Что такое математическое ожидание?
27. Перечислите основные источники систематических погрешностей анализа объектов окружающей среды.
28. Назовите первичные статистические характеристики выборочной совокупности.
29. Сформулируйте цель регрессионного анализа.
30. Что такое корреляционный анализ?
31. Какими способами можно проверить правильность результатов анализа?
32. Какие величины характеризуют сходимость (повторяемость) результатов анализа?
33. Дайте определение выброса.
34. Приведите формулы критериев, используемых для обнаружения выбросов.
35. Что характеризует распределение Пирсона?
36. Приведите формулу критерия Пирсона.
37. Что такое хеометрика?
38. Что такое предел обнаружения?
39. Что такое стандартный образец химического состава?
40. Дисперсия выборки и дисперсия генеральной совокупности.
41. Что такое дисперсия воспроизводимости?
42. В чем сущность метода наименьших квадратов?
43. Что такое ПДК?
44. Что такое коэффициент чувствительности?
45. Какую информацию дают результаты корреляционного анализа?
46. Что такое ковариация?
47. В чем отличие случайных погрешностей от систематических?
48. Что такое t-распределение? Его связь с нормальным распределением.
49. Что такое погрешность результата анализа?
50. Дайте определение среднего, медианы и размаха варьирования.
51. Целесообразность использования среднеарифметического и медианы.
52. Каким образом готовят стандартный образец химического состава объекта окружающей среды?
53. Приведите примеры релятивизации погрешностей.
54. В каких случаях можно использовать рандомизацию результатов измерений?
55. Что такое степень свободы?
56. Как связано число степеней свободы с числом измерений в случае одной и нескольких выборочных совокупностей?

57. Что такое правильность результатов анализа?
58. Что есть распределение Стьюдента? Его связь с нормальным распределением.
59. Что такое уровень значимости и как он связан с величиной доверительной вероятности?
60. Как записать выражение для доверительного интервала, и что он характеризует?
61. Как используются методы математической статистики для проверки значимости различий серийных измерений?
62. Специфика применения критерия Кохрена.
63. В чем различие применимости критериев Фишера и Кохрена при сравнении дисперсий?
64. Что такое детерминированная и стохастическая связь переменных величин?
65. Дайте понятие 'корреляционный анализ'.
66. Что такое коэффициент корреляции?
67. Что такое гистограмма?
68. Что такое тренд результатов измерений?
69. Причины появления асимметрии в распределении результатов при анализе объектов окружающей среды.
70. Что такое эксцесс в распределении результатов измерений?
71. Приведите формулы расчета асимметрии и эксцесса.
72. Идеология метода опорных векторов.
73. Математические основы метода опорных векторов.
74. Исходная и дуальная задача
75. SVM для классификации.
76. Линейная неразделимость. Борьба с ней.
77. С-SVM: расшифруйте. Краткая характеристика.
78. Ядра сходства.
79. Метод SVR
80. Метод 1-SVM
81. Метод SVDD

**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: 2016

#### Основная литература:

1. Кристиан, Г. Аналитическая химия: в 2 томах / Г. Кристиан; пер. с англ. А. В. Гармаша [и др.]; вступ. ст. акад. РАН Ю. А. Золотова.-Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.-; 25.- (Лучший зарубежный учебник). - [Т.] 1.-2013.-623 с.
2. Кристиан, Г. Аналитическая химия: в 2 томах / Г. Кристиан; пер. с англ. А. В. Гармаша [и др.]; вступ. ст. акад. РАН Ю. А. Золотова.-Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.-; 25.- (Лучший зарубежный учебник). - [Т.] 2.-2013.-504 с.: 20
3. Основы аналитической химии: в 2 томах: учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по химическим направлениям / под ред. акад. Ю.А. Золотова.-5-е изд., стер.. - Москва: Академия, 2012.-; Т. 1. - 2012. - 383 с.
4. Основы аналитической химии: в 2 томах: учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по химическим направлениям / под ред. акад. Ю.А. Золотова.-5-е изд., стер.. - Москва: Академия, 2012.-; Т. 2. - 2012. - 407 с.
5. Жебентяев А.И. Аналитическая химия. Хроматографические методы анализа: Учебное пособие / А.И. Жебентяев. - М.: НИЦ Инфра-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 206 с. - URL: <http://znanium.com/bookread.php?book=399829>
6. Аналитическая химия. Химические методы анализа: Учеб. пос. / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек и др. - 2-е изд., стер. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2014. - 542 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=419626>

#### Дополнительная литература:

1. Метрология и средства измерений: Учебное пособие / В.Ф. Пелевин. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 272 с. - URL: <http://znanium.com/go.php?id=406750>
2. Муравьева, И.В. Методы контроля и анализа веществ. Потенциометрический метод контроля и анализа веществ. [Электронный ресурс] / И.В. Муравьева, О.Л. Скорская. - Электрон. дан. - М. : МИСИС, 2012. - 45 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/47430>
3. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа : в 2 томах : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по химико-технологическим направлениям / под ред. проф. А. А. Ищенко .- Москва : Академия, 2012 .- (Высшее профессиональное образование, Химические технологии) (Бакалавриат) .- ISBN 978-5-7695-9145-7 ((в пер.)) .  
Т. 1 / [Ю. М. Глубоков, В. А. Головачева, В. И. Дворкин и др.] .- 2012 .- 351, [1] с.
4. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа : в 2 томах : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по химико-технологическим направлениям / под ред. проф. А. А. Ищенко .- Москва : Академия, 2012 .- (Высшее профессиональное образование, Химические технологии) (Бакалавриат) .- ISBN 978-5-7695-9145-7 ((в пер.)) .  
Т. 2 / [Н. В. Алов, И. А. Василенко, М. А. Гольдштрах и др.] .- 2012 .- 411, [1] с.

**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: 2016

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.