

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
имени Н.Г. Чернышевского»

## ИНСТИТУТ ХИМИИ

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебно-методической  
работе, д-р физ.-матем. наук, профессор

И.Г. Едина

« 5 » сентября 2016 г.



Рабочая программа дисциплины

### ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУЧНОМ ИССЛЕДОВАНИИ

Направление подготовки кадров высшей квалификации

*04.06.01 «Химические науки»*

Направленность

*Аналитическая химия, Органическая химия,  
Физическая химия, Электрохимия*

Квалификация (степень) выпускника

**Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения

Очная

Саратов  
2016

## 1. Цели и задачи освоения дисциплины

### Цель дисциплины:

Формирование у аспирантов понимания теоретических основ информационных технологий, используемых в научных исследованиях, ознакомление с современными методами и подходами к обработке результатов научных исследований и формирование навыков работы с современными компьютерными программами.

### Задачи:

- сформировать понимание основ современных информационных технологий, используемых в научном исследовании;
- уметь использовать и создавать специализированные компьютерные программы и банки данных;
- получить знания о возможностях использования современных информационных технологий в системах сбора, обработки и хранения химической информации;
- ознакомить с современными тенденциями и подходами в компьютеризации научно-исследовательских данных.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП аспирантуры

Дисциплина «Информационные технологии в научном исследовании» является дисциплиной по выбору, входит в состав Блока 1 «Дисциплины (модули)» и относится к вариативной части ООП по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки», направленность «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Электрохимия», индекс по учебному плану – Б1.В.ДВ.1.1.

Дисциплина «Информационные технологии в научном исследовании» изучается во 2 семестре.

Входные знания, умения и компетенции, необходимые для изучения данного курса, формируются в процессе изучения таких общих дисциплин как: Информатика, Математика, Математическая статистика. Взаимосвязь курса с другими дисциплинами ООП способствует углубленной подготовке аспирантов к решению специальных практических профессиональных задач и формированию необходимых компетенций.

## 3. Результаты обучения, определенные в картах компетенций и формируемые по итогам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Информационные технологии в научном исследовании» направлен на формирование следующей компетенции:

- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

В результате освоения дисциплины аспирант должен

• знать:

- основные Интернет-ресурсы по химии (сайты ведущих мировых издательств; российские интернет-ресурсы по химии; сайты, посвященные дистанционному химическому образованию; on-line программы, позволяющие проводить обработку данных химического эксперимента);
- структуру и средства систем дистанционного обучения, структуру образовательных ресурсов в РФ, подходы к оценке качества курсов, этику составления дистанционных образовательных ресурсов;

- возможности использования современных информационных технологий в научном исследовании.
- уметь:
  - применять методы математической обработки химической информации;
  - использовать компьютерные технологии в своих теоретических и экспериментальных исследованиях;
  - проводить поиск химической информации в сети Интернет;
  - создавать собственные интернет-курсы;
  - использовать программы по сбору, обработке, хранению и передаче химической информации (Excel, Origin, MathCad, The Unscrambler, NeuroPro, PhotoShop, ChemDraw);
  - уметь создавать авторские компьютерные алгоритмы для обработки данных химического эксперимента (Excel);
  - составлять и использовать в своих исследованиях банки данных химической информации (Microsoft Access).
- владеть:
  - способами обработки первичных данных в научно-исследовательской работе,
  - способами создания и представления компьютерных презентаций в научных целях (PowerPoint),
  - современными хемометрическими методами обработки многомерных данных,

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа (42 аудиторные, 102 – самостоятельная работа аспирантов)

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости (по темам) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)
			лекции	практические	СР	
1	Введение	2	2	-	12	Устный опрос
2	Поиск химической информации на компьютере	2	2	-	18	Письменный отчет
3	Компьютерные технологии на этапах сбора и предварительной обработки химической информации.	2	5	9	18	Устный опрос
4	Компьютерные технологии в химическом эксперименте, моделировании и обработке его результатов.	2	5	9	18	Контрольная работа
5	Хемометрические подходы к обработке данных	2	5	-	18	Реферат
6	Компьютерные технологии в оформлении результатов химического эксперимента	2	5	-	18	Защита индивидуального проекта.
Итого: 144 часа			24	18	102	Зачет

## Содержание дисциплины

**Введение в курс компьютерных технологий.** Определение компьютерных и информационных технологий. Основные понятия. История развития компьютерной техники и ее использования в научных исследованиях и образовании. Факторы эффективности использования компьютерных технологий в науке и образовании. Наука как объект компьютеризации. Модель научных исследований. Роль информации в научных исследованиях. Основные направления автоматизации научных исследований. Современное состояние систем обработки данных и телекоммуникаций. Современные аппаратные и программные средства. Автоматизированное рабочее место. Офисные технологии обработки данных.

**Поиск химической информации на компьютере.** Виды научно-технической информации. Автоматизация её обработки. Основные сведения о сети Internet. Браузеры MS Internet Explorer, Opera, Mozilla. Методы поиска информации. Телекоммуникационные сети. Средства телекоммуникационного доступа к источникам научной информации. Поиск информации в сети Интернет. Основные поисковые машины. Типы запросов. Поисковый язык. Метапоисковые системы.

Сеть Internet и ее возможности для организации оперативного обмена информацией между исследовательскими группами.

Электронные информационные ресурсы: классификация, производители, общие правила работы. Электронные журналы. Полнотекстовые базы данных мировых агрегаторов научной информации Web of Science, Scopus. Отечественные и зарубежные электронные информационные ресурсы.

Полнотекстовые журнальные базы данных ведущих академических издателей (Elsevier, Springer, ACS, Wiley, RSC, Taylor & Francis). Российская электронная библиотека научных публикаций eLIBRARY.ru. Мир науки через цитирование автора, журнала, отрасли знания. Электронные конференции.

**Компьютерные технологии на этапах сбора и предварительной обработки информации.**

*Компьютерные базы данных.* Банки химических данных. Использование компьютерных банков химических данных в обучении и научной работе. Системы управления базами данных (СУБД). Основные функции и типовая организация СУБД. Структура данных, методы доступа, интерфейсы доступа к данным. Распределенные базы данных. Базы знаний. Основы работы в СУБД Access. Банк данных, модели баз данных. Использование средств MS Excel для ведения однотабличной базы данных (списка). Ввод, модификация и выборка данных из таблицы. Аналитико-библиографические базы данных. Базы данных химических соединений.

*Применение компьютерных программ для управления приборами и получения сигналов.* Сопряжение инструментального химического оборудования с компьютерами. Аналоговый и цифровой сигналы. Специализированные компьютерные программы. Управление прибором на примере хромато-масс-спектрометра и жидкостного хроматографа.

**Компьютерные технологии в химическом эксперименте, моделировании и обработке его результатов.**

Задачи и состав экспериментальных исследований. Содержание этапа обработки результатов научного исследования. Процедуры обработки научной информации. Организация информационного обеспечения. Табличные процессоры в научных исследованиях. Логические операторы, фильтры, сортировка таблиц. Встроенные функции в Excel (математические, статистические, логические и др.).

Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Возможности программного комплекса MathCad в моделировании и обработке научных данных. Имитационное моделирование при решении проблем химической технологии и экологии.

*Компьютер как инструмент молекулярного моделирования.* Современная компьютерная химия, программное обеспечение молекулярного моделирования. Визуализация пространственных структур молекул. Квантовохимические расчеты, эмпирические и полумпирические методы прогнозирования физико-химических свойств веществ. Численное моделирование статистических характеристик и динамики химических процессов: молекулярная механика, молекулярная динамика, броуновская динамика, метод Монте-Карло. Молекулярное моделирование в инженерных науках, физике, химии, биологии и нанотехнологиях.

*Использование ЭВМ при статистической обработке результатов эксперимента.* Проверка подчинения совокупности данных нормальному закону распределения. Выявления отдельных данных, отклоняющихся от нормального распределения (промахов). Расчет основных статистических характеристик и критериев (дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал, критерии Фишера, Стьюдента и др.). Построение эмпирических моделей с использованием пакетов программ статистической обработки данных на примере MathCad.

*Основы корреляционного и регрессионного анализа на компьютере.* Графическое представление результатов эксперимента. Обработка экспериментальных зависимостей с помощью компьютерных программ. Построение диаграмм рассеяния и расчет коэффициента корреляции. Расчет и интерпретация параметров регрессионной модели, оценка их погрешностей. Применение регрессионного анализа для градуировки и расчета содержания определяемого компонента. Регрессионный анализ зависимостей в программах Excel, Origin, MathCad. Линии тренда, планки погрешности. Сглаживание криволинейных зависимостей (МНК-сглаживание, сплайн-интерполяция, фильтр Савицкого-Голея). Фурье-преобразование, его использование для фильтрации шумов и снижения пределов обнаружения. Построение дифференциальных кривых.

**Хемометрические подходы к обработке данных.** Хемометрика. Её развитие в России и мире. Понятие о многомерных данных. Размерность данных. Метод главных компонент. Интерпретация графика счетов и графика нагрузок. Классификация и распознавание образов. Многомерная калибровка. Регрессия на главные компоненты. Проекция на латентные структуры. Примеры практического применения программы The Unscrambler в обработке химических данных: обработка результатов мультисенсорной системы, обработка спектральных данных, моделирование технологического процесса.

**Компьютерные технологии в оформлении результатов научного исследования.** Процесс оформления научных работ и используемые программные средства. Редакторы научных текстов. Технологии интегрированных программных пакетов общего назначения Microsoft Office. Создание комплексных документов (технологии DDE, OLE) в MS Office. Средства создания презентаций в среде MS PowerPoint. Использование шаблонов содержания и оформления. Использование анимации и гиперссылок. Правила компьютерной презентации научного исследования. Использование баз данных при оформлении результатов научного исследования.

## **5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины**

Наряду с традиционными образовательными технологиями широко используются технологии, основанные на методах научно-технического творчества и современных информационных средствах, включающие обучение на основе учебных дискуссий, индивидуальных проектов, поисковых задач, разбора конкретных ситуаций, а также широкого использования современных информационных технологий.

Предусмотрена конференция с представлением аспирантами индивидуального проекта-презентации об использовании информационных технологий в их научно-исследовательской работе.

Аспиранты самостоятельно осуществляют поиск научной информации по теме НИД с использованием основных мировых баз данных.

При чтении лекций используются мультимедийные презентации, при этом лекции читаются в форме лекции-беседы. Лекции составляют основу теоретического обучения и должны давать систематизированные основы научных знаний по дисциплине, концентрировать внимание аспирантов на наиболее сложных вопросах, стимулировать активную познавательную деятельность аспирантов и способствовать формированию творческого мышления. Ведущим методом в лекции является устное изложение учебного материала, сопровождающееся мультимедийными презентациями. На вводной лекции аспирантам сообщается план и особенности изучения дисциплины, а также рекомендуемая литература.

Практические занятия предусматривают освоение аспирантами навыков экспериментальных работ и анализа полученных результатов. Задания носят характер самостоятельных научно-исследовательских задач.

Практические занятия:

Работа № 1. Ознакомление с базами данных ведущих академических издателей в сети Internet (2 часа).

Работа № 2. Поиск научной информации по теме НИД и формирование информационных баз данных (2 часа).

Работа № 3. Первичная обработка экспериментальных данных (статистический анализ) в Excel (2 часа)

Работа № 4. Построение зависимостей и регрессионный анализ в Excel (2 часа)

Работа № 5. Оптимизация химического эксперимента в Excel (2 часа)

Работа № 6. Обработка многомерных данных в The Unscrambler. Метод МГК (4 часа)

Работа № 7. Обработка многомерных данных в The Unscrambler. Метод ПЛС (4 часа)

## **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.**

### **6.1. Виды самостоятельной работы**

<b>Раздел/Тема дисциплины</b>	<b>Вид самостоятельной работы</b>	<b>Литература</b>
Введение	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение	Лекции Изюмов А.А. Компьютерные технологии в науке и образовании. Томск: Эль Контент, 2012. ЭБС IPRbooks.
Поиск химической информации на компьютере	Поиск и аннотирование научных публикаций, работа с интернет-источниками	<a href="http://www.science-direct.com">www.science-direct.com</a> <a href="http://pubs.acs.org">http://pubs.acs.org</a> <a href="http://www.springer.com">www.springer.com</a> <a href="http://www.rsc.org">www.rsc.org</a> <a href="http://www.tandf.co.uk/journals/default.asp">http://www.tandf.co.uk/journals/default.asp</a> , <a href="http://www.fips.ru">www.fips.ru</a> <a href="http://www.elibrary.ru">www.elibrary.ru</a>
Компьютерные технологии на этапах сбора и предварительной обработки химической информации.	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение	Практикум по информационным технологиям в профессиональной деятельности / Е.В. Михеева. - М.: Проспект : ТК Велби, 2007. – 280 с.
Компьютерные технологии в химическом эксперименте,	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение	Информационные технологии / С.-Петерб. гос. ун-т экономики и финансов; под

моделировании и обработке его результатов.		ред. В. В. Трофимова. - Москва : Юрайт : Издательский Дом Юрайт, 2011. - 624 с.
Хемометрические подходы к обработке данных	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение	Лекции <a href="http://rcs.chemometrics.ru/rcsin.htm">http://rcs.chemometrics.ru/rcsin.htm</a>
Компьютерные технологии в оформлении результатов химического эксперимента	Проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение, подготовка реферата на заданную тему	<a href="http://www.chem.msu.su/rus/teaching/analytic_docs/Recommendations.pdf">http://www.chem.msu.su/rus/teaching/analytic_docs/Recommendations.pdf</a>
Итого часов на самостоятельную работу: 102 часа		

## 6.2. Вопросы для углубленного самостоятельного изучения

1. Компьютерные технологии (КТ). Основные понятия.
2. Факторы повышения эффективности работ в науке и образовании за счет использования КТ.
3. Общая характеристика науки как объекта компьютеризации.
4. Структура модели научных исследований.
5. Основные направления рационального применения КТ в научных исследованиях.
6. Основные виды научно-технической информации (НТИ).
7. Автоматизация обработки НТИ.
8. Общая характеристика сети Internet.
9. Основные возможности работы в системе Internet Explorer.
10. Основы работы с НТИ в СУБД Ms Access.
11. Использование системы оптического сканирования FineReader в сборе НТИ.
12. Автоматизированный перевод в системе Stylus.
13. Состав и методы теоретических исследований (ТИ).
14. Компьютерная поддержка теоретических исследований.
15. Задачи и состав экспериментальных исследований. КТ на этом этапе.
16. Методология моделирования с использованием вычислительной техники.
17. Содержание этапа обработки результатов НИ с использованием КТ.
18. Обработка одномерных сигналов.
19. Обработка многомерных сигналов.
20. Использование системы MathCAD в НИ.
21. Табличный процессор Excel в НИ.
22. Процесс оформления научных работ и используемые программные средства.
23. Редакторы научных текстов.
24. Возможности редактора MS Word в создании научных документов.
25. Работа в интегрированной среде MS Office.
26. Технологии создания комплексных документов в MS Office.
27. КТ в образовании для преподавателей.
28. КТ в образовании для обучающихся.
29. Мультимедиа-технологии. Создание компьютерных презентаций.
30. Web-сайты и Web-страницы. Инструментальные средства создания Web-страниц.
31. Универсальные поисковые системы Internet и библиографические ресурсы Internet. Поиск научно-технической информации в Интернет.
32. Образовательные и научные порталы.
33. Компьютерные обучающие системы. Основные принципы новых информационных технологий обучения. Типы обучающих программ.
34. Понятие о дистанционном обучении с использованием глобальных компьютерных сетей. Основные принципы дистанционного обучения.

35. Компьютерное тестирование. Компьютерное тестирование как пример контролирующей программы. Технология проектирования компьютерных тестов предметной области.
36. Электронные информационные ресурсы: классификация, производители, общие правила работы.
37. Полнотекстовые базы данных мировых агрегаторов научной информации.
38. Полнотекстовые журнальные базы данных ведущих академических издателей.
39. Электронная библиотека российских научных журналов eLIBRARY.ru.
40. Мир науки через цитирование автора, журнала, отрасли знания. Аналитико-библиографическая база данных Scopus.

### **6.3. Порядок выполнения самостоятельной работы**

Самостоятельная подготовка к занятиям осуществляется регулярно по каждой теме дисциплины и определяется календарным графиком изучения дисциплины. В ходе освоения курса предполагается работа с лекциями и литературными источниками, поиск научных публикаций по теме научно-исследовательской работы, написание реферата по предложенным темам, подготовка презентации по использованию информационных технологий в научно-исследовательской работе аспиранта, выступление с докладом на конференции с вышеуказанной презентацией.

## **7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

### **7.1. Формы текущего контроля работы аспирантов**

В данной дисциплине в качестве форм текущего контроля используются:

- устный опрос на лекциях по материалам предыдущей лекции (для контроля самостоятельной работы аспирантов с конспектами лекций);
- письменный отчет о результатах поиска научных публикаций по теме научно-исследовательской работы аспиранта;
- контрольная работа по обработке данных химического анализа, построению графических зависимостей;
- реферат на заданную тему;
- презентация индивидуального проекта.

### **7.2. Порядок осуществления текущего контроля**

Текущий контроль выполнения заданий осуществляется регулярно, начиная со второй недели семестра. Контроль и оценивание работы с конспектами лекций осуществляется на второй неделе семестра в виде устного опроса на лекциях. Текущий контроль освоения отдельных разделов дисциплины осуществляется при помощи письменного отчета о поиске научных публикаций по теме НИД, контрольной работы, реферата, презентации индивидуального проекта в завершении изучения каждого раздела. Система текущего контроля успеваемости служит в дальнейшем наиболее качественному и объективному оцениванию в ходе промежуточной аттестации.

### **7.3. Промежуточная аттестация по дисциплине**

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета.

### **7.4. Фонд оценочных средств**

Содержание фонда оценочных средств см. Приложение №1.



## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### Основная литература:

1. Изюмов, А. А. Компьютерные технологии в науке и образовании [Электронный ресурс] / Изюмов А. А. - Томск : Эль Контент, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 2012. - 150 с. ЭБС IPRbooks.
2. Информатика / В.А. Каймин. - 6-е изд. - Москва : Инфра-М, 2010. - 283 с.
3. Информационные технологии / С.-Петерб. гос. ун-т экономики и финансов; под ред. В. В. Трофимова. - Москва : Юрайт : Издательский Дом Юрайт, 2011. - 624 с.

### Дополнительная литература

4. Практикум по информационным технологиям в профессиональной деятельности / Е.В. Михеева. - М.: Проспект : ТК Велби, 2007. – 280 с.
5. Информатика / Д.Дж. Луенбергер ; пер. с англ. Ю.Л. Цвирко под ред. К.К. Колина. - Москва : Техносфера, 2008. - 447 с.
6. Информационные технологии / Е.Л. Румянцева, В.В. Слюсарь; под ред. Л.Г. Гагариной. - Москва : Форум : Инфра-М, 2011. – 255 с.

### Интернет-ресурсы по теме дисциплины

Научная электронная библиотека [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)

Издательства: Elsevier [www.science-direct.com](http://www.science-direct.com)

American chemical society <http://pubs.acs.org/about.html>

Springer [www.springer.com](http://www.springer.com)

taylor & francis изд-во <http://www.tandf.co.uk/journals/default.asp>

Royal Society of Chemistry [www.rsc.org](http://www.rsc.org)

Wiley [www.interscience.wiley.com](http://www.interscience.wiley.com)

МАИК-Наука <http://www.maik.ru/>

Патентный поиск [www.fips.ru](http://www.fips.ru)

Информация для химиков <http://www.chem.ac.ru/> - подборка ссылок на электронные базы данных химической информации: библиотеки, энциклопедии, материалы конференций и пр. Информация о научных событиях. Сайт на английском языке.

Мир химии <http://mirhim.ucoz.ru/> - справочная информация, опыты, новости науки.

Электронная библиотека по химии <http://www.chemnet.ru/rus/elbibch.html> - сайт химического факультета МГУ, на котором представлены: книги и аналитические обзоры, учебники и журналы, учебные базы данных, а также Нобелевские премии по химии.

## 9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Слайды, рисунки, схемы по темам лекций.
2. Компьютер.
3. Аудитория, оснащенная мультимедийным проектором.

## 10. Особенности освоения дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Для аспирантов с ограниченными возможностями здоровья предусмотрены следующие формы организации педагогического процесса и контроля знаний:

- для слабовидящих:

обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс;

для выполнения контрольных заданий при необходимости предоставляется увеличивающее устройство;

задания для выполнения, а также инструкция о порядке выполнения контрольных заданий оформляются увеличенным шрифтом (размер 16-20);

- для глухих и слабослышащих:

обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости аспирантам предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- для лиц с тяжелыми нарушениями речи, глухих, слабослышащих все контрольные задания по желанию аспирантов могут проводиться в письменной форме.

Основной формой организации педагогического процесса является интегрированное обучение инвалидов, т.е. все аспиранты обучаются в смешанных группах, имеют возможность постоянно общаться со сверстниками, легче адаптируются в социуме.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации) по направлению подготовки «Химические науки», направленность «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Электрохимия».

Автор программы Труцкая (Русанова Т.Ю., д.х.н., доцент, зав. кафедрой)

Программа одобрена на заседании кафедры аналитической химии и химической экологии от 24 июня 2015 г., протокол № 11.

Программа актуализирована в 2016 году (одобрена на заседании кафедры аналитической химии и химической экологии от 30 августа 2016 г., протокол № 1).

Зав. кафедрой, д.х.н., доцент

Директор Института химии  
д.х.н., профессор

Труцкая  
Т.Ю. Русанова

Федотова  
О.В. Федотова

Федотова

## Фонд оценочных средств текущего контроля и промежуточной аттестации

### 1. Задания для текущего контроля

#### Реферат

##### Темы рефератов:

1. Факторный анализ.
2. Использование метода главных компонент для анализа многомерных данных.
3. Роль компьютеров в построении экспертных систем.
4. Базы данных в научных исследованиях.
5. Методы обработки нелинейных зависимостей.
6. История развития хемометрики как науки.
7. Нейронные сети: использование в научных исследованиях.
8. Методы обработки цифровых изображений.
9. Методы компьютерной обработки спектров.
10. Представление многомерных данных на компьютере.
11. Моделирование взаимодействия в химии.
12. Оптимизация эксперимента методом симплекс-планирования.
13. Интернет-ресурсы по химии
14. MathLab: возможности программы
15. MathCad: возможности программы
16. Базы данных органических веществ
17. Базы данных ЯМР-спектров

#### ТРЕБОВАНИЯ К РЕФЕРАТУ

##### 1. Реферат по выбранной теме должен иметь следующую структуру:

- **введение**, определяющие обоснование выбора темы;
- **анализ** проблемных ситуаций, сложившихся или складывающихся в данной предметной области;
- **описание** используемых способов разрешения проблемных ситуаций по данным отечественных и зарубежных источников;
- **выводы**, отражающие личное мнение магистранта по эффективности используемых способов разрешения проблемных ситуаций для российской науки и/или образования;
- **список** использованных литературных источников, оформленных в соответствии с требованиями библиографических стандартов;
- **список** использованных информационных ресурсов с указанием адреса сайта, индекса страницы и др.

2. Аспиранты готовят также презентацию в среде Power Point для представления на докладе.

**Правила оформления.**

Реферат печатается на бумаге формата А4, шрифт 14, интервал – полуторный. Поля со всех сторон – 2 см.

**Критерии оценки:**

«зачтено»	Тема реферата в целом отражена, использована современная научная литература, аспирант может ответить на вопросы по реферату
«не зачтено»	Тема реферата не раскрыта или реферат скачан из Интернет-источников

**Вопросы для устных опросов.**

1. Назовите области использования информационных технологий в химии.
2. Какие вы знаете компьютерные программы, используемые для первичной обработки результатов эксперимента?
3. Преимущества и недостатки информационных технологий.
4. Как построить градуировочную зависимость при нескольких параллельных измерениях каждой точки и отобразить погрешность измерений?
5. Какая программа может использоваться для построения нелинейных градуировочных зависимостей?
6. Перечислите основные этапы оптимизации условий эксперимента.
7. Каковы задачи планирования эксперимента в химии?
8. Сравните возможности полного и дробного факторного эксперимента.
9. Что такое «симплекс-оптимизация»? Как она используется в анализе?
10. В каких методах анализа компьютерные методы используются наиболее широко?
11. Каково назначение баз данных в химии?
12. Опишите метод нейронных сетей и его использование в химии.
13. Перечислите принципы компьютерной идентификации индивидуальных соединений на основе баз данных.
14. Что такое «информационно-аналитические системы», «экспертные системы», какова их роль в аналитической химии?
15. Какие задачи решаются с использованием факторного анализа?
16. Что такое «коррелированные данные»?
17. Каким образом осуществляется многомерная регрессия и градуировка?
18. Перечислите принципы выбора регрессионной модели.
19. Каким образом проводится проверка адекватности регрессионной модели?
20. Как рассчитать параметры регрессионной модели и оценить их погрешность?
21. Опишите применение регрессионного анализа для градуировки и расчета содержания определяемого компонента.
22. Какими методами проводится фильтрация шумов и снижение пределов обнаружения?
23. Создайте электронную таблицу в программе Excel для статистической обработки результатов эксперимента.
24. Как проверить подчинение совокупности данных нормальному закону распределения?
25. По какому критерию выявляются грубые ошибки (промахи)?
26. Как сравнить две (критерий Фишера) и несколько (критерии Бартлетта, Кокрена) дисперсий?
27. Назовите методы, используемые для классификации и распознавания образов.
28. Перечислите принципы отбора признаков.
29. Опишите основы кластерного и дискриминантного анализа.

30. Что такое «факторы», «целевая функция (функция отклика)», «поверхность отклика», «линии уровня»?
31. Как проводится выбор факторов и их значений?
32. Что такое «регрессионная модель»?
33. Какие требования предъявляют к матрице планирования?
34. Каким образом проводят расчет параметров регрессионной модели и проверку ее адекватности?

### Критерии оценки:

«зачтено»	Аспирант усвоил основы используемых технологий, в целом отвечает на поставленные вопросы, делает незначительные ошибки
«не зачтено»	Аспирант при ответе на вопрос делает серьезные ошибки

### Контрольная работа

#### Задание 1

#### Статистическая обработка результатов

Введите в выделенные ячейки параллельные результаты, их число и коэффициент Стьюдента, в соответствующих ячейках получатся значения дисперсии, стандартного отклонения, относительного стандартного отклонения и величины доверительного интервала

Пример решения:

№	X	n	t	$\bar{X}_{cp}$	$S^2$	S	$S_r, \%$	$\Delta x$
1	13,21	4	3,18	13,193	0,005092	0,071356	0,54	0,113
2	13,11							
3	13,17							
4	13,28							
5								
6								
7								
8								
9								

## Задание 2

**Статистическая обработка результатов двух серий измерений**

Введите в выделенные ячейки параллельные результаты, их число, коэффициенты Стьюдента, коэффициент Фишера. В соответствующих ячейках получатся значения дисперсий, стандартных отклонений, относительных стандартных отклонений, величины доверительных интервалов, а также результат сравнений результатов двух серий измерений по критериям Фишера и Стьюдента

Пример  
решения:

№	X	n	t	$X_{cp}$	$S^2$	S	$S_r, \%$	$\Delta x$
1	0,022	5	2,78	0,036	0,000123	0,0111	31,00	0,014
2	0,042							
3	0,037							
4	0,028							
5	0,05							
6								
7								
8								
9								

№	X	n	t	$X_{cp}$	$S^2$	S	$S_r, \%$	$\Delta x$
1	0,03	5	2,78	0,053	0,000314	0,017712	33,29	0,022
2	0,075							
3	0,05							
4	0,066							
5	0,045							
6								
7								
8								
9								

**F теор.**                    **6,16**  
**F эксп. =**                    2,55

Результат сравнения двух дисперсий:                    **расхождение между дисперсиями незначимо**

**t теор.**                    **2,36**                     $S^2=$                     0,000218  
**t эксп. =**                    1,86

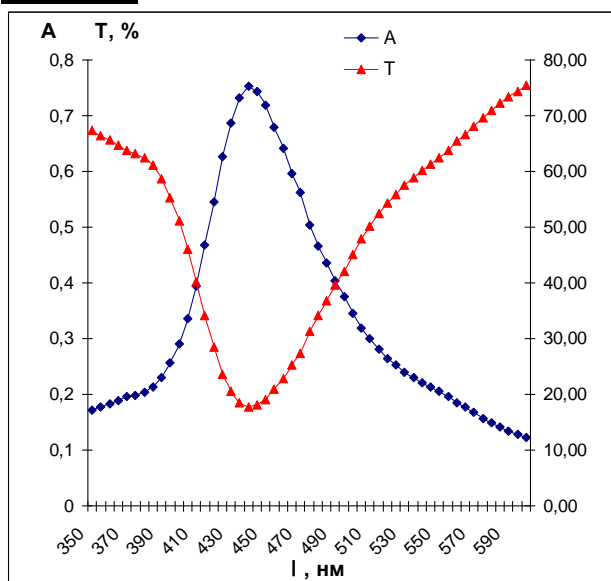
Результат сравнения двух средних:                    **расхождение между средними незначимо**

**Критерии оценки:**

«зачтено»	Электронная таблица даёт правильный результат, могут иметься погрешности оформления
«не зачтено»	Электронная таблица даёт неверный результат

Задание 3. Постройте на одном графике спектр красителя в коорд. А-λ и Т-λ (Т-пропускание в %)

$\lambda$	<b>A</b>
350	0,171
355	0,178
360	0,183
365	0,189
370	0,196
375	0,199
380	0,204
385	0,214
390	0,231
395	0,257
400	0,291
405	0,336
410	0,395
415	0,467
420	0,546
425	0,626
430	0,687
435	0,732
440	0,752
445	0,744
450	0,719
455	0,68
460	0,641
465	0,597
470	0,562
475	0,503
480	0,466
485	0,435
490	0,403
495	0,376
500	0,345
505	0,319
510	0,3
515	0,281
520	0,265
525	0,253
535	0,23
540	0,22
545	0,213
550	0,205
555	0,196
560	0,184
565	0,177
570	0,167
575	0,157
580	0,149
585	0,141
590	0,134
595	0,129
600	0,122

**Решение:****Задание 4**

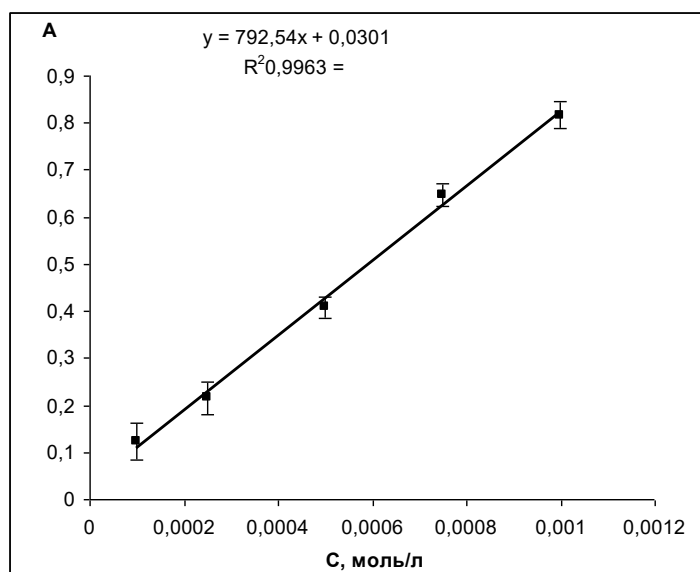
Постройте градуировочный график по следующим данным, укажите на графике величину доверительного интервала (каждое значение оптической плотности рассчитывается как среднее для 3-х измерений)

С, моль/л	0,0001	0,00025	0,0005	0,00075	0,001
A1	0,125	0,229	0,401	0,658	0,807
A2	0,108	0,215	0,405	0,645	0,829
A3	0,139	0,202	0,419	0,638	0,814

1	1
1	1
1	1

**Пример решения**

A ср.	0,124	0,215333	0,408333	0,647	0,816667	1	1
S	0,015524	0,013503	0,009452	0,010149	0,01124	0	0
deltaA	0,03854	0,033523	0,023465	0,025196	0,027904	0	0





### Тема индивидуальных проектов.

#### **Индивидуальный проект.**

Создание презентации в Power Point на тему «Использование информационных технологий в НИД», в которой аспирант отражает, какие информационные технологии, программы, методы он использует в своей собственной научно-исследовательской деятельности.

#### **Критерии оценки:**

«зачтено»	В презентации отражены суть решаемой проблемы, цель работы, постановка задач, методы исследования, основные результаты, выводы
«не зачтено»	Презентация не отражает суть решаемой проблемы

## **2. Задания для промежуточной аттестации**

### **Вопросы к зачёту:**

1. Дайте определение компьютерных и информационных технологий.
2. История развития компьютерной техники и ее использования в научных исследованиях и образовании.
3. Факторы эффективности использования компьютерных технологий в науке и образовании.
4. Роль информации в научных исследованиях.
5. Основные направления автоматизации научных исследований.
6. Современное состояние систем обработки данных и телекоммуникаций.
7. Современные аппаратные и программные средства.
8. Автоматизированное рабочее место.
9. Виды научно-технической информации. Автоматизация её обработки.
10. Основные сведения о сети Internet. Браузеры MS Internet Explorer, Opera, Mozilla. Методы поиска информации.
11. Телекоммуникационные сети. Средства телекоммуникационного доступа к источникам научной информации.
12. Поиск научной информации в сети Интернет. Основные поисковые машины. Типы запросов. Поисковый язык. Метапоисковые системы.
13. Сеть Internet и ее возможности для организации оперативного обмена информацией между исследовательскими группами.
14. Электронные информационные ресурсы: классификация, производители, общие правила работы.
15. Электронные журналы.
16. Полнотекстовые базы данных мировых агрегаторов научной информации Web of Science, Scopus.
17. Отечественные и зарубежные электронные информационные ресурсы.
18. Полнотекстовые журнальные базы данных ведущих академических издателей (Elsevier, Springer, ACS, Wiley, RSC, Taylor & Francis).
19. Российская электронная библиотека научных публикаций eLIBRARY.ru.
20. Мир науки через цитирование автора, журнала, отрасли знания. Электронные конференции.
21. *Компьютерные базы данных.* Банки химических данных.
22. Использование компьютерных банков химических данных в обучении и научной работе. Системы управления базами данных (СУБД).
23. Основные функции и типовая организация СУБД. Структура данных, методы доступа, интерфейсы доступа к данным.

24. Распределенные базы данных. Базы знаний.
25. СУБД Access. Банк данных, модели баз данных.
26. Использование средств MS Excel для ведения базы данных (списка).
27. Аналитико-библиографические базы данных. Базы данных химических соединений.
28. Применение компьютерных программ для управления приборами и получения сигналов.
29. Сопряжение инструментального химического оборудования с компьютерами. Аналоговый и цифровой сигналы.
30. Табличные процессоры в научных исследованиях. Логические операторы, фильтры, сортировка таблиц. Встроенные функции в Excel (математические, статистические, логические и др.).
31. Применение методов математического моделирования в химических исследованиях. Возможности программного комплекса MathCad в моделировании и обработке научных данных.
32. *Компьютер как инструмент молекулярного моделирования.* Современная компьютерная химия, программное обеспечение молекулярного моделирования.
33. Визуализация пространственных структур молекул. Квантовохимические расчеты, эмпирические и полуэмпирические методы прогнозирования физико-химических свойств веществ.
34. Численное моделирование статистических характеристик и динамики химических процессов: молекулярная механика, молекулярная динамика, броуновская динамика, метод Монте-Карло.
35. Молекулярное моделирование в инженерных науках, физике, химии, биологии и нанотехнологиях.
36. *Использование ЭВМ при статистической обработке результатов эксперимента.*
37. Расчет основных статистических характеристик и критериев (дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал, критерии Фишера, Стьюдента и др.).
38. Построение эмпирических моделей с использованием пакетов программ статистической обработки данных на примере MathCad.
39. Графическое представление результатов эксперимента. Обработка экспериментальных зависимостей с помощью компьютерных программ.
40. Построение диаграмм рассеяния и расчет коэффициента корреляции.
41. Расчет и интерпретация параметров регрессионной модели, оценка их погрешностей.
42. Применение регрессионного анализа для градуировки и расчета содержания определяемого компонента. Линии тренда, планки погрешности.
43. Сглаживание криволинейных зависимостей (МНК-сглаживание, сплайн-интерполяция, фильтр Савицкого-Голея).
44. Фурье-преобразование, его использование для фильтрации шумов и снижения пределов обнаружения.
45. Построение дифференциальных кривых.
46. Хемометрика. Её развитие в России и мире.
47. Понятие о многомерных данных. Размерность данных.
48. Метод главных компонент. Интерпретация графика счетов и графика нагрузок.
49. Классификация и распознавание образов.
50. Многомерная калибровка. Регрессия на главные компоненты.
51. Проекция на латентные структуры.
52. Процесс оформления научных работ и используемые программные средства.
53. Технологии интегрированных программных пакетов общего назначения Microsoft Office. Создание комплексных документов (технологии DDE, OLE) в MS Office.
54. Средства создания презентаций в среде MS PowerPoint. Использование шаблонов содержания и оформления. Использование анимации и гиперссылок.
55. Правила компьютерной презентации научного исследования.
56. Использование баз данных при оформлении результатов научного исследования.

**Критерии оценки:**

«зачет»	владеет способами обработки первичных данных в научно-исследовательской работе, способами создания и представления компьютерных презентаций в научных целях, современными хемометрическими методами обработки многомерных данных
«незачет»	не владеет способами обработки первичных данных в научно-исследовательской работе, способами создания и представления компьютерных презентаций в научных целях, современными хемометрическими методами обработки многомерных данных