

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
Аналитической химии

Селеменев В.Ф.

15.06.2018 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Б1.В.ДВ.04.01 Основы хемометрики  
Код и наименование дисциплины в соответствии с Учебным планом

1. Шифр и наименование направления подготовки/специальности:  
04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализации:  
Высокомолекулярные соединения

3. Квалификация (степень) выпускника:  
магистр

4. Форма обучения:  
очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:  
1002 аналитической химии

6. Составители программы: Паршина Анна Валерьевна, д.х.н.  
(ФИО, ученая степень, ученое звание)

7. Рекомендована: НМС химического факультета № 5 от 24.05.2018  
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2018 / 2019 Семестр: 3

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цель: формирование знаний по хемометрике, необходимых для моделирования многомерных (многофакторных) физико-химических процессов и явлений путем применения проекционных математических методов, позволяющих выделять в больших массивах данных скрытые (латентные) переменные и анализировать связи, существующие в изучаемой системе.

Задачи:

1. овладеть способами эффективного извлечения информации из экспериментальных данных для перехода на новый уровень понимания химических процессов и систем, учитывающий межкомпонентные (межфакторные) взаимодействия;
2. овладеть математическими алгоритмами многомерного анализа применительно к решению задач аналитической химии.

**10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:** (блок Б1, базовая или вариативная часть, к которой относится дисциплина; требования к входным знаниям, умениям и навыкам; дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей)

Б1.В. Вариативная часть.

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: базовые знания фундаментальных разделов физики, физической и аналитической химии, навыки практической работы в области физики и химии, владение математическим аппаратом и основами информатики в объеме, необходимом для освоения теории вероятностей, математической статистики, многомерных математических методов.

Дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей: Экспресс и тест-методы анализа.

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):**

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: основы теории вероятности и математической статистики применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации; уметь: применять схемы полного факторного эксперимента при планировании исследований по теме магистерской диссертации; владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе

		в соответствии с темой магистерской диссертации.
ПК-2	Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	<p>знать: основы основные подходы к планированию и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации;</p> <p>уметь: применять математические алгоритмы планирования и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации;</p> <p>владеть: приемами хемометрики для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 2 / 72**

**Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) Зачет с оценкой.**

### 13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)			
	Всего	По семестрам		
		3 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия	18	18		
в том числе: лекции	-	-		
практические	18	18		
лабораторные	-	-		
Самостоятельная работа	54	54		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – час.)	зачет	0		
Итого:	72	72		

#### 13.1 Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<b>1. Практические работы</b>		
1.1	Введение.	Предмет хемометрики.
1.2	Физико-химический эксперимент как процесс получения информации	Эксперимент как процесс получения информации о физико-химической системе.
1.3	Основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	Основные законы теории вероятностей. Нормальный закон распределения случайных величин. Статистика малых выборок. Сравнение дисперсий. Сравнение средних значений двух выборочных совокупностей.
1.4	Основы корреляционного и регрессионного анализа.	Коэффициент корреляции, оценка значимости. Регрессионный анализ. Доверительные границы линии регрессии. Расчет значений доверительного интервала независимой переменной по данным регрессионной зависимости. Значимость коэффициентов регрессии.

1.5	Дисперсионный анализ.	Планирование экспериментов при многофакторном дисперсионном анализе. Полноблочные и неполноблочные схемы. Латинские квадраты и кубы. Гиперлатинские квадраты. Элементы комбинаторики
1.6	Методы постановки и интерпретации многофакторного эксперимента.	Многофакторные эксперименты. Постановка, интерпретация результатов. Планирование и реализация опытов. Рандомизация опытов. Математическая модель, получение и оценка параметров, проверка адекватности математической модели.
1.7	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Обнаружение сигналов и управление. Обнаружение сигнала. Отношение сигнал/шум. Точность пределов обнаружения. Увеличение отношения сигнал/шум. Обработка сигналов. Разрешение аналитических сигналов. Определение сложности сигналов. Визуальное наблюдение.

### 13.2 Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Введение	0	1	0	0	1
2	Физико-химический эксперимент как процесс получения информации	0	2	0	6	8
3	Основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	0	3	0	6	9
4	Основы корреляционного и регрессионного анализа.	0	3	0	10	13
5	Дисперсионный анализ.	0	3	0	10	13
6	Методы постановки и интерпретации многофакторного эксперимента.	0	3	0	12	15
7	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	0	3	0	10	13
Итого:		0	18	0	54	72

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

### 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Аналитическая химия: в 3 т. / под ред. Л.Н. Москвина. – Т.3: Химический анализ. – М., 2010. – 368 с.
2	Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии / А.Н. Смагунова, О.М. Карлукова. – Учеб. пособие. – Ростов н/Д: Феникс, 2012. – 346 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Систематические и случайные погрешности химического анализа / М.С. Черновьянц [ред] – М.: Академкнига, 2004. – 156 с., ил.

4	Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман. – М. : Высш. шк., 2010. – 478 с.
5	Дёрффель К. Статистика в аналитической химии / К. Дерфель. – М. : Мир, 1994. – 267 с.
6	Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа / А.К. Чарыков. – Л. : Химия, 1984. – 165 с.
7	Вентцель Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель. – М. : Высш. шк., 1998. – 575 с.
8	Основы аналитической химии : в 2-х кн. / Ю.А. Золотов [и др.]. – М., 1999. – Кн. 1 : Общие вопросы. – С. 21-57.
9	Вершинин В.И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента / В.И. Вершинин. – Омск : ОмГУ, 2005. – 263 с.
10	Шараф М.А. Хемометрика / М.А. Шараф, Д.Л. Илмэн, Б.Р. Ковальски. – Л. : Химия, 1989. – 269 с.
11	Ахназарова С.Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. – М. : Высш. шк., 1985. – 327 с.
12	Адлер Ю.П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий/ Ю.П.Адлер, Е.В.Маркова, Ю.В.Грановский – М. : Наука, 1976. – 279 с.
13	Пикула Н.П. Метрологическое обеспечение и контроль качества химического анализа / Н.П. Пикула, А.А. Бакибаев, Г.Б. Слепченко – Томск: ТПУ, 2012. - 216 с. (Учебное пособие)
14	Гармаш А.В. Метрологические основы аналитической химии / Н.М. Сорокина, А.В. Гармаш – Москва: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. - 47 с. (Учебное пособие).

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет):

№ п/п	Источник
8	<a href="http://www.anchem.ru/">http://www.anchem.ru/</a>
9	<a href="http://www.chemweb.com">http://www.chemweb.com</a>
10	<a href="http://www.lib.vsu.ru/">www.lib.vsu.ru/</a>
11	<a href="http://www.chem.vsu.ru/sorbcr/">http://www.chem.vsu.ru/sorbcr/</a>

**16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)**

№ п/п	Источник
1	Бобрешова О.В., Паршина А.В. Основы анализа многомерных данных: методические указания к семинарским занятиям / О.В. Бобрешова, А.В.Паршина. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2009. - 25 с.
2	Бобрешова О.В., Паршина А.В. Основы химической метрологии и хемометрики: методические указания к семинарским занятиям / О.В. Бобрешова, А.В.Паршина. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2007. - 15 с.

**17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости):**

- ноутбук;
- мультимедийный проектор EPSON.

**18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

(при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)  
- ноутбук.

**19. Фонд оценочных средств:**

**19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения**

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их)	ФОС* (средства оценивания)

	посредством формирования знаний, умений, навыков)	наименование)	
ОПК-1 Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: основы теории вероятности и математической статистики применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.	Физико-химический эксперимент как процесс получения информации; основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	Устный опрос, практические задания № 1-3.
	уметь: применять схемы полного факторного эксперимента при планировании исследований по теме магистерской диссертации.	Основы корреляционного и регрессионного анализа; дисперсионный анализ.	Контрольная работа №1.
	владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.	Методы постановки и интерпретации многофакторного эксперимента; обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Устный опрос.
ПК-2 Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	знать: основы основные подходы к планированию и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.	Методы постановки и интерпретации многофакторного эксперимента; обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Устный опрос.
	уметь: применять математические алгоритмы планирования и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.	Основы корреляционного и регрессионного анализа; дисперсионный анализ.	Контрольная работа №1.
	владеть: приемами хемометрики для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.	Методы постановки и интерпретации многофакторного эксперимента; обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Устный опрос.
<b>Промежуточная аттестация</b>			Комплект КИМ

## 19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
---------------------------------	--------------------------------------	--------------

Обучающийся в полной мере владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач, что соответствует полному освоению компетенций.	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, применять теоретические знания для решения практических задач, допускает незначительные ошибки, неточности, которые исправлены после замечания преподавателя, что соответствует не достаточно полному освоению компетенций.	Базовый уровень	Хорошо
Ответ на контрольно-измерительный материал неполный, без обоснований, объяснений. Демонстрирует частичные знания учебного материала, значительные затруднения в вопросах решения практических задач, что показывает недостаточное владение компетенциями. Ошибки устраняются по дополнительным вопросам преподавателя	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Ответ на контрольно-измерительный фрагментарный. Обучающийся демонстрирует несистематические, отрывочные знания, допускает грубые, принципиальные ошибки, которые не устранены после дополнительных наводящих вопросов, что соответствует не освоению компетенций.	–	Неудовлетворительно

### **19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

#### **19.3.1 Перечень вопросов к зачету:**

1. Предмет хемометрики. Объект исследования как «черный ящик». Факторы и параметры эксперимента.
2. Статистическая модель. Принципы планирования многофакторного эксперимента.
3. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Виды и методы устранения систематических ошибок.
4. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.
5. Случайная величина. Понятие вероятности. Непрерывные и дискретные случайные величины. Генеральная совокупность. Выборочная совокупность.
6. Случайная величина. Понятие вероятности. Законы распределения случайных величин. Параметры (математическое ожидание, дисперсия) закона распределения случайной величины.
7. Случайная величина. Понятие вероятности. Нормальный закон распределения Гаусса-Лапласа.
8. Статистические гипотезы. Алгоритм проверки статистической гипотезы. Ошибки 1, 2 рода.
9. Алгоритм проверки гипотезы о принадлежности двух выборок одной генеральной совокупности с помощью параметрических методов.
10. Алгоритм проверки гипотезы о принадлежности двух выборок одной генеральной совокупности с помощью непараметрических методов.
11. Корреляционный анализ. Применение в аналитической химии.
12. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа. Применение в аналитической химии.
13. Условия применения дисперсионного анализа. Применение в аналитической химии.
14. Условия и основные принципы применения непараметрических методов обработки данных.

#### **19.3.2 Перечень практических заданий:**

##### **Практическое задание №1.**

Применение нормального закона распределения для анализа представительной выборки.

**Практическое задание №2.**

Анализ малой выборки на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот.

**Практическое задание №3.**

Проверка статистических гипотез о равенстве математических ожиданий и дисперсий случайных величин на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот.

**19.3.3 Комплект заданий для контрольных работ:**

**Комплект заданий для контрольной работы №1**

**Билет 1**

1. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.
2. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе. Алгоритм корреляционного анализа.

**Билет 2**

1. Случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения случайной величины. Дисперсия. Математическое ожидание. Среднеквадратическое отклонение.
2. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа.

**Билет 3**

3. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.
4. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе. Алгоритм однофакторного регрессионного анализа для ортогональных схем эксперимента.

**Билет 4**

1. Случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения случайной величины. Дисперсия. Математическое ожидание. Среднеквадратическое отклонение.
2. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе.

**Билет 5**

1. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.
2. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе. Алгоритм многофакторного регрессионного анализа для ортогональных схем эксперимента.

**Билет 6**

1. Случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения случайной величины. Дисперсия. Математическое ожидание. Среднеквадратическое отклонение.
2. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе. Алгоритм корреляционного анализа.

**19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**



Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме письменных работ (контрольные и практические работы). Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя практические задания, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.