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

УТВЕРЖДАЮ
И.о. зав. каф. Фармацевтической химии
и фармакогнозии
О.В. Тринеева
21.04.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.Б.04 Хемометрика в фармацевтическом анализе

1. Код и наименование специальности:

33.08.03 Фармацевтическая химия и фармакогнозия

2. Направленность (профиль): -

3. Квалификация (степень) выпускника: провизор-аналитик

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:

Фармацевтической химии и фармакогнозии

6. Составители программы:

Карлов П.М., к.ф.н., доцент

7. Рекомендована: НМС фармацевтического факультета 24.03.2025 №1500-06-07

8. Учебный год:2025/26 **Семестр(ы): 1**

9.Цели и задачи учебной дисциплины:
Целью данного курса является формирование у провизоров-аналитиков системных знаний по фундаментальным вопросам хемометрической оценки результатов химического эксперимента.
Задачи учебной дисциплины:
- сформировать теоретические основы метода хемометрической оценки - стандартные действия, которые следует предпринимать для оценки результатов анализа
- практическое использование хемометрических методов и методы оптимизации важных параметров модели

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина относится к базовой части Блока Б1 Учебного плана подготовки ординаторов по специальности 33.08.03 «Фармацевтическая химия, фармакогнозия».

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

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ПК-1	готовность к проведению экспертизы лекарственных средств с помощью химических, биологических, физико-химических и иных методов	**Знать** устройство и принципы работы современного лабораторного оборудования Знание методов статистического анализа, применяемых при оценке полученных результатов испытаний и валидации **Уметь** осуществлять выбор специализированного оборудования для проведения фармацевтического анализа **Владеть** навыками выбора и применения специализированного оборудования, предусмотренного для использования в контроле качества лекарственных средств

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

Форма промежуточной аттестации*(зачет/экзамен) зачет.*

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
			1 № семестра
Аудиторные занятия		30	30
в том числе:	лекции	-	-
	практические	30	30
	лабораторные	-	-
Самостоятельная работа		42	42
Форма промежуточной аттестации		*0*	зачет
Итого:		72	72

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Практические занятия		
1	Хемометрика в фармацевтическом анализе	Теоретические аспекты хемометрики.
		Регрессия парциальных наименьших квадратов(PLS)
2	Оценка хемометрических моделей и анализ тестовых образцов	Оценка хемометрических моделей
		Критерии отбора при создании PLS-калибровки; Оптимизация метода
		Отбор диапазона концентраций и значений компонент. Подбор репрезентативных образцов для калибровки. Влияние на прибор окружающей среды. Проблема коллинеарности. Измерения фона
		Важность параметров измерения и реперных значений. Выбор спектральных данных. Выбор методов внутренней и внешней оценки. Выбор спектральных диапазонов. Выбор первичной обработки данных. Выбор подходящего числа факторов
		Выбор удобных калибровочных образцов; распознавание выбросов. Оценка результатов проверки. Выполнение и утверждение методов.
		Практический пример применения в расчетах.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)		
		Практические	Самостоятельная работа	Всего
1	Хемометрика в фармацевтическом анализе.	8	12	20
2	Оценка хемометрических моделей и анализ тестовых образцов	22	30	52
	Итого:	30	42	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Обучение складывается из контактной работы обучающихся с преподавателем, включающей аудиторные занятия и самостоятельную работу. Предусмотрена возможность использования на всех этапах изучения дисциплины образовательного портала «Электронный университет ВГУ» Онлайн курс «хемометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097

В соответствии с требованиями ФГОС ВО в учебном процессе широко используются активные и интерактивные формы проведения занятий. Использование интерактивной модели обучения предусматривают моделирование ситуаций, близких к профессиональной деятельности провизора; совместное решение проблем.

Интерактивная форма проведения занятий организуется в виде индивидуальной, парных и групповых работ, осуществляется работа с документами и различными источниками информации. Интерактивные методы основаны на принципах взаимодействия, активности обучаемых, опоре на групповой опыт, обязательной

обратной связи. Создается среда образовательного общения, которая характеризуется открытостью, взаимодействием участников, равенством их аргументов, накоплением совместного знания, возможностью взаимной оценки и контроля.

Основное учебное время выделяется на практическую работу в хемометрике в фармацевтическом анализе.

Самостоятельная работа студентов подразумевает подготовку к тематическому текущему контролю, практическим занятиям и включает работу с учебным материалом электронных пособий кафедры, учебной, научной, справочной литературой, материалами по дисциплине, размещенными в электронной системе образовательного портала «Электронный университет ВГУ» Онлайн курс «хемометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097 и другими информационными источниками, включая интернет-ресурсы.

Оценка результатов самостоятельной работы организуется как единство двух форм: самоконтроль и контроль со стороны преподавателя.

Самоконтроль зависит от определенных качеств личности, ответственности за результаты своего обучения, заинтересованности в положительной оценке своего труда, материальных и моральных стимулов, от того насколько обучаемый мотивирован в достижении наилучших результатов. Задача преподавателя состоит в том, чтобы создать условия для выполнения самостоятельной работы (учебно-методическое обеспечение), повышать её значимость, и грамотно осуществлять контроль самостоятельной деятельности студента (фонд оценочных средств).

Работа с учебной литературой рассматривается как вид учебной работы по дисциплине хемометрика и выполняется в пределах часов, отводимых на её изучение (в разделе СРС). Каждый обучающийся обеспечен доступом к библиотечным фондам ВГУ, а также к электронным базам данных, информационно-справочным и поисковым системам, в том числе в сети Интернет.

По каждому разделу учебной дисциплины разработаны методические рекомендации для студентов и преподавателей.

На каждом занятии студентам предлагается выполнить индивидуальное или групповое задание продуктивного или творческого характера.

Предусматривается, в случае чрезвычайных обстоятельств, возможность реализации программы дисциплины в полном объеме исключительно в электронной информационно-образовательной среде с использованием различных образовательных технологий, позволяющих обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии), в том числе с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

Вопросы по учебной дисциплине включены в Итоговую государственную аттестацию выпускников.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Сливкин, Алексей Иванович. Хемометрика и фармацевтический анализ [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие : [для ординаторов, обучающихся по специальности 33.08.03 "Фармацевтическая химия и фармакогнозия"] / А.И. Сливкин, П.М. Карлов ; Воронеж. гос. ун-т .— Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2020 .— Загл. с титула экрана .— Свободный доступ из интрасети ВГУ .— Текстовый файл .—http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m20-23.pdf

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	Государственная фармакопея Российской Федерации XV издания / М-во здравоохранения и социального развития Российской Федерации [и др.] - М.: Институт фармакопеи и стандартизации в сфере обращения лекарственных средств, 2023. https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/
2	Введение в хемометрику / Сергей Кучерявский, Виталий Панчук, Юлия Монахова, Дмитрий Кирсанов, 2023. - https://rcs.chemometrics.ru/books/Введение-в-хемометрику.pdf

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

№ п/п	Ресурс
1.	Электронная библиотека ВУЗа. Режим доступа: http:// www.lib.vsu.ru
2.	Онлайн курс «хемометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

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

№ п/п	Ресурс
1.	Сливкин, Алексей Иванович. Методические материалы по организации самостоятельной работы ординаторов, обучающихся по специальности 33.08.03 Фармацевтическая химия и фармакогнозия [Электронный ресурс] : методическое пособие / А.И. Сливкин, О.В. Тринеева ; Воронеж. гос. ун-т .— Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2020 .— Загл. с титула экрана .— Свободный доступ из интрасети ВГУ .— Текстовый файл .— http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m20-109.pdf

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

1. Дисциплина реализуется с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий Онлайн курс «хемометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097. Свободный доступ в Интернет, наличие компьютерных программ общего назначения.
2. Использование информационно-справочной системы «Консультант Плюс» - открыт постоянный доступ в учебной аудитории для самостоятельной работы.

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)

Наименование помещений для проведения всех видов учебной деятельности, предусмотренной учебным планом, в том числе помещения для самостоятельной работы, с указанием перечня основного оборудования, учебно-наглядных пособий и используемого программного обеспечения	**Адрес (местоположение) помещений для проведения всех видов учебной деятельности, предусмотренной учебным планом (в случае реализации образовательной программы в сетевой форме дополнительно указывается наименование организации, с которой заключен договор)**
Учебная аудитория: специализированная мебель, мультимедиа-проектор, экран настенный с электроприводом, персональный компьютер, ПО: WinPro 8, OfficeSTD 2013 RUS OLP NL Acdmc, LibreOffice 7.1, Mozilla Firefox, СПС «ГАРАНТ-Образование», СПС «Консультант Плюс» для образования.	394036, г. Воронеж, ул. Студенческая, д. 3
Помещение для самостоятельной работы с возможностью подключения к сети «Интернет»: Специализированная мебель, ком-пьютеры (12 шт.), доска магнитно-маркерная. ПО: СПС «ГАРАНТ-Образование», СПС"Консультант Плюс" для образования, OfficeSTD 2013 RUS OLP NL Acdmc, браузер Mozilla Firefox, Libra Office 7.1	394036, г. Воронеж, ул. Студенческая, д. 3

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 посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ПК-1 готовность к проведению экспертизы лекарственных средств с помощью химических, биологических, физико-химических и иных методов	Знать устройство и принципы работы современного лабораторного оборудования	1. Хемометрика в фармацевтическом анализе. 2. Оценка хемометрических моделей и анализ тестовых образцов	Комплект Ким
	Уметь осуществлять выбор специализированного оборудования для проведения фармацевтического анализа		
	Владеть навыками выбора и применения специализированного		

	оборудования, предусмотренного для использования в контроле качества лекарственных средств		
Промежуточная аттестация			Комплект Ким

19.1 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при текущей аттестации

Перечень вопросов к текущей аттестации:

1. Опишите основные этапы создания методики многопараметрической калибровки
2. Назовите основные минусы однопараметрической калибровки
3. Причина применения PLS-регрессии при многопараметрической калибровке
4. В чем принципиальное отличие алгоритма PLS1 и алгоритма PLS2
5. Как проводится внутренняя проверка при анализе хемометрической моделируются
6. Способ расчета RMSECV (среднеквадратичной погрешности внутренней проверки)
7. Как проводится внешняя проверка при анализе хемометрической моделируются
8. Способ расчета RMSEP (среднеквадратичной погрешности прогноза)
9. Основные этапы при создании хемометрической моделируются
10. Критерии отбора при создании PLS-калибровки
11. Опишите отбор диапазона концентраций и значений компонент
12. Опишите подбор репрезентативных образцов для калибровки
13. Опишите влияние на приборную базу окружающей среды

Пример КИМа (письменный ответ):

1. Назовите основные минусы однопараметрической калибровки
2. Как проводится внешняя проверка при анализе хемометрической моделируются

Для оценивания результатов обучения при текущей аттестации используются следующие показатели

1. Знание и владение содержанием учебного материала, НД и понятийным аппаратом по дисциплине «Хемометрика в фармацевтическом анализе».
2. Умение связывать теоретические знания с практическими навыками по дисциплине «Хемометрика в фармацевтическом анализе».
3. Умение представить ответ примерами, фактами, иллюстрациями в соответствии с данными НД по фармацевтической химии.
4. Умение решать профессиональные задачи в сфере контроля качества ЛС.
5. Владеть навыками обоснования и проведения разработки хемометрической модели и оценка ее параметров.

Критерии оценивания текущей аттестации:

Критерии оценивания компетенций	**Уровень сформированности компетенций**	**Шкала оценок**

Ответ ординатора полностью соответствует всем пяти оцениваемым показателям. Компетенции сформированы полностью и используются в полном объеме.		отлично
Ответ ординатора не полностью соответствует всем оцениваемым показателям, компетенции сформированы и проявляются фрагментарно и не в полном объеме. При ответе студент допускает незначительные ошибки и неточности, которые устраняются им самостоятельно.		хорошо
Ответ ординатора на контрольно-измерительный материал не соответствует любым двум из перечисленных показателей, Компетенции сформированы в общих чертах, при ответе обучающийся допускает существенные ошибки и неточности, демонстрирует частичные знания дисциплины, не способен сочетать теоретические знания, практические умения и навыки.		удовлетвор ительно
Ответ ординатора на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем из перечисленных показателей. Компетенции не сформированы. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые профессиональные ошибки.	–	*неудовлетв орительно*

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

Для оценивания результатов обучения при промежуточной аттестации используются следующие показатели

6. Знание и владение содержанием учебного материала, НД и понятийным аппаратом по дисциплине «Хемометрика в фармацевтическом анализе».
7. Умение связывать теоретические знания с практическими навыками по дисциплине «Хемометрика в фармацевтическом анализе».
8. Умение представить ответ примерами, фактами, иллюстрациями в соответствии с данными НД по фармацевтической химии.
9. Умение решать профессиональные задачи в сфере контроля качества ЛС.
10. Владеть навыками обоснования и проведения разработки хемометрической модели и оценка ее параметров.

Для оценивания результатов обучения на зачете используется – зачтено, не зачтено.

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	**Уровень сформированности компетенций**	**Шкала оценок**

Ответ ординатора полностью соответствует всем пяти оцениваемым показателям. Компетенции сформированы полностью и используются в полном объеме.	*Повышенный уровень*	***зачтено***
Ответ ординатора не полностью соответствует всем оцениваемым показателям, компетенции сформированы и проявляются фрагментарно и не в полном объеме. При ответе студент допускает незначительные ошибки и неточности, которые устраняются им самостоятельно.	*Базовый уровень*	***зачтено***
Ответ ординатора на контрольно-измерительный материал не соответствует любым двум из перечисленных показателей, Компетенции сформированы в общих чертах, при ответе обучающийся допускает существенные ошибки и неточности, демонстрирует частичные знания дисциплины, не способен сочетать теоретические знания, практические умения и навыки.	*Пороговый уровень*	***зачтено***
Ответ ординатора на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем из перечисленных показателей. Компетенции не сформированы. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые профессиональные ошибки.	–	***незачтено***

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

Тестовые задания

Тестирование проводится письменно или с использованием ЭО и ДОТ Онлайн курс «хемометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097

Критерии оценивания компетенций при тестировании	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Выполнено верно менее 71% тестовых заданий	-	*Неудовлетворительно*
Выполнено верно 71-81% тестовых заданий	*Пороговый*	*Удовлетворительно*
Выполнено верно 82-91% тестовых заданий	*Базовый*	*Хорошо*
Выполнено верно 92-100% тестовых заданий	*Повышенный*	*Отлично*

Примеры тестовых заданий

MDL (Минимальная описываемая длина): Эмпирически полученное число для определения оптимального числа факторов

$$M \ln \frac{SSE}{M} + R \ln M$$

+

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m) \cdot (E_i - E_m)$$

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i^{meas} - Y_i^{pred})^2$$

$$\left[1 - \frac{SSE}{\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m)^2} \right] \cdot 100$$

PRESS (Прогнозируемая остаточная суммарная ошибка квадратов): Сумма всех квадратичных ошибок прогноза.

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i^{meas} - Y_i^{pred})^2$$

+

$$M \ln \frac{SSE}{M} + R \ln M$$

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m) \cdot (E_i - E_m)$$

$$\left[1 - \frac{SSE}{\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m)^2} \right] \cdot 100$$

PWS (Весомый спектр): Счетчик уравнения коррелограммы

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m) \cdot (E_i - E_m)$$

+

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i^{meas} - Y_i^{pred})^2$$

$$M \ln \frac{SSE}{M} + R \ln M$$

$$\left[1 - \frac{SSE}{\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m)^2} \right] \cdot 100$$

R2: Коэффициент определения показывает процент отклонения в значениях компонент, полученного при прогнозе. Часто его называют еще объяснимой дисперсией.

$$\left[1 - \frac{SSE}{\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m)^2} \right] \cdot 100 +$$

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i - Y_m) \cdot (E_i - E_m)$$

$$\sum_{i=1}^{M} (Y_i^{meas} - Y_i^{pred})^2$$

$$M \ln \frac{SSE}{M} + R \ln M$$

RMSECV (Среднеквадратичная погрешность внутренней проверки): Это количественная мера для определения точности, с которой делалась проверка.

$$\sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^{M} (Y_i^{meas} - Y_i^{pred})^2} = \sqrt{\frac{1}{M} \cdot PRESS} +$$

$$\sqrt{\frac{SSE}{M - R - 1}}$$

$$\sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^{M} \left(\frac{Res_i}{1 - Lever_i} \right)^2}$$

$$\sum_{i=1}^{M} (Res_i)^2$$

RMSEE (Среднеквадратичная погрешность оценки): Величина помогает рассчитать погрешность при анализе калибровочных образцов.

$$\sqrt{\frac{SSE}{M-R-1}} + \sqrt{\frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(Y_i^{meas}-Y_i^{pred}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{M}\cdot PRESS}$$

$$\sqrt{\frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{Res_i}{1-Lever_i}\right)^2}$$

$$\sum_{i=1}^{M}\left(Res_i\right)^2$$

RMSELC (Среднеквадратичная погрешность коррекции рычага): Эту величину рассчитывают во время калибровки и с ее помощью оценивают ожидаемую погрешность анализа для тестового образца

$$\sqrt{\frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{Res_i}{1-Lever_i}\right)^2} + \sqrt{\frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(Y_i^{meas}-Y_i^{pred}\right)^2}$$

$$\sqrt{\frac{SSE}{M-R-1}}$$

$$\sum_{i=1}^{M}\left(Res_i\right)^2$$

SSE (Суммарная квадратичная погрешность): Сумма квадрата остатков

$$\sum_{i=1}^{M}\left(Res_i\right)^2 + \sqrt{\frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(Y_i^{meas}-Y_i^{pred}\right)^2}$$

$$\sqrt{\frac{1}{M}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{Res_i}{1-Lever_i}\right)^2}$$

$$\sqrt{\frac{SSE}{M-R-1}}$$

Коррелограма отображает степень корреляции между спектральными данными и данными концентраций для данного числа факторов

$$\frac{\sum_{i=1}^{M}(Y_i-Y_m)\cdot(A_i-A_m)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{M}(Y_i-Y_m)^2}\cdot\sqrt{\sum_{i=1}^{M}(A_i-A_m)^2}}+$$

$$\frac{(M-1)\cdot(SpecRes_i)^2}{\sum_{j\neq i}(SpecRes_j)^2}$$

$$\frac{\int_0^{FValue} f(FValue)d(FValue)}{\int_0^{\infty} f(FValue)d(FValue)}$$

$$\sum_{i=1}^{M}(Y_i^{meas}-Y_i^{pred})^2$$

При PLS-регрессии для всех спектров расчитывается расстояния Махаланобиса

tiT (XT *X)-1 * ti +

$$M\ln\frac{SSE}{M}+R\ln M$$

$$\sum_{i=1}^{M}(Y_i^{meas}-Y_i^{pred})^2$$

$$\sum_{i=1}^{M}(Y_i-Y_m)\cdot(E_i-E_m)$$

Перечень вопросов к зачету

1. Опишите основные этапы создания методики многопараметрической калибровки

2. Назовите основные минусы однопараметрической калибровки
3. Причина применения PLS-регрессии при многопараметрической калибровке
4. В чем принципиальное отличие алгоритма PLS1 и алгоритма PLS2
5. Как проводится внутренняя проверка при анализе хемометрической моделируются
6. Способ расчета RMSECV (среднеквадратичной погрешности внутренней проверки)
7. Как проводится внешняя проверка при анализе хемометрической моделируются
8. Способ расчета RMSEP (среднеквадратичной погрешности прогноза)
9. Основные этапы при создании хемометрической моделируются
10. Критерии отбора при создании PLS-калибровки
11. Опишите отбор диапазона концентраций и значений компонент
12. Опишите подбор репрезентативных образцов для калибровки
13. Опишите влияние на приборную базу окружающей среды
14. В чем суть проблемы коллинеарности в работе с лериями образцов
15. Причины измерения фоновых значений системы
16. Стратегия выбора спектральных данных
17. Процедура выбора методов внутренней и внешней оценки
18. Подходы к выбору спектральных диапазонов
19. Как проводится выбор первичной обработки данных
20. Методика выбора подходящего числа факторов
21. Как распознаются выбросы. Значения F и FProb
22. Как проводится корректировка смещения и наклона при переносе методики
23. Дайте определение и способ расчета Коррелограммы
24. Дайте определение и способ расчета расстояния Махаланобиса
25. Дайте определение и способ расчета PRESS (Прогнозируемая остаточная суммарная ошибка квадратов)
26. Дайте определение и способ расчета R2 (объяснимая дисперсия)

Пример контрольно-измерительного материала к зачету

1. Назовите основные минусы однопараметрической калибровки
2. Процедура выбора методов внутренней и внешней оценки

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.

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

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практическое задание, позволяющее оценить степень сформированности навыков.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.

Задания пункта 19 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины