

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

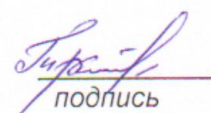
УТВЕРЖДАЮ

И.о. зав. каф. Фармацевтической химии

и фармакогнозии

О.В. Тринеева

21.04.2025 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.02.03.02 Аналитическая хеометрика

1. Код и наименование специальности: 33.05.01 Фармация
2. Направленность (профиль): фармация
3. Квалификация (степень) выпускника: провизор
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: 2028/2029 Семестр(ы): 8

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целью преподавания дисциплины «Аналитическая хеометрика» является формирование у провизоров системных знаний по фундаментальным вопросам хеометрической оценки результатов химического эксперимента.

Задачи учебной дисциплины:

- сформировать теоретические основы метода хеометрической оценки - стандартные действия, которые следует предпринимать для оценки результатов анализа;
- практическое использование хеометрических методов и методы оптимизации важных параметров модели.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина относится к Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока Б1 Учебного плана подготовки провизоров по специальности 33.05.01 «Фармация».

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

Код	Название компетенции	Код	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-5	Способен выполнять и осуществлять контроль качества клинических лабораторных исследований третьей категории сложности на различных этапах химико-токсикологических исследований, в том числе на основе внедрения новых методов и методик исследования	ПК-5.5	Планирует деятельность и составляет отчетность подразделений медицинской организации, организует контроль качества проводимых измерений (исследований) материалов, порядок ведения утвержденных форм документации	Знать: - НД, понятийный аппарат и способы расчетов по дисциплине «Аналитическая хеометрика»; - Методы статистического анализа, применяемые при оценке полученных результатов испытаний и валидации Уметь: - осуществлять выбор специализированного оборудования для проведения фармацевтического анализа; - связывать теоретические знания с практическими навыками по дисциплине «Аналитическая хеометрика»; - Формировать хеометрическую модель. Владеть: - навыками выбора и применения специализированного оборудования, предусмотренного для использования в контроле качества лекарственных средств; - навыками обоснования и проведения разработки хеометрической модели и оценки ее параметров.

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
			8
Аудиторные занятия		50	50
в том числе:	лекции	16	16
	практические	34	34
	лабораторные	-	-
Самостоятельная работа		22	22
Форма промежуточной аттестации		0	зачет
Итого:		72	72

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Хеометрика в фармацевтическом анализе	Теоретические аспекты хеометрики. Регрессия парциальных наименьших квадратов(PLS)	Онлайн курс «хеометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097
1.2	Оценка хеометрических моделей и анализ тестовых образцов	Теоретические аспекты хеометрики. Регрессия парциальных наименьших квадратов(PLS) Оценка хеометрических 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.	Онлайн курс «хеометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097

2. Практические занятия			
2.1	Хеометрика в фармацевтическом анализе	Теоретические аспекты хеометрики. Регрессия парциальных наименьших квадратов(PLS)	Онлайн курс «хеометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097
2.2	Оценка хеометрических моделей и анализ тестовых образцов	Теоретические аспекты хеометрики. Регрессия парциальных наименьших квадратов(PLS) Оценка хеометрических 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.	Онлайн курс «хеометрика в фармацевтическом анализе» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)			
		Лекции	Практические	Самостоятельная работа	Всего
1.	Хеометрика в фармацевтическом анализе.	4	8	4	16
2.	Оценка хеометрических моделей и анализ тестовых образцов	12	26	18	56
	Итого:	16	34	22	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 «хеометрика 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 Аналитической хеометрике.

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 «хеометрика 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 Аналитическая хеометрика 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.

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

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	<u>Сливкин, Алексей Иванович</u> . Хеометрика 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 хеометрику / Сергей Кучерявский, Виталий Панчук, Юлия Монахова, Дмитрий Кирсанов, 2023. - https://rscs.chemometrics.ru/books/Введение-в-хеометрику.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 «хеометрика 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, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Ресурс
1.	Методические материалы по организации самостоятельной работы обучающихся по дисциплинам "Фармацевтическая химия", "Токсикологическая химия", "Контроль качества" [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие : [для студ. 3-5 курсов направления 33.05.01 - Фармация] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: А.И. Сливкин, А.С. Чистякова, О.В. Тринеева, П.М. Карлов .— Электрон.текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2020 .— Загл. с титул. экрана .— Режим доступа: для зарегистрированных читателей ВГУ .— Текстовый файл .— URL:http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m20-159.pdf

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

1. Освоение дисциплины осуществляется с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий на сайте www.edu.vsu.ru, в котором размещена учебная и научная литература по курсу, материалы для подготовки к текущим

и промежуточной аттестации. Онлайн курс «хеометрика в фармацевтическом анализе» <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=12097>.

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 для проведения практических занятий: 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
Учебная аудитория для проведения лекционных занятий: специализированная мебель, мультимедиа-проектор, экран настенный с электроприводом, персональный компьютер. ПО WinPro 8, OfficeSTD 2013 RUS OLP NL Acdmc, Libre Office 7.1, интернет-браузер Mozilla Firefox.	394036, г. Воронеж, ул. Студенческая, д. 3
Помещение для самостоятельной работы с возможностью подключения к сети «Интернет»: Специализированная мебель, компьютеры (12 шт.), доска магнитно-маркерная. ПО: СПС «ГАРАНТ-Образование», СПС"Консультант Плюс" для образования, OfficeSTD 2013 RUS OLP NL Acdmc, браузер Mozilla Firefox, Libre Office 7.1	394036, г. Воронеж, ул. Студенческая, д. 3

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1	Все разделы дисциплины	ПК-5	ПК-5.5	Комплект тестов №1 Комплект ким №1
Промежуточная аттестация форма контроля - зачет				Комплект ким к зачету

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

Оценивание промежуточной аттестации осуществляется в соответствии с Положением об оценке промежуточной аттестации обучающихся фармацевтического факультета по результатам текущего контроля успеваемости <https://server.pharm.vsu.ru/static/upload/picture/3efc82611e561b33fff49c07384c7f11c8ccc94aba287bf23d5513d37a2fc84f.pdf> При этом, оценка по критерию «практическое занятие» определяется по среднему арифметическому, рассчитанному из оценок за все лабораторных занятия дисциплины. При неудовлетворительной работе на занятии итоговая оценка за занятие - «неудовлетворительно». При пропуске занятия итоговая оценка за занятие принимается за 0 и учитывается в текущий рейтинг. Повышение оценки за текущую успеваемость возможно в рамках индивидуальных занятий согласно графику, утвержденному на кафедре.

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме(ах): тестирования, устного и письменного опросов, коллоквиумов по соответствующим комплектам тестов и ким.

Используются следующие критерии оценивания:

1. Знание и владение содержанием учебного материала, НД и понятийным аппаратом по дисциплине «Аналитическая хеометрика».
2. Умение связывать теоретические знания с практическими навыками по дисциплине «Аналитическая хеометрика».
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 хеометрической модели и оценка ее параметров.

Описание технологии проведения:

текущая аттестация состоит из двух этапов:

1. Тестирование – продолжительностью 1 час
2. КИМ – подготовка в течении 45 минут с последующим устным ответом

Тестовые задания

Тестирование проводится письменно или с использованием ЭО и ДОТ Онлайн курс «хеометрика 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

$$M \ln \frac{SSE}{M} + R \ln M + \sum_{i=1}^M (Y_i - Y_m) \cdot (E_i - E_m) + \sum_{i=1}^M (Y_i^{\text{meas}} - Y_i^{\text{pred}})^2$$
$$\left[1 - \frac{SSE}{\sum_{i=1}^M (Y_i - Y_m)^2} \right] \cdot 100$$

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

$$\sum_{i=1}^M (Y_i^{\text{meas}} - Y_i^{\text{pred}})^2 + M \ln \frac{SSE}{M} + R \ln M + \sum_{i=1}^M (Y_i - Y_m) \cdot (E_i - E_m)$$

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

PWS (Весомый спектр): Счетчик уравнения коррелограммы

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

+

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

$$\sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^M \left(\frac{\text{Re } s_i}{1 - \text{Lever}_i} \right)^2}$$

$$\sum_{i=1}^M (\text{Re } s_i)^2$$

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

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

$$\sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^M (Y_i^{\text{meas}} - Y_i^{\text{pred}})^2} = \sqrt{\frac{1}{M} \cdot \text{PRESS}} \quad \sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^M \left(\frac{\text{Re } s_i}{1 - \text{Lever}_i} \right)^2}$$

$$\sum_{i=1}^M (\text{Re } s_i)^2$$

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

$$\sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^M \left(\frac{\text{Re } s_i}{1 - \text{Lever}_i} \right)^2} +$$

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

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

$$\sum_{i=1}^M (\text{Re } s_i)^2$$

SSE (Суммарная квадратичная погрешность): Сумма квадрата остатков

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

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

$$\frac{\sum_{i=1}^M (Y_i - Y_m) \cdot (A_i - A_m)}{\sqrt{\sum_{i=1}^M (Y_i - Y_m)^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^M (A_i - A_m)^2}} + \frac{(M - 1) \cdot (\text{SpecRes}_i)^2}{\sum_{j \neq i} (\text{SpecRes}_j)^2} \frac{\int_0^{\text{FValue}} f(\text{FValue}) d(\text{FValue})}{\int_0^{\infty} f(\text{FValue}) d(\text{FValue})} \sum_{i=1}^M (Y_i^{\text{meas}} - Y_i^{\text{pred}})^2$$

При PLS-регрессии для всех спектров рассчитывается расстояния Махаланобиса

$t_i^T (X^T X)^{-1} t_i +$

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

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

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

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 хеометрической моделируются
6. Способ расчета RMSECV (среднеквадратичной погрешности внутренней проверки)
7. Как проводится внешняя проверка при анализе хеометрической моделируются
8. Способ расчета RMSEP (среднеквадратичной погрешности прогноза)
9. Основные этапы при создании хеометрической 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 Коррелогаммы
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 КИМа (письменный ответ):

Контрольно-измерительный материал № 1

1. Способ расчета RMSECV (среднеквадратичной погрешности внутренней проверки)
2. Стратегия выбора спектральных данных
3. Дайте определение и способ расчета PRESS (Прогнозируемая остаточная суммарная ошибка квадратов)

Для оценивания результатов обучения на текущей аттестации используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Ответ обучающегося полный, в процессе использована актуальная НД, ответ аргументирован соответствующими фактами, расчетами и иллюстрациями, необходимыми для корректного решения поставленной практической задачи. Компетенции сформированы полностью и используются в полном объеме.	Повышенный уровень	отлично
Ответ обучающегося 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	хорошо
Ответ обучающегося на контрольно-измерительный материал не соответствует заявленным требованиям к изложению материала, не приведены необходимые примеры, иллюстрации или расчеты, 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	удовлетворительно
Ответ обучающегося на контрольно-измерительный материал не соответствует перечисленным требованиям. Компетенции не сформированы. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые профессиональные ошибки.	–	неудовлетворительно

20.2 Промежуточная аттестация

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 практические задания, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются количественные шкалы оценок.

Описание технологии проведения:

Промежуточная аттестация состоит из одного этапа:

1. КИМ – подготовка в течении 45 минут с последующим устным ответом

Используются следующие критерии оценивания:

1. Знание и владение содержанием учебного материала, НД и понятийным аппаратом по дисциплине «Аналитическая хеометрика».
2. Умение связывать теоретические знания с практическими навыками по дисциплине «Аналитическая хеометрика».
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 хеометрической 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 обучающегося полностью соответствует всем пяти оцениваемым показателям. Компетенции сформированы полностью и используются в полном объеме.	<i>Повышенный уровень</i>	зачтено
Ответ обучающегося 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.	<i>Базовый уровень</i>	зачтено
Ответ обучающегося 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.	<i>Пороговый уровень</i>	зачтено
Ответ обучающегося на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем из перечисленных показателей. Компетенции не сформированы. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые профессиональные ошибки.	–	незачтено

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 хеометрической моделируются

6. Способ расчета RMSECV (среднеквадратичной погрешности внутренней проверки)
7. Как проводится внешняя проверка при анализе хеометрической моделируются
8. Способ расчета RMSEP (среднеквадратичной погрешности прогноза)
9. Основные этапы при создании хеометрической 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 Коррелогаммы
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 Контрольно-измерительный материал № 1

1. Как проводится внешняя проверка при анализе хеометрической модели
2. Процедура выбора методов внутренней и внешней оценки
3. Дайте определение и способ расчета R² (объяснимая дисперсия)

20.3. 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 контрольных и лабораторных работ, рефератов. 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 теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков.

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

Задания пункта 20 рекомендуются к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины