

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа-Югры
"Сургутский государственный университет"

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

_____ Е.В. Коновалова

15 июня 2023 г., протокол УМС №5

Основы хемометрики и химической метрологии рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой **Химии**

Учебный план s040501-АнХим-23-1 РПД.plx
04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

Квалификация **Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану	108	Виды контроля в семестрах: зачеты 7
в том числе:		
аудиторные занятия	66,2	
самостоятельная работа	41,8	

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
	Неделя			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	32	32	32	32
Практические	32	32	32	32
Контактная работа	2,2	2,2	2,2	2,2
Итого ауд.	66,2	66,2	66,2	66,2
Контактная работа	66,2	66,2	66,2	66,2
Сам. работа	41,8	41,8	41,8	41,8
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

канд. физ.-мат. наук, Туров Юрий Прокопьевич

Рабочая программа дисциплины

Основы хемометрики и химической метрологии

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - специалитет по специальности 04.05.01
Фундаментальная и прикладная химия (приказ Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652)

составлена на основании учебного плана:

04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

утвержденного учебно-методическим советом вуза от 15.06.2023 протокол № 5.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Зав. кафедрой канд., биол., наук Сутормин Олег Сергеевич

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1	Целью изучения курса «Основы хемометрики и химической метрологии» является формирование современного физико-химического, математического мировоззрения и навыков самостоятельной работы, необходимых для использования полученных знаний при решении задач профессиональной деятельности. Планирование, организация эксперимента и обработка полученных данных имеют большое научное и практическое значение, позволяя оптимизировать любой эксперимент с наименьшими затратами, что очень важно в организации как научного, так и практического эксперимента. Зная методы и принципы планирования эксперимента, специалист может использовать их при постановке и решении многообразных задач в области аналитической химии, метрологии, стандартизации и сертификации. Дисциплина основывается на применении методов математической статистики к обработке химической информации. В соответствии с этим основными задачами дисциплины являются: сформировать у студентов системных представлений о важности и роли методов математической статистики при обработке данных в аналитической химии; освоение студентами основных алгоритмов и прикладных программ, программного обеспечения, базами данных для обработки данных химического эксперимента; владение методологией выбора оптимальных алгоритмов при анализе многомерных данных, полученных при исследовании многокомпонентных природных объектов.
-----	--

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ООП:	Б1.В.ДВ.01
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
2.1.1	Информатика
2.1.2	Строение вещества
2.1.3	Математика
2.1.4	Физика
2.1.5	Аналитическая химия
2.2	Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
2.2.1	Производственная практика, преддипломная практика
2.2.2	Анализ объектов
2.2.3	Хроматографические методы
2.2.4	Спектроскопические методы
2.2.5	Организация аналитического контроля

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ПК-3.1: Осуществляет подбор методов и средств для исследования различных объектов с использованием доступных реактивов и оборудования

ПК-3.2: Проводит отбор проб, пробоподготовку и исследование различных объектов аналитическими методами

ПК-3.3: Анализирует результаты и составляет отчеты по результатам исследований

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1	Знать:
3.1.1	Современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием; методы обработки данных с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик; основы теории измерений и распространения погрешностей прямых и косвенных измерений, способы оценки качества результатов химических и физико-химических методов анализа; знает возможности и ограничения различных методов обработки химической информации; способы представления результатов исследований в отчетах и научной печати химической направленности.
3.1.2	Общетеоретические основы методов обработки, оценки качества результатов изучения свойств веществ и процессов с их участием и последовательных этапов получения знаний при обработке химической информации
3.2	Уметь:

3.2.1	Анализировать результаты и составлять отчеты по результатам исследований; оценивать качество и проводить обработку результатов химического анализа на этапах: наблюдение – анализ данных – синтез – оформление отчета – защита информации.
3.2.2	Оптимизировать алгоритм обработки экспериментальных данных в исследованиях с учетом особенностей аналитического метода. Оценить качество и метрологическую надежность данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием при решении задач профессиональной деятельности
3.3	Владеть:
3.3.1	Использованием базовых знаний в области математики и физики при планировании работ химической направленности; применением теоретических и полуэмпирических моделей при решении задач химической направленности; способами представления результатов и составлением отчетов по стандартной форме; современными методами многомерного статистического анализа результатов экспериментального исследования свойств и состава различных объектов анализа, навыками практического использования пакетов прикладных программ для сбора, обработки, архивирования и защиты данных, результатов для представления их в виде отчетов и научных публикациях; использования стандартного программного обеспечения и специализированных баз данных.
3.3.2	Методами формально-математического анализа экспериментальных данных и формулирования статистически надежных выводов, грамотного оценивания правильности и точности результатов анализа в химии

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Примечание
	Раздел 1. Основные идеи хемометрики и химической метрологии					
1.1	1. История зарождения хемометрики как самостоятельного раздела в аналитической химии. 2. Косвенный характер измерений в химико-аналитической работе. Виды измерений, прямые и обратные задачи. 3. Хемометрика и управление процессами. /Лек/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.3Л2.1 Л2.3 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
1.2	Методы оценки правильности. Истинное и действительное значение. /Пр/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
1.3	Подготовка к практическим занятиям. Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. /Ср/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 2. Статистические методы в аналитической химии					
2.1	1. Аналитический сигнал в химических измерениях и типы его обработки. 2. Виды и классификация погрешностей в аналитической химии. 3. Особенности применения теории распространения ошибок в химических измерениях. 4. Метрологические характеристики методик анализа и результатов,	7	8	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.6Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
2.2	Нормальный закон распределения и его роль в аналитической химии. Выявление отдельных данных, отклоняющихся от нормального распределения (промахов). /Пр/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	

2.3	Подготовка к практическим занятиям. Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. /Ср/	7	12	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
Раздел 3. Основы дисперсионного анализа						
3.1	1. Сравнение двух и нескольких дисперсий. 2. Повторяемость, воспроизводимость и сходимостъ результатов измерений и анализов. 3. Использование принципов дисперсионного анализа при аккредитации аналитических лабораторий. /Лек/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.5Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.2	Применение дисперсионного анализа для оценки представительности пробы, внутри- и межлабораторной погрешности. /Пр/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.3	Подготовка к практическим занятиям. Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. /Ср/	7	8	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
Раздел 4. Основы корреляционного анализа						
4.1	1. Понятия "функциональная зависимость" и "корреляция", их различия и использование в химии. 2. Проверка гипотез, классификация и идентификация в химии. 3. Признаки, образы, кластеры в аналитической химии и количественные оценки результатов идентификации. /Лек/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.3 Л1.6Л2.1 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
4.2	Применение корреляционного анализа для выявления закономерностей, прогноза, отбора классификационных признаков. /Пр/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.5Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
4.3	Подготовка к практическим занятиям. Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. /Ср/	7	7,8	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.4 Л1.6Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
Раздел 5. Основы регрессионного анализа						
5.1	1. Градуировки и расчет содержаний аналитов в химии. 2. Регрессионная модель, интерпретация ее параметров и оценка погрешностей. 3. Принципы факторного анализа, регрессия (проекции) на главных компонентах и использование в химии. /Лек/	7	6	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.2	Предпосылки и применение регрессионного анализа при обработке результатов. /Пр/	7	8	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	

5.3	Подготовка к практическим занятиям. Проработка и анализ теоретического материала по теме занятия. /Ср/	7	8	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
Раздел 6.						
6.1	/Зачёт/	7	0	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	Зачёт
6.2	/КонР/	7	2,2	ПК-3.1 ПК-3.2 ПК-3.3	Л1.1 Л1.4 Л1.6Л2.2 Л2.3 Л2.4Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	Контрольная работа

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

5.1. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации

Представлены отдельным документом

5.2. Оценочные материалы для диагностического тестирования

Представлены отдельным документом

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Дерффель К., Адлер Ю. П.	Статистика в аналитической химии	М.: Мир, 1994	14
Л1.2	Зайдель А.Н.	Ошибки измерений физических величин	Москва: Лань, 2009, электронный ресурс	1
Л1.3	Шачнева Е. Ю.	Хеометрика. Базовые понятия	Москва: Лань, 2016, электронный ресурс	1
Л1.4	Кулаичев А.П.	Методы и средства комплексного статистического анализа данных: Учебное пособие	Москва: ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2022, электронный ресурс	1
Л1.5	Боровков А. А.	Математическая статистика	Санкт-Петербург: Лань, 2021, электронный ресурс	1

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.6	Зенкевич И. Г., Ермаков С. С., Карцова Л. А., Кирсанов Д. О., Москвин А. Л., Москвин Л. Н., Немец В. М., Панчук В. В., Родинков О. В., Семенов В. Г., Слесарь Н. И., Сляднев М. Н., Якимова Н. М.	Аналитическая химия. Химический анализ	Санкт-Петербург: Лань, 2022, электронный ресурс	1
6.1.2. Дополнительная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Емельянов А.М., Кидяева Н.П., Подолько Е.А., Шпилев Е.М.	Статистические методы обработки, планирования инженерного эксперимента: учебное пособие	Благовещенск: Дальневосточный государственный аграрный университет, 2015, электронный ресурс	1
Л2.2	Бахтеев С. А., Юсупов Р. А.	Метрологическое обеспечение лабораторных работ по аналитической химии: Учебное пособие	Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2017, электронный ресурс	1
Л2.3	Бегунов А.А., Пацовский А.П.	Метрология: в 3 ч. Ч. 3. Методы, средства и методики аналитических измерений в пищевой и перерабатывающей промышленности: учебное пособие	Москва: ГИОРД, 2019, электронный ресурс	2
Л2.4	Дворкин, В. И.	Метрология и обеспечение качества химического анализа	Москва: Техносфера, 2019, электронный ресурс	1
Л2.5	Арефьева Р. П.	Метрология в химическом анализе: учебное пособие	Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2017, электронный ресурс	1
6.1.3. Методические разработки				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
ЛЗ.1	Харитонов М. И., Харитонов А. М.	Планирование и организация эксперимента: Методические указания	Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ, 2014, электронный ресурс	1
ЛЗ.2	Хомутова Е. Г., Колотилина Е. Ю.	Методика расчета метрологических показателей методик количественного химического анализа: учебно-методическое пособие	Москва: РТУ МИРЭА, 2021, электронный ресурс	1

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Электронная библиотека учебных материалов по химии, http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/
Э2	ХиМиК - сайт о химии, http://www.xumuk.ru/
Э3	Каталог химических ресурсов, http://www.chemport.ru/
Э4	Российское Хемометрическое Общество, https://www.chemometrics.ru

6.3.1 Перечень программного обеспечения

6.3.1.1	Операционная система Microsoft Windows, Пакет прикладных программ Microsoft Office.
---------	---

6.3.2 Перечень информационных справочных систем

6.3.2.1	Информационно-правовой портал Гарант.ру, Справочно-правовая система «Консультант плюс»
---------	--

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1	Помещения для проведения лекционных, практических занятий укомплектованы необходимой специализированной учебной мебелью и техническими средствами для предоставления учебной информации студентам. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (лабораторных занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащена: комплект специализированной учебной мебели, маркерная (меловая) доска, комплект переносного мультимедийного оборудования - компьютер, проектор, проекционный экран, компьютеры с возможностью выхода в Интернет и доступом в электронную информационно-образовательную среду. Обеспечен доступ к сети Интернет и в электронную информационную среду организации.
-----	--