



Факультет	Естественных наук	
Кафедра	Химии	
Направление подготовки	04.03.01 Химия	
Направленность (профиль)	Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность	
	Основы хемометрики	Б1.Б.22

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого»
ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л.Н. Толстого»

УТВЕРЖДЕНА
на заседании
Ученого совета университета
протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Рабочая программа дисциплины «Основы хемометрики»

Трудоемкость: 3 зачетные единицы

Квалификация выпускника: Бакалавр

Год начала подготовки: 2014

Форма обучения: очная

Заведующий кафедрой
химии _____ Ю.М. Атрощенко

Декан ФЕН _____ И.В. Шахкельдян

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП бакалавриата	3
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	3
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий	4
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	6
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине	7
6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.....	7
6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	7
6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы	7
6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.....	13
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	15
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	16
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	16
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем	18
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине	18
12. Аннотация рабочей программы дисциплины	20
13. Лист регистрации изменений к рабочей программе дисциплины	21
1. Разработчики:.....	22

1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотнесенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

Планируемые результаты освоения образовательной программы (код и название компетенции)	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования компетенции в процессе освоения образовательной программы
ОПК-2: владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Выпускник знает: виды ошибок в аналитической химии, статистические характеристики и формулы для их расчета, понятия и методы градуировки, методы оптимизации и планирования эксперимента Умеет: проводить расчеты в области статистической обработки результатов химического анализа, оптимизации и планирования химического эксперимента. Владеет и (или) имеет опыт деятельности: методами градуировки и построения градуировочных функций с помощью электронных программ.	в соответствии с учебным планом и планируемым и результатами освоения ОПОП

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП БАКАЛАВРИАТА

Дисциплина «Основы хемометрики» относится к дисциплинам Блока 1 базовой части дисциплин направления. Изучение данной дисциплины базируется на освоении студентами дисциплин «Математика», «Информатика».

К началу изучения дисциплины студенты должны владеть:

- знаниями основных разделов математики и химии;
- умениями решать математические задачи;
- навыками проведения математических расчетов различных химических и физических величин.

Дисциплина «Основы хемометрики» является базовой для дисциплин «Количественный анализ», «Качественный анализ», «Физико-химические методы анализа», «Анализ объектов окружающей среды», «Основы биотехнологии», «Химическая технология».

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем зачетных единиц / часов по формам обучения
Максимальная учебная нагрузка (всего)	3/108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего)	54
в том числе:	
Лекции	20
лабораторные занятия (включая защиту отчета по лабораторным работам)	32
КСРС	2
другие виды контактной работы	

Самостоятельная работа студента (всего)	54
в том числе:	
внеаудиторная самостоятельная работа по подготовке к лекционным занятиям	15
внеаудиторная самостоятельная работа по подготовке к лабораторным занятиям и защите отчета	15
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к семинарским и/или практическим занятиям	-
подготовка учебного проекта	8
подготовка к контрольным работам	8
выполнение заданий для самостоятельной работы в системе управления обучением MOODLE	2
подготовка к зачету	6
Промежуточная аттестация в форме зачета	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Очная форма обучения

Наименование тем (разделов).	Количество академических или астрономических часов по видам учебных занятий			
	Занятия лекционного типа	Лабораторные занятия	Другие виды учебных занятий	Самостоятельная работа обучающихся
Тема 1. Введение. Виды ошибок в аналитической химии.	2	3		5
Тема 2. Эмпирические распределения частот.	2	3		5
Тема 3. Теоретические распределения.	2	3		5
Тема 4. Статистические методы проверки.	2	4		5
Тема 5. Закон распространения ошибок.	2	4		5
Тема 6. Простой дисперсионный анализ.	4	4		5
Тема 7. Градуировка: общие представления.	2	3		6
Тема 8. Построение градуировочных функций.	2	4		6
Тема 9. Оптимизация и планирование эксперимента.	2	4		6
Контроль самостоятельной работы студентов			2	
Подготовка к зачету				6
ИТОГО	20	32	2	54

Тема 1. Введение. Виды ошибок в аналитической химии.

Предмет, задачи и методы хеометрики. Классификация погрешностей по способу вычисления: абсолютные и относительные погрешности. Классификация погрешностей по характеру вызывающих их причин: систематические (инструментальные, методические, реактивные, оперативные, личные), случайные погрешности, промахи. Способы выявления систематической погрешности: варьирование величины пробы, анализ стандартного образца. Аналитический сигнал фона, холостой опыт. Характеристики анализа: воспроизводимость, правильность, точность. Генеральная совокупность, выборка. Постоянная и изменяющаяся

ошибки. Анализ соотношения величин систематической и случайной ошибок как фактор выбора метода анализа.

Тема 2. Эмпирические распределения частот.

Одномерное распределение: ступенчатая диаграмма, форма распределения (симметричная, асимметричная), выявление случайных и систематических ошибок. Статистические характеристики: средние значения (арифметическое и геометрическое среднее, медиана), границы разброса (понятия стандартного отклонения или средней квадратичной ошибки, число степеней свободы, дисперсии, размаха варьирования), асимметрия (формула для расчета, левосторонняя и правосторонняя асимметрия) и эксцесс. Двумерное распределение: характеристики распределения, области применения.

Тема 3. Теоретические распределения.

Нормальное или гауссово распределение: параметры распределения, геометрическая интерпретация средней квадратичной ошибки, площади гауссовых кривых, кривые распределений при различной средней квадратичной ошибке, поверхность двумерного нормального распределения, гауссов интеграл ошибок, точки перегиба гауссовой кривой. Понятия статистической надежности и доверительного интервала среднего значения, односторонняя и двусторонняя границы доверительного интервала.

Распределение Пуассона (вид функциональной зависимости величины измеренного значения от частоты ее появления, дискретность распределения, асимметрия, приближение к нормальному распределению).

Специальные распределения: t -, F - и χ^2 -распределения. Зависимость формы t -распределения от числа степеней свободы, переход t -распределения в нормальное распределение. Кривая F -распределения, формула для расчета F -критерия. Кривая χ^2 -распределения, зависимость формы кривой от числа степеней свободы, формула для расчета. Вычисление доверительного интервала. Связь между отдельными теоретическими распределениями.

Тема 4. Закон распространения ошибок.

Расчет общей ошибки в случае некоррелированных переменных. Вычисление общей ошибки в случае сложения, вычитания, умножения и деления измеряемых величин. Расчет ошибки взвешивания. Применение закона распространения ошибок к различным методам аналитической химии.

Тема 5. Статистические методы проверки.

Интерпретация результатов анализа: статистическая гипотеза (значимая и незначимая разница между величинами, правила ее выявления), ошибки первого и второго рода. Допустимый процент возможных ошибок. Сравнение двух средних квадратичных ошибок (F -критерий или критерий Фишера). Сравнение нескольких средних квадратичных ошибок (критерий Бартлета). Сравнение двух средних значений (t -критерий). Определение грубых ошибок: Q -критерий.

Тема 6. Простой дисперсионный анализ.

Необходимость использования простого дисперсионного анализа. Средняя квадратичная ошибка воспроизводимости. Ошибка сопоставимости. Ход простого дисперсионного анализа: распределение цифрового материала на группы, определение случайных ошибок внутри групп, расчет степеней свободы и дисперсий. Зависимость точности данных от числа участвующих в анализе лабораторий. Источники случайной ошибки. Устранение ошибок.

Тема 7. Градуировка: общие представления.

Градуировка как сравнение. Понятия градуировки, стандарта, первичного и вторичного стандартов, рабочего образца сравнения. Факторы, определяющие качество градуировки: воспроизводимость, правильность аттестации образцов сравнения, корректность процедуры сравнения (влияние физических свойств стандартных образцов и посторонних химических

компонентов). Селективность измерительной процедуры. Альтернативные пути решения проблемы проверки правильности измерительной процедуры: анализ стандартных образцов и сравнение результатов анализа, полученных двумя методиками, основанными на различных физических принципах измерений. Частота повторных градуировок. Абсолютные и относительные методы анализа. Общая схема процедуры градуировки. Градуировочные модели: коэффициент чувствительности, рабочий и динамический диапазоны методики; аналитические модели (аналитические функции). Способы градуировки: способы внешней и внутренней градуировки, внутренний стандарт, способ добавок, способ изотопного разбавления.

Тема 8. Построение градуировочных функций.

Задачи регрессионного анализа и корреляции. Коэффициент корреляции, формула для его расчета. Графическое определение констант. Построение линии регрессии при сильно разбросанных значениях измерений. Построение линии регрессии при очень большом количестве точек измерений. «Канальный» метод по Вернеру. Метод наименьших квадратов. Расчет констант линейных функций и их доверительных интервалов. Расчет зависимых переменных и их доверительных интервалов.

Тема 9. Оптимизация и планирование эксперимента.

Общие сведения о методах оптимизации и планирования эксперимента. Основные понятия и определения: факторы (параметры или входы), выход (оптимизируемый параметр или функция отклика); факторное пространство, поверхность отклика; математическое описание процесса или математическая модель. Систематический ход процедуры оптимизации: выбор целевой функции, выбор наиболее значимых факторов, оптимизация (стратегии одновременной и последовательной оптимизации). Графическая зависимость отклика от влияющих факторов. Основные принципы планирования экспериментов: принцип «прочих равных», повторные измерения, рандомизация, группировка экспериментов в блоки, факторный эксперимент, смешанные оценки, симметрия плана. Методы полного факторного эксперимента и дробных реплик. Матрица планирования эксперимента. Дробный факторный эксперимент. Оптимизация по методу крутого восхождения.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Необходимые материалы для самостоятельной работы студентов по дисциплине представлены в модульной объектно-ориентированной динамической учебной среде Moodle.

Для самостоятельной проработки материала в течение семестра студентам рекомендуется ряд учебно-методических пособий:

1. Основы хемометрики: Учебно-методическое пособие для лабораторно-практических занятий. Серия «Химия окружающей среды и химическая экспертиза» [Текст] / Авт.-сост. Севостьянова Н.Т., Баташев С.А. – Изд-во ТГПУ им. Л.Н. Толстого, 2010. – 64 с.
2. Шурыгина, Л.И. Методы оптимизации химического эксперимента: учеб. пособие [Электронный ресурс] / Л.И. Шурыгина, Э.П. Суровой. – Кемерово, 2009. – 58 с. URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=232734
3. Шурыгина, Л.И. Методы оптимизации химического эксперимента. Часть II: Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента: учеб. пособие [Электронный ресурс] / Л.И. Шурыгина, Э.П. Суровой. – Кемерово, 2011. – 67 с. URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=232735

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

Формирование компетенции «владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций» (ОПК-2) осуществляется в несколько этапов в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП, соотношенными с планируемыми результатами обучения по каждой дисциплине (модулю) и практике.

6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Компетенция «владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций» (ОПК-2)

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
Знания	- видов ошибок в аналитической химии; - статистических характеристик и формул для их расчета; - понятий и методов градуировки; - методов оптимизации и планирования эксперимента.	Отметка «зачтено» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 41 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины
Умения	- проводить расчеты в области статистической обработки результатов химического анализа; - проводить оптимизацию и планирование химического эксперимента.	осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий, на зачете.
Навыки	- использования методов градуировки и построения градуировочных функций с помощью электронных программ.	

6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Тест 1. Виды ошибок в аналитической химии. Эмпирические распределения частот. Вариант 1.

1. Погрешности, вызванные постоянно действующей причиной, постоянные во всех измерениях или меняющиеся по постоянно действующему закону, которые можно выявить и устранить, называются

а) случайными; б) систематическими; в) грубыми.

2. Степень близости друг к другу единичных определений или рассеяние единичных результатов относительно среднего характеризуется

а) правильностью; б) точностью; в) воспроизводимостью; г) сходимостью.

3. Погрешности, обусловленные методикой определения, называют

- а) случайными; в) грубыми; е) инструментальными;
 б) систематическими; д) методическими; ж) оперативными.

4. Способ выявления систематической погрешности, основанный на анализе образцов, изготовленных из материала, состав и свойства которого надежно установлены и максимально близки к составу и свойствам анализируемой пробы, называют

- а) варьированием величины пробы; б) анализом стандартного образца;
 в) способом проведения холостого опыта.

5. В качестве границ разброса в аналитической химии используют

- а) относительную погрешность; в) размах варьирования;
 б) стандартное отклонение; г) доверительный интервал.

6. По способу вычисления различают погрешности...

- а) абсолютные; б) относительные; в) грубые; г) методические; д) оперативные.

7. Способ выявления систематических погрешностей, основанный на увеличении размера пробы в кратное число раз, называют

- а) варьированием величины пробы; б) анализом стандартного образца;
 в) способом проведения холостого опыта.

8. Качество химического анализа, отражающее близость к нулю систематической погрешности, называют

- а) правильностью; б) точностью; в) воспроизводимостью; г) сходимостью.

9. При определении содержания свинца в сплаве были получены следующие результаты (%): 14,50; 14,43; 14,54; 14,45; 14,44; 14,52; 14,58; 14,40; 14,25; 14,49. Медиана равна

- а) 14,43; б) 14,44; в) 14,45; г) 14,46; д) 14,47; е) 14,48; ж) 14,49.

10. Арифметическое среднее значение содержания свинца в сплаве в соответствии с данными задания 9 равно:

- а) 14,43; б) 14,44; в) 14,45; г) 14,46; д) 14,47; е) 14,48; ж) 14,49.

Тест 2. Теоретические распределения частот.

Вариант 1.

1. С уменьшением средней квадратичной ошибки ширина нормального гауссовского распределения

- а) уменьшается; б) увеличивается; в) не изменяется.

2. Укажите пределы гауссовского интеграла, в которых лежит 99,73 % всех результатов

- а) $-\sigma \dots + \sigma$; б) $-1,96\sigma \dots + 1,96\sigma$; в) $-3\sigma \dots + 3\sigma$.

3. Для описания распределения частот, выражаемых только целыми числами, используют

- а) распределение Стьюдента; в) распределение Пуассона;

- б) распределение Фишера; г) χ^2 -распределение.

4. Установите соответствие между распределениями и их графическими изображениями

- а) нормальное распределение;
 б) распределение Фишера;
 в) χ^2 -распределение;
 г) распределение Пуассона.

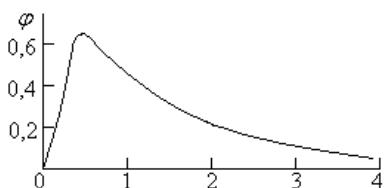


Рисунок 1.

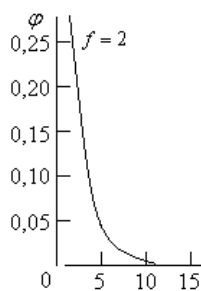


Рисунок 2.

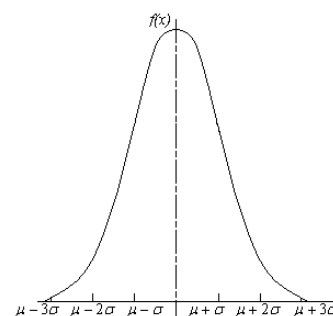


Рисунок 3.

5. При $f \rightarrow \infty$ t -распределение переходит

Самостоятельное творческое задание по дисциплине «Основы хемометрики» направлено на формирование у студентов целостного представления о дисциплине, самостоятельное знакомство студентов с различными методами количественного химического анализа, формирование научной основы для последующего изучения других разделов аналитической химии, таких как «Теоретические основы количественного анализа», «Инструментальные методы химического анализа», «Химический анализ объектов окружающей среды», «Хроматографические методы анализа лекарственных препаратов», «Электрохимические методы анализа лекарственных препаратов», «Химические основы фармацевтики» и «Методы определения токсических веществ», а также необходимо для качественного выполнения выпускной квалификационной работы, прежде всего в части сбора, обработки, интерпретации данных химического анализа и планирования химического эксперимента. Выполнение индивидуального творческого задания также необходимо для формирования профессиональной компетентности студента, его вовлечения в научно-исследовательскую деятельность и будущую профессиональную деятельность химика-эксперта.

Индивидуальное творческое задание по дисциплине «Основы хемометрики» включает создание студентом расчетной задачи и ее решение. Содержание задачи, созданной студентом, не должно дублировать задачи, решенные на лабораторно-практических занятиях и выданные преподавателем для внеаудиторной работы. Эта задача разрабатывается студентом самостоятельно и не является копией задачи из учебника или задачника. В качестве источников справочного материала для задачи могут использоваться учебники, учебные пособия, задачники, лабораторные практикумы, монографии, научные статьи, опубликованные в печатном виде или на специализированных химических учебно-научных сайтах или сайтах из списка рекомендуемой литературы.

Структура разработанной студентом задачи

1. *Условие расчетной задачи, основанное на результатах количественного анализа.* Условие задачи может содержать справочный материал, например описание конкретного метода и методики анализа, взятый из лабораторного практикума, научной статьи, монографии и т.д.
2. *Формулировка задания или вопроса* (что конкретно нужно найти, рассчитать, установить и т.д.).
3. *Решение задачи* (должно содержать используемые для расчетов формулы и сами расчеты в подробном виде).
4. *Ответ* (должен быть развернутым и соответствовать задаче или вопросу по п. 2).
5. *Список использованной литературы* (и/или электронных источников).

При разработке задачи студенты должны использовать как можно больше элементов из разных разделов дисциплины «Основы хемометрики». Курс «Основы хемометрики» включает в себя 3 основных раздела:

- 1) статистические тесты;
- 2) градуировка;
- 3) оптимизация и планирование эксперимента.

За использование каждого из указанных разделов в задаче студенту начисляется по 1 баллу. Таким образом, если задача содержит материал по всем трем разделам курса, то за формулировку такой задачи студент получает 3 балла. В конечном счете баллы за задачу складываются из следующих составляющих:

- 1) использование в условии задачи материала из различных разделов дисциплины «Основы хемометрики» – 3 балла;
- 2) оценка корректности формулировки задачи – 0,5 балла;
- 3) использование справочного материала – 1 балл;
- 4) решение задачи (с учетом степени ее сложности) – 4 балла;
- 5) формулировка ответа – 1 балл;
- 6) оформление работы – 1 балл.

Таким образом, максимально за выполнение индивидуального творческого задания студент может заработать 10,5 баллов, что соответствует балльно-рейтинговой системе по дисциплине «Основы хемометрики». Индивидуальное творческое задание может быть выполнено в рукописном или электронном виде и сдано преподавателю на бумажном (и/или электронном носителе) не позднее 2 недель до зачета. Бумажный вариант должен быть написан или распечатан четко, разборчиво.

Наличие опечаток и ошибок в тексте, математических и химических формулах, уравнениях химических реакций не допустимо.

Требования к оформлению бумажного и электронного варианта задания (в случае набора на компьютере): документ в формате MS Word 97-2003. Размер бумаги А4, поля: слева – 3 см, справа, сверху, снизу – по 2 см. Шрифт Times New Roman 12 пт., интервал 1,5. Страницы должны быть пронумерованы (первой страницей является титульный лист, на нем номер не печатается).

При работе над индивидуальным творческим заданием студентам рекомендуется использовать литературу из списка рекомендуемой основной и дополнительной литературы по дисциплине, а также следующие источники:

1. Практикум по аналитической химии и физико-химическим методам анализа [Текст]: Учеб. пособие /И.В. Тикунова, И.А. Шаповалов, А.И. Артеменко. – М.: Высш. Шк., 2006. – 208 с.: ил.

Студенты также могут использовать и другую учебную и научную литературу по желанию.

Вопросы к зачету по дисциплине

1. Сформулируйте предмет, задачи и методы хемометрики.
2. Классификация погрешностей по способу вычисления: абсолютные и относительные погрешности.
3. Классификация погрешностей по характеру вызывающих их причин: систематические (инструментальные, методические, реактивные, оперативные, личные), случайные погрешности, промахи.
4. Опишите способы выявления систематической погрешности.
5. Что такое аналитический сигнал фона?
6. Для чего используется холостой опыт?
7. Характеристики анализа: воспроизводимость, правильность, точность.
8. Понятия генеральной совокупности и выборки.
9. Анализ соотношения величин систематической и случайной ошибок как фактор выбора метода анализа.
10. Опишите формы представления одномерного распределения.
11. Дайте определения статистическим характеристикам (средние значения, границы разброса, асимметрия и эксцесс), приведите формулы для их расчета.
12. Двумерное распределение: характеристики распределения, области применения.
13. Дайте характеристику нормального или гауссова распределения.
14. Что такое статистическая надежность?
15. Как рассчитать доверительный интервал среднего значения с односторонней и двусторонней границами?
16. Изобразите вид функциональной зависимости распределения Пуассона. Какими величинами оно характеризуется?
17. Зависимость формы t-распределения от числа степеней свободы, переход t-распределения в нормальное распределение.
18. Кривая F-распределения, формула для расчета F-критерия.
19. Кривая χ^2 -распределения, зависимость формы кривой от числа степеней свободы, формула для расчета.
20. Покажите связь между отдельными теоретическими распределениями.
21. Как рассчитать общую ошибку в случае некоррелированных переменных?
22. Вычисление общей ошибки в случае сложения, вычитания, умножения и деления измеряемых величин.
23. Расчет ошибки взвешивания.
24. Покажите применение закона распространения ошибок к различным методам аналитической химии.
25. Что такое статистическая гипотеза?
26. Дайте определения ошибки первого и второго рода.
27. как определяется допустимый процент возможных ошибок?
28. Как проводят сравнение двух средних квадратичных ошибок?

29. Сравнение нескольких средних квадратичных ошибок (критерий Бартлета).
30. Сравнение двух средних значений (t -критерий).
31. Определение грубых ошибок: Q -критерий.
32. Чем обусловлена необходимость использования простого дисперсионного анализа?
33. Как рассчитать среднюю квадратичную ошибку воспроизводимости и ошибку сопоставимости?
34. Опишите ход простого дисперсионного анализа.
35. Каковы могут быть источники случайной ошибки?
36. Дайте определения понятиям градуировки, стандарта, первичного и вторичного стандартов, рабочего образца сравнения.
37. Какие факторы определяют качество градуировки?
38. Какие существуют альтернативные пути решения проблемы проверки правильности измерительной процедуры?
39. Какова должна быть частота повторных градуировок?
40. Чем различаются абсолютные и относительные методы анализа?
41. Приведите общую схему процедуры градуировки.
42. Дайте определения следующим характеристикам градуировочных моделей коэффициенту чувствительности, рабочему и динамическому диапазону методики; аналитическим моделям.
43. Опишите различные способы градуировки.
44. Сформулируйте задачи регрессионного анализа и корреляции.
45. Что такое коэффициент корреляции, как его рассчитать?
46. Графическое определение констант.
47. Построение линии регрессии при сильно разбросанных значениях измерений.
48. Построение линии регрессии при очень большом количестве точек измерений.
49. В чем заключается сущность метода наименьших квадратов?
50. Расчет констант линейных функций и их доверительных интервалов.
51. Расчет зависимых переменных и их доверительных интервалов.
52. Дайте определения следующим понятиям: факторы (параметры или входы), выход (оптимизируемый параметр или функция отклика), факторное пространство, поверхность отклика, математическое описание процесса или математическая модель.
53. Опишите систематический ход процедуры оптимизации.
54. Приведите основные принципы планирования экспериментов.
55. Опишите методы полного факторного эксперимента и дробных реплик.
56. Как составляется матрица планирования эксперимента?
57. Что такое дробный факторный эксперимент?
58. Как проводят оптимизацию по методу крутого восхождения?

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

Для оценки успеваемости студентов по дисциплине «Основы хемометрики» проводятся следующие виды контроля:

- 1) текущий контроль умений проводить статистические расчеты по результатам химического анализа и анализировать результаты химических исследований, а также оптимизацию и планирование эксперимента с применением методов статистики проводится в форме тестирований, контрольных работ №1 и 2, самостоятельного творческого задания, а также на практических занятиях;
- 2) текущий контроль навыков градуировки различными методами, построения градуировочных функций и расчета основных статистических характеристик, в том числе с помощью электронных программ, проводится на практических занятиях в фронтальной

форме, а также с использованием контрольной работы №2, самостоятельного творческого задания.

- 3) Проверка умений и навыков, проводимая на лабораторных занятиях, осуществляется при самостоятельном выполнении студентами заданий с применением электронных программ MS Excel и SigmaPlot и включает проверку правильности графических построений и расчетов, обсуждение полученных результатов.
- 4) Итоговый контроль – вид контроля, проводимый по завершению изучения дисциплины в семестре, проводится в форме зачета с применением тестовых, расчетных заданий, а также в устной беседе студента с преподавателем.

Лабораторные занятия, реализуемые в соответствии с тематическим планированием дисциплины (раздел 4), обеспечены методическими рекомендациями, представленными в печатном или электронном виде.

Для анализа степени усвоения учебного материала по дисциплине преподавателем и студентами используется балльно-рейтинговая система.

При оценивании знаний учебного материала учитываются следующие качественные показатели:

- а) глубина, которая характеризуется знанием теоретических и практических разделов курса;
- б) полнота знаний, которая соответствует объему программы информации основных учебных пособий;
- в) осознанность, которая характеризуется умением конкретизировать полученную информацию на конкретных примерах при устных ответах на семинарах, коллоквиуме и при решении задач.

Все знания, умения и навыки студента оцениваются в баллах. Общая оценка знаний студента по данной дисциплине определяется как сумма баллов, полученных студентом при прохождении всех видов контроля знаний. Успешность изучения данной дисциплины, завершающейся зачетом, оценивается суммой баллов, исходя из 100 максимально возможных, и включает следующие составляющие:

Итоговая оценка = работа в семестре (80%) + ответ на зачете (20%)

Максимальная сумма баллов, которую студент может набрать в течение семестра за выполнение лабораторных работ, контрольной работы, тестовых заданий и индивидуальных заданий по темам, сдачу коллоквиума, активность на занятиях и посещаемость, может быть равна 80 баллов (70 + 10 бонусов).

Минимальное количество баллов, позволяющее считать дисциплину освоенной, составляет 41 балл.

Описание балльно-рейтинговой системы по дисциплине «Основы хеометрики».

№ п/п	Вид деятельности студента	Кол-во в семестре	Кол-во баллов
1	Посещение лекционного занятия, наличие конспекта лекций – 0,5 балла за 1 занятие.	5	2,5
2	Посещение лабораторного занятия с оформлением материала в тетради (при наличие выполненного домашнего задания) – 0,5 балла за 1 занятие.	16	8
3	Активная работа на лабораторном занятии (ответы на устные вопросы преподавателя, решение задач у доски) – 0,5 балла за одно занятие.	16	8
4	Выполнение тестовых заданий – 5 баллов за один тест.	3	15
5	Выполнение контрольной работы – 18 баллов.	2	36
6	Выполнение индивидуального творческого задания – 10,5 баллов.	1	10,5
7	Зачет	1	20
Всего:			100

Критерии оценки знаний студентов на зачете

Оценка	Требования
«Зачтено»	Оценка «зачтено» выставляется студенту, если он знает основные понятия в области статистической обработки результатов, градуировки, оптимизации и планирования эксперимента, владеет формулами для расчета основных статистических характеристик, в течение курса выполнял задания с использованием электронных программ, проверочные задания и отчитался по заданию для самостоятельной работы, отвечает на поставленные вопросы по темам дисциплины, справляется с задачами, тестами и другими видами применения знаний.
«Не зачтено»	Оценка «не зачтено» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические работы.

7. ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Основная литература

1. Основы хемометрики: Учебно-методическое пособие для лабораторно-практических занятий. Серия «Химия окружающей среды и химическая экспертиза» [Текст]/ Авт.-сост. Севостьянова Н.Т., Баташев С.А. – Изд-во ТГПУ им. Л.Н.Толстого, 2010. – 64 с.

2. Шурыгина, Л.И. Методы оптимизации химического эксперимента: учеб. пособие [Электронный ресурс] / Л.И. Шурыгина, Э.П. Суровой. – Кемерово, 2009. – 58 с. – 150 ISBN 978-5-8353-0926-9. URL:

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=232734

3. Шурыгина, Л.И. Методы оптимизации химического эксперимента. Часть II: Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента: учеб. пособие [Электронный ресурс] / Л.И. Шурыгина, Э.П. Суровой. – Кемерово, 2011. – 67 с. – ISBN 978-5-8353-1171-2. URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=232735

7.2. Дополнительная литература

1. Ананьев, В.А. Анализ экспериментальных данных: учебное пособие / В.А. Ананьев. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2009. - Ч. 1. - 102 с. - ISBN 978-5-8353-0931-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232208>

2. Основы аналитической химии [Текст]: учебник для студентов химических направлений и химических специальностей вузов. В 2 томах / ред. Ю. А. Золотов. - 4-е изд., перераб. и доп. - М. : Академия .Т.1. - 2010. - 384 с.

3. Основы аналитической химии: Учебник для студентов химических направлений и химических специальностей вузов. В 2-х томах [Текст] / ред. Ю.А. Золотов.- 4-е изд., перераб. и доп.- М: Академия. - Т.2.- 2010.- 416 с. - ISBN 978-5-7695-5823-8.

Периодические издания:

1. Вестник БГУ. Серия 2: Химия. Биология. География [Электронный ресурс]: сайт / Белорусский государственный университет. Минск. 1973-2014. URL: <http://www.bsu.by/ru/main.aspx?guid=184121>.

2. Вестник Московского университета. Серия 2: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Химический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Москва. 1986-2014. URL: <http://www.chemnet.ru/rus/vmgu/welcome.html>.

3. Вестник Пермского университета. Серия: Химия. [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2011-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=32574>.

4. Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: Физика. Химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1969-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9468>.

5. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет). Челябинск. 2009-2014. URL: <http://www2.susu.ac.ru/science/publish/vestnik>.

6. Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Сибирский федеральный университет. Красноярск. 2008-2014. URL: <http://journal.sfu-kras.ru/home>.

7. Известия Академии наук. Серия химическая [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1961-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7833>.

8. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Физика и химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2001-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=38071>.

9. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2000-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9907>.

10. European Reviews of Chemical Research [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=51199>

8. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Национальный цифровой ресурс Руконт. Электронная библиотечная система [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.rucont.ru>

2. Университетская библиотека Он-лайн. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.biblioclub.ru>

3. Электронно-библиотечная система Ibooks.ru (“Айбукс”). [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://ibooks.ru>

4. Научная электронная библиотека. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.eLibrary.ru>

5. SCIENCE ONLINE [Полнотекстовый мультидисциплинарный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.sciencemag.org>

6. Естественнонаучный образовательный портал. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.en.edu.ru>

7. Библиотека химического факультета МГУ. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/library>

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Для успешного изучения дисциплины предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- курс лекций в виде презентаций;
- задания для самостоятельной работы студентов;

- комплекс текущих тестовых заданий и контрольных работ в электронном и печатном виде для контроля знаний по предмету на лабораторных занятиях и КСРС.

Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине, которую следует получить на сайте университета в сети интернет в системе «Электронное обучение» (MOODLE – модульная объектно-ориентированная динамическая учебная среда) и

использовать для подготовки к лабораторным занятиям. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем.

Готовясь к лабораторным занятиям, студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подготовиться к выполнению лабораторной работы, оформить лабораторный журнал по разработанной схеме, выполнить задания для самостоятельной работы.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются информационные технологии, охватывающие ресурсы (компьютеры, программное обеспечение и сети), необходимые для управления информацией (создание, хранение, управление, передача и поиск информации):

- технические средства: компьютерная техника и средства связи (ноутбук, проектор, экран, USB-накопители и т.п.);
- коммуникационные средства (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты, личного кабинета студента и преподавателя);
- организационно-методическое обеспечение (электронные учебные и учебно-методические материалы, компьютерное тестирование, использование электронных мультимедийных презентаций при проведении лекционных и лабораторных занятий);
- программное обеспечение Microsoft Office (Excel, Power Point, Word и т.д.), Skype, поисковые системы, электронная почта и т.п.;
- среда электронного обучения ТГПУ им. Л.Н. Толстого <http://moodle.tsput.ru>.

комплект лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Программное обеспечение Microsoft Office XP Professional Win32 Russian– Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
4. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г.
5. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
6. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 1894-150512-101810 от 12-05-2015 г.

современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

2. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
3. Официальный интернет-портал правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
4. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
5. Портал "Информационно-коммуникационные технологии в образовании" <http://www.ict.edu.ru>.

11. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованные мультимедийными средствами обучения.

2. Учебные аудитории для проведения лабораторных занятий.

3. Компьютерные классы с доступом в интернет для работы с информационно-правовыми системами, в том числе «Гарант» и с доступом к электронно-библиотечной системе.

4. Аудитории для самостоятельной работы студентов, оснащенные компьютерной техникой, имеющей доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронной информационно-образовательной среде ТГПУ им. Л.Н. Толстого, внутривузовскому сетевому окружению.

12. АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ.

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

ОПК-2: владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине.

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести

Знания

видов ошибок в аналитической химии, статистических характеристик и формул для их расчета, понятий и методов градуировки, методов оптимизации и планирования эксперимента;

умения

проводить расчеты в области статистической обработки результатов химического анализа, оптимизации и планирования химического эксперимента;

навыки

использования методов градуировки и построения градуировочных функций с помощью электронных программ.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина «Основы хеометрики» относится к дисциплинам Блока 1 базовой части дисциплин направления. Изучение данной дисциплины базируется на освоении студентами дисциплин «Математика», «Информатика».

К началу изучения дисциплины студенты должны владеть:

- знаниями основных разделов математики и химии;
- умениями решать математические задачи;
- навыками проведения математических расчетов различных химических и физических величин.

Дисциплина «Основы хеометрики» является базовой для дисциплин «Качественный анализ», «Количественный анализ»; «Физико-химические методы анализа»; «Анализ объектов окружающей среды»; «Основы биотехнологии»; «Химическая технология».

3. Объем дисциплины 3 зачетные единицы.

4. Образовательный процесс осуществляется на русском языке.

5. Разработчики: Севостьянова Н.Т., кандидат химических наук, доцент кафедры химии, Стемпинь Н.Д., кандидат химических наук, доцент кафедры химии.

13. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2016-2017 учебный год

В рабочую программу дисциплины внесены изменения в части обновления состава необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 2 от 16 февраля 2017 г.

2017-2018 учебный год

Обновлен состав необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения.

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.

2. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.

3. Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian - контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.

4. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.

5. Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional - контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.

6. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.

7. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.

8. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 17E0-170518-102844-823-690 от 18-05-2017 г.

Обновлен состав современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.

2. Официальный интернет-портал базы данных правовой информации <http://pravo.gov.ru>.

3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.

4. Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» <http://www.ict.edu.ru>.

5. Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных <http://webofscience.com>.

6. Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) <http://neicon.ru>.

7. Базы данных издательства Springer <https://link.springer.com>.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Разработчики:

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность
Севостьянова Надежда Тенгизовна	Кандидат химических наук	Доцент	Доцент кафедры химии
Стемпинь Надежда Дмитриевна	Кандидат химических наук	Доцент	Доцент кафедры химии