

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра аналитической химии и экспертизы

Авторы-составители: **Васянин Александр Николаевич**

Рабочая программа дисциплины

ХЕМОМЕТРИКА В АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Код УМК 86143

Утверждено
Протокол №4
от «20» мая 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Хеометрика в аналитической химии

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « М.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **04.04.01** Химия

направленность Аналитическая химия

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Хемотрика в аналитической химии** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.04.01 Химия (направленность : Аналитическая химия)

ПК.3 Способен проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов

Индикаторы

ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.04.01 Химия (направленность: Аналитическая химия)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	4
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	36
Проведение лекционных занятий	12
Проведение лабораторных работ, занятий по иностранному языку	24
Самостоятельная работа (ак.час.)	72
Формы текущего контроля	Входное тестирование (1) Письменное контрольное мероприятие (5)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (4 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Хеометрика в аналитической химии. 1 уч.период

Введение в хеометрику

Вводная лекция и входной контроль

Введение. Основные разделы хеометрики, понятия, история развития. Хеометрика и аналитическая химия

История появления хеомететрики. Место хеометрики в ряду дисциплин. Разделы хеометрики. Хеометрические задачи и аналитическая химия.

Модели и данные, применяемые в химическом анализе

Химические данные и химическая информация. Типы химических данных. "Белые", "черные" и серые модели.

Введение в язык обработки статистических данных R

Основные инструменты и работа с ними. Python, R, SPSS

Язык обработки статистических данных R и среда RStudio

Введение в язык R и знакомство со средой программирования RStudio.

Типы данных R и их связь с основными типами данных, применяемых в хеометрике

Типы данных и структуры данных, применяемые в R. Таблицы данных (data frames) и работа с ними. Импорт и экспорт данных.

Основные операции над данными в R

Преобразование данных. Векторизация основных операций над данными в R. Фильтры. Приемы работы с данными.

Подготовка данных

Важность правильной подготовки данных для получения корректных результатов

Основные задачи подготовки данных: центрирование и нормирование

Подготовка данных для обработки методом главных компонент. Центрирование и масштабирование

Фильтрация данных. Обработка сигналов

Методы фильтрации данных. Простые оконные фильтры. Фильтр Савицкого-Голея.

Метод главных компонент

Метод главных компонент К.Пирсона и его роль в хеометрике. "Химический ранг" матрицы. Разделение данных на "сигнал" и "шум".

Разрешение многомерных кривых

Применение методов разрешения многомерных кривых (Multivariate Curve Resolution) в фотометрии

Качественный анализ

Виды качественного анализа и методы решения

Дискриминация

Методы дискриминантного анализа в хеометрике. Линейный дискриминантный анализ (LDA) и его применение.

Количественный анализ

Задачи градуировки: классификация, примеры

Градуировка (калибровка). Постановка задачи

Задача калибровки (градуировки) в аналитической химии. Аналитический сигнал, чувствительность, порог обнаружения (LOD) и порог количественного обнаружения (LOQ). Линейная градуировка и ее характеристики.

Нелинейная градуировка

Особенности нелинейной градуировки.

Многоканальная калибровка

Многоканальная градуировка и использование в градуировке многомерных данных

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Сычев С. Н., Гаврилина В. А. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем: учебное пособие / С. Н. Сычев, В. А. Гаврилина. - Санкт-Петербург: Лань, 2013, ISBN 978-5-8114-1377-5. - 256. - Библиогр. в конце гл.
2. Отто М. Современные методы аналитической химии: [учебник] перевод с немецкого / М. Отто ; ред. А. В. Гармаш. - Москва: Техносфера, 2006, ISBN 5-94836-072-5. - 416. - Библиогр. в конце глав

Дополнительная:

1. Шараф М. А., Иллмэн Д. Л., Ковальски Б. Р. Хемометрика / М. А. Шараф, Д. Л. Иллмэн, Б. Р. Ковальски ; пер.: А. Н. Мариничек, А. К. Чарыков ; ред.: И. А. Ибрагимов, А. К. Чарыков. - Ленинград: Химия, 1989, ISBN 5-7245-0361-1. - 272.

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Хемометрика в аналитической химии** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);
- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

- система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).
- система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.
- система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Лекционные занятия: аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
2. Лабораторные занятия: компьютерный класс (ауд. 327, корп. 6), оснащенный специализированным оборудованием и программным обеспечением. Состав оборудования определен в Паспорте лаборатории.
3. Групповые (индивидуальные) консультации: аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.
4. Текущий контроль: аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.
5. Самостоятельная работа: помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим

программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Хеометрика в аналитической химии**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ПК.3

Способен проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов</p>	<p>Владеет современными компьютерными технологиями обработки хеометрических данных</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Не знает рассмотренных в изучаемом курсе методов хеометрической обработки данных. Не умеет выбрать подходящий метод обработки даже с помощью преподавателя. Не владеет навыком использования их на практике.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Знает некоторые из рассмотренных в изучаемом курсе методы хеометрической обработки данных. Умеет выбрать подходящий метод обработки с помощью преподавателя. Владеет навыком использования их на практике, допуская небольшое количество ошибок, которые может исправить с помощью преподавателя.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Знает большинство рассмотренных в изучаемом курсе методов хеометрической обработки данных. Умеет выбрать подходящий метод обработки. Владеет навыком самостоятельного использования их на практике с небольшим количеством ошибок.</p> <p align="center">Отлично</p> <p>Знает все рассмотренные в изучаемом курсе методы хеометрической обработки данных. Умеет самостоятельно выбрать подходящий метод обработки. Владеет навыком самостоятельного использования их на практике.</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : 12/24/72

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 45 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 45 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
Входной контроль	Введение. Основные разделы хемометрики, понятия, история развития. Хемометрика и аналитическая химия Входное тестирование	Знание основ математической статистики и способов ее применения в аналитической химии. Знание основ программирования. Знание основ аналитической химии.
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	Основные операции над данными в R Письменное контрольное мероприятие	Знание языка R и умение работать в RStudio
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	Метод главных компонент Письменное контрольное мероприятие	Знание метода главных компонент и умение применить его к химическим данным
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	Разрешение многомерных кривых Письменное контрольное мероприятие	Знание методов разрешения многомерных кривых и умение применить их к химическим данным

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	Дискриминация Письменное контрольное мероприятие	Знание методов качественного анализа, применяемых в хемометрике. Умение применить их на практике
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	Нелинейная градуировка Письменное контрольное мероприятие	Умение работать с методами нелинейной градуировки

Спецификация мероприятий текущего контроля

Введение. Основные разделы хемометрики, понятия, история развития. Хемометрика и аналитическая химия

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **0**

Проходной балл: **0**

Показатели оценивания	Баллы
Матричные вычисления (по 3 балла за пример):- Расчёт результата перемножения матриц- Расчёт определителя (3×3) - Расчёт обратной матрицы (2×2)	9
Написание простого алгоритма фильтрации элементов одномерного массива	6
Задача на знание основ статистики:- Расчёт среднего - 1 балл- Расчёт квартилей - 2 балла- Расчёт дисперсии - 3 балла	6
Написание простого алгоритма для вычисления элементов массива	4

Основные операции над данными в R

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность выполнения заданий (небольших программ): до 5 баллов за каждое из 3 заданий: Верно написанная программа - 5 баллов; С небольшими ошибками, но в целом верно написанная программа - 3	20

балла; Неоптимально написанная программа, возвращающая, тем не менее, верный результат - 3 балла; Программа написана с грубыми ошибками, нет программы - 0 баллов. Оформленный отчёт - до 5 баллов	
Правильность выполнения заданий (небольших программ): С небольшими ошибками, но в целом верно написанные программы; Неоптимально написанные программы, возвращающие, тем не менее, верный результат; Минимальный отчёт	9
Формальное присутствие на занятии, отправленные программы не работают или работают некорректно Отчет не оформлен	1

Метод главных компонент

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность выполнения задания: Верно реализован импорт данных - 3 балла; Верно выбран метод и написан код для преобразования методом главных компонент - 4 балла; Визуализация данных - до 3 баллов Программа написана с грубыми ошибками, нет программы - 0 баллов.	10
Интерпретация результатов и выводы	5
Аккуратность оформления отчета: от 0 до 5 баллов	5

Разрешение многомерных кривых

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность выполнения задания: Верно реализован импорт данных - 3 балла; Верно выбран метод и написан код для преобразования методом главных компонент - 4 балла; Визуализация данных - до 3 баллов Программа написана с грубыми ошибками, нет программы - 0 баллов.	10
Интерпретация результатов и выводы	5
Аккуратность оформления отчета: до 5 баллов	5

Дискриминация

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность выполнения задания: Верно реализован импорт данных - 3 балла; Верно выбран метод и написан код для преобразования методом главных компонент - 4 балла; Визуализация данных - до 3 баллов Программа написана с грубыми ошибками, нет программы - 0 баллов.	10
Интерпретация результатов и выводы	5
Аккуратность оформления отчета: от 0 до 5 баллов	5

Нелинейная градуировка

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**

Проходной балл: **9**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность выполнения задания: Верно реализован импорт данных - 3 балла; Верно выбран метод и написан код для преобразования методом главных компонент - 4 балла; Визуализация данных - до 3 баллов Программа написана с грубыми ошибками, нет программы - 0 баллов.	10
Интерпретация результатов и выводы	5
Аккуратность оформления отчета: от 0 до 5 баллов	5