



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФГБОУ ВО «ИГУ»  
Кафедра физической и коллоидной химии

УТВЕРЖДАЮ  
Декан химического факультета, доц.  
А.И. Вильмс  
“ 20 ” \_\_\_\_\_ 2020 г.

Рабочая программа дисциплины Б1.В.05

Наименование дисциплины **ХЕМОМЕТРИКА**

Направление подготовки **04.03.01 - Химия**

Направленность подготовки: **теоретическая и прикладная химия.**

Квалификация выпускника – **БАКАЛАВР**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК химического  
факультета

Протокол № 6 от «20» мая 2020 г.

Председатель \_\_\_\_\_  
А.И. Вильмс.

Рекомендовано кафедрой физической и  
коллоидной химии:

Протокол № 8 от 17» марта 2020 г.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Шmidt А. Ф.

Иркутск 2020 г.

## Содержание

	стр.
1. Цели и задачи дисциплины	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины	4
4. Содержание и структура дисциплины	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	6
4.3 Содержание учебного материала:	8
4.3.1 Перечень практических занятий и лабораторных работ	9
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов	11
4.4 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	12
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) <i>(при наличии)</i>	12
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):	12
а) основная литература;	12
б) дополнительная литература;	12
в) периодические издания;	13
г) список авторских методических разработок	13
д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы	13
6. Материально-техническое обеспечение дисциплины	13
7. Образовательные технологии	13
8. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	14

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

**Цель:** получение студентами знаний и навыков в области применения методов математической статистики при планировании эксперимента, обработке его результатов и формировании адекватных эксперименту выводов.

### Задачи:

- ознакомить студентов химического факультета с математическими методами обработки результатов эксперимента;
- закрепить необходимый понятийный аппарат, основные законы распределения случайных величин;
- сформировать умение оценивать погрешности измерений, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования
- сформировать умение визуализировать экспериментальные данные в форме таблиц, графиков, диаграмм и гистограмм
- дать представление о пакете анализа данных MS Excel для однофакторного и двухфакторного дисперсионного анализа

## II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО:

- 2.1 Дисциплина «Хеометрика» относится к базовым дисциплинам вариативной части (Б1.В.05).
- 2.2 Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами, а именно:
- «Математика» (Б1.О.10),
  - «Дополнительные главы математики» (Б1.О.11),
  - «Информатика» (Б1.О.21),
  - «Информатика и вычислительная техника» (Б1.О.22),
  - «Математическая теория эксперимента» (Б1.В.02),
  - «Аналитическая химия» (Б1.О.17).
- 2.3 Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:
- «Физическая химия. Химическая термодинамика» (Б1.О.23),
  - «Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ» (Б1.О.23).
  - «Физико-химия поверхностно-активных веществ» (Б1.В.ДВ.02.02),
  - «Использование хроматографии и электрохимических методов в анализе объектов сложного состава» (Б1.В.ДВ.03.01),
  - выполнения квалификационных работ и формирования профессиональных компетенций.

Учебная дисциплина «Хеометрика» знакомит студентов с прикладной научной отраслью знаний, возникшей на стыке экспериментальной химии и математики. Понимание сущности эксперимента и знакомство с методами обработки экспериментальных результатов является необходимой частью подготовки специалиста-химика, поскольку каждому химику в процессе учебы или работы необходимо критически оценивать имеющиеся экспериментальные данные из литературных источников, рационально спланировать свой эксперимент, обработать полученные данные и с учетом погрешностей эксперимента критически осмыслить его результаты и сформулировать соответствующие выводы.

### III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.03.01 «Химия», профиль: теоретическая и прикладная химия.

#### Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
<i>ПК-4</i> Способен обрабатывать результаты работ химической направленности с использованием стандартных методов и методик	<i>ИДК<sub>ПК4.2</sub></i> Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знать:</b> способы обработки результатов измерений при помощи программного обеспечения и требования к методам обработки
		<b>Уметь:</b> визуализировать экспериментальные данные в форме таблиц, графиков, диаграмм и гистограмм
		<b>Владеть:</b> математическими методами обработки результатов эксперимента, в частности, применять пакет анализа данных MS Excel.
<i>ПК-5</i> Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения	<i>ИДК<sub>ПК5.3</sub></i> Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования.	<b>Владеть:</b> математическими методами обработки результатов эксперимента
		<b>Знать:</b> возможности и границы применимости видов математического анализа и методы планирования эксперимента
		<b>Уметь:</b> оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования

#### IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа,

Форма промежуточной аттестации: *зачет*

##### 4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа		
			Лекции	Практические занятия	КСР + консультации			
1	Введение. Понятия о плане эксперимента	5	2	-	-	-	-	
2	Измерение физико-химических величин	5	3	6	-	3	Устный опрос, самостоятельные задания, контрольная работа	
3	Элементы математической статистики	5	3	6	-	3	Устный опрос, самостоятельные задания, контрольная работа	
4	Элементы дисперсионного анализа	5	1	2	-	1	Устный опрос, самостоятельные задания	
5	Основы корреляционного и регрессионного анализа	5	3	6	-	2	Устный опрос, самостоятельные задания, коллоквиум	

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися	Самостоятельная работа	Самостоятельная работа	Самостоятельная работа	
6	Краткий обзор многомерных методов анализа	5	3	4	-	2	Устный опрос, самостоятельные задания, коллоквиум
7	Практический анализ экспериментальных данных	5	3	2	3	4	Устный опрос, самостоятельные задания, контрольная работа
<b>Итого часов</b>		<b>5</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>3</b>	<b>15</b>	Зачет

#### 4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
5	Измерение физико-химических величин	Решение задач по теме		1	Самостоятельные задания.	См. № 1 в списке рекомендуемой литературы
5	Измерение физико-химических величин	Подготовка к контрольной работе по теме «Измерение физико-химических величин»		2	Контрольная работа	1. См. список основной литературы 2. См. и №1, № 2 и №4 в списке рекомендуемой литературы

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
5	Элементы математической статистики	Решение задач по теме		1	Самостоятельные задания.	См. № 1 в списке рекомендуемой литературы
5	Элементы математической статистики	Подготовка к контрольной работе по теме «Элементы математической статистики»		2	Контрольная работа	1. См. список основной литературы 2. См. № 1 и № 3 в списке рекомендуемой литературы
5	Элементы дисперсионного анализа	Решение задач по теме		1	Самостоятельные задания. Устный опрос.	См. № 1 в списке рекомендуемой литературы
5	Основы корреляционного и регрессионного анализа	Подготовка к коллоквиуму по теме «Элементы дисперсионного анализа и основы корреляционного и регрессионного анализа»		2	Собеседование в форме коллоквиума	1. См. список основной литературы 2. См. № 3 в списке рекомендуемой литературы
5	Краткий обзор многомерных методов анализа	Подготовка к коллоквиуму опросу по теме «Краткий обзор многомерных методов анализа»		2	Собеседование в форме коллоквиума	1. См. список основной литературы 2. См. № 3 в списке рекомендуемой литературы
5	Практический анализ экспериментальных данных	Решение задач по теме, подготовка к контрольной работе по теме «Практический анализ экспериментальных данных»		4	Самостоятельные задания, Контрольная работа	См. № 1 в списке рекомендуемой литературы
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				<b>15</b>		
<b>Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)</b>				<b>15</b>		

## **4.3 Содержание учебного материала**

### **Содержание разделов и тем дисциплины**

#### **1. Введение. Понятия о плане эксперимента**

Предмет, задачи и проблемы курса «Хеометрика». Понятие эксперимента и классификация экспериментов. Математическая модель объекта исследования. Основные тапы проведения эксперимента и классификация экспериментальных задач. Параметры оптимизации. Факторы, влияющие на результат эксперимента.

#### **2. Измерение физико-химических величин**

Физико-химические величины и их классификация. Измерение и методы (типы) измерений. Признаки и шкалы. Погрешности измерений, их происхождение и классификация. Запись результатов измерений и их округление. Математические действия с приближенными числами. Погрешности измерительных приборов. Погрешности функций приближенных аргументов.

#### **3. Элементы математической статистики**

Случайные величины и их характеристики. Законы распределения случайных величин. Выборка и ее характеристики. Интервальное оценивание и доверительный интервал. Теория статистического вывода и проверка гипотез (статистических и параметрических).

#### **4. Элементы дисперсионного анализа**

Общие сведения. Пример применения однофакторного дисперсионного анализа.

#### **5. Основы корреляционного и регрессионного анализа**

Понятие о статистической и корреляционной связи. Условия применения и задачи корреляционно-регрессионного анализа. Парная линейная корреляция. Статистическое изучение корреляционной связи. Метод наименьших квадратов.

#### **6. Краткий обзор многомерных методов анализа**

Стратегия обработки многомерных данных. Факторный анализ. Метод главных компонент. Полный и дробный факторный эксперименты. Кластерный анализ. Дискриминантный анализ.

#### **7. Практический анализ экспериментальных данных**

Визуализация данных и форматы их представлений: составление таблиц, построение графиков, диаграмм и гистограмм. Оценка точности измерений, распространение погрешностей. Проверка распределений, критерий согласия хи-квадрат. Методы сравнения экспериментальных данных. Калибровочные процедуры.

### 4.3.1 Перечень практических занятий и лабораторных работ

№ № п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1	Измерение физико-химических величин	Погрешности измерений и их происхождение. Запись результатов измерений и их округление. Решение задач	1	Устный опрос. Самостоятельные задания.	ПК-5.3
2					
3		Математические действия с приближенными числами. Решение задач.	1	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
4		Погрешности измерительных приборов. Решение задач.	1	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
5		Погрешности функций приближенных аргументов. Решение задач.	1	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
6		<b>Контрольная работа № 1</b> по теме «Измерение физико-химических величин»	2	Контрольная работа	ПК-5.3
7	Элементы математической статистики	Законы распределения случайных величин. Решение задач.	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
8		Интервальное оценивание и доверительный интервал. Решение задач.	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
9		<b>Контрольная работа № 2</b> по теме «Элементы математической статистики»	2	Контрольная работа	ПК-5.3
10	Элементы дисперсионного анализа	Решение задач на применения однофакторного дисперсионного анализа.	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3

11	Основы корреляционного и регрессионного анализа	<b>Коллоквиум № 1</b> по теме «Элементы дисперсионного анализа и основы корреляционного и регрессионного анализа»	2	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-5.3
12		Парная линейная корреляция. Решение задач.	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
13		Метод наименьших квадратов. Решение задач.	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
14	Краткий обзор многомерных методов анализа	<b>Коллоквиум № 2</b> по теме «Краткий обзор многомерных методов анализа»	2	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-5.3
15		Примеры использования многомерных методов анализа	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-5.3
16	Практический анализ экспериментальных данных	Визуализация данных: таблицы	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-4.2 ПК-5.3
17		Визуализация данных: графики	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-4.2 ПК-5.3
18		Визуализация данных: диаграммы и гистограммы	2	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-4.2 ПК-5.3
19		Применение процедур однофакторного и двухфакторного дисперсионного анализа при помощи MS Excel	3	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-4.2 ПК-5.3
20		Проверка распределений, критерий согласия хи-квадрат	1	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-4.2 ПК-5.3
21		Калибровочные процедуры	1	Устный опрос. Самостоятельные задания	ПК-4.2 ПК-5.3
22		<b>Контрольная работа № 3</b> по теме «Практический анализ экспериментальных данных»	1	Проверка контрольной работы	ПК-5.3

#### 4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	Измерение физико-химических величин	Подготовка к Контрольной работе №1 (см. Оценочные материалы для текущего контроля). Выполнение самостоятельных заданий.	ПК-5	ПК-5.3
2	Элементы математической статистики	Подготовка к Контрольной работе №2 (см. Оценочные материалы для текущего контроля). Выполнение самостоятельных заданий	ПК-5	ПК-5.3
3	Элементы дисперсионного анализа	Выполнение самостоятельных заданий	ПК-5	ПК-5.3
4	Основы корреляционного и регрессионного анализа	Подготовка к коллоквиуму №1 (см. Оценочные материалы для текущего контроля). Выполнение самостоятельных заданий	ПК-5	ПК-5.3
5	Краткий обзор многомерных методов анализа	Подготовка к коллоквиуму №2 (см. Оценочные материалы для текущего контроля). Выполнение самостоятельных заданий	ПК-5	ПК-5.3
6	Практический анализ экспериментальных данных	Подготовка к Контрольной работе №3 (см. Оценочные материалы для текущего контроля). Выполнение самостоятельных заданий.	ПК-4 ПК-5	ПК-4.2 ПК-5.3

## Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения задач и подготовки к коллоквиумам и контрольным работам, проводится во внеаудиторное время.

Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях

1. Самойлов, Н. А. Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов" [Электронный ресурс] / Н. А. Самойлов. - Москва : Лань", 2013. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1553-3.

### 4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии) \_\_\_\_\_

## V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### а) основная литература

1. Берикашвили, В.Ш. Статистическая обработка данных, планирование эксперимента и случайные процессы [Текст : Электронный ресурс] : Учебное пособие / В. Ш. Берикашвили, С. П. Оськин. - 2-е изд., испр. и доп. - Электрон. дан.col. - Москва : Издательство Юрайт, 2019. - 164 с. - (Бакалавр и магистр. Академический курс). - Режим доступа: ЭБС "Юрайт". - Internet access. - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-534-09216-5.
2. Сидняев, Н.И. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных [Текст : Электронный ресурс] : Учебник и практикум / Н. И. Сидняев. - 2-е изд., пер. и доп. - Электрон. дан.col. - Москва : Издательство Юрайт, 2019. - 495 с. - (Бакалавр и магистр. Академический курс). - Режим доступа ЭБС "Юрайт". - Неогр. доступ. - ISBN 978-5-9916-2925-6
3. Смагунова, А.Н. Математическое планирование эксперимента в методических исследованиях аналитической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. Н. Смагунова, Г. В. Пашкова, Л. И. Белых. - 3-е изд., стер. - [Б. м.] : Лань, 2018. - 120 с. - Режим доступа ЭБС "Лань". - неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-2540-2

### б) дополнительная литература

1. Самойлов, Н. А. Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико-технологических процессов" [Электронный ресурс] / Н. А. Самойлов. - Москва : Лань", 2013. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1553-3.
2. Прошин, В. И. Анализ результатов измерений в экспериментальной физике [Электронный ресурс] / В. И. Прошин, В. Г. Сидоров. - 1-е изд. - [Б. м.] : Лань, 2018. - 172 с. - Режим доступа ЭБС "Лань". - неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-2886-1.
3. Трофимов, А. Г. Математическая статистика [Текст : Электронный ресурс] : Учебное пособие / А. Г. Трофимов. - 2-е изд. - Электрон. дан.col. - Москва : Издательство Юрайт, 2019. - 259 с. - (Университеты России). - Режим доступа ЭБС "Юрайт". - Неогр. доступ. - ISBN 978-5-534-08874-8.
4. Зайдель, АН. Ошибки измерений физических величин [Электронный ресурс] / А. Н. Зайдель. - Москва : Лань, 2009. - 112 с. : ил., табл. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-0643-2



**в) периодические издания (при необходимости)**

**г) список авторских методических разработок:**

1. Математическая обработка физико-химических данных и расчеты по графикам [Электронный ресурс] : метод. указ. / Иркутский гос. ун-т, Науч. б-ка ; сост. Д. С. Суслов. - ЭВК. - Иркутск : ИГУ, 2010. - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ.
2. Быков, М.В. Математическая и графическая обработка физико-химических данных [Текст] : учеб. пособие / М. В. Быков, Д. С. Суслов, В. С. Ткач ; рец.: А. И. Вильмс, И. С. Петрушин ; Иркут. гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2015. - 91 с. ; 20 см. - ISBN 978-5-9624-1292-4

**д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы**

1. <https://www.chemometrics.ru/ru/books/>  
Данный интернет источник – это сайт Российского хемометрического общества, на котором в открытом доступе представлены учебные пособия по хемометрике и современное программное обеспечение.
2. [https://books.google.ru/books?hl=ru&lr=&id=G8JMac7OCtAC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Chemometrics+massart&ots=kFHkaOz71W&sig=RNivQBy54k4gcBFОКН-cBLVpw24&redir\\_esc=y#v=onepage&q=Chemometrics%20massart&f=false](https://books.google.ru/books?hl=ru&lr=&id=G8JMac7OCtAC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Chemometrics+massart&ots=kFHkaOz71W&sig=RNivQBy54k4gcBFОКН-cBLVpw24&redir_esc=y#v=onepage&q=Chemometrics%20massart&f=false)

Данный интернет источник – это ссылка на учебник в электронном виде на английском языке: Deming S. N. et al. Chemometrics: a textbook. – Elsevier, 1988.

## **VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **6.1. Учебно-лабораторное оборудование:**

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием и приборной базой, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 402, 426, 303); ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.
- компьютерный класс химического факультета. Общее количество единиц вычислительной техники – 12 шт. Имеется локальная сеть.

### **6.2. Программное обеспечение:**

### **6.3. Технические и электронные средства:**

## **VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

В процессе изучения дисциплины «Хемометрика» читаются лекции, проводятся контрольные работы, коллоквиумы, разбор конкретных ситуаций с использованием пассивных, активных и интерактивных форм обучения.

*Активные формы обучения.* На практических занятиях, которые составляют более половины от контактной работы, каждый студент помимо совместного решения типовых задач выполняет индивидуальное задание. Такой вид организации обучения способствует

приобретению навыков самостоятельного планирования экспериментов и оценки погрешности измерений. Выполнение самостоятельных заданий на компьютере формирует умение проводить первичный анализ экспериментальных данных с учетом законов и закономерностей, визуализировать полученные данные, представлять результаты опытов с указанием доверительного интервала, грамотно формулировать выводы.

Закрепление теоретических положений хемометрики проводится в виде интерактивного обучения – коллоквиумов, и выполнения расчетных задач.

**Наименование тем занятий с использованием интерактивных форм обучения:**

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
1	Понятия о плане эксперимента. Измерение физико-химических величин	практические	Групповая дискуссия	2
2	Элементы математической статистики	практические	Групповая дискуссия	2
3	Элементы дисперсионного анализа и основы корреляционного и регрессионного анализа	практические	Групповая дискуссия / коллоквиум	2
4	Краткий обзор многомерных методов анализа	практические	Групповая дискуссия / коллоквиум	2
Итого часов				8

**VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

**Оценочные средства (ОС):**

Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенций:

**Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:**

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Устный опрос, самостоятельные задания, контрольная работа	Введение. Понятия о плане эксперимента. Измерение физико-химических величин	ПК-5

2	Устный опрос, самостоятельные задания, контрольная работа	Элементы математической статистики	ПК-5
3	Устный опрос, самостоятельные задания	Элементы дисперсионного анализа	ПК-5
4	Устный опрос, самостоятельные задания, коллоквиум	Основы корреляционного и регрессионного анализа	ПК-5
5	Устный опрос, самостоятельные задания, коллоквиум	Краткий обзор многомерных методов анализа	ПК-5
6	Устный опрос, самостоятельные задания, контрольная работа	Практический анализ экспериментальных данных	ПК-4, ПК-5

### Демонстрационные варианты контрольных работ

#### Контрольная работы №1

1. Сколько значащих цифр содержится в каждом из следующих чисел:

а) 1331; б) 0,1040; в) 5,000; г)  $88 \cdot 10^7$ ; д)  $2 \cdot 10^3$ ; е)  $0,600 \cdot 10^3$ .

2. Произвести указанные действия с приближенными числами (числа даны с точностью до половины единицы разряда последней значащей цифры):

а)  $(76,102 + 34,17) - (0,3546 + 6,25) \times 10,13 =$

б)  $\ln 78,91 + 21,1415^2 - \sqrt{17625,07} =$

3. Измерение напряжения на солнечной батарее равного 1,25 В проводили с помощью АЦП с погрешностью 1,25%. Можно ли сказать, что батарея годна к эксплуатации, если согласно паспортным данным напряжение на батарее должно быть не ниже 1,23 В.

4. Рассчитать давление газа и погрешности его определения (абсолютную и относительную), если объем сосуда составляет  $40,0 \pm 0,5$  л, температура  $298,0 \pm 1$  К, универсальная газовая постоянная равна  $8,314$  Дж/(моль·К), а количество вещества равно  $100,0 \pm 0,1$  моль. Для того чтобы получить давление в Па необходимо перевести объем в м<sup>3</sup>.

#### Контрольная работа №2

1. При проведении некоторого исследования была проведена серия измерений сферических гранул силикагеля. Для случайным образом выбранных 13-ти измерений были получены значения диаметров частиц (в мм): 1,19; 1,34; 1,28; 1,23; 1,55; 1,01; 1,72; 1,39; 1,64; 1,61; 1,49; 1,59; 1,77. Определите среднее значение диаметра этих части и дайте доверительный интервал ( $p=0,90$ ) с учетом того, что штангенциркуль (инструмент измерения) имеет погрешность измерения 0,01 мм.

2. На входе в 6-ой корпус ИГУ измеряют температуру тела заходящих студентов. В таблице ниже приведены случайно выбранные результаты измерений:

Температура тела, °С	36,6	36,8	35,9	36,3	36,5	37,1	37,3
Количество студентов, чел	100	53	20	74	33	15	3

Определите:

а) с вероятностью 98% доверительный интервал средней температуры тела во всей генеральной совокупности,

- б) с вероятностью 90% определите доверительный интервал средней температуры тела во всей генеральной совокупности,  
 в) на сколько доверительный интервал во втором случае будет отличаться от интервала в первом?

### Контрольная работа №3

$$P(s) = As^3 + Bs^2 + Cs + D$$

$s$	0	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5
$P$	10	50,1	39,58	15,4	23,68	33,6	57,78	100,9	149,5	256

Задание:

- 1) Постройте график по точкам (на миллиметровой бумаге).
- 2) Найдите определенный интеграл в интервале  $s$  от 0 до 2,5.
- 3) Постройте касательные и определите из данных графика их уравнения (т.е.  $P=as+b$ , нужно найти  $a$  и  $b$ ) в точках, со значениями  $s$  близкими к 1, 2 и 5. В ответе указать точные координаты этих точек.

### Вопросы для собеседования

#### Коллоквиум 1. Элементы дисперсионного анализа и основы корреляционного и регрессионного анализа.

1. Задачи, решаемые в дисперсионном анализе. Характеристика межгрупповой и внутригрупповой дисперсии. Чем обусловлена вариация групповых средних вокруг общего среднего?
2. Какая параметрическая гипотеза принимается в качестве нулевой при дисперсионном анализе? Порядок проверки этой гипотезы. Что называют дисперсионным отношением? Какое вероятностное распределение применяют для проверки гипотезы в дисперсионном анализе? Перечислите его числовые характеристики.
3. Дайте определение статистической и функциональной связи. Что называют корреляционной связью? Перечислите причины возникновения корреляционной связи между признаками.
4. Какие задачи решает корреляционно-регрессионный анализ? В чем заключается суть метода наименьших квадратов? Практическое значение парной линейной корреляции. Что называют уравнением регрессии? Дайте определение коэффициента корреляции. Основные этапы изучения корреляционной зависимости. Какие задачи решаются на каждом этапе?

#### Коллоквиум 2. Краткий обзор многомерных методов анализа

1. Как зависит число опытов от вида принимаемой математической модели? Чем можно объяснить широкое распространение полиномиальных моделей?
2. Дайте определение полного факторного эксперимента. Что характеризуют  $\beta$ -коэффициенты? Перечислите этапы планирования и реализации полного факторного эксперимента. Что называют кодированием факторов? Зачем его проводят?
3. Геометрическое представление планов типа  $2^k$ . Как происходит формирования матрицы планирования экспериментов? Постройте матрицу планирования для планов  $2^2; 2^3; 2^4$ .
4. Свойства матрицы планирования полного факторного эксперимента. Что называют

рандомизацией опытов? Зачем ее проводят? Какие опыты называют параллельными? Как и для чего проводится проверка однородности дисперсии параллельных опытов? Что означает понятие воспроизводимости эксперимента?

5. Как оценить ошибку эксперимента? Какой метод применяется при расчете коэффициентов уравнения регрессии? Запишите формулу расчета  $b$ -коэффициентов. Что называют взаимодействием факторов и как оно учитывается при планировании полного факторного эксперимента? Что называют взаимодействием первого, второго, третьего и т.д. порядка? Как определяется число возможных взаимодействий факторов? Способы проверки значимости  $b$ -коэффициентов.
6. Чем может быть обусловлена незначимость коэффициентов уравнения регрессии? Как и для чего проводится проверка адекватности уравнения регрессии? Что называют дробным факторным экспериментом? Дайте определение дробной реплики полного факторного эксперимента.
7. Порядок планирования дробного факторного эксперимента. Какие планы называют насыщенными? Явление смешивания оценок  $\beta$ -коэффициентов в дробном факторном эксперименте. Что называют генерирующим соотношением и определяющим контрастом?

Промежуточная аттестация (*зачет*) может проводиться в форме устного собеседования или в виде тестовых заданий с открытыми вопросами.

### **ПРИМЕРНЫЙ СПИСОК ВОПРОСОВ К ЗАЧЕТУ:**

1. Эксперимент. Дайте определение и классификацию экспериментов. Какие вопросы решает планирование эксперимента? Математическая модель объекта исследования.
2. Факторы и их область определения. Что называют функцией отклика и поверхностью отклика?
3. Основные этапы и задачи проведения экспериментальных исследований. Параметр оптимизации: определение и предъявляемые к нему требования. Обобщенный параметр оптимизации.
4. Требования, предъявляемые к факторам. Уровни факторов и интервалы варьирования факторов. Ограничения необходимые для учета при выборе интервала варьирования. Зависимость количества опытов в эксперименте от числа уровней факторов. Факторное пространство.
5. Физико-химические величины. Основные типы физико-химических величин и их типы. Методы измерений.
6. Погрешность измерений. Классификация погрешностей. Математические модели результата измерения и погрешности измерения.
7. Представление результата измерений. Правила округления числовых значений результата измерения. Математические действия с приближенными числами.
8. Функция и плотность распределения случайной величины. Определения математического ожидания и дисперсии случайной величины. Основные законы распределения случайной величины, применяемые при планировании эксперимента. Числовые характеристики этих законов.

9. Определения генеральной совокупности и выборки. Характеристики точечной оценки и критерии ее качества. Интервальная оценка и доверительный интервал.
10. Статистическая гипотеза. Параметрические и непараметрические гипотезы. Нулевая гипотеза. Уровень значимости и область принятия гипотезы.
11. Статистический критерий. Мощностью критерия. Этапы проверки гипотезы. Ошибкам первого и второго рода, вероятность их совершения.
12. Задача, решаемая при проверке гипотезы о законе распределения. Роль критерия Пирсона при проверке гипотезы о законе распределения.
13. Какие статистические критерии применяются при проверке параметрических гипотез? Основные гипотезы о выборочных средних, порядок их проверки. Выявление грубых погрешностей с использованием параметрических гипотез.
14. Задачи, решаемые в дисперсионном анализе. Характеристика межгрупповой и внутригрупповой дисперсии. Чем обусловлена вариация групповых средних вокруг общего среднего?
15. Какая параметрическая гипотеза принимается в качестве нулевой при дисперсионном анализе? Порядок проверки этой гипотезы. Дисперсионное отношение. Вероятностное распределение, применяемое для проверки гипотезы в дисперсионном анализе, и его числовые характеристики.
16. Статистическая и функциональная связи. Корреляционная связь. Причины возникновения корреляционной связи между признаками.
17. Задачи, решаемые корреляционно-регрессионным анализом. Суть метода наименьших квадратов. Практическое значение парной линейной корреляции. Уравнение регрессии. Коэффициент корреляции. Этапы изучения корреляционной зависимости.
18. Зависимость числа опытов от вида принимаемой математической модели. Чем можно объяснить широкое распространение полиномиальных моделей?
19. Полный факторный эксперимент. Что характеризуют  $\beta$ -коэффициенты? Этапы планирования и реализации полного факторного эксперимента. Кодирование факторов.
20. Геометрическое представление планов типа  $2^k$ . Формирования матрицы планирования экспериментов. Матрицу планирования для планов  $2^2, 2^3, 2^4$ .
21. Свойства матрицы планирования полного факторного эксперимента. Рандомизация опытов. Параллельные опыты. Проверка однородности дисперсии параллельных опытов. Воспроизводимость эксперимента.
22. Оценка ошибки эксперимента. Расчет коэффициентов уравнения регрессии. Взаимодействие факторов и его учет при планировании полного факторного эксперимента. Взаимодействия первого, второго, третьего и т.д. порядка. Как определяется число возможных взаимодействий факторов? Способы проверки значимости  $b$ -коэффициентов. Чем может быть обусловлена незначимость коэффициентов уравнения регрессии?
23. Проверка адекватности уравнения регрессии. Дробный факторный эксперимент и дробная реплики полного факторного эксперимента.
24. Порядок планирования дробного факторного эксперимента. Какие планы называют насыщенными? Явление смешивания оценок  $\beta$ -коэффициентов в дробном факторном эксперименте. Что называют генерирующим соотношением и определяющим

контрастом?

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
ПК-4.2 Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знает:</b> способы обработки результатов измерений при помощи программного обеспечения и требования к методам обработки	Выполнение самостоятельных заданий. Собеседование.
	<b>Умеет:</b> визуализировать экспериментальные данные в форме таблиц, графиков, диаграмм и гистограмм	Выполнение самостоятельных заданий. Собеседование. Выполнение контрольной работы.
	<b>Владеет:</b> математическими методами обработки результатов эксперимента, в частности, применять пакет анализа данных MS Excel.	Выполнение самостоятельных заданий. Собеседование.
ПК-5.3 Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования.	<b>Владеть:</b> математическими методами обработки результатов эксперимента	Собеседование. Выполнение самостоятельных заданий.
	<b>Знать:</b> возможности и границы применимости видов математического анализа и методы планирования эксперимента	Собеседование. Выполнение самостоятельных заданий.
	<b>Уметь:</b> оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования	Собеседование. Выполнение самостоятельных заданий. Выполнение контрольной работы.

### КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:

1. Предусмотрено 2 собеседования по теоретическому материалу в виде коллоквиумов. Каждая тема оценивается максимум на 15 баллов.
2. Предусмотрено 3 контрольные работы, каждая из которых оценивается максимум на 20 баллов.

#### Зачтено:

в целом, сформированные знания предмета, умение применять методы и подходы изучаемой дисциплины при решении учебных и практических задач с минимальным количеством ошибок не принципиального характера, наличие навыков применения

методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных и практических задач **(60 баллов и более)**.

**Не зачтено:**

фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных задач **(менее 60 баллов)**.

**Разработчики:**



доцент М.В. Быков

профессор Д.С. Суслов

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии  
17» марта 2020 г.

Протокол № 8

Зав. кафедрой



/А.Ф. Шмидт/

*Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.*