



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  
«11» марта 2026 г.

Рабочая программа дисциплины Б1.В.25

Наименование дисциплины:  
ХЕМОМЕТРИКА

Направление подготовки: 04.03.01 – Химия,  
направленности – химия.

Квалификация выпускника – БАКАЛАВР

Форма обучения: *очная*


Согласовано с УМК\_химического  
факультета

Рекомендовано кафедрой физической и  
коллоидной химии:

Протокол № 1 от «11» марта 2026 г. .

Протокол № 7 от «12» февраля 2026 г.

Председатель   
А.И. Вильмс

И.о. зав. кафедрой   
Белых Л.Б.

Иркутск 2026 г.

## СОДЕРЖАНИЕ

1	Цели и задачи дисциплины.....	4
2	Место дисциплины в структуре ОПОП.....	4
3	Требования к результатам освоения дисциплины.....	7
4	Содержание и структура дисциплины.....	9
4.1	Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов.....	9
4.2	План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	10
4.3	Содержание учебного материала .....	13
4.4	Примерная тематика курсовых работ (проектов) ( <i>при наличии</i> ).....	17
5	Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля) .....	18
5.1	Основная литература .....	18
5.2	Дополнительная литература .....	18
5.3	Периодические издания (при необходимости) .....	20
5.4	Список авторских методических разработок.....	20
5.5	Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы .....	20
6	Материально-техническое обеспечение дисциплины .....	20
6.1	Учебно-лабораторное оборудование: .....	20
6.2	Программное обеспечение.....	21
6.3	Технические и электронные средства.....	21
7	Образовательные технологии.....	21
8	Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации .....	21
8.1	Общие сведения .....	21
8.2	Демонстрационные варианты практических заданий.....	22
8.3	Вопросы для устного опроса .....	24
8.4	Планируемые результаты обучения для формирования компетенций .....	29
8.5	Программа оценивания контролируемых компетенций.....	32
8.6	Критерии оценивания результатов обучения.....	39

## ПЕРЕЧЕНЬ ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ

ВО – высшее образование;

з.е. – зачетная единица, равная 36 академическим часам;

ИДК – индикатор достижения компетенции;

Компетенция – (от лат. *competentia* «согласие; соразмерность» от *competere* «соответствовать, подходить») в рамках ФГОС ВО нестрого определенный термин, выражающий требование(требования) к результатам освоения программы бакалавриата выпускниками, освоившими программу бакалавриата, разрабатываемой и утверждаемой образовательной организации высшего образования самостоятельно в соответствии с ФГОС ВО; представлены в виде универсальных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций;

Направленность – устанавливаемый образовательной организации высшего образования профиль программы бакалавриата, который соответствует направлению подготовки в целом или конкретизирует содержание программы бакалавриата в рамках направления подготовки путем ориентации ее на: область (области) профессиональной деятельности и сферу (сферы) профессиональной деятельности выпускников; тип (типы) задач и задачи профессиональной деятельности выпускников; при необходимости - на объекты профессиональной деятельности выпускников или область (области) знания;

ОПК – общепрофессиональные компетенции;

ОПОП – основная профессиональная образовательная программа;

Профиль – синоним направленности, в рамках ФГОС ВО написан в скобках по отношению к направленности;

ОС – оценочные средства;

ПА – промежуточная аттестация (форма);

ПК – профессиональные компетенции;

ПС – профессиональный стандарт;

РПД – рабочая программа дисциплины;

ТК – средства текущего контроля;

УК – универсальные компетенции;

ФГОС ВО – федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования;

ЭИОС – электронная информационная образовательная система.

## **1 Цели и задачи дисциплины**

Цель: формирование у обучающихся системы теоретических знаний и практических навыков в области применения математических и статистических методов для планирования химического эксперимента, обработки, визуализации и интерпретации экспериментальных данных, включая решение задач регрессионного анализа, классификации, снижения размерности и предобработки аналитических сигналов.

Задачи:

1) освоение понятийного аппарата хемометрики (латентные переменные, проекционные методы, многомерные пространства признаков, расстояния и меры близости); закрепление (на уровне, достаточном для практического применения) основ теории погрешностей, проверки статистических гипотез, дисперсионного и корреляционного анализа;

2) изучение математических основ метода главных компонент, регрессионных методов, методов классификации; ознакомление с методами предварительной обработки аналитических данных;

3) приобретение навыков работы с табличным процессором (MS Excel, LibreOffice Calc) как инструментом для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, функции, надстройка «Анализ данных»;

4) развитие способности самостоятельно выполнять цикл хемометрического анализа: от первичной обработки данных до построения и валидации прогностической модели; выработка умения критически оценивать адекватность выбранной математической модели решаемой химической задаче; привитие навыков количественной оценки качества модели.

## **2 Место дисциплины в структуре ОПОП**

Учебная дисциплина «Хемометрика» относится к базовым дисциплинам вариативной части (Б1.В.25).

Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами, а именно:

- «Математика» (Б1.О.10),
- «Дополнительные главы математики» (Б1.О.12),
- «Информатика» (Б1.О.22),
- «Информатика и вычислительная техника» (Б1.О.23),
- «Математическая теория эксперимента» (Б1.В.02),
- «Механика и молекулярная физика» (Б1.О.13),

- «Электричество и магнетизм» (Б1.О.14),
- «Аналитическая химия» (Б1.О.18);

перечень необходимых знаний, умений и навыков включает:

- знание понятий вектора, матрицы, определителя, обратной матрицы,
- умение выполнять операции умножения матриц и векторов,
- понимание понятия производной функции нескольких переменных,
- понимание физической природы сигнала, понятий шума, разрешающей способности, динамического диапазона,
- знание основных законов поглощения электромагнитного излучения,
- базовые навыки работы с табличным процессором (MS Excel или LibreOffice Calc): ввод и форматирование данных, построение графиков, использование встроенных функций, работа с массивами,
- представление о систематических и случайных погрешностях,
- умение рассчитывать доверительный интервал среднего значения,
- знание t-критерия Стьюдента и F-критерия Фишера,
- навык построения простого градуировочного графика.

Перечень последующих учебных дисциплин и разделов блоков программы бакалавриата, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- «Химическая технология» (Б1.О.27),
- «Физико-химия поверхностно-активных веществ» (Б1.В.ДВ.02.02),
- выполнения выпускных квалификационных работ и формирования профессиональных компетенций, обучения по магистерским программам в области химии.

Хемометрика представляет собой прикладную междисциплинарную область, находящуюся на стыке химии, математической статистики и компьютерных наук. Дисциплина обеспечивает формирование у обучающихся современных компетенций в области количественного анализа многомерных экспериментальных данных, планирования эксперимента, выявления скрытых закономерностей и построения прогностических моделей.

Актуальность дисциплины обусловлена следующими факторами:

- современные физико-химические методы анализа (спектроскопия, хроматография, масс-спектрометрия) генерируют многомерные данные, обработка которых классическими статистическими методами малоэффективна;

- требования к достоверности результатов химического анализа, предъявляемые в научно-исследовательских лабораториях и на производстве, предполагают статистическую и хемометрическую валидацию методик;
- внедрение принципов «зелёной химии» и цифровизации химического эксперимента требует от специалиста умения извлекать максимум информации из минимального числа измерений.

### 3 Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по направлению подготовки 04.03.01 «Химия», профиль: Химия; перечень компетенций, индикаторов их достижения и планируемые результаты обучения по дисциплине представлены в таблице ниже.

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Результаты обучения
ПК-4. Способен обрабатывать результаты работ химической направленности с использованием стандартных методов и методик	ИДК <sub>ПК-4.2</sub> . Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (к ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»; <b>Уметь:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, множественную, полиномиальную) и интерпретировать их параметры; выполнять снижение размерности данных с помощью PCA; применять регрессию (в упрощённом виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке <b>Владеть:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Результаты обучения
		линейной регрессии; методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации $R^2$ , среднеквадратичная ошибка).
ПК-5. Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения	ИДК <sub>ПК-5.3</sub> . Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования	<p><b>Владеть:</b> методами расчёта описательных статистик (среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал) в табличном процессоре; навыками проверки нормальности распределения (Q-Q график) и обнаружения выбросов; способностью формулировать заключение о статистической значимости влияния исследуемого фактора на основе результатов парного t-теста или ANOVA</p> <p><b>Знать:</b> классификацию погрешностей измерений; закон накопления погрешностей для косвенных измерений (включая функции нескольких переменных с частными производными); статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера, парный t-тест, одно- и двухфакторный дисперсионный анализ)</p> <p><b>Уметь:</b> вычислять погрешность косвенного измерения по заданным погрешностям величин; определять класс точности измерительного прибора; сравнивать средние значения и дисперсии двух выборок помощью t- и F-тестов; выполнять дисперсионный анализ в табличном процессоре и интерпретировать результаты</p>

#### 4 Содержание и структура дисциплины

Трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц, 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)					Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа		
			Лекции	Практические занятия				
				Всего	Из них практическая подготовка*	-	-	
1	Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей	7	2	2	2	2	2	Проверка отчетов по ПР, устный опрос
2	Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили	7	2	2	2	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос
3	Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. Проверка гипотез	7	2	2	2	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос
4	Метод главных компонент (МГК, PCA)	7	2	2	2	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос
5	Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК)	7	2	4	4	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос
6	Множественная линейная регрессия (МЛР, MLR). Отбор переменных.	7	2	2	2	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос

№ 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			КСР + консультации + КО	-			-
			Лекции	Практические занятия						
				Всего	Из них практическая подготовка*					
7	Метод проекций на латентные структуры (ПЛС, PLS)	7	2	2	2	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос		
8	Предварительная обработка спектральных (экспериментальных) данных	7	2	2	2	1	3	Проверка отчетов по ПР, устный опрос		
9	Методы многомерной классификации	7	2	0	0	2	6	Устный опрос, тест		
<b>Итого часов</b>			<b>18</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>11</b>	<b>29</b>	Зачет		

\*Примечание: КР – контрольная работа, ЛР – лабораторная работа, ПР – практическая работа \*в рабочей программе по дисциплине при выполнении лабораторных работ предусмотрена **практическая подготовка** в виде выполнения отдельных видов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью

#### 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.)		
7	Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей	Чтение лекционного материала по закону накопления погрешностей. Решение задач по теме	сентябрь	2	Практические задания по теме. УО	См. список рекомендуемой литературы (№1–3)

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
7	Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили	Повторение функций Excel/LibreOffice.Calc для статистических расчётов. Подготовка отчета по ПР «Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили»	сентябрь	2	Проверка отчета по работе. УО	См. список рекомендуемой литературы (№2,4,5,6)
7	Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. Проверка гипотез	Изучение теоретических основ F-теста и t-теста по конспекту лекции. Самостоятельное знакомство с надстройкой «Анализ данных» в Excel. Подготовка отчета по ПР «Сравнение выборок. Дисперсионный анализ»	сентябрь	3	Проверка отчета по работе. УО	См. список рекомендуемой литературы (№2,4,5,6)
7	Метод главных компонент (МГК, РСА)	Чтение главы по РСА в учебнике. Подготовка к выполнению РСА в Excel (ознакомление с алгоритмом через ковариационную матрицу). Подготовка отчета по ПР «Метод главных компонент»	октябрь	4	Проверка отчета по работе. УО	См. список рекомендуемой литературы (№4–6)
7	Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК)	Повторение матричной формы МНК (по конспекту лекции). Изучение функций ЛИНЕЙН и ТЕНДЕНЦИЯ в Excel. Подготовка отчета по ПР «Парная и полиномиальная регрессия»	октябрь	3	Проверка отчета по работе. УО	См. список рекомендуемой литературы (№4–6)

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
7	Множественная линейная регрессия (МЛР, MLR). Отбор переменных.	Чтение главы по Множественная линейная регрессия в учебнике. Ознакомление с методом пошагового отбора переменных. Подготовка к выполнению MLR на УФ-спектрах. Подготовка отчета по ПР «Множественная линейная регрессия»	ноябрь	3	Проверка отчета по работе. УО	См. список рекомендуемой литературы (№4–6)
7	Метод проекций на латентные структуры (ПЛС, PLS)	Чтение главы по PLS в учебнике, Изучение теоретических основ по конспекту лекций. Подготовка отчета по ПР «Метод проекций на латентные структуры»	ноябрь	3	Практические задания по теме. УО	См. список рекомендуемой литературы (№4–6)
7	Предварительная обработка спектральных (экспериментальных) данных	Изучение таблицы коэффициентов сглаживания Савицкого–Голея. Подготовка отчета по ПР «Предварительная обработка данных»	декабрь	3	Проверка отчета по работе. УО	См. список рекомендуемой литературы (№4–6)
7	Методы многомерной классификации	Чтение главы в учебнике, Изучение теоретических основ по конспекту лекций. Подготовка к итоговому тесту по дисциплине	декабрь	6	Тест	См. список рекомендуемой литературы (№4–6)
<b>Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)</b>				<b>29</b>		
<b>Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)</b>				<b>29</b>		

*Контактная работа может быть аудиторной, внеаудиторной, а также проводиться в электронной информационно-образовательной среде. Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплинам (модулям) включает в себя: занятия лекционного типа (лекции и иные учебные занятия, предусматривающие преимущественную передачу учебной информации педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, обучающимся), занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия), групповые консультации, индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях (в том числе индивидуальные консультации); иную контактную работу (при необходимости), предусматривающую групповую или индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, определяемую организацией самостоятельно.*

## 4.3 Содержание учебного материала

### 4.3.1 Содержание разделов и тем дисциплины

*Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей.* История развития хемометрики: С. Вольд, Б. Ковальский. Цели и задачи курса. Место хемометрики в системе химического образования. Понятие измерения, наблюдения, переменной. Типы данных по шкалам: номинативная, порядковая, интервальная, относительная. Физико-химические величины и их классификация. Прямые и косвенные измерения. Погрешности измерений: систематические, случайные, грубые. Запись результатов измерений и правила округления. Математические действия с приближёнными числами. Закон накопления погрешностей для косвенных измерений: общая формула через частные производные. Классы точности измерительных приборов.

*Статистическое описание данных. Нормальное распределение.* Квантили и квартили. Модальность и размерность данных. Представление данных в виде векторов и матриц. Нормальное распределение: функция плотности вероятности и функция распределения. Параметры нормального распределения ( $\mu$ ,  $\sigma$ ). Стандартизация данных ( $Z$ -преобразование). Понятие квантиля и процентиля. Квартили, децили. Межквартильный размах (IQR). Правило « $1,5 \times \text{IQR}$ » для обнаружения выбросов. Функция распределения Стьюдента ( $t$ -распределение). Доверительный интервал.

*Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. Проверка гипотез.* Проверка статистических гипотез: нулевая и альтернативная гипотезы. Ошибки первого и второго рода, мощность теста. Сравнение дисперсий двух выборок:  $F$ -тест (критерий Фишера). Сравнение средних двух выборок:  $t$ -тест Стьюдента (с равными и неравными дисперсиями). Парный  $t$ -тест для зависимых выборок. Проблема множественного сравнения. Однофакторный дисперсионный анализ (ANOVA): общая, факторная и остаточная дисперсии. Двухфакторный ANOVA (без взаимодействия и с взаимодействием). Апостериорный тест Тьюки (Tukey HSD).

*Метод главных компонент (МГК, PCA).* Отношения между переменными. Ковариация и корреляция (коэф. Пирсона, Корреляционная матрица и ее тепловая карта). Латентные переменные. Нахождение главных компонент (матрицы корреляции, алгоритм NIPALS). Анализ графиков счетов и нагрузок. Объяснённая и остаточная дисперсия. Расстояния и структуры данных

*Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК).* Отбор переменных. Основные понятия регрессионного анализа: зависимая и независимая переменные. Линейная модель  $y = a + bx$ . Метод наименьших квадратов (МНК): вывод

формул, матричная форма записи  $b = (X^T X)^{-1} X^T y$ . Стандартные отклонения коэффициентов регрессии. Коэффициент детерминации  $R^2$ . Полиномиальная регрессия ( $y = a + bx + cx^2$ ). Линеаризация нелинейных зависимостей (логарифмирование, обратные величины)

*Множественная линейная регрессия (МЛР, MLR)*. Матричная форма множественной линейной регрессии:  $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots$ . Проблема мультиколлинеарности. Регрессия по главным компонентам (PCR) как способ борьбы с мультиколлинеарностью. Методы отбора переменных: равномерное прореживание каналов; пошаговый отбор по максимуму  $R^2$  или минимуму стандартной ошибки регрессии  $s_e$ . Кросс-валидация (скользящий контроль) для выбора оптимального числа предикторов.

*Метод проекций на латентные структуры (ПЛС, PLS)*. Отличие PLS от PCA и PCR. Математическая основа PLS1 и PLS2. Алгоритм NIPALS для PLS: весовые векторы  $w$  и  $c$ , счёт  $t$ , нагрузки  $p$  и  $q$ . Дефляция матриц  $X$  и  $Y$ . Выбор оптимального числа латентных переменных по минимуму RMSE кросс-валидации. Интерпретация графиков нагрузок для  $X$  и  $Y$  блоков. Применение PLS для количественного анализа спектральных данных

*Предварительная обработка спектральных (экспериментальных) данных*. Искажения в реальных данных: формы пиков (Гауссиана, Лоренциана, Фойгт), цифровое разрешение, типы шума (белый, дрейф, импульсный). Нормирование, центрирование, автошкалирование: когда и зачем. Логарифмирование и другие преобразования. Сглаживание: метод скользящего среднего; полиномиальное сглаживание по Савицкому–Голею (коэффициенты, выбор окна). Коррекция базовой линии. Дискретное преобразование Фурье –ознакомительно.

*Методы многомерной классификации*. Геометрическое представление данных. Оценка качества классификации. Виды расстояний (Евклидово, Манхэттенское, Махаланобиса, Коэффициент корреляции). Агломеративная кластеризация. Кластеризация с помощью метода  $k$ -средних/медиадов. Метод ближайших соседей (kNN). Линейный и квадратичный дискриминантный анализ. Дискриминантный анализ на основе ПЛС (PLS-DA)

### 4.3.2 Перечень практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров и практических или лабораторных работ	Трудоемкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции
			Всего	Из них практическая подготовка		
1	2	3	4	5	6	7
1	1	Семинар: решение задач по теме «Погрешности измерений»	2	2	Практические задания по теме, устный опрос	ПК-5
2	2	Практическая работа «Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили»	2	2	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-5
3	3	Практическая работа «Сравнение выборок. Дисперсионный анализ»	2	2	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-5
4	4	Практическая работа «Метод главных компонент»	2	2	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-4
5	5	Практическая работа «Парная и полиномиальная регрессия»	4	4	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-4
6	6	Практическая работа «Множественная линейная регрессия»	2	2	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-4
7	7	Практическая работа «Метод проекций на латентные структуры»	2	2	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-4
8	8	Практическая работа «Предварительная обработка данных»	2	2	Проверка отчета по ПР, устный опрос	ПК-4

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

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	Код ИДК
1	Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля).	ПК-5	ИДК <sub>ПК-5.3</sub>
2	Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-5	ИДК <sub>ПК-5.3</sub>
3	Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. Проверка гипотез	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-5	ИДК <sub>ПК-5.3</sub>

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	Код ИДК
4	Метод главных компонент (МГК, PCA)	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-4	ИДК <sub>ПК-4.2</sub>
5	Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК)	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-4	ИДК <sub>ПК-4.2</sub>
6	Множественная линейная регрессия (МЛР, MLR). Отбор переменных.	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-4	ИДК <sub>ПК-4.2</sub>
7	Метод проекций на латентные структуры (ПЛС, PLS)	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-4	ИДК <sub>ПК-4.2</sub>
8	Предварительная обработка спектральных (экспериментальных) данных	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля). Написание отчетов по ПР, выполнение практических заданий (см. План СРС).	ПК-4	ИДК <sub>ПК-4.2</sub>
9	Методы многомерной классификации	Подготовка к устному опросу (см. вопросы текущего контроля) и итоговому тестированию.	ПК-5	ИДК <sub>ПК-5.3</sub>

#### 4.3.4 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с подготовкой отчетов по выполненным практическим работам, закреплением теоретического материала в виде решения задач, подготовки к устному опросу, итоговому тестированию, проводится во внеаудиторное время.

##### Требования к оформлению отчёта по практической работе

1. Отчёт выполняется в электронной форме в среде табличного процессора MS Excel или LibreOffice Calc.

2. Файл отчёта должен содержать отдельные листы (или чётко разделённые смысловые блоки): титульный лист, постановка задачи, исходные данные, расчёты (с формулами), графики, выводы.
3. Все расчётные значения должны быть получены с использованием встроенных функций табличного процессора (вычисления «вручную» с последующим вводом чисел не допускаются).
4. Графики и диаграммы должны содержать: название, подписанные оси с указанием размерностей, легенду (при наличии нескольких рядов данных).
5. Текстовые выводы по итогам работы формулируются в ячейках или текстовых блоках; вывод должен содержать интерпретацию полученных результатов и (при необходимости) ссылки на численные критерии качества ( $R^2$ , RMSE, p-value и т.п.).
6. Файл отчёта сохраняется в формате .xlsx (или .ods) и именуется по шаблону: Фамилия\_ИО\_НомерПЗ\_Хемометрика.xlsx.
7. Отчёт считается сданным, если файл передан преподавателю посредством ЭИОС не позднее следующего практического занятия (или в срок, установленный календарным графиком).
8. Защита отчёта проводится в форме устного собеседования (по требованию преподавателя) либо проверяется только по содержимому файла.

Методические рекомендации по выполнению практически работ и обработке (экспериментальных) данных по каждой практической работе описаны в методических рекомендациях, подготовленных преподавателями кафедры и размещенный в соответствующем разделе ЭИОС (Хемометрика).

Примеры решения некоторых типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях и информационных ресурсах:

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. <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.

#### **4.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)**

*Не предусмотрено.*

## 5 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

### 5.1 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 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
- 3 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
- 4 Сливкин, А. И. Хемометрика и фармацевтический анализ : учебно-методическое пособие / А. И. Сливкин, П. М. Карлов. — Воронеж : ВГУ, 2020. — 79 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/433160> (дата обращения: 30.04.2026). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

### 5.2 Дополнительная литература

- 5 Кучерявский С., Панчук В., Монахова Ю., Кирсанов Д. Введение в хемометрику [Электронный ресурс] / <https://www.chemometrics.ru/books/%D0%92%D0%B2%D0%B5%D0%B4%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5-%D0%B2-%D1%85%D0%B5%D0%BC%D0%BE%D0%BC%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%B8%D0%BA%D1%83.pdf> – . 2025. - 372 с. - Неогр. доступ.
- 6 Шараф, М. А. Хемометрика / М. А. Шараф, Д. Л. Иллмэн, Б. Р. Ковальски ; пер. с англ. А. Н. Мариничева, А. К. Чарыкова ; под ред. И. А. Ибрагимова, А. К. Чарыкова. - Ленинград : Химия. Ленингр. отд-ние, 1989. - 269 с. : граф., ил., схемы, табл. ; 22 см. - Библиогр.: с. 262-269. - Пер. изд. : Chemometrics / A. Sharaf

- Muhammad, L. Ilman Deboran, R. Kowalski Bruce. - New York, 1986. - ISBN 5-7245-0361-1 : 2.10 p. - Текст : непосредственный.
- 7 Шачнева, Е.Ю.. Хемометрика. Базовые понятия : учеб.-метод. пособие / Е. Ю. Шачнева. - СПб. : Лань, 2017. - 157 с. : ил. ; 22 см. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Библиогр.: с. 157. - ISBN 978-5-8114-2301-9 : 699.60 p. - Текст : непосредственный.
  - 8 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.
  - 9 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.
  - 10 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.
  - 11 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
  - 12 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 : 9 экз.

*Сверено с АБ ИГУ*



### 5.3 Периодические издания (при необходимости)

нет необходимости;

### 5.4 Список авторских методических разработок

В ЭИОС ИГУ размещены методические указания к лабораторным работам:

- 13 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 : 9 экз.
- 14 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
- 15 <https://educa.isu.ru/course/view.php?id=46391>

### 5.5 Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- 16 <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.
- 17 Данный интернет источник – это ссылка на учебник в электронном виде на английском языке: Deming S. N. et al. Chemometrics: a textbook. – Elsevier, 1988.: [https://books.google.ru/books?hl=ru&lr=&id=G8JMac7OCtAC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Chemometrics+massart&ots=kFHkaOz71W&sig=RNivQBy54k4gcBFOKH-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=RNivQBy54k4gcBFOKH-cBLVpw24&redir_esc=y#v=onepage&q=Chemometrics%20massart&f=false)

## 6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

### 6.1 Учебно-лабораторное оборудование:

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

- компьютерный класс химического факультета оборудован 12 ПК с установленным пакетом MS Office. Имеется локальная сеть. Есть доска.

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 402, 426, 303); ауд. 5, 6, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами

## **6.2 Программное обеспечение**

Лицензируемое ПО:

- 1 Операционная система Windows-7, лицензия принадлежит ИГУ;
- 2 Пакет MS Office – 2016, лицензия принадлежит ИГУ;
- 3 Свободно распространяемые программы:
- 4 Google Chrome — браузер, разрабатываемый компанией Google
- 5 Libre Office – офисный пакет, разрабатываемый компанией The Document Foundation

## **6.3 Технические и электронные средства**

—

## **7 Образовательные технологии**

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

Активные формы обучения. На практических занятиях, которые составляют около половины от контактной работы, происходит совместное обсуждение и решение типовых задач, а также задач химической направленности. Такой вид организации обучения, с элементами интерактивных форм обучения, способствует приобретению навыков самостоятельного планирования экспериментов и оценки погрешности измерений. Выполнение самостоятельных заданий, в том числе 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 хеометрики проводится в виде выполнения расчетных задач.

## **8 Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации**

### **8.1 Общие сведения**

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: ПК-4, ПК-5.

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов представлены в таблице:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Выполнение практических работ. Отчет по ПР. Собеседование в форме устного опроса	Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. Проверка гипотез Метод главных компонент (МГК, РСА) Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК) Множественная линейная регрессия (МЛР, MLR). Отбор переменных. Метод проекций на латентные структуры (ПЛС, PLS) Предварительная обработка спектральных (экспериментальных) данных	ПК-4, ПК-5
2	Собеседование в форме устного опроса	Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей	ПК-5
3	Собеседование в форме устного опроса. Тестирование	Методы многомерной классификации	ПК-4, ПК-5

Варианты тестирования представлены в ЭИОС ИГУ:  
<https://educa.isu.ru/course/view.php?id=46391Libre%20Office>

## 8.2 Демонстрационные варианты практических заданий

Демонстрационный варианты заданий

1. Вычислите массовые доли элементов в борной кислоте и определите абсолютные погрешности этих массовых долей, если атомные массы:  $Ar(B) 10,80 \pm 0,12$  а.е.м.;  $Ar(H) = 1,00 \pm 0,01$  а.е.м;  $Ar(O) = 16,00 \pm 0,15$  а.е.м.

2. Вычислите химическое количество вещества сульфида серебра  $\text{Ag}_2\text{S}$  массой  $34,72 \pm 0,22$  г. Определите погрешности для количества вещества (относительную и абсолютную), если относительная погрешность атомной массы серы составляет 1,8%, а серебра — 1,3%.

3. Вычислите массу оксида бария и объем газа, которые образовались в результате разложения карбоната бария массой  $118,4 \pm 1,2$  г. Определите погрешности рассчитанных величин, если абсолютные погрешности атомных масс  $\approx 0,2$  а.е.м.

4. Определите объем кислорода (и погрешности), который потребуется для полного сжигания  $61 \pm 1$  мл изопропанола. Примите, что абсолютные погрешности атомных масс  $\approx 0,2$  а.е.м., молярный объем газа при н.у. — константа, а плотность изопропанола равна  $0,785 \pm 0,011$  г/мл.

5. Рассчитайте  $y = 2/x^2 + 5p + q^2/4 - 3z$  и  $\epsilon_y$ , при  $x = 2$ ;  $p = 0,2$ ;  $q = 4$ ;  $z = 0,4$ , если  $\epsilon_x = 0,1$ ;  $\epsilon_p = 0,01$ ;  $\epsilon_q = 0,3$ ;  $\epsilon_z = 0,08$ .

6. При калибровке вольтметра с максимальным пределом измерения 40 В получены следующие результаты измерения ( $U_{\text{в}}$ ) при различных значениях эталонного электрического напряжения ( $U_{\text{эт}}$ ). Определите класс точности прибора, если:

$U_{\text{эт}}, \text{В}$	4,2	7,8	10,0	16,4	20,5	33,3
$U_{\text{в}}, \text{В}$	4,4	7,6	9,9	15,9	21,0	33,6

7. На практических занятиях студенты некоторого курса ИГУ определяли температуру кипения циклогексилового спирта. В таблице ниже приведена случайная выборка некоторых полученных результатов:

Температура кипения, °С	161,0	158,6	162,3	161,5	159,7	160,8	160,1	161,3	159,1
Сколько раз встречается в выборке	13	7	9	11	9	20	29	25	7

Определите:

- 1) с вероятностью 98% определить доверительный интервал средней величины температуры во всей генеральной совокупности.
- 2) с вероятностью 90% определите доверительный интервал средней величины температуры во всей генеральной совокупности.
- 3) на сколько доверительный интервал во втором случае будет отличаться от интервала в первом.

Проверьте результат расчета с помощью пакета анализа данных LibreOffice Calc или MS Excel.

8. Обычно зависимость изобарной теплоемкости от температуры описывают рядами типа  $c_{p,T}^0 = a + bT + cT^2$  или  $c_{p,T}^0 = a + bT + c'T^{-2}$ . В таблице представлены данные о зависимости теплоемкости углеродного материала от температуры. Методом наименьших квадратов выполните расчет регрессионных коэффициентов эмпирических уравнений двух типов:  $c_{p,T}^0 = a + bT + cT^2$ ,  $c_{p,T}^0 = a + bT + c'T^{-2}$  и  $c_{p,T}^0 = a + bT + cT^2 + c'T^{-2}$ . Выберите наилучшую из предложенных моделей и приведите ее итоговое уравнение, а также доверительные интервалы (на уровне  $\alpha = 10\%$ ) для регрессионных коэффициентов. Обоснуйте выбор модели, в том числе количественными показателями.

9. В результате серии экспериментальных измерений были получены данные УФ-спектроскопии для серии растворов ароматических углеводородов, всего было приготовлено 25 образцов таких растворов. Выберите около 80% данных для построения градуировочной зависимости, а остальные 20% оставьте для валидации. *Задание:* постройте УФ-спектры 5-7 смесей из градуировочного и валидационного наборов. Подпишите оси абсцисс и ординат, укажите в подписях размерности. Так как для построения надежной зависимости одной длины волны часто оказывается недостаточно, то можно построить зависимость по различным длинам волн. Определите параметры МЛР для каждого из трех веществ и определите оптимальное число длин волн, необходимое для построения модели, опишите причину выбора. Для смесей постройте графики типа  $\bar{y} - y$ , нанесите на них разными цветами точки обучающих и валидационных наборов данных.

### 8.3 Вопросы для устного опроса

#### . Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей

1. Что такое хемометрика и каковы её основные задачи в химии?
2. Перечислите типы данных по измерительным шкалам (номинативная, порядковая, интервальная, относительная). Приведите примеры из химической практики.
3. Чем отличаются прямые и косвенные измерения?
4. Назовите виды погрешностей измерений (систематические, случайные, грубые). Приведите примеры.
5. Сформулируйте закон накопления погрешностей для косвенных измерений.
6. Как правильно округлить результат измерения, если известна его абсолютная погрешность?
7. Что такое класс точности измерительного прибора и как его определить?
8. Почему при записи результата измерения число значащих цифр согласуется с погрешностью?

#### Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили

9. Что такое нормальное распределение? Какими параметрами оно описывается?
10. Что такое стандартизация данных (Z-преобразование) и зачем она нужна?
11. Дайте определение квантиля и процентиля. Приведите примеры.

12. Что такое квартили? Как рассчитать межквартильный размах (IQR)?
13. Как с помощью правила « $1,5 \times \text{IQR}$ » обнаружить выбросы в выборке?
14. Что такое доверительный интервал? Как он связан с доверительной вероятностью?
15. Для чего используется t-распределение Стьюдента?
16. Что показывает box-plot (ящик с усами)? Как интерпретировать его элементы?

### **Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. F-тест, t-тест**

17. Что такое нулевая и альтернативная гипотезы в статистической проверке?
18. Что такое ошибка первого рода и ошибка второго рода? Чем отличается мощность теста?
19. Для чего применяется F-тест (критерий Фишера)?
20. В каких случаях используется t-тест с равными дисперсиями, а в каких — с неравными?
21. Чем отличается парный t-тест от обычного двухвыборочного t-теста?
22. В чём суть проблемы множественного сравнения? Почему нельзя просто использовать много t-тестов?
23. Что такое однофакторный дисперсионный анализ (ANOVA)? Какие дисперсии сравниваются?
24. Что даёт апостериорный тест Тьюки после ANOVA?
25. Как интерпретировать результаты двухфакторного ANOVA? Что означает наличие взаимодействия факторов?

### **Метод главных компонент (PCA)**

26. Что такое ковариация и коэффициент корреляции Пирсона? В чём разница?
27. Что такое латентная (скрытая) переменная в контексте PCA?
28. Какова цель метода главных компонент?
29. Что показывают графики счетов (scores plot) и графики нагрузок (loadings plot)?
30. Как определить, сколько главных компонент стоит оставить для интерпретации?
31. Что такое Scree-plot (график каменистой осыпи) и как его читать?
32. Что такое Q-остатки и расстояние до модели ( $T^2$ ) в PCA?
33. Чем отличается PCA на ковариационной матрице от PCA на корреляционной матрице?
34. Как по графику нагрузок определить, какие исходные переменные сильно коррелируют между собой?

### **Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК)**

35. Чем отличается регрессионный анализ от корреляционного?
36. Сформулируйте суть метода наименьших квадратов (МНК).
37. Запишите матричную формулу для нахождения коэффициентов линейной регрессии.
38. Что означает коэффициент детерминации  $R^2$  и какие у него пределы?
39. Как интерпретировать график остатков (гомоскедастичность, нормальность)?
40. Когда имеет смысл использовать полиномиальную регрессию вместо линейной?
41. Как рассчитать предел обнаружения и предел количественного определения по градуировочному графику?

42. Что такое линеаризация нелинейной зависимости? Приведите пример.
43. Как построить доверительный интервал для предсказанного значения концентрации?

### **Множественная линейная регрессия (MLR). Отбор переменных**

44. В чём отличие множественной линейной регрессии от парной?
45. Что такое мультиколлинеарность и чем она опасна для MLR?
46. Для чего нужен VIF (фактор инфляции дисперсии)? При каком значении VIF мультиколлинеарность считается высокой?
47. В чём идея регрессии по главным компонентам (PCR)?
48. Какие методы отбора переменных в MLR вы знаете? В чём разница между «равномерным прореживанием» и «пошаговым отбором»?
49. Что такое кросс-валидация? Зачем она нужна при выборе числа предикторов?
50. Как оценить качество модели MLR на тестовой выборке?

### **Метод проекций на латентные структуры (PLS)**

51. Чем принципиально отличается PLS от PCA?
52. В чём отличие PLS от PCR (регрессии по главным компонентам)?
53. Как выбирается оптимальное число латентных переменных в PLS-модели?
54. Что показывают графики нагрузок для X- и Y-блоков в PLS?
55. Для решения каких химических задач PLS применяется чаще всего?

### **Предварительная обработка аналитических данных**

56. Какие основные типы шума встречаются в аналитических сигналах (белый, дрейф, импульсный)?
57. Чем отличается сглаживание методом скользящего среднего от сглаживания по Савицкому–Голею?
58. В чём преимущество сглаживания по Савицкому–Голею перед простым скользящим средним?
59. Как выбрать ширину окна сглаживания? Что происходит при слишком узком и слишком широком окне?
60. Для чего нужна коррекция базовой линии? Приведите примеры из химической практики (хроматография, спектроскопия).
61. В чём суть метода коррекции базовой линии с помощью асимметричных наименьших квадратов (airPLS)?
62. Что такое центрирование и автошкалирование данных? Когда какой метод применяется?
63. Зачем может потребоваться логарифмическое или степенное преобразование данных?
64. Что такое бакетинг (binning) и для каких целей он используется?
65. Как дискретное преобразование Фурье (DFT) помогает в обработке аналитических сигналов?

### **Методы многомерной классификации**

66. Чем отличается классификация с обучением (supervised) от классификации без обучения (unsupervised)?
67. Какие виды расстояний между объектами используются в многомерной классификации? Назовите не менее трёх.

68. Что такое Евклидово расстояние и когда его применяют?
69. Что такое расстояние Махаланобиса и в чём его преимущество перед Евклидовым?
70. В чём суть агломеративной иерархической кластеризации?
71. Что такое дендрограмма и как её интерпретировать?
72. Чем отличаются методы связей (одиночной, полной, Варда) в иерархической кластеризации?
73. Как работает метод k-средних (k-means)?
74. Как работает метод k ближайших соседей (kNN)? От чего зависит выбор параметра k?
75. В чём отличие линейного (LDA) и квадратичного (QDA) дискриминантного анализа?

Промежуточная аттестация (*зачет*) проводится с использованием бально-рейтинговой системы оценивания результатов обучения.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЗАЧЕТУ (ТЕСТУ,  
СОБЕСЕДОВАНИЮ)

**Часть А. Базовые понятия (вопросы 1–10)**

1. Дайте определение хемометрики. Какие задачи решает хемометрика в аналитической химии?
2. Перечислите типы данных по измерительным шкалам. Приведите примеры из химической практики.
3. В чём различие между систематической и случайной погрешностью?
4. Сформулируйте закон накопления погрешностей для косвенных измерений.
5. Что такое нормальное распределение? Какими параметрами оно описывается?
6. Что такое квантиль и квартиль? Как рассчитать межквартильный размах (IQR)?
7. Для чего нужен Q-Q plot? Как интерпретировать его вид?
8. Что такое нулевая гипотеза? Что означают ошибки первого и второго рода?
9. В каких случаях применяется t-тест Стьюдента, а в каких — F-тест Фишера?
10. Что такое дисперсионный анализ (ANOVA) и когда он используется?

**Часть Б. Метод главных компонент (вопросы 11–15)**

11. Что такое метод главных компонент (PCA)? Какова его основная цель?
12. Что показывают графики счетов (scores) и нагрузок (loadings) в PCA?
13. Как определить, сколько главных компонент следует оставить для интерпретации?
14. В чём различие PCA на ковариационной и корреляционной матрицах?

**Часть В. Регрессионные методы (вопросы 16–22)**

16. В чём суть метода наименьших квадратов (МНК)?
17. Запишите матричную формулу для нахождения коэффициентов линейной регрессии.
18. Что означает коэффициент детерминации  $R^2$ ? Каковы его пределы?
19. Как рассчитать предел обнаружения (LOD) и предел количественного определения (LOQ) по градуировочному графику?
20. Что такое мультиколлинеарность и чем она опасна для множественной линейной регрессии?
21. Чем регрессия по главным компонентам (PCR) отличается от обычной MLR?
22. В чём отличие PLS от PCA и PCR?

**Часть Г. Предобработка и классификация (вопросы 23–30)**

23. В чём разница между сглаживанием скользящим средним и сглаживанием по Савицкому–Голею?
24. Для чего нужна коррекция базовой линии? Назовите один из методов.
25. Что такое центрирование и автошкалирование данных? Когда их применяют?

26. Чем отличается классификация с обучением (supervised) от классификации без обучения (unsupervised)?
27. Как работает метод k-ближайших соседей (kNN)? От чего зависит выбор параметра k?
28. Что такое матрица ошибок (confusion matrix)? Какие показатели из неё можно рассчитать?
29. Что такое ROC-кривая и для чего она используется?
30. Как работает метод k-средних (k-means) и как выбрать число кластеров?

#### 8.4 Планируемые результаты обучения для формирования компетенций

Индикаторы достижения компетенции и их код	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
ИДК <sub>ПК-4.2</sub> . Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	Знает: основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»	Устный опрос, тестирование. Отчеты по практическим работам.
	Умеет: строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, множественную, полиномиальную) и интерпретировать их параметры; выполнять снижение размерности данных с помощью PCA; применять регрессию (в упрощённом виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным	Собеседование по проделанным практическим работам. Отчеты по практическим работам.

Индикаторы достижения компетенции и их код	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
	<p>данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке</p> <p>Владеет: навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной линейной регрессии; методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации <math>R^2</math>, среднеквадратичная ошибка</p>	<p>Собеседование по проделанным практическим работам. Отчеты по практическим работам.</p>
<p>ИДК<sub>ПК-5.3</sub>. Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования</p>	<p>Знает: классификацию погрешностей измерений; закон накопления погрешностей для косвенных измерений (включая функции нескольких переменных с частными производными); статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера, парный t-тест, одно- и двухфакторный дисперсионный анализ)</p> <p>Владеет: методами расчёта описательных статистик (среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал) в табличном процессоре; навыками проверки нормальности распределения (Q-Q график) и обнаружения выбросов; способностью формулировать заключение о статистической значимости влияния исследуемого фактора на основе результатов парного t-теста или ANOVA</p>	<p>Устный опрос, тестирование. Отчеты по практическим работам.</p> <p>Собеседование по проделанным практическим работам. Отчеты по практическим работам.</p>

Индикаторы достижения компетенции и их код	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
	<p>Умеет: вычислять погрешность косвенного измерения по заданным погрешностям величин;  определять класс точности измерительного прибора;  сравнивать средние значения и дисперсии двух выборок помощью t- и F-тестов;  выполнять дисперсионный анализ в табличном процессоре и интерпретировать результаты</p>	<p>Собеседование по проделанным практическим работам.  Отчеты по практическим работам.</p>

### 8.5 Программа оценивания контролируемых компетенций

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Планируемые результаты обучения <sup>2</sup>	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС	
					ТК <sup>3</sup>	ПА
1	2	3	4	5	6	7
Введение. Типы данных. Основы теории погрешностей	ИДКПК-5.3. Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования	<b>Знать:</b> классификацию погрешностей измерений; закон накопления погрешностей для косвенных измерений (включая функции нескольких переменных с частными производными); статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера, парный t-тест, одно- и двухфакторный дисперсионный анализ) <b>Уметь:</b> вычислять погрешность косвенного измерения по заданным погрешностям величин; определять класс точности измерительного прибора; сравнивать средние значения и дисперсии двух выборок помощью t- и F-тестов; выполнять дисперсионный анализ в табличном процессоре и интерпретировать результаты	<b>Знает:</b> классификацию погрешностей измерений; закон накопления погрешностей для косвенных измерений (включая функции нескольких переменных с частными производными); <b>Уметь:</b> вычислять погрешность косвенного измерения по заданным погрешностям величин; определять класс точности измерительного прибора;	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса», Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования.	УО, Т	зачёт
Статистическое описание данных. Нормальное распределение. Квантили и квартили	ИДКПК-5.3. Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования	<b>Владеть:</b> методами расчёта описательных статистик (среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал) в табличном процессоре; навыками проверки нормальности распределения (Q-Q график) и обнаружения выбросов; способностью формулировать заключение о статистической значимости влияния исследуемого фактора на основе результатов парного t-теста или ANOVA <b>Знать:</b> классификацию погрешностей измерений; закон накопления погрешностей для косвенных измерений (включая функции нескольких переменных с частными производными); статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера, парный t-тест, одно- и двухфакторный дисперсионный анализ)	<b>Владеет:</b> методами расчёта описательных статистик (среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал) в табличном процессоре; навыками проверки нормальности распределения (Q-Q график) и обнаружения выбросов; <b>Знает:</b> статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера,	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса», Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР	

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Планируемые результаты обучения <sup>2</sup>	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС	
					ТК <sup>3</sup>	ПА
1	2	3	4	5	6	7
Сравнение выборок. Дисперсионный анализ. Проверка гипотез	ИДК <sub>ПК-5.3</sub> . Способен оценить погрешности измеряемых характеристик веществ и материалов, источники ошибок при использовании выбранного метода исследования	<b>Владеть:</b> методами расчёта описательных статистик (среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительный интервал) в табличном процессоре; навыками проверки нормальности распределения (Q-Q график) и обнаружения выбросов; способностью формулировать заключение о статистической значимости влияния исследуемого фактора на основе результатов парного t-теста или ANOVA <b>Знать:</b> классификацию погрешностей измерений; закон накопления погрешностей для косвенных измерений (включая функции нескольких переменных с частными производными); статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера, парный t-тест, одно- и двухфакторный дисперсионный анализ) <b>Уметь:</b> вычислять погрешность косвенного измерения по заданным погрешностям величин; определять класс точности измерительного прибора; сравнивать средние значения и дисперсии двух выборок помощью t- и F-тестов; выполнять дисперсионный анализ в табличном процессоре и интерпретировать результаты	<b>Владеет:</b> способностью формулировать заключение о статистической значимости влияния исследуемого фактора на основе результатов парного t-теста или ANOVA <b>Знает:</b> статистические критерии проверки гипотез (t-критерий Стьюдента, F-критерий Фишера, парный t-тест, одно- и двухфакторный дисперсионный анализ) <b>Умеет:</b> сравнивать средние значения и дисперсии двух выборок помощью t- и F-тестов; выполнять дисперсионный анализ в табличном процессоре и интерпретировать результаты	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР УО, Т., ПР	
Метод главных компонент (МГК, РСА)	ИДК <sub>ПК-4.2</sub> . Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов:	<b>Знает:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод главных компонент (PCA), возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, надстройку «Анализ данных»; <b>Владеет:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров;	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР	

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Планируемые результаты обучения <sup>2</sup>	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС	
					ТК <sup>3</sup>	ПА
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>
		матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»; <b>Уметь:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, множественную, полиномиальную) и интерпретировать их параметры; выполнять снижение размерности данных с помощью PCA; применять регрессию (в упрощённом виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке <b>Владеть:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной линейной регрессии; методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации R <sup>2</sup> , среднеквадратичная ошибка).				
Парная и полиномиальная регрессия. Метод наименьших квадратов (МНК)	ИДКПК-4.2. Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»; <b>Уметь:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, , полиномиальную) и интерпретировать их параметры;	<b>Знает:</b> метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»; <b>Умеет:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, , полиномиальную) и интерпретировать их параметры; <b>Владеет:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР	

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Планируемые результаты обучения <sup>2</sup>	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС	
					ТК <sup>3</sup>	ПА
1	2	3	4	5	6	7
		<p>множественную, полиномиальную) и интерпретировать их параметры; выполнять снижение размерности данных с помощью PCA; применять регрессию (в упрощённом виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке</p> <p><b>Владеть:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной линейной регрессии; методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации R<sup>2</sup>, среднеквадратичная ошибка).</p>	ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ) и надстройкой «Анализ данных»			
Множественная линейная регрессия (MLP, MLR). Отбор переменных.	ИДК <sub>ПК-4.2</sub> . Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<p><b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»;</p> <p><b>Уметь:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, множественную, полиномиальную) и интерпретировать их параметры; выполнять снижение размерности данных с помощью PCA; применять регрессию (в упрощённом</p>	<p><b>Знает:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, регрессию по главным компонентам (PCR), возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»;</p> <p><b>Умеет:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (множественную) и интерпретировать их параметры; для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке, выполнять</p>	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР	

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Планируемые результаты обучения <sup>2</sup>	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС	
					ТК <sup>3</sup>	ПА
1	2	3	4	5	6	7
		<p>виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке</p> <p><b>Владеть:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной линейной регрессии; методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации <math>R^2</math>, среднеквадратичная ошибка).</p>	<p>снижение размерности данных с помощью PCA;</p> <p><b>Владеет:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной линейной регрессии; методами и оценки качества модели (коэффициент детерминации <math>R^2</math>, среднеквадратичная ошибка).</p>			
Метод проекций на латентные структуры (ПЛС, PLS)	ИДКПК-4.2. Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<p><b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»;</p> <p><b>Уметь:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели (парную, множественную, полиномиальную) и интерпретировать их параметры; выполнять снижение размерности данных с помощью PCA; применять регрессию (в упрощённом виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке</p>	<p><b>Знает:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод проекций на латентные структуры (PLS); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, надстройку «Анализ данных»;</p> <p><b>Умеет:</b> строить в табличном процессоре регрессионные модели и интерпретировать их параметры; применять регрессию (в упрощённом виде, в том числе PLS) для построения калибровочных моделей по спектральным данным и оценивать качество прогноза на тестовой выборке</p> <p><b>Владеет:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и надстройкой «Анализ данных»;</p>	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР	

Тема или раздел дисциплины <sup>1</sup>	Код и наименование индикатора достижения компетенций	Планируемые результаты обучения <sup>2</sup>	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС	
					ТК <sup>3</sup>	ПА
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>
		<b>Владеть:</b> навыками работы с функциями табличных процессоров (в частности ЛИНЕЙН, ТЕНДЕНЦИЯ, СМЕЩ, КОРРЕЛ) и настройкой «Анализ данных»; приёмами пошагового отбора переменных и равномерного прореживания каналов при построении множественной линейной регрессии; методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации R <sup>2</sup> , среднеквадратичная ошибка).	методами предобработки данных (автошкалирование, центрирование, сглаживание) и оценки качества модели (коэффициент детерминации R <sup>2</sup> , среднеквадратичная ошибка).			
Предварительная обработка спектральных (экспериментальных) данных	ИДКПК-4.2. Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, настройку «Анализ данных»;	<b>Знает:</b> основные алгоритмы обработки данных: предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии);	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования. Представил отчеты по практическим работам	УО, Т., ПР	
Методы многомерной классификации	ИДКПК-4.2. Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение	<b>Знать:</b> основные алгоритмы обработки данных: метод наименьших квадратов и его применение в регрессионном анализе, метод главных компонент (PCA), регрессию по главным компонентам (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS); методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA) и предобработки сигналов (сглаживание Савицкого–Голея, коррекция базовой линии); возможности табличных процессоров для выполнения хемометрических расчётов: матричные операции, регрессионные функции, настройку «Анализ данных»;	<b>Знает:</b> основные алгоритмы обработки данных: методы классификации (k ближайших соседей, линейный дискриминантный анализ, PLS-DA);	Владеет материалом, представленным в разделе 8, пункт «Вопросы для устного опроса». Правильно ответил на соответствующие вопросы теста/собеседования.	УО, Т	

<sup>1</sup>В соответствии с подразделом 4.1 <sup>2</sup>Представлено в обобщенном виде в соответствии с таблицей раздела 3 <sup>3</sup>УО – устный опрос, Кл – коллоквиум, Т – тест, ПР – практическое задание.

## 8.6 Критерии оценивания результатов обучения

В соответствии с бально-рейтинговой системой ИГУ для получения зачета по дисциплине «Хеометрика» студенту необходимо набрать не менее 60 баллов.

Обязательным является выполнение студентом **7 компьютерных практических работ** по данной дисциплине, подготовка и сдача отчётов по указанным работам, выполнение практических заданий в виде контрольной работы и тестирования, а также участие в устных опросах на практических занятиях.

При выполнении компьютерных практических работ оценивается: правильность выполнения расчётов с использованием встроенных функций табличного процессора, оформление и содержание отчёта (включая наличие всех необходимых листов в файле Excel/Calc: титульный лист, постановка задачи, исходные данные, расчёты с формулами, графики, выводы), умение корректно визуализировать данные (подписанные оси, названия графиков, легенды), способность интерпретировать полученные результаты и формулировать выводы, а также устная защита отчёта (ответы на 1–2 вопроса преподавателя).

**Отчёт по каждой компьютерной практической работе оценивается в 7 баллов.**

Критерии оценивания отчёта следующие:

- а) Файл отчёта сдан вовремя (до следующего практического занятия) — 1 балл.
- б) Правильность расчётов (использование формул, отсутствие «вбитых» вручную чисел, корректные ссылки на ячейки) — 2 балла.
- в) Наличие и корректное оформление графиков (подписанные оси с размерностями, название, легенда при необходимости) — 1 балл.
- г) Текстовый вывод по результатам работы (содержательный, отражающий суть полученных результатов и их интерпретацию) — 1 балл.
- д) Устная защита отчёта (ответ на 1–2 вопроса преподавателя по методике выполнения работы и интерпретации результатов) — 1 балл.

**Шкала снижения баллов:** при сдаче отчёта с опозданием до одной недели оценка снижается на 1 балл; при сдаче с опозданием более одной недели отчёт не принимается (0 баллов); после двукратного возвращения отчёта на доработку за каждое последующее возвращение оценка снижается на 1 балл.

**Семинар по расчёту погрешностей** (решение задач на закон накопления погрешностей и определение класса точности прибора) оформляется в виде отдельного отчета и оценивается в 6 баллов по следующим критериям: решены все 5 задач на закон накопления погрешностей, определён класс точности прибора, вывод по результатам.

**Устные опросы** проводятся в начале каждого практического занятия (кроме первого и итогового) по материалу предыдущей лекции. Каждый опрос оценивается в 1–2 балла: полный уверенный ответ — 2 балла, частичный ответ (одна неточность) — 1 балл, неверный ответ или отказ отвечать — 0 баллов. Всего за семестр может быть проведено до 8 опросов, максимальная сумма баллов за опросы — 16.

**Поощрительные баллы** (до 4 баллов) начисляются за следующие достижения: сдача всех 7 компьютерных практических работ досрочно (за 2 недели до окончания семестра) — 4 балла; активная работа на занятиях (задаёт вопросы, дополняет ответы, помогает другим студентам) — 4 балл; выполнение дополнительного задания повышенной сложности — 7 баллов.

**Итоговый тест или собеседование** (20 баллов) проводится для студентов, набравших за семестр от 31 до 59 баллов. Студенты, набравшие 60 баллов и более, освобождаются от итогового контроля и получают оценку автоматически. Студенты, набравшие 30 баллов и менее, к итоговому контролю не допускаются. Итоговое собеседование проводится в устной форме (2 вопроса из списка) и оценивается как «зачёт» (при успешной сдаче студент получает дополнительные 10 баллов) или «незачёт» (0 дополнительных баллов).

**Автоматический зачёт** (без итогового собеседования) выставляется студенту при наборе 60 и более баллов в течение семестра.

#### *Промежуточная аттестация - зачет*

Зачтено (60 баллов и более): в целом, сформированные знания предмета хемометрики, умение применять методы многомерного анализа данных (метод главных компонент, регрессионные методы, включая множественную линейную регрессию и проекционные методы, методы классификации), умение оценивать погрешности измерений и обрабатывать экспериментальные данные с использованием табличного процессора, способность интерпретировать результаты хемометрического анализа (графики счетов и нагрузок, коэффициенты регрессии, показатели качества модели) и формулировать обоснованные выводы, наличие навыков работы в среде MS Excel или LibreOffice Calc (включая функции ЛИНЕЙН, МУМНОЖ, МОБР, надстройку «Анализ данных») при решении учебных и практических задач с минимальным количеством ошибок непринципиального характера.

Не зачтено (менее 60 баллов): фрагментарное знание предмета хемометрики, отсутствие умения применять методы главных компонент, регрессионные методы и методы классификации для обработки экспериментальных данных, неспособность оценивать

погрешности измерений и выполнять статистическую обработку результатов, отсутствие навыков работы с табличным процессором для решения хемометрических задач, наличие грубых ошибок в интерпретации результатов и формулировке выводов.

**Разработчики:**



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  
Протокол № 7 от «12» февраля 2026 г.

И.о. зав. кафедрой



/ Л.Б. Бельх /

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