

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Основы химической метрологии и хемометрики

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Аналитическая химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.)

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине(модулю)
СПК-2.С. Способен применять законы, лежащие в основе различных методов химического анализа, при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	СПК-2.С.1. Использует физические законы и закономерности при интерпретации и обсуждении результатов аналитических экспериментов, представленных в литературе и полученных при решении поставленных задач	Знать: законы, лежащие в основе различных методов химической метрологии и хемометрики. Уметь: выбирать и обосновывать схемы математического анализа и обработки экспериментальных данных в зависимости от решаемой химико-аналитической задачи, а также условий эксперимента. Владеть: основными теориями, концепциями, законами, описывающими принципы математического анализа одномерных и многомерных экспериментальных данных при решении химико-аналитических задач, и применять их при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных
СПК-3.С. Способен сопоставлять возможности и области применения, достоинства и недостатки различных методов аналитической химии	СПК-3.С.1. Планирует схему анализа с учетом возможностей конкретного метода	Знать: особенности, преимущества и ограничения различных методов химической метрологии и хемометрики. Уметь: сопоставлять возможности и области различных методов химической метрологии и хемометрики. Владеть: навыками планирования и осуществления химического анализа, включающего стадию математической обработки экспериментальных данных.
СПК-4.С. Способен анализировать научную литературу с целью выбора методов для решения конкретных аналитических задач, самостоятельно планировать исследование	СПК-4.С.1. сопоставляет данные разных источников и предлагает возможные способы решения конкретных аналитических задач	Знать: основные поисковые системы, базы данных и ведущие периодические издания по аналитической химии. Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора методов химической метрологии и хемометрики для решения конкретных химико-аналитических задач. Владеть: навыками к интерпретации и обсуждению результатов проведенного исследования, основываясь на современной литературе по теории и практике методов химической метрологии и хемометрики.

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 12 часов занятия семинарского типа, 4 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 72 часа составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

знать: основы методов качественного и количественного химического анализа; базовые принципы метрологической обработки экспериментальных данных при выполнении химико-аналитического эксперимента.

уметь: выбирать и обосновывать схему проведения эксперимента при решении химико-аналитических задач; применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных; ориентироваться в современной литературе по теории методов математической обработки экспериментальных данных и их применению в аналитической химии.

владеть: материалом предшествующих курсов – «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Теория вероятностей», «Элементы прикладной математической статистики», а также «Аналитическая химия»; навыками планирования и осуществления химического анализа, включающего стадию математической обработки и интерпретации результатов эксперимента.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1. Метрологические основы аналитической химии	6	2	2				4	2		2
Тема 2. Нормальное распределение и его роль в аналитической химии	10	4	2	2			8	2		2
Тема 3. Дисперсионный анализ	8	4	2				6	2		2
Тема 4. Корреляционный анализ	6	2	2				4	2		2
Тема 5. Способы распознавания образов. Кластерный анализ	14	2	2				4	6	4	10
Тема 6. Регрессионный анализ	16	2	2				4	6	6	12
Тема 7. Математическое планирование эксперимента	12	2					2	4	6	10
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	36					4	4			32
Итого	108	18	12	2		4	36			72

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

Вопросы для тестовых опросов:

1. Формула для расчета выборочной дисперсии $s^2(x) = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \bar{x})^2}{n-1}$ справедлива:

- а) всегда
- б) только для нормально распределенной величины x
- в) для нормально распределенной x при малом n ($n < 20$)
- г) для нормально распределенной x при большом n ($n > 20$)

2. Пусть генеральная совокупность случайной величины x имеет нормальное распределение. Тогда распределение Стьюдента - это:

- а) распределение величины $(x - \bar{x}) / \sigma(x)$
- б) распределение величины $(x - \bar{x}) / s(x)$**
- в) распределение величины x при малом объеме выборки
- г) распределение величины $x - \bar{x}$ при малом объеме выборки

3. Образец меди имеет содержание порядка 98% Cu. Каким требованиям должен удовлетворять метод анализа, позволяющий оценить чистоту образца путем прямого определения меди в нем?

- а) высокая чувствительность
- б) высокая точность**
- в) высокая чувствительность и высокая точность
- г) задача, поставленная таким образом, неразрешима

4. Необходимо оценить чистоту образца кремния, содержащего порядка 99.99999% Si.

Каким требованиям должен удовлетворять метод анализа, наиболее подходящий для решения поставленной задачи?

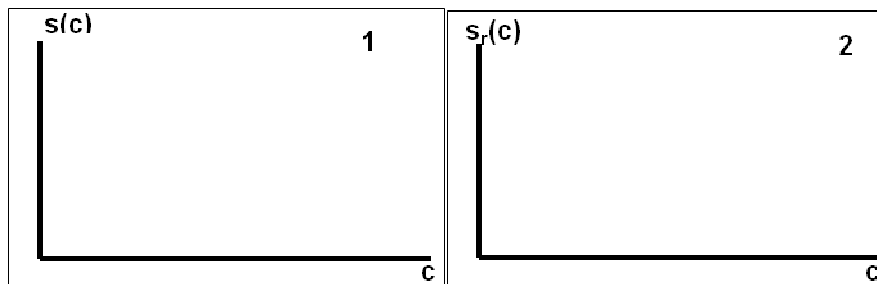
- а) высокая точность и многоэлементность
- б) высокая точность и чувствительность
- в) высокая чувствительность и многоэлементность**
- г) задача, поставленная таким образом, неразрешима

5. При сравнении двух серий параллельных результатов одного образца экспериментальная величина отношения Фишера оказалась больше табличной. О чем это говорит?

- а) одна из серий содержит систематическую погрешность
- б) хотя бы одна из серий содержит систематическую погрешность
- в) обе серии содержат систематическую погрешность
- г) выявить систематическую погрешность таким путем невозможно**

6. Схематически изобразите зависимости (1) абсолютного, (2) относительного стандартного отклонения результатов химического анализа от содержания определяемого компонента в образце.

(ответ: $s(c) = a \cdot c + b$, $s_r(c) = a + b/c$, где $a > 0$ и $b > 0$)



7. Критерий Фишера можно использовать

- а) для сравнения двух выборочных дисперсий**
- б) для сравнения нескольких выборочных дисперсий
- в) для сравнения двух нормально распределенных величин
- г) для проверки гипотезы о нормальном распределении

8. Критерий χ^2 можно использовать для
- а) выявления промахов
 - б) сравнения нескольких средних
 - в) проверки гипотезы о нормальном распределении и сравнения нескольких дисперсий**
 - г) проверки гипотезы линейности регрессионной зависимости
9. Для какого из перечисленных методов при обработке результатов анализа не следует применять критерий Стьюдента?
- а) титриметрия
 - б) спектрофотометрия
 - в) атомно-абсорбционный анализ
 - г) радиометрические методы анализа**
10. Имеется 4 серии, содержащие, соответственно, 5, 6, 7 и 8 параллельных результатов анализа. Какой критерий следует применить, чтобы установить, одинакова ли воспроизводимость этих серий?
- а) Фишера
 - б) Стьюдента
 - в) Бартлетта**
 - г) Кокрена
11. Важнейшим условием получения достоверных значений коэффициентов корреляции является
- а) наличие большого числа данных**
 - б) близость зависимости между переменными к линейной
 - в) наличие повторных измерений каждой величины
 - г) наличие для каждой величины большой серии параллельных значений
12. Важнейшим условием получения достоверных результатов при использовании непараметрических статистических критериев является
- а) наличие информации о законе распределения данных
 - б) наличие большого числа данных**
 - в) оптимальный размер выборки в пределах 5-10
 - г) близость закона распределения данных к закону Пуассона
13. Важнейшим условием получения достоверных результатов при использовании параметрических статистических критериев является

- а) **наличие информации о законе распределения данных**
 - б) наличие большого числа данных
 - в) оптимальный размер выборки в пределах 5-10
 - г) близость закона распределения данных к нормальному
14. Кластерный анализ при распознавании образов следует использовать
- а) всегда
 - б) только в задачах классификации
 - в) только в задачах идентификации
 - г) **только при большом объеме обучающей выборки**
15. Что такое обучающая выборка?
- а) серия параллельных измерений большого объема
 - б) набор образов неизвестных объектов, подлежащих классификации
 - в) набор образов известных объектов, заранее сгруппированных по классам
 - г) **набор образов известных объектов, относящихся к различным классам**
16. Какова задача кластерного анализа?
- а) отнести неизвестный объект к тому или иному классу
 - б) **отнести каждый объект обучающей выборки к тому или иному классу**
 - в) идентифицировать каждый объект обучающей выборки
 - г) установить сходство неизвестного объекта с тем или иным объектом обучающей выборки
17. Задача метода К ближайших соседей – это
- а) найти К объектов обучающей выборки, максимально близких к неизвестному объекту
 - б) найти К объектов обучающей выборки, максимально близких между собой
 - в) найти К объектов различных классов, максимально близких к неизвестному объекту
 - г) **установить, к какому классу ближе всего неизвестный объект**
18. Что такое "образ" применительно к задачам распознавания образов?
- а) **совокупность признаков объекта, геометрически представляемая в виде точки**
 - б) совокупность признаков объекта, геометрически представляемая в виде множества точек
 - в) совокупность признаков объекта, геометрически представляемая в виде поверхности в многомерном пространстве
 - г) схематическое графическое изображение объекта

19. Какое требование к аналитическим признакам, используемым для идентификации, не является необходимым?
- значения признаков для различных объектов должны как можно больше различаться
 - значения величин, характеризующих признаки, должны быть как можно больше**
 - отдельные признаки должны как можно меньше коррелировать между собой
 - совокупный набор признаков должен как можно достовернее отличать один объект от другого
20. Какое из условий не относится к предпосылкам классического метода наименьших квадратов?
- значения функции должны иметь нормальный закон распределения
 - относительное стандартное отклонение функции не зависит от ее величины**
 - отдельные значения функции не должны коррелировать друг с другом
 - погрешности аргументов пренебрежимо малы по сравнению с погрешностями функции
21. Для описания градуировочного графика использовали две модели: линейную $y = a_0 + a_1x$ и параболическую $y = A_0 + A_1x + A_2x^2$. Относительно каждой из моделей рассчитали дисперсию адекватности и сравнили их по критерию Фишера. Эти дисперсии оказались статистически неразличимыми. Какую модель следует выбрать?
- ту, у которой дисперсия адекватности меньше
 - безразлично, какую
 - линейную**
 - параболическую

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение:

- Решение задач по теме: выявление промахов, сравнение случайных величин, проверка возможности объединения выборочных совокупностей и т. п.
- Решение задач по теме: проверка подчинения выборочной совокупности экспериментальных данных, например, результатов измерения аналитического сигнала, нормальному распределению и др.
- Решение задач по теме: проверка статистической неразличимости химического состава анализируемых объектов, выявление проблемных этапов реализации методики анализа объекта и т. п.
- Решение задач по теме: выявление влияния матричных компонентов на аналитический сигнал определяемого химического элемента и др.
- Решение задач по теме: выбор наиболее важных признаков химических соединений после проведения корреляционного анализа, группировка множества химических соединений в отдельные классы, идентификация отдельных представителей класса и др.

6. Решение задач по теме: применение закона распространения погрешностей к различным функциям, наиболее часто используемым для описания массива экспериментальных данных, решение обратной регрессионной задачи при выполнении количественного инструментального анализа объекта и др.
7. Решение задач по теме: освоение процедуры составления и сокращения матрицы планирования, использование метода факторного планирования эксперимента при разработке методики определения химического элемента в реальном объекте инструментальным методом и т. п.

Примерные темы рефератов:

1. Инструментарий тестовой статистики. Проверка простых статистических гипотез.
 2. Оценка неопределённости результатов косвенных измерений. Закон распространения неопределённостей.
 3. Повышение качества результатов химико-аналитического эксперимента.
 4. Выявление скрытых закономерностей.
 5. Современный качественный анализ.
 6. Способы количественного анализа. Решение обратной регрессионной задачи.
 7. Оптимизация условий химико-аналитического эксперимента.
8. Ресурсное обеспечение:
- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу
- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу. Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются:
<http://nbmgu.ru/>

Основная литература

1. Основы аналитической химии. Т.1. / Под ред. Ю.А. Золотова (учебник, рекомендован Министерством образования Российской Федерации в качестве учебника для студентов химического направления и химических специальностей высших учебных заведений). 6-е изд., перераб. и доп. – М.: Академия, 2014, 400 с. ISBN 978-5-4468-0517-4. (Долманова И. Ф., Гармаш А. В., Глава 2 Метрологические основы аналитической химии. С. 20 – 49).
2. А. В. Гармаш, Н. М. Сорокина. Метрологические основы аналитической химии. М.: МГУ, 2012.
1. Аналитическая химия. Проблемы и подходы. / Под ред. Р. Келнера, Ж. М. Мерме, М. Отто, Г. М. Видмера. В 2 т. М.: Мир, 2004.
2. Д. Скуг, Д. Уэст. Основы аналитической химии. В 2 т. М.: Мир, 1979.
3. К. Дёрффель. Статистика в аналитической химии. М.: Мир, 1994.
4. В. В. Налимов. Применение математической статистики при анализе вещества. М.: Физматгиз, 1960.

5. А. К. Чарыков. Математическая обработка результатов химического анализа. Методы обнаружения и оценки ошибок. Л.: Химия, 1984.

Дополнительная литература

1. В. И. Дворкин. Метрология и обеспечение качества количественного химического анализа. М.: Химия, 2001.
 2. Л. З. Румшинский. Математическая обработка результатов эксперимента. Справочное руководство. М.: Наука, 1971.
 3. В. П. Спиридонов, А. А. Лопаткин. Математическая обработка физико-химических данных. М.: МГУ, 1970.
 4. Рекомендации и номенклатурные правила ИЮПАК по аналитической химии. / Под ред. В. М. Иванова. М.: Бинوم, 2004.
 5. Количественное описание неопределенности в аналитических измерениях. Руководство ЕВРАХИМ/СИТАК. / Под ред. Л. А. Конопелько. СПб.: ВНИИМ имени Д. И. Менделеева, 2003.
- Материально-техническое обеспечение: занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами), персональным компьютером и мультимедийным проектором

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

1. Осколок Кирилл Владимирович, к.х.н., доцент; oskolok@analyt.chem.msu.ru
2. Гармаш Андрей Викторович, к.х.н., доцент; garmash@analyt.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Перечень вопросов для зачёта:

1. Основные задачи химической метрологии и хемометрики. Экспериментальные данные, химическая информация, информационный шум.
2. Случайная и систематическая погрешность. Воспроизводимость и правильность.
3. Инструментарий тестовой статистики. Грубые промахи. Критерий Диксона.

4. Закон распространения неопределённостей.
5. Проверка значимости различия случайных величин, подчиняющихся нормальному распределению. Критерий Стьюдента.
6. Сравнение дисперсий. Критерий Фишера.
7. Оценка предела обнаружения.
8. Функции распределения случайной величины (Гаусса, Пуассона, Стьюдента, Фишера, χ^2 -распределение).
9. Центральная предельная теорема теории вероятности. Причины отклонения от нормального распределения.
10. Непараметрические статистические критерии.
11. Проверка нормальности распределения случайных величин. Критерий Пирсона.
12. Принципы дисперсионного анализа. Закон аддитивности дисперсий.
13. Внутригрупповая и межгрупповая дисперсии.
14. Сравнение дисперсий. Односторонний и двусторонний критерий Фишера.
15. Проверка однородности совокупности дисперсий. Критерии Бартлетта и Кокрена.
16. Примеры использования дисперсионного анализа при выполнении химико-аналитического эксперимента.
17. Примеры многомерных экспериментальных данных в аналитической химии.
18. Функциональные и стохастические связи. Тенденция, закономерность, закон.
19. Корреляционный анализ. Дисперсия и ковариация. Коэффициент корреляции.
20. Типичные ошибки интерпретации корреляции двух величин.
21. Критерии значимости отличия коэффициента корреляции от нуля, различия двух коэффициентов корреляции.
22. Расчёт коэффициентов корреляции для всех пар экспериментальных характеристик в матрице свойств с помощью программы MSExcel.
23. Примеры использования корреляционного анализа при выполнении химико-аналитического эксперимента.
24. Принципы распознавания образов в химии. Задачи классификации и идентификации.
25. Аналитический признак. Выявление значимых признаков для составления образа объекта.
26. Матрица поворота. Сингулярное разложение невырожденной матрицы. Сокращение размера пространства признаков. Матрица счетов и матрица нагрузок.
27. Создание классов. Кластерный анализ. Построение дендрограмм.
28. Создание классификационной модели. Обучающая и контрольная выборки.
29. Формулировка решающего правила. Метод SIMCA. Метод k ближайших соседей.
30. Регрессионный анализ. Основные принципы. Классификация. Задачи интерполяции и аппроксимации.

31. Одномерный линейный классический регрессионный анализ. Условия и процедура выполнения. Прямая и обратная регрессионная задача.
32. Проведение одномерного и многомерного регрессионного анализа в программе MSExcel.
33. Выбор регрессионной модели и оценка её качества.
34. Примеры использования регрессионного анализа при решении химико-аналитических задач.
35. Метод факторного планирования эксперимента. Поиск экстремума целевой аналитической функции.
36. Основные идеи метода и процедура планирования двухфакторного эксперимента. Принцип локальности.
37. Важнейшие свойства матрицы планирования. Полный и дробный факторный эксперимент. Сокращение матрицы планирования.
38. Примеры использования метода факторного планирования при выполнении химико-аналитического эксперимента.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора методов химической метрологии и хеометрики для решения конкретных химико-аналитических задач. Уметь: выбирать и обосновывать схемы математического анализа и обработки экспериментальных	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете

<p>данных в зависимости от решаемой химико-аналитической задачи, а также условий эксперимента.</p> <p>Уметь: сопоставлять возможности и области различных методов химической метрологии и хемометрики.</p> <p>Уметь: комбинировать важнейшие критерии для проверки статистических гипотез при выполнении химико-аналитического эксперимента; проводить статистическую обработку результатов химического анализа.</p>	
<p>Владеть: простейшими математическими методами отделения полезной информации от информационного шума при решении важнейших химико-аналитических задач.</p> <p>Владеть: основными теориями, концепциями, законами, описывающими принципы математического анализа одномерных и многомерных экспериментальных данных при решении химико-аналитических задач, и применять их при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных.</p> <p>Владеть: навыками планирования и осуществления химического анализа, включающего стадию разделения и концентрирования микрокомпонентов.</p> <p>Владеть: навыками планирования и осуществления химического анализа, включающего стадию математической обработки экспериментальных данных</p> <p>Владеть: навыками к интерпретации и обсуждению результатов проведенного исследования, основываясь на современной литературе по теории и практике методов химической метрологии и хемометрики.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>