

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор по образовательной  
деятельности

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев  
«\_\_» \_\_\_\_\_

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1162446	Методы обработки экспериментальных данных в аналитической химии

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
<b>Образовательная программа</b> 1. Аналитический контроль природных и технических объектов	<b>Код ОП</b> 1. 18.04.01/33.09
<b>Направление подготовки</b> 1. Химическая технология	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 18.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Васильева Наталья Леонидовна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	физико-химических методов анализа
2	Домбровская Маргарита Адамовна	кандидат химических наук, доцент	Доцент	физико-химических методов анализа

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ **Методы обработки экспериментальных данных в аналитической химии**

## 1.1. Аннотация содержания модуля

В структуре образовательной программы модуль «Методы обработки экспериментальных данных в аналитической химии» находится в части формируемой участниками образовательных отношений, по выбору студента. Модуль имеет своей целью ознакомление студентов с современными методами и алгоритмами хемометрики, используемыми для проведения качественного и количественного химического анализа, контроля результатов химического анализа, планировании экспериментов при оптимизации отдельных стадий анализа. Модуль направлен на формирование навыков самостоятельного проведения хемометрической обработки аналитических данных в приложении к решению технологических и аналитических задач.

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Хемометрика	3
ИТОГО по модулю:		3

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Анализ природных и технических объектов
Постреквизиты и кореквизиты модуля	1. Физические измерения в аналитической химии

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Хемометрика	ОПК-2 - Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной	З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности

	<p>деятельности, используя методы моделирования и математического анализа</p>	<p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа</p> <p>П-1 - Решать самостоятельно сформулированные практические задачи, относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ПК-3 - Способен реализовать метрологическое сопровождение аналитического контроля природных и технических объектов</p>	<p>З-1 - Изложить основные положения нормативных и методических документов, регламентирующих работы по метрологическому обеспечению</p> <p>З-2 - Описать области применения методов измерений, принципы работы средств измерений</p> <p>З-3 - Систематизировать нормативные и методические документы, регламентирующие вопросы прохождения аккредитации в области обеспечения единства измерений</p> <p>У-1 - Применять методы системного анализа для подготовки и обоснования выводов о состоянии метрологического обеспечения на производстве</p> <p>У-2 - Организовать производственно-хозяйственную деятельность метрологической службы</p> <p>У-3 - Проводить анализ структуры и деятельности метрологической службы для оценки соответствия требованиям в заявленной области аккредитации</p> <p>П-1 - Принимать решения об эффективности деятельности метрологической службы организации</p> <p>П-2 - Планировать перспективы развития деятельности метрологической службы</p>

		П-3 - Оценить соответствие метрологической службы требованиям в заявленной области аккредитации
--	--	---

### **1.5. Форма обучения**

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Хемотрика**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Васильева Наталья Леонидовна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	физико- химических методов анализа
2	Домбровская Маргарита Адамовна	кандидат химических наук, доцент	Доцент	физико- химических методов анализа

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический**

Протокол № 10 от 16.06.2023 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Васильева Наталья Леонидовна, Доцент, физико-химических методов анализа
- Домбровская Маргарита Адамовна, Доцент, физико-химических методов анализа

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Предмет и задачи хеометрики	Роль хеометрики в аналитической химии. Задачи курса.
P2	Показатели качества химического анализа	Классификация и источники погрешностей. Метрологические показатели качества анализа: прецизионность и правильность анализа. Точность анализа.
P3	Применение математической статистики к оцениванию точностных показателей методик измерений	Задачи, решаемые математической статистикой в аналитической химии. Случайные непрерывные и дискретные величины. Распределения случайных величин. Параметры распределения: математическое ожидание, дисперсия, показатели асимметрии и эксцесса. Нормальное распределение, его значение в аналитической практике. Центральная предельная теорема Ляпунова. Примеры нарушения начальных условий теоремы. Нормированное нормальное распределение. Значения параметров. Интегралы Гаусса и Лапласа. Понятие квантиля (процентиля). Статистическая оценка параметров распределения. Требования к оценкам. Некоторые специальные распределения, связанные с нормальным: распределение выборочного среднего, хи квадрат- Пирсона, Фишера, Стьюдента, Кохрена, Грабса. Доверительный интервал. Нижняя и верхняя доверительные границы. Уровень значимости. Проверка статистических гипотез. Нулевая и альтернативная гипотезы. Ошибки первого и второго рода.

		Оценка фактической точности анализа. Оценивание повторяемости, воспроизводимости, правильности. Назначение нормативов контроля, оценивание приемлимости результатов количественного химического анализа, внутренний контроль качества результатов анализа. Разработка и аттестация методик измерений.
<b>P4</b>	Метрология при градуировк	Выбор вида зависимости. Определение параметров линейного графика. Проверка гипотезы о линейности. Оценивание погрешностей градуирования. Регрессионный анализ.
<b>P5</b>	Предел обнаружения и его оценка	Относительный и абсолютный пределы обнаружения. Критерий Кайзера, надежный предел обнаружения. Концентрация эквивалентная фону.
<b>P6</b>	Основы статистического планирования эксперимента	Методы дисперсионного анализа. Однофакторный дисперсионный анализ. Постановка эксперимента и обработка результатов. Многофакторная классификация. Применение метода при изучении методических погрешностей методик измерений. Корреляционный анализ (проверка взаимной зависимости двух переменных). Линейная корреляция и ее применение в химико-аналитических исследованиях. Планирование эксперимента, обработка результатов. Оценка значимости выборочного коэффициента корреляции. Методы планирования экстремальных экспериментов. Факторное двухуровневое планирование эксперимента. Полный факторный эксперимент. Проведение эксперимента и расчет коэффициентов регрессии. Дробный факторный эксперимент. Оптимизация методом крутого восхождения. Выбор реплик большей дробности. Метод “перевала”. Интерпретация и объяснение результатов эксперимента.

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

### 1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Хеометрика

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Адлер, Ю. П.; Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий : научная литература.; Наука, Москва; 1976; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=696011> (Электронное издание)
2. Налимов, В. В.; Применение математической статистики при анализе вещества : монография.;



Физматгиз, Москва; 1960; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=473753> (Электронное издание)

3. Шурыгина, Л. И.; Методы оптимизации химического эксперимента : учебное пособие. II. Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232735> (Электронное издание)

#### **Печатные издания**

1. Шараф, Мухаммад А., М. А., Ибрагимов, И. А., Иллман, Д. Л., Ковальски, Б. Р., Мариничев, А. Н., Чарыков, А. К.; Хемометрика; Химия, Ленинград; 1989 (4 экз.)

2. Дерффель; Статистика в аналитической химии : Пер. с нем.; Мир, Москва; 1994 (2 экз.)

3. Саутин, С. Н.; Планирование эксперимента в химии и химической технологии; Химия. Ленингр. отделение, Ленинград; 1975 (5 экз.)

#### **Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы**

Зональная научная библиотека УрФУ <http://lib.urfu.ru>

Научная электронная библиотека Elibrary.ru <https://www.elibrary.ru/>

Электронная библиотечная сеть "Лань" <http://e.lanbook.com/>

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ <http://study.urfu.ru/>

#### **Материалы для лиц с ОВЗ**

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

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

Министерство образования и науки Российской Федерации (<http://минобрнауки.рф/>)

Федеральный портал «Российское образование» (<http://www.edu.ru/>)

ООО Научная электронная библиотека (<http://elibrary.ru/defaultx.asp>)

Электронный научный архив УрФУ (<https://elar.urfu.ru>)

Поисковая система <http://www.yandex.ru>

Поисковая система <http://www.google.com>

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

#### **Хемометрика**

**Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением**

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
-------	--------------	---	---

1	Лекции	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p>	<p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)</p>
2	Практические занятия	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами</p>	<p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)</p>