

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Хеометрика**

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация
Магистр

Форма обучения
Очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины Б1.В.ДВ.4.2. «Хемометрика»

2. **Цель изучения дисциплины** – выстроить у магистрантов систему базовых знаний о методах и средствах новой поддисциплины аналитической химии – хемометрики и овладеть методами решения практических задач химического анализа с их помощью. Основными объектами изучения дисциплины являются математические методы и технологии компьютерной химии.

3. **Год и семестр обучения:** 2 год, 3 семестр.

4. **Общая трудоемкость дисциплины** составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – занятия практического типа) 72 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
Второй уровень (углубленный) (ПК–1) – II способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты.	У(ПК–1) – II – Уметь: проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты с использованием современных статистических и проекционных методов.
Второй уровень (углубленный) (СПК–3) – II владение основами методологии анализа и исследования объектов различной природы современными химическими и физико-химическими методами анализа, способность применять статистические методы обработки аналитической информации.	В (СПК–3) – II – Владеть: основами методологии анализа и исследования объектов различной природы современными химическими и физико-химическими методами анализа, показывать способность применять статистические и проекционные методы обработки аналитической информации.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Раздел дисциплины	Всего, (час.)	Контактная работа(час.)		Самостоя- тельная работа, (час.)
		Лекции	Практиче- ские занятия	
Математизация и компьютеризация аналитической химии	10	2	2	6
Применение теории информации в аналитической химии	12	2	2	8
Математическое моделирование в аналитической химии	16	4	4	8
Обработка аналитических сигналов	14	4	2	8
Метод распознавания образов	18	4	4	10
Базы данных, системы поиска и искусственного интеллекта	14	2	4	8

Творческие расчётные и практические индивидуальные задания (по темам дипломных работ)	24	-	-	24
Итого:	108	18	18	72

6.2. Содержание дисциплины

Модуль 1. Математизация и компьютеризация аналитической химии.

Хемометрика – новая поддисциплина аналитической химии, ее становление и развитие. Предмет и задачи хемометрики. Составные части и области приложения хемометрики.

Модуль 2. Применение теории информации в аналитической химии.

Трактовка информации. Неопределенность (энтропия). Уравнение Шеннона. Единица информации. Информативность аналитического метода.

Модуль 3. Математическое моделирование в аналитической химии.

Понятие модели. Формальное и теоретическое (физико-химическое) моделирование. Линейный регрессионный анализ. Функция регрессии. Постулаты линейного регрессионного анализа. Метод наименьших квадратов (МНК) при равноточных измерениях функции отклика. Метод НК в матричной форме. Метод определителей. Коридор погрешностей для линии регрессии. Коэффициент линейной корреляции. Формулы МНК для зависимости, исходящей из начала координат. Метод НК при неравноточных измерениях функции отклика (взвешенный МНК). Исключение «выскакивающей» точки. Оценка гипотезы линейности исследуемой зависимости. Двухфазная регрессия. Построение градуировочного графика. Процедуры МНК с нарушением постулатов регрессионного анализа. Фильтр Кальмана. Конфлюентный анализ. Феноменологическое моделирование. Метод максимума правдоподобия. Метод наименьших расстояний. Нелинейный МНК. Линеаризованный вариант МНК. Метод численного статистического моделирования (метод Монте-Карло). Нестатистический подход к интервальному оцениванию результатов измерений (метод центра неопределенности). Решение задач градуировки в Excel.

Модуль 4. Обработка аналитических сигналов.

Увеличение отношения «сигнал-шум». Усреднение сигнала. Модуляция сигнала. Фурье-преобразование. Преобразование формы сигнала. Нахождение кривой по точкам. Отделение сигнала от фона. Дифференцирование сигнала. Измерение площадей сигналов. Сглаживание данных. Блочное усреднение. Усреднение методом движущегося окна. Полиномиальное сглаживание методом НК. Сглаживание сплайн-функциями. Сглаживание Фурье-преобразованием. Дифференцирование сигнала. Разрешение сложных сигналов. Дифференцирование сигнала. Факторный анализ. Определение числа компонентов по рангу матрицы данных. Разрешение сложных сигналов методом математического моделирования. Профили Гаусса, Лоренца, Фойгта. Разрешение сигналов с помощью множественной регрессии. Развертывание налагающихся сигналов.

Модуль 5. Метод распознавания образов.

Кластерный анализ. Сбор данных. Предварительная обработка данных. Трансляция, нормировка, масштабирование данных. Интервальное масштабное преобразование. Автомасштабное преобразование на единицу дисперсии.

Отбор полезной информации. Применение Фурье-преобразования. Факторный анализ. Статистическое взвешивание признаков по дисперсиям. Заполнение пустот баз данных. Классификация объектов. Геометрический подход. Мера подобия образа. Евклидово расстояние, манхэттенское расстояние, расстояние Чебышева. Представление данных в форме дендрограммы. Применение метода главных компонент в классификации, реализация в Excel. Метод ближайшего соседа. Метод наиболее удаленных соседей. Центроидный метод. Контролируемое обучение машин. Тренировочный ряд. Линейное обучающее устройство.

Модуль 6. Базы данных, системы поиска и искусственного интеллекта.

Базы данных. Данные, аналоговые и цифровые. Получение и хранение данных. Информация, ее отличие от данных. Информационно-поисковые системы. Системы искусственного интеллекта. Экспертные системы. Нейронные сети.

6.3. Форма промежуточной аттестации: зачет

7. Ресурсное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература

1. Померанцев А.Л. Хемометрика в Excel: Учеб. пособие / А.Л. Померанцев. – Томск: Из-во ТПУ, 2014. – 435 с.

2. Шелковников В.В., Баталова В.Н., Киселева М.А., Отмахов В.И., Скворцова Л.Н., Зарубин А.Г. Физико-химические методы анализа. Учебно-методический комплекс (УМК). Томск, 2011. <http://edu.tsu.ru/eor/resource/557/tpl/index.html>;

7.2. Дополнительная литература

1. Родионова О.Е., Померанцев А.Л. Хемометрика: достижения и перспективы // Успехи химии. – 2006. – Т. 75. – № 4. – С. 302-321.

http://rcs.chemometrics.ru/papers/UspKhim75_302.pdf Электронное издание;

2. Померанцев А. Л. Учебный курс по хемометрике. – 2011 <http://rcs.chemometrics.ru/Tutorials/index.html> Электронное издание.

3. Марьянов Б.М. Избранные главы хемометрики: Учеб. пособие для хим. фак. Вузов / Б.М. Марьянов. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2004. – 166 с.

4. Марьянов Б.М. Метод линеаризации в инструментальной титриметрии / Б.М. Марьянов. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2001. – 158 с.

5. Р 50.1.098-2014. Рекомендации по стандартизации. Статистические методы. Определение и использование линейных функций при калибровке. <http://meganorm.ru/Index2/1/4293766/4293766466.htm> Электронное издание.

6. ГОСТ Р 54500.3.1-2011 Неопределенность измерения. Часть 3. Руководство по выражению неопределенности измерения. Дополнение 1. Трансформирование распределений с использованием метода Монте-Карло.

<http://meganorm.ru/Data2/1/4293792/4293792085.pdf> Электронное издание;

7. Джонсон К. Численные методы в химии / К. Джонсон. – М.: Мир, 1983. – 504 с.

8. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа / А.К. Чарыков. - Л.: Химия, 1984.

9. Романенко С.В. Феноменологическое моделирование аналитических сигналов в форме пиков: Дис. ... док. хим. наук. – Томск, 2006. – 435 с.

7.3 Электронные ресурсы

1. Программный пакет OpenOffice.org Calc для статистической обработки результатов аналитических определений, рекомендации к использованию программы в разделе «Справка» (клавиша <F1>) или на сайте: www.OpenOffice.org;

2. Программный пакет Microsoft Office 2003 Excel, рекомендации к использованию программы в разделе «Справка» (клавиша <F1>) или на сайте: www.microsoft.com;

3. Программный пакет «Origin Pro 8» для статистической обработки результатов аналитических определений, рекомендации к использованию программы в разделе «Справка» (клавиша <F1>) или на сайте: www.OriginLab.com;

4. Оригинальные программы «Add noise», «Simcurv-v1.0», «DifTM» и «Protolyt» для изучения закона нормального распределения погрешностей измерений и моделирования кривых титрования, созданные на кафедре к.х.н. Зарубиным А.Г. под руководством д.х.н. Марьянова Б.М. www.chemometrics.ru.

8. Автор: Зарубин Алексей Геннадьевич, канд. хим. наук, старший преподаватель кафедры аналитической химии ХФ ТГУ.