Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

Согласовано

Декан ФЕН

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Резников В.А..

*подпись*

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20\_\_\_ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Прикладной анализ данных в химии и материаловедении**

направление подготовки: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

направленность (профиль): Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения: очная

Разработчик:

к.х.н. Дребущак Т.Н. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Зав. каф. химического материаловедения

академик РАН, д.х.н., проф. Ляхов Н.З. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Руководитель программы:

д.х.н., доц. Емельянов В.А. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Новосибирск, 2021

**Содержание**

[1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы 3](#_Toc21097778)

[2. Место дисциплины в структуре образовательной программы 3](#_Toc21097779)

[3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося 3](#_Toc21097780)

[4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий 4](#_Toc21097781)

[5. Перечень учебной литературы 5](#_Toc21097782)

[6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся 5](#_Toc21097783)

[7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины 5](#_Toc21097784)

[8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине 6](#_Toc21097785)

[9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине 6](#_Toc21097786)

[10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине 6](#_Toc21097787)

Приложение 1 Аннотация по дисциплине

Приложение 2 Оценочные средства по дисциплине

# Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Результаты освоения образовательной программы  (компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
| --- | --- | --- |
| **С-ОПК-4.** Способен планировать химический эксперимент «в стекле» и «*in silico*», обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач | **С-ОПК-4.2.** Обрабатывает данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик | - знает базовые математические методы анализа данных химического эксперимента |
| **С-ПК-1.** Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках | **С-ПК-1.3.** Проводит исследования и испытания веществ и материалов, инновационной химической продукции | - умеет выбирать оптимальные процедуры обработки экспериментальных данных и оценивать погрешности |

# 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины *Прикладной анализ данных в химии и материаловедении*: основы компьютерной грамотности, теория вероятностей и математическая статистика, физическая химия, измерительный практикум, строение вещества, химия твердого тела.

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо освоение дисциплины *Прикладной анализ данных в химии и материаловедении*: производственная практика, научно-исследовательская работа, итоговая государственная аттестация.

# 3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 1 з.е. (36 ч)

Форма промежуточной аттестации: 7 семестр –зачет

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № | Вид деятельности | Семестр |
| 7 |
| 1 | Лекции, ч | 8 |
| 2 | Практические занятия, ч | 9 |
| 3 | Лабораторные занятия, ч |  |
| 4 | Занятия в контактной форме, ч  из них | 19 |
| 5 | из них аудиторных занятий, ч | 17 |
| 6 | групповая работа с преподавателем, ч | - |
| 7 | консультаций, час. | - |
| 8 | промежуточная аттестация, ч | 2 |
| 9 | Самостоятельная работа, час. | 17 |
| 10 | Всего, ч | 36 |

Реализация дисциплины включена в практическую подготовку в ИХТТМ СО РАН при проведении следующих видов занятий, часть из которых предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью:

- лекции;

- практические занятия.

# 4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

***7 семестр***

Лекции (8 ч)

|  |  |
| --- | --- |
| Наименование темы и их содержание | Объем,  час |
| Раздел 1. Измерения в химии. Общие принципы постановки задач обработки экспериментальных данных и извлечения достоверной химической информации из них. Признаки и типы шкал. Погрешности измерений и причины их возникновения. Категории ошибок. | 2 |
| Раздел 2. Случайные величины. Параметры случайных величин и их оценки. Точечное оценивание. Виды распределений случайных величин. Интервальное оценивание. Теория статистического вывода, ошибки I и II рода. | 2 |
| Раздел 3. Поиск взаимосвязи двух и более случайных величин. Корреляция и регрессия. Метод наименьших квадратов, линейная модель и анализ остатков, гетероскедактичность данных и варианты перехода к гомоскедактичному случаю. | 2 |
| Раздел 4. Краткий обзор многомерных методов анализа данных и основ хемометрики. Определение источника вариации данных. Дисперсионный анализ. Предсказание и оценивание, градуировка. Основы обработки спектров и оценки точности. | 2 |

Практические занятия (10 ч)

|  |  |
| --- | --- |
| Содержание практического занятия | Объем, час |
| Визуализация данных. Статистические функции и процедуры в электронных таблицах. Нахождение точечных оценок по выборке, построение доверительных интервалов, распространение погрешностей. | 2 |
| Сравнение экспериментальных данных различными методами (t-тесты, непараметрические тесты). Критерий хи-квадрат и другие критерии, примеры использования. Сравнение точности измерений. | 2 |
| Использование регрессионного анализа. Линии тренда, ошибки наклона. Определение видов систематических ошибок. Примеры проведения калибровочных процедур. Использование дисперсионного анализа. Проверка гипотезы линейности данных. | 2 |
| Примеры обработки данных дифракционных экспериментов, особенности определения ошибок по порошковым данным и по данным, полученным в монокристальном эксперименте. Примеры обработки спектров. | 2 |
| Выполнение различных заданий по всему материалу курса на выбор по запросам студентов. | 1 |

Самостоятельная работа студентов (16 ч)

|  |  |
| --- | --- |
| Перечень занятий на СРС | Объем, час |
| Закрепление, обобщение и повторение пройденного учебного материала | 6 |
| Уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях | 5 |
| Подготовка к зачету | 6 |

# 5. Перечень учебной литературы

1. *Дребущак Т. Н.* Введение в хемометрику. Новосиб. гос. ун-т, Новосибирск, 2013.
2. *Бендат Дж., Пирсол А.* Прикладной анализ случайных данных: Пер. с англ. М.: Мир, 1989. 540 с.
3. *Брандт З.* Анализ данных. Статистические и вычислительные методы для научных работников и инженеров: Пер. с англ. М.: Мир; АСТ, 2003. 686 с.
4. *Hughes I. G., Hase T. P. A.* Measurements and their uncertainties. Oxford Univ. Press Inc., 2010. 136 p.
5. *Massart D. L., Vandeginste B. G. M., Deming S. N., Michotte Y., Kaufman L.* Chemometrics: a textbook. Elsevier, 1988. 488 p.
6. *Шараф М. А., Иллмэн Д. Л., Ковальски Б. Р.* Хемометрика: Пер. с англ. Л.: Химия, 1989. 272 с.

# 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

. Не используется

# 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

***7.1 Ресурсы сети Интернет***

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);

- образовательные интернет-порталы;

- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС, электронную почту, социальные сети.

***7.2 Современные профессиональные базы данных:***

- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)

- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service)

- Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)

# 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

***8.1 Перечень программного обеспечения***

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

***8.2 Информационные справочные системы***

Не используются.

# 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

# 10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень результатов обучения по дисциплине *Прикладной анализ данных в химии и материаловедении* и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

***10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине***

***Текущий контроль успеваемости:***

В течение семестра преподаватель контролирует посещаемость, оценивает уровень подготовки студента к каждому занятию в коллективном обсуждении тем, рассматриваемых в рамках курса, контролирует выполнение заданий на практических занятиях.

***Промежуточная аттестация:***

Студент получает зачет по результатам текущего контроля. В случае отсутствия активности студента на занятиях в семестре, невыполнения заданий на практических занятиях, студент направляется на сдачу зачета в виде устного собеседования.

***Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине Прикладной анализ данных в химии и материаловедении***

Таблица 10.1

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Код компетенции** | **Индикатор** | **Результат обучения по дисциплине** | **Оценочное средство** |
| **С-ОПК-4** | **С-ОПК-4.2.** Обрабатывает данные с использованием стандартных методов аппроксимации численных характеристик | - знает базовые математические методы анализа данных химического эксперимента | зачет |
| **С-ПК-1** | **С-ПК-1.3.** Проводит исследования и испытания веществ и материалов, инновационной химической продукции | - умеет выбирать оптимальные процедуры обработки экспериментальных данных, оценивать погрешности | зачет |

Таблица 10.2

|  |  |
| --- | --- |
| **Критерии оценивания результатов обучения** | **Шкала**  **оценивания** |
| **Зачет:**  - ответ отличается глубиной и полнотой раскрытия содержания вопросов;  - аргументированные ответы на дополнительно заданные вопросы;  - логичность и последовательность ответа | *Зачет* |
| **Зачет:**  – - нераскрытие содержания вопросов, наличие более 3 ошибок в содержании ответа;  - неспособность дать ответы на дополнительно заданные вопросы (или ошибочные ответы);  - отсутствие логики в изложения материала | *Незачет* |

***Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения***

Примеры вопросов к зачету:

1. Измерения в химии. Типы шкал. Допустимые преобразования шкал.
2. Погрешности измерения и причины их возникновения. Классификация ошибок. Распространение погрешностей.
3. Что такое случайная величина. Нормальное распределение. Виды распределений случайных величин, основанных на нормальном.
4. Параметры случайных величин и их оценки. Точечное оценивание параметров. Свойства оценок.
5. Интервальное оценивание (построение доверительных интервалов). Доверительные интервалы для среднего, для дисперсии.
6. Проверка статистических гипотез, основные этапы. Ошибки первого и второго рода. Проверка соответствия экспериментального распределения и теоретического (или ожидаемого) распределения по критерию согласия хи-квадрат.
7. Методы сравнения двух процедур по t-тестам. Сравнение точности процедур.
8. Корреляция и регрессия, метод наименьших квадратов. Сравнение двух процедур проведения эксперимента методами регрессионного анализа. Определение типа систематической ошибки.
9. Непараметрические методы сравнения двух процедур. Типы шкал. Процедура ранжирования.
10. Определение источника вариации данных. Однофакторный и двухфакторный дисперсионный анализ.
11. Калибровочные процедуры. Регрессия и проверка на линейность, поправка на гетероскедактичность.
12. Обработка данных дифракционных экспериментов, особенности определения ошибок по порошковым данным и по данным, полученным монокристальном эксперименте. Разделение и интегрирование пиков.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы дисциплины**

**«*Прикладной анализ данных в химии и материаловедении*»**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа) | Дата и №  протокола Ученого совета ФЕН | Подпись  ответственного |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |