

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Аксёнов Александр Викторович
Должность: Декан химического факультета
Дата подписания: 19.06.2026 12:15:47
Уникальный программный ключ:
073635787274402487435acab3ab854864d48641

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»**

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического
факультета,
д-р.хим.наук, проф.
Аксенов А.В.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
«Хеометрика и хемоинформатика»**

Направление подготовки
Направленность (профиль)

04.04.01 Химия
Аналитическая химия и химическая
экспертиза

Год начала обучения
Форма обучения
Реализуется в семестре

2026
очная
1

Разработано
канд.хим.наук, доцент
кафедры аналитической
химии химического
факультета
Червонная Т. А.

1. Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

Целью курса «Хеометрика и хемоинформатика» является систематическое изложение принципов статистической обработки данных, моделировании и применении многомерных калибровок.

Задачи освоения дисциплины является:

Главные задачи изучения «Хеометрика и хемоинформатика» формулируются следующим образом:

- изучить механизмы химических процессов в аналитической химии при помощи математического аппарата;
- научиться выбирать способ обработки результатов анализа;
- использовать на практике варианты хеометрического анализа;
- проводить анализ с использованием инструментов хеометрики.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений. Дисциплина изучается в 1 семестре.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код, формулировка компетенции	Код, формулировка индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций, индикаторов
УК-6 Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки.	ИД-1 УК-6 Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. ИД-2 УК-6 Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; ИД-3 УК-6 Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда	Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет работать в команде.

ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической химии и смежных с химией науках	ИД-1 ПК-1 Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, ИД-2 ПК-1 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.	Знает концепции основных разделов современной химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями для поиска и обработки информации, работы с базами данных, презентации результатов в избранной предметной области Умеет работать в команде Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях
ПК-4 Способен применять знания теоретических положений химии и современных тенденций развития в профессиональной деятельности;	ИД-1 ПК-4 Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры и идентификации химических веществ и материалов. ИД-2 ПК-4 Способен изучать свойства химических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов.	Знает концепции основных разделов современной химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области фундаментальной и прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями для поиска и

		обработки информации, работы с базами данных, презентации результатов в избранной предметной области. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях. Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов.
ПК-5 Способен использовать современную аппаратуру, в том числе, вычислительные методы при проведении научных исследований области аналитической химии	ИД-1 ПК-5 Способен выбирать методы и средства решения поставленных профессиональных задач. ИД-2 ПК-5 Выполняет стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для решения профессиональных задач. ИД-3 ПК-5 Способен обрабатывать результаты решения поставленных профессиональных задач.	Знает концепции основных разделов современной химической науки. Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии. Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты. Умеет пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями для поиска и обработки информации, работы с базами данных, презентации результатов в избранной предметной области. Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии. Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях.

4. Объем учебной дисциплины (модуля) и формы контроля *

Объем занятий: всего: 4 з.е. 144 акад.ч.	ОФО, в акад. часах
Контактная работа:	
Лекции/из них практическая подготовка	18/0
Практических занятий/из них практическая подготовка	18/4
Самостоятельная работа	54
Формы контроля	
Экзамен	54
Зачет	-
Зачет с оценкой	-
Курсовая работа	Нет

* Дисциплина (модуль) предусматривает применение электронного обучения, дистанционных образовательных технологий (если иное не установлено образовательным стандартом)

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием количества часов и видов занятий

№	Раздел (тема) дисциплины и краткое содержание	Формируемые компетенции, индикаторы	очная форма				Формы текущего контроля успеваемости
			Контактная работа обучающихся с преподавателем/ из них в форме практической подготовки, часов			Самостоятельная работа, часов	
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы		
1.	Хеометрика. Предмет и задачи История развития хеометрики как науки в работах российских и зарубежных ученых. Распознавание образов. Искусственный интеллект. Анализ исследовательских данных. Отличие исследовательского анализа данных от проверки статистических гипотез. Взаимосвязь между отдельными стадиями химического анализа.	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2(4)	-	6	Собеседование
2.	Химический анализ как метрологическая процедура. Результат анализа как случайная величина. Погрешности, способы их классификации. Основные источники погрешностей в химическом анализе. Статистические критерии: математическое ожидание (генеральное среднее) и генеральная дисперсия случайной величины, выборочное среднее, дисперсия, стандартное отклонение, доверительная вероятность и доверительный. интервал.	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	3	2	-	6	Собеседование

3.	Первичная обработка экспериментальных результатов. Построение полигона и гистограммы распределения экспериментальных результатов. Нормальное распределение. Критерий Пирсона. Статистические гипотезы. Проверка гипотезы о нормальном распределении результатов анализа. Применение статистических гипотез в анализе. Промахи и методы их исключения. Систематические погрешности в химическом анализе. Правильность и способы проверки правильности. Погрешности косвенных измерений.	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	1	2	-	6	Собеседование
4.	Дисперсионный анализ. Визуализация данных, форматы представления данных. Определение источника вариации данных. Однофакторный дисперсионный анализ (на примере проверки влияния различных методик проведения химического анализа в разных лабораториях). Ошибка сопоставимости. Ход простого дисперсионного анализа: распределение цифрового материала на группы, определение случайных ошибок внутри групп, расчет степеней свободы и дисперсий. Зависимость точности данных от числа участвующих в анализе лабораторий. Источники случайной ошибки. Устранение ошибок. Двухфакторный дисперсионный анализ	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2	-	6	Собеседование
5.	Метод наименьших квадратов. Суть метода наименьших квадратов. Использование метода наименьших квадратов в аналитической химии. Метод наименьших квадратов в в регрессионном анализе (аппроксимация данных).	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2	-	6	Коллоквиум

	Взвешенный метод наименьших квадратов. Погрешность анализа с использованием метода наименьших квадратов.						
6.	Однофакторный эксперимент. Критерии выбора вида математической модели химического процесса. Требования к математической модели. Оценка адекватности математической модели. Регрессионный анализ. Применение регрессионного анализа для построения градуировочных зависимостей. Коэффициент корреляции. Многофакторный эксперимент. Поверхность отклика. Математическое планирование аналитического эксперимента. Полный факторный эксперимент. Оценка значимости факторов математической модели.	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2	-	6	Решение индивидуальных заданий
7.	Методы численного интегрирования. Дифференциальная спектроскопия. Повышение информационного содержания аналитического сигнала. Оценка параметров сигнала. Разрешение сложных аналитических сигналов. Дифференциальная спектроскопия. Выделение отдельных компонент сигнала. Методы численного интегрирования.	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2	-	6	Тестирование
8.	Многокомпонентный анализ. Сбор, обработка, хранение и отображение результатов анализа, планирование и оптимизация экспериментов. Базы данных, основные принципы их построения и использования. Обработка многомерных данных: центрирование, нормирование, взвешивание. Понятие о факторном анализе. Общие сведения о методах оптимизации и планирования эксперимента. Основные	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2	-	6	Собеседование

	понятия и определения.						
9.	Основные методы интеллектуального анализа данных: метод опорных векторов, искусственных нейронных сетей, метод частичных наименьших квадратов. Визуализация многомерных данных с использованием методов интеллектуального анализа: анализ главных компонент, карты Кохонена, генеративные топографические карты. Алгоритм NIPALS.	УК-6 ПК-1 ПК-4 ПК-5	2	2	-	6	Коллоквиум
	ИТОГО за семестр		18	18 (4)	-	54	
	ИТОГО		18	18 (4)	-	54	

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств (ФОС) по дисциплине (модулю) базируется на перечне осваиваемых компетенций с указанием индикаторов. ФОС обеспечивает объективный контроль достижения запланированных результатов обучения. ФОС включает в себя:

- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;

- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций (включаются в методические указания по тем видам работ, которые предусмотрены учебным планом и предусматривают оценку сформированности компетенций);

- типовые оценочные средства, необходимые для оценки знаний, умений и уровня сформированности компетенций.

ФОС является приложением к данной программе дисциплины (модуля).

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Приступая к работе, каждый студент должен принимать во внимание следующие положения.

Дисциплина (модуль) построена по тематическому принципу, каждая тема представляет собой логически завершённый раздел.

Лекционный материал посвящён рассмотрению ключевых, базовых положений курсов и разъяснению учебных заданий, выносимых на самостоятельную работу студентов.

Практические занятия проводятся с целью закрепления усвоенной информации, приобретения навыков ее применения при решении практических задач в соответствующей предметной области.

Самостоятельная работа студентов направлена на самостоятельное изучение дополнительного материала, подготовку к практическим занятиям, а также выполнения всех видов самостоятельной работы.

Для успешного освоения дисциплины, необходимо выполнить все виды самостоятельной работы, используя рекомендуемые источники информации.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1 Основная литература:

1. Шачнева, Е.Ю. Хемометрика. Базовые понятия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е.Ю. Шачнева. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2016. - 160 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/90051>

2. Вершинин, В.И. Аналитическая химия [Электронный ресурс] : учебник / В.И. Вершинин, И.В. Власова, И.А. Никифорова. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 428 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/97670>

3. Аналитическая химия: химические методы анализа [Электронный ресурс] : учебник / Е.Г. Власова [и др.] ; под ред. О.М. Петрухина, Л.Б. Кузнецовой. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 467 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/97407>

4. Вершинин, В.И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.И. Вершинин, Н.В. Перцев. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 236 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92623>

8.2 Дополнительная литература:

1. Метрология и средства измерений: Учебное пособие/Пелевин В. Ф. - М.: НИЦ ИНФРА-М, Нов. знание, 2013. - 272 с.: 60х90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат)

(Переплёт) ISBN 978-5-16-006769-8 - Режим доступа:
<http://znanium.com/catalog/product/406750>

2. Муравьева, И.В. Методы контроля и анализа веществ. Потенциометрический метод контроля и анализа веществ [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.В. Муравьева, О.Л. Скорская. - Электрон. дан. - Москва : МИСИС, 2012. - 45 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/47430> 3

. Адлер, Ю.П. Методология и практика планирования эксперимента в России [Электронный ресурс] : монография / Ю.П. Адлер, Ю.В. Грановский. - Электрон. дан. - Москва : МИСИС, 2016. - 182 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/93686>

4. Смагунова, А.Н. Математическое планирование эксперимента в методических исследованиях аналитической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.Н. Смагунова, Г.В. Пашкова, Л.И. Белых. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 120 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/98248>

8.3 Интернет-ресурсы:

1. <http://ru.wikipedia.org> - электронная энциклопедия.
2. <http://www.koob.ru> - электронная библиотека.
3. <http://www.iqlib.ru> - Электронно-библиотечная система.
4. <http://studentam.net> - электронная библиотека учебников.
5. www.dissercat.ru - электронная библиотека диссертационных работ.

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

При чтении лекций используется компьютерная техника, демонстрации презентационных мультимедийных материалов. На семинарских и практических занятиях студенты представляют презентации, подготовленные ими в часы самостоятельной работы.

Информационные справочные системы:

Информационно-справочные и информационно-правовые системы, используемые при изучении дисциплины:

1	https://studbooks.net
2	https://chem21.info
3	https://studme.org/

Программное обеспечение:

1	Альт Рабочая станция 10
2	Альт Рабочая станция К
3	Альт «Сервер»
4	Пакет офисных программ - Р7-Офис

10. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Лекционные занятия	1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, укомплектованная специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации: компьютер (переносной ноутбук), проектор (переносной проектор), доска магнитно-маркерная. Учебно-наглядные пособия в виде тематических презентаций, соответствующих рабочим программам дисциплин.
	2	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ
Практические занятия	1	Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа, укомплектованная специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации: компьютер (переносной ноутбук), проектор (переносной проектор), доска магнитно-маркерная.
	2	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ
П практическая подготовка	1	Помещения для практической подготовки, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.
	2	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ
Самостоятельная работа	1	Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.
	2	Фонды и ресурсы Научной библиотеки СКФУ

11. Особенности освоения дисциплины (модуля) лицами с ограниченными возможностями здоровья

Обучающимся с ограниченными возможностями здоровья предоставляются специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы, специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования, услуги ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, а также услуги сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков.

Освоение дисциплины (модуля) обучающимися с ограниченными возможностями здоровья может быть организовано совместно с другими обучающимися, а также в отдельных группах.

Освоение дисциплины (модуля) обучающимися с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

В целях доступности получения высшего образования по образовательной программе лицами с ограниченными возможностями здоровья при освоении дисциплины (модуля) обеспечивается:

1) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),
- письменные задания, а также инструкции о порядке их выполнения оформляются увеличенным шрифтом,

- специальные учебники, учебные пособия и дидактические материалы (имеющие крупный шрифт или аудиофайлы),
- индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс,
- при необходимости студенту для выполнения задания предоставляется увеличивающее устройство;

2) для лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:

- присутствие ассистента, оказывающий студенту необходимую техническую помощь с учетом индивидуальных особенностей (помогает занять рабочее место, передвигаться, прочитать и оформить задание, в том числе, записывая под диктовку),
- обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающемуся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;
- обеспечивается надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации;

3) для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата (в том числе с тяжелыми нарушениями двигательных функций верхних конечностей или отсутствием верхних конечностей):

- письменные задания выполняются на компьютере со специализированным программным обеспечением или надиктовываются ассистенту;
- по желанию студента задания могут выполняться в устной форме.

12. Особенности реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения

Согласно части 1 статьи 16 Федерального закона от 29 декабря 2012 г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации» под *электронным обучением* понимается организация образовательной деятельности с применением содержащейся в базах данных и используемой при реализации образовательных программ информации и обеспечивающих ее обработку информационных технологий, технических средств, а также информационно-телекоммуникационных сетей, обеспечивающих передачу по линиям связи указанной информации, взаимодействие обучающихся и педагогических работников. Под *дистанционными образовательными технологиями* понимаются образовательные технологии, реализуемые в основном с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) взаимодействии обучающихся и педагогических работников.

Реализация дисциплины может быть осуществлена с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично. Компоненты УМК дисциплины (рабочая программа дисциплины, оценочные и методические материалы, формы аттестации), реализуемой с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения, содержат указание на их использование.

При организации образовательной деятельности с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения могут предусматриваться асинхронный и синхронный способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

При применении дистанционных образовательных технологий и электронного обучения в расписании по дисциплине указываются: способы осуществления взаимодействия участников образовательных отношений посредством информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (ВКС-видеоконференцсвязь, ЭТ – электронное тестирование); ссылки на электронную информационно-образовательную среду СКФУ, на образовательные платформы и ресурсы иных организаций, к которым предоставляется открытый доступ через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет»; для

синхронного обучения - время проведения онлайн-занятий и преподаватели; для асинхронного обучения - авторы онлайн-курсов.

При организации промежуточной аттестации с применением дистанционных образовательных технологий и электронного обучения используются Методические рекомендации по применению технических средств, обеспечивающих объективность результатов при проведении промежуточной и государственной итоговой аттестации по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры с применением дистанционных образовательных технологий (Письмо Минобрнауки России от 07.12.2020 г. № МН- 19/1573-АН "О направлении методических рекомендаций").

Реализация дисциплины с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий осуществляется с использованием электронной информационно-образовательной среды СКФУ, к которой обеспечен доступ обучающихся через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет», или с использованием ресурсов иных организаций, в том числе платформ, предоставляющих сервисы для проведения видеоконференций, онлайн-встреч и дистанционного обучения (МТС-Линк), а также с использованием возможностей социальных сетей для осуществления коммуникации обучающихся и преподавателей.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины, реализуемой с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, включает представленные в электронном виде рабочую программу, учебно-методические пособия или курс лекций, методические указания к выполнению различных видов учебной деятельности обучающихся, предусмотренных дисциплиной, и прочие учебно-методические материалы, размещенные в информационно-образовательной среде СКФУ.