

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

аналитической химии



Т.В. Елисеева

24.04.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.03.01 Основы метрологии и хемометрики

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация:

Физическая химия

3. Квалификация выпускника: Магистр

4. Форма обучения: Очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: 1002 аналитической химии

6. Составители программы: Паршина Анна Валерьевна, д.х.н.

(ФИО, ученая степень, ученое звание)

7. Рекомендована: Научно-методический Совет химического факультета,

11.04.2024, протокол № 4

(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2025 / 2026

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целью освоения учебной дисциплины является:

– формирование знаний по метрологии и хемометрике, необходимых для моделирования многомерных (многофакторных) физико-химических процессов и явлений путем применения проекционных математических методов, позволяющих выделять в больших массивах данных скрытые (латентные) переменные и анализировать связи, существующие в изучаемой системе.

Задачи учебной дисциплины:

– овладеть способами эффективного извлечения информации из экспериментальных данных для перехода на новый уровень понимания химических процессов и систем, учитывающий межкомпонентные (межфакторные) взаимодействия;

– овладеть математическими алгоритмами многомерного анализа применительно к решению задач физической, неорганической химии и аналитической химии.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: (обязательная часть или часть, формируемая участниками образовательных отношений (вариативная) блока Б1, к которой относится дисциплина; требования к входным знаниям, умениям и навыкам; дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей)

Б1.В. Вариативная часть.

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: базовые знания фундаментальных разделов физики, физической и аналитической химии, навыки практической работы в области физики и химии, владение математическим аппаратом и основами информатики в объеме, необходимом для освоения теории вероятностей, математической статистики, многомерных математических методов.

Дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей: Компьютерные технологии в науке и образовании, Мультисенсорные системы и перспективы практического применения, Интеллектуальные сенсорные системы на основе наноструктурированных материалов.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ – 2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области физической и неорганической химии	ПКВ - 2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Знать: основные математические функции, используемые в компьютерных программах математических и статистических методов применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента. Уметь: составлять и применять математические алгоритмы многомерного анализа в основных компьютерных программах математических и статистических методов для решения задач физической, неорганической химии и аналитической химии, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации. Владеть:

				теоретическими основами и компьютерными программами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике для обработки результатов одно- и многофакторного эксперимента.
		ПКВ - 2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знать: основные метрологические аспекты выполнения физико-химического эксперимента с применением приемов релятивизации, рандомизации. Уметь: обеспечить единство измерений и оценить показатели точности определения значений измеряемой величины при выполнении исследований по теме магистерской диссертации. Владеть: основными приемами градуировки, обнаружения и обработки сигналов, а также оценки метрологических характеристик методик анализа.
ПКВ – 3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области физической и неорганической химии	ПКВ - 3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	Знать: способы получения информации об исследуемой величине путем обработки и графической визуализации результатов физико-химического эксперимента с помощью статистических и многомерных математических методов. Уметь: выполнять проверку статистических гипотез применительно к анализу собственных экспериментальных данных и сопоставлению с результатами других исследований. Владеть: основными приемами корреляционного, дисперсионного и регрессионного анализа применительно к многофакторному эксперименту.
		ПКВ - 3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Знать: основные принципы и подходы для выполнения НИР и НИОКР в области физической, неорганической химии и аналитической химии, в том числе по теме магистерской диссертации с применением многофакторного планирования эксперимента. Уметь: формулировать статистически обоснованные и математически доказанные выводы по результатам НИР и НИОКР по теме магистерской диссертации. Владеть: навыками представления результатов НИР и НИОКР для публикации в научных изданиях по теме магистерской диссертации.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. (в соответствии с учебным планом) – 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – зачет с оценкой.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		3 семестр		
Аудиторные занятия	56	56		
в том числе:	лекции	18	18	
	практические	38	38	
	лабораторные	-	-	
Самостоятельная работа	88	88		
в том числе: курсовая работа (проект)				
Форма промежуточной аттестации (экзамен – <u> </u> час.)				
Итого:	144	144		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Общие вопросы метрологии и хемометрики.	Предмет хемометрики. Физико-химический эксперимент как метрологическая процедура. Классификация и оценка ошибок прямых и косвенных измерений. Точность, правильность, воспроизводимость измерений. Правила округления результатов прямых и косвенных измерений.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
1.2	Основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	Основные законы теории вероятностей. Нормальный закон распределения случайных величин. Применение закона Гаусса-Лапласа для анализа представительной выборки. Статистика малых выборок.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
1.3	Статистические гипотезы и алгоритмы их проверки	Статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Проверка типа распределения. Проверка выборки на наличие грубых промахов. Сравнение выборочных параметров как метод исследования.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
1.4	Основы многофакторного эксперимента.	Факторы. Параметры. Введение в корреляционный и регрессионный анализ. Оценка значимости коэффициентов регрессии. Оценка адекватности регрессии. Введение в дисперсионный анализ.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
1.5	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Рандомизация. Релятивизация. Способы оценки пределов обнаружения и определения точности их оценки. Математические приемы увеличения чувствительности градуировочной функции.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
2. Практические занятия			
2.1	Общие вопросы метрологии и хемометрики.	Округление результатов прямых и косвенных измерений на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
2.2	Основы математической статистики	Анализ представительной выборки на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)

	применительно к физико-химическому эксперименту.	Анализ малой выборки на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации.	
2.3	Статистические гипотезы и алгоритмы их проверки	Проверка выборки на наличие грубых промахов на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации. Проверка статистической гипотезы о соответствии типа распределения нормальному на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот. Проверка статистических гипотез о равенстве математических ожиданий и дисперсий случайных величин на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
2.4	Основы многофакторного эксперимента.	Оценка корреляции между парами параметров/факторов на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации. Построение одно- и двумерных градуировочных зависимостей по ортогональным схемам эксперимента на примере результатов спектрофотометрического и потенциометрического анализа растворов аминокислот. Применение однофакторного дисперсионного анализа для оценки влияния вида галоидного алкила на степень полимеризации.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)
2.5	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Оценка пределов обнаружения на основании одно- и двумерных градуировочных зависимостей на примере результатов спектрофотометрического и потенциометрического анализа растворов аминокислот.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хемометрики (vsu.ru)

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Общие вопросы метрологии и хемометрики.	2	2	0	6	10
2	Основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	6	14	0	28	48
3	Статистические гипотезы и алгоритмы их проверки	2	6	0	18	26
4	Основы многофакторного эксперимента.	6	14	0	30	50
5	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	2	2	0	6	10
	Итого:	18	38	0	88	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: указание наиболее сложных разделов, работа с конспектами лекций, презентационным материалом, рекомендации по выполнению курсовой работы, по организации самостоятельной работы по дисциплине и др)

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Смагунова, А. Н. Методы математической статистики в аналитической химии [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. Н. Смагунова, О. М. Карпукова. – Ростов н/Д.: Феникс, 2012. – 346 с. : ил. – Библиогр.: с. 324-328. – ISBN 978-5-222-19507-9.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Аналитическая химия [Текст]. В 3 т. Т. 3. Химический анализ : учеб. для студ. высш. учеб. заведений / И. Г. Зенкевич [и др.] ; под. ред. Л. Н. Москвина. – М. : Академия 2010. – 364, [1] с. : ил., табл. – Библиогр.: с. 356-359. – ISBN 978-5-7695-3957-2.
3	Основы аналитической химии [Текст]. В 2 т. Т. 2. Методы химического анализа : учеб. для вузов / Н.В. Алов [и др.] ; под ред. Ю. А. Золотова – М. : Академия, 2014 . – 6-е изд., перераб. и доп. – 409, [1] с. : ил., табл. – Библиогр. в конце гл. – ISBN 978-5-4468-0518-1.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
4	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хеометрики (vsu.ru)
5	ЗНБ ВГУ, www.lib.vsu.ru/
6	Электронно-библиотечная система BOOK.ru, https://www.book.ru/
7	Электронно-библиотечная система "Университетская библиотека online", http://biblioclub.ru/
8	Электронно-библиотечная система "Консультант студента", http://www.studmedlib.ru

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Паршина А.В. Математическая обработка результатов эксперимента [Текст] : методические указания к семинарским занятиям / А. В. Паршина, О. В. Бобрешова. – Воронеж : Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2021. – 28 с. – Библиогр.: с. 28. – 100 экз.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ) в части освоения лекционного материала, проведения текущей и промежуточной аттестации, проведения части лабораторных работ и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru/>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для электронного обучения (ЭО) (п. 15).

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины: (при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)
- 4 компьютера.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

По решению кафедры оценки за экзамен/зачет могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре, но не ранее, чем на заключительном занятии. При несогласии студента с оценкой последний вправе сдавать экзамен/зачет на общих основаниях.

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Общие вопросы метрологии и хемометрики.	ПКВ – 2 ПКВ – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, контрольная работа №1.
2.	Основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	ПКВ – 2 ПКВ – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, контрольная работа №1.
3.	Статистические гипотезы и алгоритмы их проверки	ПКВ – 2 ПКВ – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, контрольная работа №2.
4.	Основы многофакторного эксперимента.	ПКВ – 2 ПКВ – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, контрольная работа №2.
5.	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	ПКВ – 2 ПКВ – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, контрольная работа №2.
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Билеты к зачету

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольная работа 1

(наименование оценочного средства текущего контроля успеваемости)

Перечень:

Перечень вопросов №1:

- 1) Классификация ошибок: погрешности и отклонения, абсолютные и относительные, систематические (классификация, примеры) и случайные. Виды систематических ошибок, методы их устранения (продемонстрировать на примере конкретного физико-химического метода анализа). Количественная оценка ошибок. Точность, правильность, воспроизводимость, их количественная оценка. Правила округления.
- 2) Случайная величина. Непрерывная случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины (формулировка, графический и аналитический вид). Преобразование Лапласа, графический и аналитический вид закона Гаусса-Лапласа. Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа (формула). Докажите, что параметры стандартного нормированного распределения непрерывной случайной величины Гаусса-Лапласа равны соответственно: $\mu(u)=0$, $\sigma(u)=1$.
- 3) Случайная величина. Генеральная совокупность, математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение. Выборочная совокупность, среднее значение, стандартное отклонение. Докажите, что дисперсия среднего значения выборки, объемом n , в n раз меньше дисперсии единичного значения. Распределение Стьюдента. Алгоритм анализа малой выборки.

Перечень вопросов №2:

- 1) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 70; 71; 73; 66; 69; 66; 65; 100.
- 2) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 84; 94; 86; 90; 84; 82; 85; 110.
- 3) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 123; 125; 125; 120; 128; 125; 123; 100.
- 4) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 138; 140; 143; 144; 143; 144; 144; 100.
- 5) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 182; 185; 183; 180; 186; 177; 180; 100.
- 6) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 188; 193; 199; 193; 194; 195; 189; 100.
- 7) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 224; 228; 213; 233; 221; 223; 224; 100.
- 8) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 65; 73; 62; 63; 72; 66; 66; 100.
- 9) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 76; 90; 77; 78; 82; 80; 82; 110.
- 10) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 123; 128; 121; 120; 123; 122; 119; 100.
- 11) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 194; 180; 188; 187; 197; 204; 194; 100.
- 12) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 166; 170; 183; 181; 183; 171; 181; 100.
- 13) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 140; 137; 142; 144; 147; 141; 131; 100.
- 14) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 118; 118; 111; 118; 122; 127; 117; 90.
- 15) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 208; 202; 213; 225; 213; 218; 217; 100.

Описание технологии проведения: письменная работа.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания):

Отлично – 95-100%; хорошо – 75-80%; удовлетворительно – 55-60%; неудовлетворительно – менее 55%.

Контрольная работа 2

(наименование оценочного средства текущего контроля успеваемости)

Перечень:

Перечень вопросов №1:

- 1) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Принципиальный алгоритм проверки статистической гипотезы о принадлежности двух выборок к одной генеральной совокупности.
- 2) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Сформулируйте и докажите правило 3σ . Алгоритмы проверки выборок разного объема ($n \geq 50$, $n \leq 30$, $n \leq 10$) на наличие грубых промахов.
- 3) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Алгоритм проверки типа распределения случайной величины по критерию Пирсона.

Перечень вопросов №2:

- 1) Хемометрика. Статистическая модель. Факторы и параметры эксперимента. Кратко охарактеризуйте типы подходов к планированию многофакторного эксперимента.
- 2) Корреляционный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической химии.
- 3) Дисперсионный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической химии.
- 4) Регрессионный анализ. Этапы. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа. Применение в аналитической химии.

Описание технологии проведения: письменная работа.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания):

Отлично – 95-100%; хорошо – 75-80%; удовлетворительно – 55-60%; неудовлетворительно – менее 55%.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету

(наименование оценочного средства промежуточной аттестации)

Перечень:

1. Метрология. Измерение величины. Прямые и косвенные измерения.
2. Эксперимент. Схема активного эксперимента.
3. Классификация ошибок: погрешности и отклонения, абсолютные и относительные, систематические и случайные (с примерами). Количественная оценка ошибок.
4. Точность, правильность, воспроизводимость. Их количественная оценка.
5. Случайное событие. Классическое и статистическое определения вероятности случайного события (с примерами).
6. Случайная величина. Непрерывная случайная величина. Дискретная случайная величина. Закон распределения случайной величины.
7. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины. Генеральная совокупность, математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение.
8. Преобразование Лапласа. Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа.
9. Выборочная совокупность, среднее значение, стандартное отклонение. Распределение Стьюдента. Алгоритм анализа малой выборки.
10. Статистическая гипотеза. Принципиальный алгоритм проверки статистической гипотезы. Нулевая и обратная статистические гипотезы.
11. Алгоритм проверки выборки на наличие грубых промахов при $n \geq 50$.

12. Алгоритм проверки выборки на наличие грубых промахов при $n \leq 10$.
13. Алгоритм проверки выборки на наличие грубых промахов при $n \leq 30$.
14. Алгоритм проверки подчинения распределения случайной величины нормальному закону.
15. Принципиальный алгоритм проверки гипотезы о принадлежности нескольких выборок одной генеральной совокупности
16. Алгоритм сравнения средних двух выборок.
17. Алгоритм сравнения дисперсий двух выборок.
18. Алгоритм сравнения дисперсий нескольких выборок равного объема.
19. Алгоритм сравнения дисперсий нескольких выборок разного объема.
20. Хемометрика. Статистическая модель. Факторы и параметры эксперимента. Кратко охарактеризуйте типы подходов к планированию многофакторного эксперимента.
21. Корреляционный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической химии.
22. Дисперсионный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической химии.
23. Регрессионный анализ. Этапы. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа. Применение в аналитической химии.

Описание технологии проведения: собеседование по билетам.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания:

Отлично (повышенный уровень сформированности компетенций) – обучающийся в полной мере владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач, что соответствует полному освоению компетенций;

Хорошо (базовый уровень сформированности компетенций) – обучающийся владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, применять теоретические знания для решения практических задач, допускает незначительные ошибки, неточности, которые исправлены после замечания преподавателя, что соответствует не достаточно полному освоению компетенций.

Удовлетворительно (пороговый уровень сформированности компетенций) – ответ на контрольно-измерительный материал неполный, без обоснований, объяснений. Демонстрирует частичные знания учебного материала, значительные затруднения в вопросах решения практических задач, что показывает недостаточное владение компетенциями. Ошибки устраняются по дополнительным вопросам преподавателя.

Неудовлетворительно – ответ на контрольно-измерительный фрагментарный. Обучающийся демонстрирует несистематические, отрывочные знания, допускает грубые, принципиальные ошибки, которые не устранены после дополнительных наводящих вопросов, что соответствует не освоению компетенций.

20.3 Контроль освоения ПКВ

Контроль освоения ПКВ-2.

ПКВ-2. Закрытые вопросы

1. Каковы основные показатели правильности результатов эксперимента (выберите два варианта)?

А стандартное отклонение

Б доверительный интервал

В абсолютная погрешность

Г относительная погрешность

2. Какая из указанных ошибок является характеристикой воспроизводимости результатов эксперимента (выберите один вариант)?

А стандартное отклонение

Б абсолютная погрешность

В относительная погрешность

3. Какие принципы выполнения эксперимента могут быть использованы способы устранения систематических ошибок (выберите два варианта)?

А дублирование эксперимента

Б релятивизация

В рандомизация

Г проверка выборки на наличие грубых промахов

4. Какой этап отсутствует в алгоритме статистического анализа малой выборки (выберите один вариант)?

А проверка выборки на наличие грубых промахов

Б сравнение дисперсий

В расчет доверительного интервала

5. Среднее значение измеряемой величины составило 2.487, а ошибка его определения составила ± 0.1268 . Выберите вариант, в котором результат эксперимента представлен в соответствии с правилами округления.

А 2.48 ± 0.13

Б 2.5 ± 0.1

В 2.4 ± 0.13

6. Какая функция в программе EXCEL позволяет выполнить расчет доверительного интервала (выберите один вариант)?

А СТАНДОТКЛОН (или СТАНДОТКЛОН.В)

Б ДИСП (или ДИСП.В)

В ДОВЕРИТ (или ДОВЕРИТ.СТЬЮДЕНТ)

Г СРЗНАЧ

7. Какие функции в программе EXCEL могут быть использованы при реализации алгоритма проверки выборки на наличие грубых промахов по t-критерию (выберите четыре варианта)?

А МИН

Б СТАНДОТКЛОН (или СТАНДОТКЛОН.В)

В ДИСП (или ДИСП.В)

Г МАКС

Д ДОВЕРИТ (или ДОВЕРИТ.СТЬЮДЕНТ)

Е СРЗНАЧ

Ж СУММ

8. Какая функция в программе EXCEL позволяет выполнить расчет коэффициента корреляции (выберите один вариант)?

А СРЗНАЧ

Б СУММ

В КОРРЕЛ

Г ДИСП

Д МИН

9. Какие функции в программе EXCEL могут быть использованы для расчета коэффициентов регрессии матричным способом (выберите три варианта)?

А МОПРЕД(X)

Б ТРАНСП(X)

В МОБР(X)

Г МУМНОЖ(X;Y)

ПКВ-2. Комбинированные вопросы

1. Какой тип ошибки характеризует любое отличие измеряемой величины от истинного значения?

Погрешность

2. Какой тип ошибки характеризует любое отличие измеряемой величины от среднего значения?

Отклонение

3. Какой параметр выборки может быть рассчитан как отношение суммы всех вариантов к объему выборки?

Среднее значение

4. Какой параметр (выраженный в тех же единицах измерения, что и измеряемая величина) выборки характеризует средний разброс вариант относительно среднего значения?

Стандартное отклонение

5. Как называют значение выборки, сильно отличающееся от других значений выборки (значимость отличия устанавливается путем проверки статистической гипотезы)?

Грубый промах

6. Рассчитайте доверительный интервал, которому принадлежит ошибка среднего значения, если объем выборки $n=16$, коэффициент Стьюдента $t=2.13$ (при числе степеней свободы выборки 15 и доверительной вероятности 0.95), стандартное отклонение $s(x)=2$. Запишите полученное значение с учетом правил округления.

1.1

ПКВ-2. Открытые вопросы

1. В чем состоит принцип дублирования эксперимента? Как называется совокупность данных, полученных при дублировании эксперимента?

Дублирование эксперимента – повтор измерений при одних и тех же условиях, заданных исследователем.

Совокупность данных, полученных при дублировании эксперимента, называют выборкой или выборочной совокупностью.

2. Дайте определение таким метрологическим понятиям как точность, правильность и воспроизводимость.

Точность – малость ошибки или близость измеренного значения к истинному.

Правильность – малость систематической ошибки или близость среднего значения к истинному.

Воспроизводимость – малость случайной ошибки или близость измеренного значения к среднему.

3. Сформулируйте, в чем состоит основное отличие систематической и случайной ошибок.

Систематическая ошибка – постоянная по величине и знаку ошибка, которую необходимо учесть или устранить.

Случайная ошибка – переменная по величине и знаку ошибка, которую невозможно устранить при выполнении эксперимента.

4. Сформулируйте принципы релятивизации и рандомизации, используемые для устранения систематических ошибок при выполнении эксперимента.

Релятивизация – выполнение измерений относительно объекта сравнения, т.е. рассмотрение разности результатов измерений для объекта исследования и объекта сравнения. Рандомизация – прием, переводящий систематические ошибки в разряд случайных посредством варьирования одновременно нескольких составляющих эксперимента без нарушения условий дублирования эксперимента.

5. В чем состоит нормальный закон распределения непрерывной случайной величины (закон Гаусса)? Дайте определение параметрам закона распределения случайной величины (математическое ожидание, дисперсия).

Если вероятность значений непрерывной случайной величины тем выше, чем ближе они к математическому ожиданию, тогда распределение случайной величины подчиняется нормальному закону (закону Гаусса).

Математическое ожидание – среднее значение из всех возможных значений случайной величины (генеральное среднее).

Дисперсия – математическое ожидание квадрата отклонения значений случайной величины от ее математического ожидания.

6. Что такое статистическая гипотеза и каков общий принципиальный алгоритм проверки статистической гипотезы?

Статистическая гипотеза – предположение о типе распределения или о свойствах параметров распределения случайной величины.

Алгоритм проверки статистической гипотезы включает следующие этапы: формулировка нулевой гипотезы; задание уровня значимости (или доверительной вероятности) на котором будет сделан вывод о справедливости или несправедливости гипотезы; выбор и расчет критерия проверки; сравнение рассчитанного значения критерия с его критическим значением. Критическое (максимально допустимое) значение критерия находят в соответствующей статистической таблице при заданном уровне значимости и числе степеней свободы. Если рассчитанное значение критерия не превышает критическое, то нулевая статистическая гипотеза верна, в противном случае верна обратная статистическая гипотеза.

Контроль освоения ПКВ-3.

ПКВ-3. Закрытые вопросы

1. Какие критерии могут быть использованы для статистической оценки значимости отличий результатов эксперимента (выберите два варианта)?

- А критерий Стьюдента**
- Б Q-критерий
- В t -критерий
- Г критерий Фишера**

2. Какие статистические критерии используются для проверки гипотезы о принадлежности двух выборок одной генеральной совокупности (выберите два варианта)?

- А критерий Фишера**
- Б критерий 3σ
- В критерий Стьюдента**
- Г асимметрия и эксцесс

3. Распределение Стьюдента позволяет выполнить статистический анализ выборки, объемом не более 30. Верно ли данное утверждение?

Верно

4. Если распределение случайной величины подчиняется нормальному закону (закону Гаусса), то для любой совокупности значений данной величины может быть установлена вероятность попадания ее значений в заданный доверительный интервал с помощью значений функции Лапласа. Верно ли данное утверждение?

Неверно

5. Если распределение случайной величины подчиняется нормальному закону (закону Гаусса), то разброс ее значений относительно математического ожидания не превышает утроенное среднеквадратическое отклонение. Верно ли данное утверждение?

Верно

6. В чем состоят основные принципы многофакторного эксперимента (выберите три варианта)?

- А объект исследования представляется как «черный ящик»**
- Б закономерности, определяющие поведения объекта исследования, выявляются посредством установления изменений параметров при одновременном воздействии различных факторов**
- В закономерности, определяющие поведения объекта исследования, выявляются посредством установления изменений параметров при поочередном воздействии различных факторов
- Г устанавливаются условия/допущения, в которых поведение объекта исследования описывается неэмпирическими уравнениями
- Д составление плана эксперимента осуществляется на основании математической модели**

7. Согласно методу наименьших квадратов, лучшими оценками коэффициентов уравнения регрессии будут такие, при которых сумма квадратов разности экспериментальных значений и значений, установленных по уравнению, будет минимальна. Верно ли данное утверждение?

Верно

8. Какой основной критерий используют в дисперсионном анализе (выберите один вариант)?

- А критерий Фишера**
- Б критерий Стьюдента
- В критерий Пирсона

9. Факторами в дисперсионном анализе могут быть (выберите один вариант).

- А количественные характеристики объекта исследования
- Б качественные характеристики объекта исследования
- В количественные и качественные характеристики объекта исследования**

ПКВ-3. Комбинированные вопросы

1. Какой критерий может быть использован для проверки выборки на наличие грубых промахов, если объем выборки менее 30?

t-критерий

2. Какой критерий может быть использован для проверки выборки на наличие грубых промахов, если объем выборки менее 10?

Q-критерий

3. Как в хемометрике называют величины, которые задают и/или контролируют в ходе эксперимента?

Факторы

4. Как в хемометрике называют величины, которые измеряют и/или оптимизируют в ходе эксперимента?

Параметры

5. Какой критерий может быть использован для оценки значимости коэффициентов регрессии?

Критерий Стьюдента

6. Какой критерий может быть использован для проверки адекватности регрессии?

Критерий Фишера

ПКВ-3. Открытые вопросы

1. Изложите принципиальный алгоритм статистического анализа малой выборки (укажите последовательность действий без формул).

Задать уровень значимости (или доверительной вероятности) на котором будет выполнен анализ. Проверить выборку на наличие грубых промахов. Рассчитать среднее значение выборки. Рассчитать стандартное отклонение. Рассчитать доверительный интервал (для расчета доверительного интервала следует использовать табличное значение коэффициента Стьюдента при заданном уровне значимости (или доверительной вероятности) и числе степеней свободы, на единицу меньшей объема выборки). Представить результат эксперимента с учетом правил округления.

2. Изложите принципиальный алгоритм проверки гипотезы о принадлежности нескольких выборок одной генеральной совокупности (укажите последовательность действий без формул).

Задать уровень значимости (или доверительной вероятности) на котором будет выполнен анализ. Проверить выборки на наличие грубых промахов и рассчитать основные параметры выборок (среднее значение, дисперсию). Выполнить статистическое сравнение дисперсий выборок для проверки гипотезы о равенстве дисперсий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки. Выполнить статистическое сравнение средних значений выборок для проверки гипотезы о равенстве математических ожиданий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки. Гипотеза о принадлежности выборок одной генеральной совокупности верна, если и дисперсии, и средние значения выборок различаются незначимо (то есть если верна и гипотеза о равенстве дисперсий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки, и гипотеза о равенстве математических ожиданий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки).

3. Дайте определение понятию корреляции.

Наличие линейной взаимосвязи между двумя количественными характеристиками объекта исследования.

4. В чем состоит задача однофакторного дисперсионного анализа?

Изучение влияния одного фактора (количественного или качественного), который принимает различные уровни (значения или «качества» факторов) на рассматриваемый параметр.

5. Какова задача многофакторного дисперсионного анализа?

Изучение влияния нескольких факторов (количественных или качественных), каждый из которых принимает различные уровни (значения или «качества» факторов), на рассматриваемый параметр для оценки значимости каждого из них.

6. Дайте определение регрессионного анализа.

Установление функциональной зависимости между измеряемыми (или оптимизируемыми) и задаваемым (или контролируемым) количественными характеристиками объекта исследования.