

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
Аналитической химии

Селеменов В.Ф.

15.06.2018 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.04.02 Основы метрологии

Код и наименование дисциплины в соответствии с Учебным планом

1. Шифр и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализации:

Высокомолекулярные соединения

3. Квалификация (степень) 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: НМС химического факультета № 5 от 24.05.2018

(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2018 / 2019 Семестр: 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цель: формирование знаний по 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:

1. овладеть способами эффективного извлечения информации из экспериментальных данных для перехода на новый уровень понимания химических процессов и систем, учитывающий межкомпонентные (межфакторные) взаимодействия;
2. овладеть математическими алгоритмами многомерного анализа применительно к решению задач аналитической химии.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: (блок Б1, базовая или вариативная часть, 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: Экспресс и тест-методы анализа.

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

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: основные метрологические аспекты выполнения физико-химического эксперимента; уметь: рассчитывать вероятности простых и сложных случайных событий, с учетом представлений о типах случайных событий; владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для получения и обработки результатов физико-химического эксперимента.
ПК-2	Владением теорией и навыками практической работы	знать: способы графической визуализации результатов эксперимента, виды измерений, типы ошибок,

	в избранной области химии	источники и способы устранения систематических ошибок, правила округления; уметь: обеспечить единство измерений и оценить показатели точности определения значений измеряемой величины при выполнении физико-химического эксперимента; владеть: алгоритмами статистического анализа малой и представительной выборок, проверки статистических гипотез о равенстве математических ожиданий и дисперсий случайных величин, с учетом представлений о типах случайных величин, законах их распределения и свойствах параметров законов распределения.
--	---------------------------	---

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 2 / 72

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

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)			
	Всего	По семестрам		
		3 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия	18	18		
в том числе: лекции	-	-		
практические	18	18		
лабораторные	-	-		
Самостоятельная работа	54	54		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – ___ час.)	зачет	0		
Итого:	72	72		

13.1 Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Практические работы		
1.1	Введение.	Введение в метрологию.
1.2	Основы метрологии	Метрология. Измерение величины. Средства измерения. Метрологические характеристики. Результат измерения. Единство измерений. Прямые, косвенные измерения.
1.3	Физико-химический эксперимент как процесс получения информации	Эксперимент как процесс получения информации о физико-химической системе. Классификация ошибок: погрешности и отклонения, абсолютные и относительные, систематические и случайные. Релятивизация. Рандомизация. Количественная оценка ошибок прямых и косвенных величин. Точность, правильность, воспроизводимость. Правила округления.
1.4	Основы теории вероятностей	Введение в теорию вероятностей: случайное событие, вероятность случайного события. Теоремы сложения и умножения вероятностей.

1.5	Законы распределения случайных величин.	Результат эксперимента как случайная величина. Законы распределения случайных величин. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины. Преобразование Лапласа. Выборочная совокупность. Распределение Стьюдента.
1.6	Алгоритмы статистического анализа	Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа. Алгоритм анализа малой выборки. Проверка статистических гипотез. Ошибки 1-го и 2-го рода. Проверки выборки на наличие грубых промахов (Q-критерий, τ -критерий). Проверка гипотезы о равенстве средних (критерий Стьюдента). Проверка гипотезы о равенстве дисперсий (критерии Фишера).
1.7	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Обнаружение сигналов и управление. Обнаружение сигнала. Отношение сигнал/шум. Точность пределов обнаружения. Увеличение отношения сигнал/шум. Обработка сигналов. Разрешение аналитических сигналов. Определение сложности сигналов. Визуальное наблюдение.

13.2 Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение	0	1	0	0	1
2	Физико-химический эксперимент как процесс получения информации	0	2	0	6	8
3	Основы математической статистики применительно к физико-химическому эксперименту.	0	3	0	6	9
4	Основы корреляционного и регрессионного анализа.	0	3	0	10	13
5	Дисперсионный анализ.	0	3	0	10	13
6	Методы постановки и интерпретации многофакторного эксперимента.	0	3	0	12	15
7	Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	0	3	0	10	13
Итого:		0	18	0	54	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

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	Аналитическая химия: в 3 т. / под ред. Л.Н. Москвина. – Т.3: Химический анализ. – М., 2010. – 368 с.
2	Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии / А.Н. Смагунова, О.М. Карпукова. – Учеб. пособие. — Ростов н/Д: Феникс, 2012. — 346 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
-------	----------

3	<i>Систематические и случайные погрешности химического анализа / М.С. Черновьянц [ред] – М.: Академкнига, 2004. – 156 с., ил.</i>
4	<i>Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман. – М.: Высш. шк., 2010. – 478 с.</i>
5	<i>Дёрффель К. Статистика в аналитической химии / К. Дёрффель. – М.: Мир, 1994. – 267 с.</i>
6	<i>Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа / А.К. Чарыков. – Л.: Химия, 1984. – 165 с.</i>
7	<i>Вентцель Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель. – М.: Высш. шк., 1998. – 575 с.</i>
8	<i>Основы аналитической химии: в 2-х кн. / Ю.А. Золотов [и др.]. – М., 1999. – Кн. 1: Общие вопросы. – С. 21-57.</i>
9	<i>Вершинин В.И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента / В.И. Вершинин. – Омск: ОмГУ, 2005. – 263 с.</i>
10	<i>Шараф М.А. Хемометрика / М.А. Шараф, Д.Л. Илмэн, Б.Р. Ковальски. – Л.: Химия, 1989. – 269 с.</i>
11	<i>Ахназарова С.Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. – М.: Высш. шк., 1985. – 327 с.</i>
12	<i>Адлер Ю.П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий/ Ю.П.Адлер, Е.В.Маркова, Ю.В.Грановский – М.: Наука, 1976. – 279 с.</i>
13	<i>Пикула Н.П. Метрологическое обеспечение и контроль качества химического анализа / Н.П. Пикула, А.А. Бакибаев, Г.Б. Слепченко – Томск: ТПУ, 2012. - 216 с. (Учебное пособие)</i>
14	<i>Гармаш А.В. Метрологические основы аналитической химии / Н.М. Сорокина, А.В. Гармаш – Москва: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. - 47 с. (Учебное пособие).</i>

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

№ п/п	Источник
8	http://www.anchem.ru/
9	http://www.chemweb.com
10	www.lib.vsu.ru/
11	http://www.chem.vsu.ru/sorbcr/

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

№ п/п	Источник
1	<i>Бобрешова О.В., Паршина А.В. Основы анализа многомерных данных: методические указания к семинарским занятиям / О.В. Бобрешова, А.В.Паршина. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2009. - 25 с.</i>
2	<i>Бобрешова О.В., Паршина А.В. Основы химической метрологии и хемометрики: методические указания к семинарским занятиям / О.В. Бобрешова, А.В.Паршина. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2007. - 15 с.</i>

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости):

- ноутбук;
- мультимедийный проектор EPSON.

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)
- ноутбук.

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или	Планируемые результаты обучения (показатели	Этапы формирования компетенции (разделы	ФОС*
-----------------------------------	---	---	------

ее части)	достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	(темы) дисциплины или модуля и их наименование)	(средства оценивания)
ОПК-1 Способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	знать: основные метрологические аспекты выполнения физико-химического эксперимента.	Основы метрологии. Физико-химический эксперимент как процесс получения информации.	Устный опрос, контрольная работа №1.
	уметь: рассчитывать вероятности простых и сложных случайных событий, с учетом представлений о типах случайных событий.	Основы теории вероятностей	Устный опрос.
	владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для получения и обработки результатов физико-химического эксперимента.	Законы распределения случайных величин. Алгоритмы статистического анализа. Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Устный опрос, контрольная работа №1, практические задания № 1-3.
ПК-2 Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	знать: способы графической визуализации результатов эксперимента, виды измерений, типы ошибок, источники и способы устранения систематических ошибок, правила округления.	Основы метрологии. Физико-химический эксперимент как процесс получения информации.	Устный опрос, контрольная работа №1.
	уметь: обеспечить единство измерений и оценить показатели точности определения значений измеряемой величины при выполнении физико-химического эксперимента;	Основы метрологии. Физико-химический эксперимент как процесс получения информации. Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Устный опрос, контрольная работа №1, практические задания № 1-3.
	владеть: алгоритмами статистического анализа малой и представительной выборок, проверки статистических гипотез о равенстве математических ожиданий и дисперсий случайных величин, с учетом представлений о типах случайных величин, законах их распределения и свойствах параметров законов распределения.	Законы распределения случайных величин. Алгоритмы статистического анализа. Обнаружение и разрешение аналитических сигналов.	Устный опрос, контрольная работа №1, практические задания № 1-3.
Промежуточная аттестация			Комплект КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
---------------------------------	--------------------------------------	--------------

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.	Повышенный уровень	Отлично
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.	Базовый уровень	Хорошо
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	Пороговый уровень	Удовлетворительно
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.	–	Неудовлетворительно

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к зачету:

1. Классификация ошибок: погрешности и отклонения, абсолютные и относительные, систематические и случайные (с примерами). Количественная оценка ошибок.
2. Косвенная величина. Количественная оценка ошибок косвенных величин.
3. Точность, правильность, воспроизводимость. Их количественная оценка.
4. Случайное событие. Классическое и статистическое определения вероятности случайного события (с примерами). Классификация случайных событий: невозможные, случайные, достоверные, зависимые, независимые, совместные, несовместные (с примерами).
5. Случайное событие. Сумма случайных событий (с примером). Теоремы сложения вероятностей.
6. Случайное событие. Произведение случайных событий (с примерами). Теоремы умножения вероятностей.
7. Случайное событие. Полная группа случайных событий (с примером), противоположные случайные события. Условная вероятность, полная вероятность.
8. Случайная величина. Дискретная, непрерывная случайная величина. Генеральная совокупность. Закон распределения случайной величины. Параметры закона распределения случайной величины (математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение). Свойства параметров закона распределения случайной величины.
9. Случайная величина. Непрерывная случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины. Преобразование Лапласа. Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа.
10. Случайная величина. Генеральная совокупность, математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение. Выборочная совокупность, среднее значение, стандартное отклонение. Распределение Стьюдента. Алгоритм анализа малой выборки.
11. 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.

12. Сформулируйте и докажите правило 3σ .

13. Докажите, что дисперсия среднего значения выборки, объемом n , в n раз меньше дисперсии единичного значения.

14. Докажите, что параметры стандартного нормированного распределения непрерывной случайной величины Гаусса-Лапласа равны соответственно: $\mu(u)=0$, $\sigma(u)=1$.

19.3.2 Перечень практических заданий:

Практическое задание №1.

Применение нормального закона распределения для анализа представительной выборки.

Практическое задание №2.

Анализ малой выборки на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот.

Практическое задание №3.

Проверка статистических гипотез о равенстве математических ожиданий и дисперсий случайных величин на примере результатов потенциометрического анализа растворов аминокислот.

19.3.3 Комплект заданий для контрольных работ:

Комплект заданий для контрольной работы №1

Билет 1

1. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.

2. Можно ли объединить две выборки А и В на 5% уровне значимости? Если «Да», рассчитайте параметры объединенной выборки и доверительной интервал отклонения среднего значения от математического ожидания при доверительной вероятности 0,95.

А	2,33	4,64	3,59	3,45	2,64	3,00	3,41	2,03	2,80
В	2,08	3,72	2,51	2,65	2,56	6,56	2,21	2,58	3,13

Билет 2

1. Случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения случайной величины. Дисперсия. Математическое ожидание. Среднеквадратическое отклонение.

2. Можно ли объединить две выборки А и В на 5% уровне значимости? Если «Да», рассчитайте параметры объединенной выборки и доверительной интервал отклонения среднего значения от математического ожидания при доверительной вероятности 0,95.

А	31,0	37,0	35,0	32,0	30,0	23,0	56,0	30,0	31,0
В	24,0	28,0	33,0	29,0	30,0	31,0	27,0	40,0	28,0

Билет 3

1. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.

2. Можно ли объединить две выборки А и В на 5% уровне значимости? Если «Да», рассчитайте параметры объединенной выборки и доверительной интервал отклонения среднего значения от математического ожидания при доверительной вероятности 0,95.

А	5,2	20,0	5,5	5,3	5,0	4,9	5,5	5,4	5,3
В	5,0	5,1	4,9	5,1	5,4	5,5	5,1	5,0	4,9

Билет 4

1. Случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения случайной величины. Дисперсия. Математическое ожидание. Среднеквадратическое отклонение.

2. Можно ли объединить две выборки А и В на 5% уровне значимости? Если «Да», рассчитайте параметры объединенной выборки и доверительной интервал отклонения среднего значения от математического ожидания при доверительной вероятности 0,95.

А	1,33	1,64	1,59	1,45	1,64	3,29	1,41	1,23	1,80
В	1,68	1,62	1,01	0,65	1,56	1,27	1,20	1,58	1,13

Билет 5

1. Случайная ошибка. Систематическая ошибка. Погрешность. Отклонение. Точность. Правильность. Воспроизводимость.

2. Можно ли объединить две выборки А и В на 5% уровне значимости? Если «Да», рассчитайте параметры объединенной выборки и доверительной интервал отклонения среднего значения от математического ожидания при доверительной вероятности 0,95.

А	1,33	1,64	1,59	1,45	1,64	3,29	1,41	1,23	1,80
В	1,68	1,62	1,01	0,65	1,56	1,27	1,20	1,58	1,13

Билет 6

1. Случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения случайной величины. Дисперсия. Математическое ожидание. Среднеквадратическое отклонение.

2. Можно ли объединить две выборки А и В на 5% уровне значимости? Если «Да», рассчитайте параметры объединенной выборки и доверительной интервал отклонения среднего значения от математического ожидания при доверительной вероятности 0,95.

А	11	13	12	10	11	12	10	13	13
В	10	11	15	12	10	11	10	2	12

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме письменных работ (контрольные и практические работы). Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя практические задания, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.