МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.

_____ _____ 20___ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы научных исследований и метрология Б1.В.ОД.9

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия
Профиль подготовки: Физическая химия
Квалификация выпускника: бакалавр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):

Улахович Н.А.

Рецензент(ы):

Кутырева М.П.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.
Протокол заседания кафедры No ___ от "____" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:
Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 725016

Казань
2016

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Улахович Н.А. Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова , Nikolay.Ulakhovich@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Основы научных исследований и метрология" является подготовка к научно-исследовательской и педагогической деятельности, связанной с методами регистрации и обработки результатов химических экспериментов и проведением исследований в области аналитического контроля и получения количественных параметров химических равновесий. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления об отдельных областях приложения математики, математической статистики и компьютерной техники для решения задач аналитической химии и других химических дисциплин, имеющих дело с большими наборами экспериментальных данных. При освоении дисциплины студенты получают обзорные знания о способах проверки гипотез, корреляционных и регрессионных зависимостях, а также о перспективах развития методологии оценки как истинного значения измеряемой величины, так и параметров эмпирических формул.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.9 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 2 курсе, 4 семестр.

Дисциплина 'Основы научных исследований и метрология' относится к вариативной части блока дисциплин. Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих курсов базовой части цикла Б2 и Б3: 'Неорганическая химия' (расчеты параметров химических равновесий), 'Аналитическая химия' (количественный анализ) и 'Высшая математика' (теория вероятностей). Полученные при освоении дисциплины знания и умения облегчают освоение дисциплин 'ЭВМ в химии' и 'Аналитическая химия' (инструментальные методы анализа).

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОК-7 (общекультурные компетенции)	способностью к самоорганизации и самообразованию
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основы математической статистики, общие закономерности и методологию применения способов расчета различных погрешностей при получении экспериментальных данных.

2. должен уметь:

самостоятельно определять параметры распределения, проводить проверку характера распределения, оценивать случайные и систематические погрешности.

3. должен владеть:

навыками планирования и интерпретации результатов эксперимента при метрологической аттестации химического состава различных объектов.

Владение основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего высшей математики и аналитической химии) (ПК-2).

Способность применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-3).

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 4 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Общие сведения об измерениях физических величин. Основные принципы подходы к измерениям. Измерительное преобразование. Размер и значение физической величины.	4	1	2	0	0	письменное домашнее задание
2.	Тема 2. Основные и производные величины.Размерность. Система физических величин и система единиц.	4	2	2	0	0	письменное домашнее задание
3.	Тема 3. Общие вопросы теории измерений. Классификация измерений. Принципы, методы и методики измерения. Средства измерений. Условия измерений. Свойства состояния измерений. Погрешности измерений.	4	3	2	0	0	письменное домашнее задание
4.	Тема 4. Эталоны физических величин. Передача размеров единиц физических величин. Погрешности средств измерений и их нормирование.	4	4	2	0	0	письменное домашнее задание
5.	Тема 5. Общие понятия математической статистики. Генеральная совокупность и выборка. Параметры распределения. Математическое ожидание случайной величины. Дисперсия случайной величины.	4	5	2	0	0	письменное домашнее задание

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Нормальное распределение. Функция нормального распределения. Принципы, лежащие в основе закона нормального распределения.	4	6	2	0	0	тестирование
7.	Тема 7. Моменты непрерывного распределения. Равномерное распределение. Некоторые специальные распределения. Распределение Стьюдента. Распределение Фишера.	4	7	2	0	0	письменное домашнее задание
8.	Тема 8. Разбор конкретной ситуации: Проверка нормальности распределения выборки из 100 измерений построением гистограммы и использованием критерия Пирсона.	4	8	2	0	0	письменное домашнее задание
9.	Тема 9. Сравнение дисперсий. Сравнение двух дисперсий. Сравнение нескольких дисперсий. Выделение большей дисперсии из многих. Подозрительно выделяющиеся значения (промахи).	4	9	2	0	0	письменное домашнее задание
10.	Тема 10. Условия применения методов математической статистики и проверка выполнения этих условий	4	10	2	0	0	коллоквиум

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
11.	Тема 11. Оценка случайной погрешности. Прецизионность, сходимость и воспроизводимость. Повторяемость. Внутрилабораторный контроль качества измерений.	4	11	2	0	0	письменное домашнее задание
12.	Тема 12. Оценка систематической погрешности: по стандартному образцу, сравнением результатов двух независимых методов, варьированием массы пробы. Способы устранения систематической погрешности. Межлабораторные эксперименты.	4	12	2	0	0	тестирование
13.	Тема 13. Распределение дискретных случайных величин. Распределение Пуассона. Биноминальное распределение.	4	13	2	0	0	письменное домашнее задание
14.	Тема 14. Корреляционный и регрессионный анализы. Проверка взаимосвязи двух физических величин. Метод наименьших квадратов.	4	14	2	0	0	письменное домашнее задание

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
15.	Тема 15. Обеспечение качества химических измерений. Робастность, селективность и специфичность. Планирование эксперимента и оценка статистических характеристик методики анализа.	4	15	2	0	0	письменное домашнее задание
16.	Тема 16. Разбор конкретной ситуации: Аттестация методики количественного анализа воздуха рабочей зоны.	4	16	2	0	0	письменное домашнее задание
17.	Тема 17. Концепция неопределенности в химических измерениях (круглый стол с приглашением ведущих специалистов в области метрологии).	4	17	2	0	0	письменное домашнее задание
18.	Тема 18. Контрольная работа 1 (метрологические характеристики методик количественного химического анализа)	4	18	2	0	0	контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	4		0	0	0	зачет
	Итого			36	0	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. Общие сведения об измерениях физических величин. Основные принципы подходы к измерениям. Измерительное преобразование. Размер и значение физической величины.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Определение метрологии. Единство измерений. Теоретическая метрология (теория измерений, создание теоретических основ построения систем единиц и эталонов, разработка теории погрешностей). Прикладная метрология (вопросы практического измерения в различных сферах, повышение точности, обеспечение автоматизации). Законодательная метрология (государственные стандарты). Основополагающие принципы метрологии (аксиомы).

Тема 2. Основные и производные величины.Размерность. Система физических величин и система единиц.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Этапы развития метрологии (Метрическая ковенция 1875 г., Международнон бюро мер и весов, Главная палата мер и весов в Петербурге). Передача размера единиц средствами измерений (государственные эталоны, вторичные эталоны, образцовые средства измерений, рабочие средства измерений). Качество измерений. Свойства состояния измерений (точность, сходимость, воспроизводимость, быстрота получения результатов). Классификация измерений: 1. Равноточные, неравноточные. 2. Однократные, многократные. 3. Статические, динамические. 4. Метрологические, технические. 5. Абсолютные, относительные. 6. Прямые, косвенные, совместные, совокупные. Средства измерений. Контроль неизменности размера единиц во времени.

Тема 3. Общие вопросы теории измерений. Классификация измерений. Принципы, методы и методики измерения. Средства измерений. Условия измерений. Свойства состояния измерений. Погрешности измерений.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Классификация погрешностей: 1. По способу выражения (абсолютные и относительные). 2. В зависимости от того завышают или занижают результат (положительные и отрицательные). 3. По типу связи между погрешностью и измеряемой величиной (постоянные и пропорциональные). 4. В зависимости от характера причин, вызывающих погрешность (систематические и случайные). 5. По источникам происхождения (инструментальные, реагентные, методические). 6. Прямые и косвенные. Систематические погрешности. Правильность измерений. Постоянные и пропорциональные систематические погрешности. Три способа оценки систематических погрешностей. Типы систематических погрешностей. Первый тип ? погрешности известной природы, значения которых могут быть предварительно рассчитаны. Второй тип ? известной природы, значения которых неизвестны, но могут быть оценены в ходе эксперимента. Сюда относятся инструментальные, реагентные и методические погрешности. Третий тип ? причины и погрешности неизвестны, выявить не представляется возможным.

Тема 4. Эталоны физических величин. Передача размеров единиц физических величин. Погрешности средств измерений и их нормирование.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Релятивизация - определение или измерение относительно некоторого другого объекта. Результат определяют по разности таким образом, что систематические погрешности взаимно исключаются. Рандомизация - перевод систематических погрешностей в разряд случайных. Основана на том, что систематическая погрешность единичного явления (прибора, метода, исполнителя) при рассмотрении ее в более широком классе однотипных явлений (серия приборов, группа методов, коллектив исполнителей) становится величиной переменной (случайной).

Тема 5. Общие понятия математической статистики. Генеральная совокупность и выборка. Параметры распределения. Математическое ожидание случайной величины. Дисперсия случайной величины.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Релятивизация - определение или измерение относительно некоторого другого объекта. Результат определяют по разности таким образом, что систематические погрешности взаимно исключаются. Рандомизация - перевод систематических погрешностей в разряд случайных. Основана на том, что систематическая погрешность единичного явления (прибора, метода, исполнителя) при рассмотрении ее в более широком классе однотипных явлений (серия приборов, группа методов, коллектив исполнителей) становится величиной переменной (случайной). Лекция 5. Случайные погрешности (это не число, а функция случая). Случайная величина определяется областью изменения и вероятностью, с которой она попадает в тот или иной интервал. Дискретные и непрерывные случайные величины. Генеральная и выборочная совокупности величин.

Тема 6. Нормальное распределение. Функция нормального распределения. Принципы, лежащие в основе закона нормального распределения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Параметры распределения случайных величин (математическое ожидание, дисперсия случайной величины). Математическое ожидание непрерывной случайной величины. Математическое ожидание непрерывной случайной величины. Средневзвешенное значение дискретной случайной величины. Свойства математического ожидания. Дисперсия непрерывной и конечнозначной случайной величины. Дисперсия выборочной совокупности. Свойства дисперсии. Математическое ожидание среднего результата (математическое ожидание случайной величины). Дисперсия среднего результата. Стандартное отклонение среднего результата (частное от деления стандартного отклонения на корень квадратный из объема выборки).

Тема 7. Моменты непрерывного распределения. Равномерное распределение. Некоторые специальные распределения. Распределение Стьюдента. Распределение Фишера.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Гистограммы и распределение. Пример гистограммы дискретной величины. Взвешенная сумма. Весовой множитель. Условие нормировки чисел. Нормальное распределение. Функция Гаусса. Предельное распределение. Нормировочный множитель (выражение для его расчета получаем последовательными подстановками в формулу для функции нормального распределения). Принципы, лежащие в основе закона нормального распределения: 1. Принцип симметрии (вероятности одинаковых по величине, но обратных по знаку случайных погрешностей равны). 2. Первая производная равна нулю, если значение случайной величины совпадает с истинной величиной (средним значением результата). Для результатов измерения равных среднему арифметическому на кривой распределения наблюдается максимум. Закон нормального распределения предполагает вероятность случайных погрешностей тем меньшую, чем больше их абсолютное значение. 3. Максимальная вероятность сложного события отвечает минимальной сумме квадратов отклонений величин от среднего результата, т.е. закон нормального распределения включает в себя принцип наименьших квадратов. 4. Кривая функции нормального распределения имеет две симметричные относительно вертикальной оси точки перегиба (вторая производная равна нулю) на расстояниях от центра рассеяния, равных стандартному генеральному отклонению.

Тема 8. Разбор конкретной ситуации: Проверка нормальности распределения выборки из 100 измерений построением гистограммы и использованием критерия Пирсона.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Зависимость вида кривой нормального распределения от величины генерального стандартного отклонения (определяет степень "размытости" кривой). Величина истинного значения (среднего результата) определяет положение привой распределения на оси абсцисс. Точке перегиба кривой отвечает значение абсциссы, равное стандартному отклонению. Вероятность того, что случайная погрешность отдельного измерения не превышает по абсолютному значению стандартное отклонение, равна 68 % (двух стандартных отклонений - 95.4 %, трех - 99.7 %).

Тема 9. Сравнение дисперсий. Сравнение двух дисперсий. Сравнение нескольких дисперсий. Выделение большей дисперсии из многих. Подозрительно выделяющиеся значения (промахи).

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Оценка характера распределения. В качестве примера рассматриваем выборку из 100 измерений определения меди в образце (от 600 до 621 мг найдено). Средний результат 610 мг. Стандартное отклонение равно 4 мг. Все результаты разбиваем на классы таким образом, чтобы каждый класс объединял результаты измерений на интервале шириной в половину стандартного отклонения. Строим гистограмму. В точке максимума частота попадания в определенный класс составляет 0.19. Используя это значение находим стандартное отклонение. Получаем 4.2. Этот результат практически совпадает с теоретическим значением (4.0), что позволяет считать полученную выборку нормально распределенной. По данным гистограммы может быть проведена и более строгая количественая оценка соответствия выборки нормальному распределению по критерию Пирсона (хи-квадрат ? критерий). Сравнение экспериментальных и теоретических частот попадания в данный класс позволяет на заданном уровне вероятности решить вопрос о характере распределения.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 10. Условия применения методов математической статистики и проверка выполнения этих условий

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Для этого используем функцию Лапласа. Данный интеграл вероятности обладает симметрией относительно знака при величине z, которая представляет собой частное от деления отклонения от среднего результата на стандартное отклонение. Обычно в таблице против соответствующего значения z приведено значение интеграла вероятности (функция Лапласа). Таким образом для каждого класса находим хи-квадрат. Если сумма полученных значений не превышает теоретического значения (табличного значения) на заданном уровне вероятности, то выборка распределена нормально.

Тема 11. Оценка случайной погрешности. Прецизионность, сходимость и воспроизводимость. Повторяемость. Внутрилабораторный контроль качества измерений.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Оценка характера распределения при выборке ограниченного объема (число определений не превышает 20). В этом случае вычисляют два параметра асимметрию (А) и эксцесс (Е). Для симметричных распределений А = 0. Для распределений, вытянутых в сторону больших значений, А больше 0. Для распределений, имеющих ?хвост? в сторону малых значений, А меньше 0. Положительное значение А встречается чаще. Далее рассчитывает по формуле дисперсию асимметрию. Если модуль асимметрии не превышает утроенный корень квадратный из дисперсии асимметрии, то выборка распределена нормально. Положительный Е соответствует распределению более островершинному, чем нормальному (отрицательный наоборот). Если модуль эксцесса не превышает пятикратный корень квадратный из дисперсии эксцесса, то выборка распределена нормально.

Тема 12. Оценка систематической погрешности: по стандартному образцу, сравнением результатов двух независимых методов, варьированием массы пробы. Способы устранения систематической погрешности. Межлабораторные эксперименты.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

t-Распределение. Для определения совокупностей результатов измерений ограниченного объема используют распределение Стьюдента, которое связывает между собой три основные характеристики: ширину доверительного интервала, соответствующую ему вероятность, объем выборочной совокупности. Для определения критерия Стьюдента (t) необходимо предварительно рассчитать среднее значение и стандартное отклонение.Высота и ширина кривой t-распределения зависят от числа степеней свободы. Если число степеней свободы стремится к бесконечности, то t-распределение переходит в нормальное распределение. Грубые погрешности (промахи) и способы их устранения. Выбор критерия для искючения сомнительного результата имеет свои трудности. Универсального правила не существует. Используют: 1. Q-Критерий (если расчетное значение меньше табличного, то результат не является грубым промахом. В противном случае результат исключают. 2. Результат является промахом, если его отклонение от среднего значения превышает частное от деления утроенного стандартного отклонения на корень квадратный из объема выборки. 3. Промахом считают результат, лежащий за интервалом, ограничивающим средний результат критическим значением, которое находят умножая величину параметра тау-критического на стандартное отклонение.

Тема 13. Распределение дискретных случайных величин. Распределение Пуассона. Биноминальное распределение.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Оценка систематической погрешности. Существует три основных способа: 1. По стандартным образцам (СО). Расхождение экспериментально найденного результата и теоретически рассчитанного оценивают с помощью t-критерия. 2. Сравнение результатов двух независимых методов. Сначала рассчитывают средневзвешенное стандартное отклонение, а потом оценивают t-критерий. Для этого частное от деления разности средних результатов двух независимых методов на средневзвешенное стандартное отклонение умножают на корень квадратный из комбинации объемов двух выборок. Обязательным условием является равноточность результатов, полученных двумя независимыми методами. Если рассчитанное значение t-критерия меньше табличной величины, то систематическую погрешность можно считать незначимой. 3. Для оценки постоянной систематической погрешности проводят многократное определение содерджания компонента и параллельное многократное определение содержания того же компонента удвоенного размера. Для оценки пропорциональной погрешности проводят серию параллельных измерений пробы, содержащей добавку определяемого компонента. Затем сравнивают средний результат со средним результатом, полученным в первой серии измерений для пробы, не содержащей добавки. Условием незначимости систематической погрешности является тот факт, что постоянная систематическая погрешность не превышает произведения t-критерия на стандартное отклонение постоянной систематической погрешности. Кроме того, пропорциональная систематическая погрешность за вычетом единицы не должна превышать произведение t-критерия на стандартное отклонение пропорциональной систематической погрешности.

Тема 14. Корреляционный и регрессионный анализы. Проверка взаимосвязи двух физических величин. Метод наименьших квадратов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Сравнение нескольких дисперсий. Выборочные дисперсии считают однородными (а результаты равноточными), если значение критерия Бартлета меньше хи-квадрат-критерия на заданном уровне значимости. Для расчета критерия Бартлета необходимы значения средневзвешенной дисперсии, выборочных дисперсий и числа степеней свободы. Если объемы всех выборочных совокупностей равны, однородность дисперсий и пригодность результатов для совместной обработки проверяют с помощью критерия Кохрана.

Тема 15. Обеспечение качества химических измерений. Робастность, селективность и специфичность. Планирование эксперимента и оценка статистических характеристик методики анализа.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Показатели эффективности химического анализа. Чувствительность. Коэффициент чувствительности (значение первой производной градуировочной функции). Величина коэффициента чувствительности характеризует скорость изменения аналитческого сигнала с изменением концентрации. Предел обнаружения. (количество вещества, которое может быть обнаружено с помощью данного метода с достаточной вероятностью). Предел обнаружения может быть задан и минимальным аналитическим сигналом, который можно уверенно отличать от сигнала контрольного опыта.

Тема 16. Разбор конкретной ситуации: Аттестация методики количественного анализа воздуха рабочей зоны.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Аттестация методик измерений на примере методики количественного химического анализа. Цель аттестации - установить пригодность методики для получения ответа на заданные вопросы с требуемой надежностью. Для этого надо оценить правильность поставленных задач и затем доказать, возможно ли их решение. Понятие аттестация включает весь аналитический процесс: 1. Моделирование процедуры. 2. Отбор пробы. 3. Подготовка пробы. 4. Измерение. 5. Обработка данных. В ходе аттестации следует определить, какая из методик анализа с точки зрения показателей эффективности пригодна для решения данной задачи с заданной и доверительной вероятностью.

Тема 17. Концепция неопределенности в химических измерениях (круглый стол с приглашением ведущих специалистов в области метрологии).

лекционное занятие (2 часа(ов)):

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Концепция неопределенности в химических измерениях. Фундаментальные понятия химической метрологии. Понятием "неопределенность" предлагается заменить "погрешность" с целью устранения разделения погрешностей на "случайные" и "систематические". Понятие "неопределенность" включает в себя как те так и другие погрешности.

Тема 18. Контрольная работа 1 (метрологические характеристики методик количественного химического анализа)

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Контрольная работа. Примеры билетов для контрольной работы по дисциплине "Основы научных исследований и метрология"

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Общие сведения об измерениях физических величин. Основные принципы подходы к измерениям. Измерительное преобразование. Размер и значение физической величины.	4	1	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
2.	Тема 2. Основные и производные величины.Размерность. Система физических величин и система единиц.	4	2	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
3.	Тема 3. Общие вопросы теории измерений. Классификация измерений. Принципы, методы и методики измерения. Средства измерений. Условия измерений. Свойства состояния измерений. Погрешности измерений.	4	3	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
4.	Тема 4. Эталоны физических величин. Передача размеров единиц физических величин. Погрешности средств измерений и их нормирование.	4	4	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Общие понятия математической статистики. Генеральная совокупность и выборка. Параметры распределения. Математическое ожидание случайной величины. Дисперсия случайной величины.	4	5	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
6.	Тема 6. Нормальное распределение. Функция нормального распределения. Принципы, лежащие в основе закона нормального распределения.	4	6	подготовка к тестированию	2	тестирование
7.	Тема 7. Моменты непрерывного распределения. Равномерное распределение. Некоторые специальные распределения. Распределение Стьюдента. Распределение Фишера.	4	7	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
8.	Тема 8. Разбор конкретной ситуации: Проверка нормальности распределения выборки из 100 измерений построением гистограммы и использованием критерия Пирсона.	4	8	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Сравнение дисперсий. Сравнение двух дисперсий. Сравнение нескольких дисперсий. Выделение большей дисперсии из многих. Подозрительно выделяющиеся значения (промахи).	4	9	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
10.	Тема 10. Условия применения методов математической статистики и проверка выполнения этих условий	4	10	подготовка к коллоквиуму	2	коллоквиум
11.	Тема 11. Оценка случайной погрешности. Прецизионность, сходимость и воспроизводимость. Повторяемость. Внутрилабораторный контроль качества измерений.	4	11	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
12.	Тема 12. Оценка систематической погрешности: по стандартному образцу, сравнением результатов двух независимых методов, варьированием массы пробы. Способы устранения систематической погрешности. Межлабораторные эксперименты.	4	12	подготовка к тестированию	2	тестирование
13.	Тема 13. Распределение дискретных случайных величин. Распределение Пуассона. Биноминальное распределение.	4	13	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
14.	Тема 14. Корреляционный и регрессионный анализы. Проверка взаимосвязи двух физических величин. Метод наименьших квадратов.	4	14	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
15.	Тема 15. Обеспечение качества химических измерений. Робастность, селективность и специфичность. Планирование эксперимента и оценка статистических характеристик методики анализа.	4	15	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
16.	Тема 16. Разбор конкретной ситуации: Аттестация методики количественного анализа воздуха рабочей зоны.	4	16	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
17.	Тема 17. Концепция неопределенности в химических измерениях (круглый стол с приглашением ведущих специалистов в области метрологии).	4	17	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
18.	Тема 18. Контрольная работа 1 (метрологические характеристики методик количественного химического анализа)	4	18	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
	Итого				36	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- компьютерные презентации лекций;
- контрольная работа по разделам 1-9
- контрольная работа по разделам 11-17
- интерактивный опрос по разделам 1-5;
- интерактивный опрос по разделам 10-14;
- Разбор конкретной ситуации по разделу 8 "Проверка нормальности распределения выборки из 100 измерений построением гистограммы и использованием критерия Пирсона".

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

- Разбор конкретной ситуации по разделу 16 "Аттестация методики количественного анализа воздуха рабочей зоны".

- круглый стол с привлечением ведущих специалистов в области метрологии по разделу 17 "Концепция неопределенности в химических измерениях".

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Введение. Общие сведения об измерениях физических величин. Основные принципы подходы к измерениям. Измерительное преобразование. Размер и значение физической величины.

домашнее задание , примерные вопросы:

Определение метрологии. Единство измерений. Теоретическая метрология (теория измерений, создание теоретических основ построения систем единиц и эталонов, разработка теории погрешностей). Прикладная метрология (вопросы практического измерения в различных сферах, повышение точности, обеспечение автоматизации). Законодательная метрология (государственные стандарты). Основополагающие принципы метрологии (аксиомы).

Тема 2. Основные и производные величины.Размерность. Система физических величин и система единиц.

домашнее задание , примерные вопросы:

Этапы развития метрологии (Метрическая ковенция ? 1875 г., Международнон бюро мер и весов, Главная палата мер и весов в Петербурге). Передача размера единиц средствами измерений (государственные эталоны, вторичные эталоны, образцовые средства измерений, рабочие средства измерений). Качество измерений. Свойства состояния измерений (точность, сходимость, воспроизводимость, быстрота получения результатов). Классификация измерений: 1. Равноточные, неравноточные. 2. Однократные, многократные. 3. Статические, динамические. 4. Метрологические, технические. 5. Абсолютные, относительные. 6. Прямые, косвенные, совместные, совокупные. Средства измерений. Контроль неизменности размера единиц во времени.

Тема 3. Общие вопросы теории измерений. Классификация измерений. Принципы, методы и методики измерения. Средства измерений. Условия измерений. Свойства состояния измерений. Погрешности измерений.

домашнее задание , примерные вопросы:

Этапы развития метрологии (Метрическая ковенция ? 1875 г., Международнон бюро мер и весов, Главная палата мер и весов в Петербурге). Передача размера единиц средствами измерений (государственные эталоны, вторичные эталоны, образцовые средства измерений, рабочие средства измерений). Качество измерений. Свойства состояния измерений (точность, сходимость, воспроизводимость, быстрота получения результатов). Классификация измерений: 1. Равноточные, неравноточные. 2. Однократные, многократные. 3. Статические, динамические. 4. Метрологические, технические. 5. Абсолютные, относительные. 6. Прямые, косвенные, совместные, совокупные. Средства измерений. Контроль неизменности размера единиц во времени.

Тема 4. Эталоны физических величин. Передача размеров единиц физических величин. Погрешности средств измерений и их нормирование.

домашнее задание , примерные вопросы:

Релятивизация ? определение или измерение относительно некоторого другого объекта. Результат определяют по разности таким образом, что систематические погрешности взаимно исключаются. Рандомизация - перевод систематических погрешностей в разряд случайных. Основана на том, что систематическая погрешность единичного явления (прибора, метода, исполнителя) при рассмотрении ее в более широком классе однотипных явлений (серия приборов, группа методов, коллектив исполнителей) становится величиной переменной (случайной).

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 5. Общие понятия математической статистики. Генеральная совокупность и выборка. Параметры распределения. Математическое ожидание случайной величины. Дисперсия случайной величины.

домашнее задание , примерные вопросы:

Случайные погрешности (это не число, а функция случая). Случайная величина определяется областью изменения и вероятностью, с которой она попадает в тот или иной интервал. Дискретные и непрерывные случайные величины. Генеральная и выборочная совокупности величин.

Тема 6. Нормальное распределение. Функция нормального распределения. Принципы, лежащие в основе закона нормального распределения.

тестирование , примерные вопросы:

Параметры распределения случайных величин (математическое ожидание, дисперсия случайной величины). Математическое ожидание непрерывной случайной величины. Математическое ожидание непрерывной случайной величины. Средневзвешенное значение дискретной случайной величины. Свойства математического ожидания. Дисперсия непрерывной и конечнозначной случайной величины. Дисперсия выборочной совокупности. Свойства дисперсии. Математическое ожидание среднего результата (математическое ожидание случайной величины). Дисперсия среднего результата. Стандартное отклонение среднего результата (частное от деления стандартного отклонения на корень квадратный из объема выборки).

Тема 7. Моменты непрерывного распределения. Равномерное распределение. Некоторые специальные распределения. Распределение Стьюдента. Распределение Фишера.

домашнее задание , примерные вопросы:

Гистограммы и распределение. Пример гистограммы дискретной величины. Взвешенная сумма. Весовой множитель. Условие нормировки чисел. Нормальное распределение. Функция Гаусса. Предельное распределение. Нормировочный множитель (выражение для его расчета получаем последовательными подстановками в формулу для функции нормального распределения). Принципы, лежащие в основе закона нормального распределения: 1. Принцип симметрии (вероятности одинаковых по величине, но обратных по знаку случайных погрешностей равны). 2. Первая производная равна нулю, если значение случайной величины совпадает с истинной величиной (средним значением результата). Для результатов измерения равных среднему арифметическому на кривой распределения наблюдается максимум. Закон нормального распределения предполагает вероятность случайных погрешностей тем меньшую, чем больше их абсолютное значение. 3. Максимальная вероятность сложного события отвечает минимальной сумме квадратов отклонений величин от среднего результата, т.е. закон нормального распределения включает в себя принцип наименьших квадратов. 4. Кривая функции нормального распределения имеет две симметричные относительно вертикальной оси точки перегиба (вторая производная равна нулю) на расстояниях от центра рассеяния, равных стандартному генеральному отклонению.

Тема 8. Разбор конкретной ситуации: Проверка нормальности распределения выборки из 100 измерений построением гистограммы и использованием критерия Пирсона.

домашнее задание , примерные вопросы:

Зависимость вида кривой нормального распределения от величины генерального стандартного отклонения (определяет степень ?размытости? кривой). Величина истинного значения (среднего результата) определяет положение привой распределения на оси абсцисс. Точке перегиба кривой отвечает значение абсциссы, равное стандартному отклонению. Вероятность того, что случайная погрешность отдельного измерения не превышает по абсолютному значению стандартное отклонение, равна 68 % (двух стандартных отклонений ? 95.4 %, трех ? 99.7 %).

Тема 9. Сравнение дисперсий. Сравнение двух дисперсий. Сравнение нескольких дисперсий. Выделение большей дисперсии из многих. Подозрительно выделяющиеся значения (промахи).

домашнее задание , примерные вопросы:

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Оценка характера распределения. В качестве примера рассматриваем выборку из 100 измерений определения меди в образце (от 600 до 621 мг найдено). Средний результат 610 мг. Стандартное отклонение равно 4 мг. Все результаты разбиваем на классы таким образом, чтобы каждый класс объединял результаты измерений на интервале шириной в половину стандартного отклонения. Строим гистограмму. В точке максимума частота попадания в определенный класс составляет 0.19. Используя это значение находим стандартное отклонение. Получаем 4.2. Этот результат практически совпадает с теоретическим значением (4.0), что позволяет считать полученную выборку нормально распределенной. По данным гистограммы может быть проведена и более строгая количественая оценка соответствия выборки нормальному распределению по критерию Пирсона (хи-квадрат ? критерий). Сравнение экспериментальных и теоретических частот попадания в данный класс позволяет на заданном уровне вероятности решить вопрос о характере распределения.

Тема 10. Условия применения методов математической статистики и проверка выполнения этих условий

коллоквиум , примерные вопросы:

Для этого используем функцию Лапласа. Данный интеграл вероятности обладает симметрией относительно знака при величине z, которая представляет собой частное от деления отклонения от среднего результата на стандартное отклонение. Обычно в таблице против соответствующего значения z приведено значение интеграла вероятности (функция Лапласа). Таким образом для каждого класса находим хи-квадрат. Если сумма полученных значений не превышает теоретического значения (табличного значения) на заданном уровне вероятности, то выборка распределена нормально.

Тема 11. Оценка случайной погрешности. Прецизионность, сходимость и воспроизводимость. Повторяемость. Внутрилабораторный контроль качества измерений.

домашнее задание , примерные вопросы:

Оценка характера распределения при выборке ограниченного объема (число определений не превышает 20). В этом случае вычисляют два параметра асимметрию (А) и эксцесс (Е). Для симметричных распределений А = 0. Для распределений, вытянутых в сторону больших значений, А больше 0. Для распределений, имеющих ?хвост? в сторону малых значений, А меньше 0. Положительное значение А встречается чаще. Далее рассчитывает по формуле дисперсию асимметрию. Если модуль асимметрии не превышает утроенный корень квадратный из дисперсии асимметрии, то выборка распределена нормально. Положительный Е соответствует распределению более островершинному, чем нормальному (отрицательный наоборот). Если модуль эксцесса не превышает пятикратный корень квадратный из дисперсии эксцесса, то выборка распределена нормально.

Тема 12. Оценка систематической погрешности: по стандартному образцу, сравнением результатов двух независимых методов, варьированием массы пробы. Способы устранения систематической погрешности. Межлабораторные эксперименты.

тестирование , примерные вопросы:

t-Распределение. Для определения совокупностей результатов измерений ограниченного объема используют распределение Стьюдента, которое связывает между собой три основные характеристики: ширину доверительного интервала, соответствующую ему вероятность, объем выборочной совокупности. Для определения критерия Стьюдента (t) необходимо предварительно рассчитать среднее значение и стандартное отклонение.Высота и ширина кривой t-распределения зависят от числа степеней свободы. Если число степеней свободы стремится к бесконечности, то t-распределение переходит в нормальное распределение. Грубые погрешности (промахи) и способы их устранения. Выбор критерия для искючения сомнительного результата имеет свои трудности. Универсального правила не существует. Используют: 1. Q-Критерий (если расчетное значение меньше табличного, то результат не является грубым промахом. В противном случае результат исключают. 2. Результат является промахом, если его отклонение от среднего значения превышает частное от деления утроенного стандартного отклонения на корень квадратный из объема выборки. 3. Промахом считают результат, лежащий за интервалом, ограничивающим средний результат критическим значением, которое находят умножая величину параметра тау-критического на стандартное отклонение.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 13. Распределение дискретных случайных величин. Распределение Пуассона. Биноминальное распределение.

домашнее задание , примерные вопросы:

Оценка систематической погрешности. Существует три основных способа: 1. По стандартным образцам (СО). Расхождение экспериментально найденного результата и теоретически рассчитанного оценивают с помощью t-критерия. 2. Сравнение результатов двух независимых методов. Сначала рассчитывают средневзвешенное стандартное отклонение, а потом оценивают t-критерий. Для этого частное от деления разности средних результатов двух независимых методов на средневзвешенное стандартное отклонение умножают на корень квадратный из комбинации объемов двух выборок. Обязательным условием является равноточность результатов, полученных двумя независимыми методами. Если рассчитанное значение t-критерия меньше табличной величины, то систематическую погрешность можно считать незначимой. 3. Для оценки постоянной систематической погрешности проводят многократное определение содерджания компонента и параллельное многократное определение содержания того же компонента удвоенного размера. Для оценки пропорциональной погрешности проводят серию параллельных измерений пробы, содержащей добавку определяемого компонента. Затем сравнивают средний результат со средним результатом, полученным в первой серии измерений для пробы, не содержащей добавки. Условием незначимости систематической погрешности является тот факт, что постоянная систематическая погрешность не превышает произведения t-критерия на стандартное отклонение постоянной систематической погрешности. Кроме того, пропорциональная систематическая погрешность за вычетом единицы не должна превышать произведение t-критерия на стандартное отклонение пропорциональной систематической погрешности.

Тема 14. Корреляционный и регрессионный анализы. Проверка взаимосвязи двух физических величин. Метод наименьших квадратов.

домашнее задание , примерные вопросы:

Сравнение нескольких дисперсий. Выборочные дисперсии считают однородными (а результаты равноточными), если значение критерия Бартлета меньше хи-квадрат-критерия на заданном уровне значимости. Для расчета критерия Бартлета необходимы значения средневзвешенной дисперсии, выборочных дисперсий и числа степеней свободы. Если объемы всех выборочных совокупностей равны, однородность дисперсий и пригодность результатов для совместной обработки проверяют с помощью критерия Кохрана.

Тема 15. Обеспечение качества химических измерений. Робастность, селективность и специфичность. Планирование эксперимента и оценка статистических характеристик методики анализа.

домашнее задание , примерные вопросы:

Показатели эффективности химического анализа. Чувствительность. Коэффициент чувствительности (значение первой производной градуировочной функции). Величина коэффициента чувствительности характеризует скорость изменения аналитческого сигнала с изменением концентрации. Предел обнаружения. (количество вещества, которое может быть обнаружено с помощью данного метода с достаточной вероятностью). Предел обнаружения может быть задан и минимальным аналитическим сигналом, который можно уверенно отличать от сигнала контрольного опыта.

Тема 16. Разбор конкретной ситуации: Аттестация методики количественного анализа воздуха рабочей зоны.

домашнее задание , примерные вопросы:

Аттестация методик измерений на примере методики количественного химического анализа. Цель аттестации ? установить пригодность методики для получения ответа на заданные вопросы с требуемой надежностью. Для этого надо оценить правильность поставленных задач и затем доказать, возможно ли их решение. Понятие аттестация включает весь аналитический процесс: 1. Моделирование процедуры. 2. Отбор пробы. 3. Подготовка пробы. 4. Измерение. 5. Обработка данных. В ходе аттестации следует определить, какая из методик анализа с точки зрения показателей эффективности пригодна для решения данной задачи с заданной и доверительной вероятностью.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Тема 17. Концепция неопределенности в химических измерениях (круглый стол с приглашением ведущих специалистов в области метрологии).

домашнее задание , примерные вопросы:

Концепция неопределенности в химических измерениях. Фундаментальные понятия химической метрологии. Понятием ?неопределенность? предлагается заменить ?погрешность? с целью устранения разделения погрешностей на ?случайные? и ?систематические?. Понятие ?неопределенность? включает в себя как те так и другие погрешности.

Тема 18. Контрольная работа 1 (метрологические характеристики методик количественного химического анализа)

контрольная работа , примерные вопросы:

Примеры билетов для контрольной работы приведены в разделе Прочее.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Примеры тестовых заданий по темам 1-5:

1. Степень близости результатов измерения к истинному (принятому опорному) значению измеряемой величины отражает:

А. Правильность

Б. Прецизионность

В. Точность

Г. Воспроизводимость

2. Дисперсия произведения двух случайных переменных величин равна:

А. Сумме дисперсий этих величин

Б. Нулю

В. Дисперсии случай величины

Г. Произведению их дисперсий

Примеры тестовых заданий по темам 10-14

1. Для проверки характера распределения случайной непрерывной величины используют:

А. Критерий Фишера

Б. Критерий соответствия Пирсона ("хи-квадрат")

В. Критерий Стьюдента

Г. Критерий Бартлета

2. Распределение дискретных случайных величин соответствует::

А.Распределению Гаусса

Б. Распределению Стьюдента

В. Распределению Пуассона

Г. Биноминальному распределению

. Примеры билетов для контрольной работе 1

Билет 1

1. Случайная величина. Вероятность попадания случайной величины в определенный интервал. Область изменения случайной величины.

2. Свойства дисперсии.

Билет 2

1. Равноточные и неравноточные измерения.

2. Математическое ожидание непрерывной случайной величины.

Билет 3

1. Число степеней свободы.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

2. Математическое ожидание среднего результата.

Билет 4

1. Асимметрия распределения. Дисперсия асимметрии.
2. Дисперсия выборочной совокупности. Стандартное выборочное отклонение.

Примеры билетов для контрольной 2

Билет 1

1. Как можно рассчитать t-критерий Стьюдента?
2. Оценка постоянной систематической погрешности по способу варьирования массы пробы.

Билет 2

1. Сравнение результатов двух независимых методов. Средневзвешенное стандартное отклонение.
2. Q-Критерий. С какой целью его используют.

Билет 3

1. Оценка пропорциональной систематической погрешности варьированием массы пробы.
2. Релятивизация. Приведите примеры.

Билет 4

1. Критерий Бартлета. Средневзвешенная дисперсия. В каких случаях дисперсии можно считать однородными.
2. Рандомизация.

Контрольные вопросы к самостоятельной работе студентов

1. Единство измерений.
2. Образцовые средства измерений.
3. Свойства состояния измерений (точность, правильность, прецизионность).
4. Воспроизводимость, сходимость, повторяемость.
5. Классификация измерений.
6. Случайные погрешности измерения.
7. Генеральная и выборочная совокупности.
8. Математическое ожидание случайной величины. Свойства.
9. Математическое ожидание среднего результата.
10. Дисперсия случайной величины. Свойства.
11. Дисперсия среднего результата.
12. Гистограммы и распределение.
13. Асимметрия и эксцесс.
14. Функция нормального распределения.
15. Генеральное стандартное отклонение вероятностной переменной. Математический смысл.
16. Как влияет величина стандартного отклонения на морфологию кривой нормального распределения?
17. Как зависят характеристики кривой t-распределения от числа степеней свободы?
18. Доверительный интервал. Как зависит доверительный интервал от объема выборки?
19. Каким образом можно проверить нормальность распределения?
20. Чему равен критерий Фишера? С какой целью его используют?
21. Функция Лапласа.
22. Приближенные методы проверки нормальности распределения.
23. В каких случаях результаты измерения следуют логарифмически нормальному распределению?
24. Каким образом можно оценить однородность результатов нескольких выборочных совокупностей?

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

25. Выделение большей дисперсии из многих.

26. Как можно выявить грубые промахи измерений?

27. В каких случаях необходимо исключить из выборки подозрительно выделяющие значения измерений?

28. Какое распределение характеризует распределение дискретных случайных величин?

29. Как можно рассчитать стандартное относительное отклонение? Каким образом эта величина зависит от концентрации определяемого компонента?

30. Назовите наиболее распространенные практические приемы оценки систематической погрешности.

31. Как можно оценить значимость расхождений средних результатов двух независимых методов?

32. Можно но ли устранить систематические погрешности?

33. Какое понятие используют в концепции неопределенности вместо термина "доверительный интервал"?

34. Как оценивают "стандартную неопределенность" систематического характера?

35. Что такое абсолютная и относительная недостоверности?

Примеры билетов для проведения зачета

Билет 1

1. Точность измерений.

2. Чему равна вероятность сложного события?

3. $\chi_{кр}$ = ?

4. Критерий Бартлета. Формулы для расчета.

5. Математическое ожидание непрерывной случайной величины.

Билет 2.

1. Систематические погрешности второго типа.

2. Нормировочный коэффициент.

3. Оценка систематической пропорциональной погрешности.

4. Sx = ?

5. Для чего рассчитывают "хи-квадрат"-критей Пирсона?

Билет 3

1. Средневзвешенная дисперсия.

2. Систематическая погрешность приготовления растворов.

3. Как можно рассчитать коэффициент Стьюдента при использовании стандартных образцов?

4. Свойства дисперсии.

5. Примеры погрешностей по источникам происхождения.

Билет 4

1. Систематическая погрешность градуировочного графика.

2. Как можно оценить систематическую постоянную погрешность?

3. Дисперсия среднего результата.

4. χ_x = ?

5. Предел обнаружения.

7.1. Основная литература:

1. Математическая обработка результатов химического эксперимента: Учебно-методическое пособие / Н.А.Улахович, М.П.Кутырева, Л.Г.Шайдарова, Ю.И.Сальников. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 60 с.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

2. Математическая обработка результатов химического эксперимента:учебно-методическое пособие для лекционного курса 'Метрология'[Электронный ресурс] /Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников.- Казань: Казанский (Приволжский) Федеральный университет, 2010. - 60 с.

Режим доступа: http://kpfu.ru/docs/F910466741/Mat_ekperiment.pdf

7.2. Дополнительная литература:

1.Аналитическая химия: проблемы и подходы: в 2 т. / ред.: Р. Кельнер, Ж.-М. Мерме, М. Отто, Г. М. Видмер; пер. с англ. А. Г. Борзенко [и др.] под ред. Ю. А. Золотова.?М.: Мир: АСТ, Т. 1.?2004.?608 с.

2.Аналитическая химия: проблемы и подходы: в 2 т. / ред.: Р. Кельнер, Ж.-М. Мерме, М. Отто, Г. М. Видмер; пер. с англ. А. Г. Борзенко [и др.] под ред. Ю. А. Золотова.?М.: Мир: АСТ, Т. 2.?2004.?728 с.

3. Основы аналитической химии: в 2 томах: учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по химическим направлениям / под ред. акад. Ю.А. Золотова.?5-е изд., стер..?Москва: Академия, 2012.?; 25.?(Высшее профессиональное образование, Естественные науки).?ISBN 978-5-7695-9123-5((в пер.)). Т. 1.?2012.?383 с.

4.Жебентяев А. И. Аналитическая химия. Химические методы анализа: Учеб. пос. [Электронный ресурс] / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек и др. - 2-е изд., стер. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2014. - 542 с.

Режим доступа: http://znanium.com/bookread.php?book=419626

7.3. Интернет-ресурсы:

1.Сайт Российского Хемометрического общества - http://rcs.chph.ras.ru/

2Статистика в аналитической химии. Курс лекций МГУ. - http://chemstat.com.ru/

3.Метрология - http://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%BE%D0%BB%D0%BE%D0%B3%

4. Метрология как наука об измерениях. - http://www.kipstory.ru/metr/

5. Козлов М.Г. Метрология и стандартизация- печатный оргинал электронного издания. - http://www.hi-edu.ru/e-books/xbook109/01/

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы научных исследований и метрология" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB,audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудованием имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный проектор

Система интерактивного опроса.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Физическая химия .

Автор(ы):
Улахович Н.А. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Кутырева М.П. _____
"__" _____ 201 __ г.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ