

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Косенок Сергей Михайлович
 Должность: ректор
 Дата подписания: 05.07.2026 09:20:39
 Уникальный программный ключ:
 e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdf836

Оценочные материалы для промежуточной аттестации по дисциплине

Основы хемометрики и химической метрологии

Код, направление подготовки	04.05.01, Фундаментальная и прикладная химия
Направленность (профиль)	Аналитическая химия
Форма обучения	очная
Кафедра-разработчик	Химии
Выпускающая кафедра	Химии

Типовые задания для контрольной работы:

1. По данным таблицы рассчитать средние значения и дисперсии результатов испытаний двух катализаторов:

Выход целевого продукта (%) с использованием двух катализаторов	
А	Б
85	87
86	85
83	86
82	93
87	89
90	88
80	86
81	89

2. По данным таблиц сравнить дисперсии и проверить их однородность с использованием F-распределения:

Таблица 1

Выход целевого продукта (%) с использованием двух катализаторов	
А	Б
85	87
86	85

83	86
82	93
87	89
90	88
80	86
81	89

Таблица 2

Результаты анализа образца с 5 ppm аналита двумя методами	
4,99	5,01
4,99	4,95
5,00	5,03
5,01	4,96
5,00	4,99
5,00	5,02

3. По приведенным в таблице данным рассчитать коэффициент корреляции и оценить характер функциональной связи переменных x и y .

x	y
1,1	14,0
2,1	18,3
3,5	21,0
6,2	24,0

Типовые вопросы к зачету:

1. Основные идеи хемометрики и химической метрологии

Основные задачи хемометрики и химической метрологии. Прямые и косвенные измерения. Особенности измерения химических величин. Аналитический сигнал, градуировочная функция. Абсолютные и относительные методы анализа. Образцы сравнения, стандартные образцы. Основные понятия химической метрологии: погрешность, воспроизводимость, правильность, чувствительность, селективность. Статистические методы оценки воспроизводимости. Методы оценки правильности.

2. Статистические методы в аналитической химии

Основные понятия и положения математической статистики. Генеральная и выборочная совокупность, генеральные и выборочные параметры. Методы оценки правильности. Способы получения независимых данных. Истинное и действительное значение. Специальные способы проверки и улучшения правильности. Статистические критерии проверки гипотез, их применение для оценки правильности. Критерий Стьюдента, его модификации, предпосылки его применения. Нормальный закон распределения и его роль в аналитической химии. Причины отклонения результатов анализа от нормального распределения. Статистические критерии подчинения совокупности данных нормальному закону распределения и выявления отдельных данных, отклоняющихся от нормального распределения (промахов).

3. Основы дисперсионного анализа

Основы дисперсионного анализа. Сравнение двух (критерий Фишера) и нескольких (критерии Бартлетта, Кокрена) дисперсий. Применение дисперсионного анализа для сравнения нескольких средних значений, оценки представительности пробы, внутри- и межлабораторной погрешности. Воспроизводимость и сходимости. Оценка погрешности отдельных стадий анализа. "Прослеживаемость" аналитических методик (обеспечение единства измерений).

4. Основы корреляционного анализа

Основы корреляционного анализа. Статистические критерии проверки гипотез относительно коэффициентов корреляции. Применение корреляционного анализа для выявления закономерностей, прогноза, отбора классификационных признаков. Основы теории распознавания образов. Классификация и идентификация. Аналитический (классификационный) признак, образ, кластер. Принципы отбора признаков, их предварительные преобразования. Основы кластерного и дискриминантного анализа. Современный качественный анализ.

5. Основы регрессионного анализа

Основы регрессионного анализа. Предпосылки классического регрессионного анализа. Принципы выбора регрессионной модели, проверка ее адекватности. Расчет и интерпретация параметров регрессионной модели, оценка их погрешностей. Применение регрессионного анализа для градуировки и расчета содержания определяемого компонента.

Основы методов многомерного регрессионного анализа. Регрессия на главных компонентах, проекция на скрытые структуры (дробный или блочный метод наименьших квадратов). Описательная и предсказательная сила регрессионной модели.

