

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЧЕРКАСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦЬКОГО**

# **МАТЕМАТИЧНА ОБРОБКА ХІМІЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ**

**ПРОГРАМА**  
**навчальної дисципліни**  
**підготовки \_бакалавра**  
(назва освітньо-кваліфікаційного рівня)  
**галузі знань \_\_\_ 0401 Природничі науки**  
**напряму \_6.040101 Хімія**  
(шифр і назва напряму)

**(Шифр за ОПП 2.4.4)**

**2013 рік**

РОЗРОБЛЕНО ТА ВНЕСЕНО:

Черкаським національним університетом імені Богдана Хмельницького

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Валентина Олександрівна Мінаєва, кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії – викладач навчальної дисципліни «Математична обробка хімічного експерименту».

РЕЦЕНЗЕНТИ:

---

— \_\_\_\_\_ *Т. С. Нінова*, кандидат педагогічних наук, доцент кафедри хімії ЧНУ ім. Б. Хмельницького;

---

\_\_\_\_\_ *Т.В. Солодовнік*, кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та технології неорганічних речовин ЧДТУ.  
(ініціали, прізвище, науковий ступінь, учене звання, посада)

---

Обговорено та рекомендовано до затвердження Вченою радою Навчально-наукового інституту природничих наук

“\_\_28\_\_\_\_” 08 \_\_2013 року, протокол №\_1\_

Затверджено Вченою радою Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького

“ 29 ”\_\_08\_ 2013\_року\_\_\_, протокол №\_1\_

ББК 24.4 я 73 – 1

УДК 543 (073)

ISBN

© ЧНУ, 2013.

## ВСТУП

Програма вивчення вибіркової за ОПП навчальної дисципліни “Математична обробка хімічного експерименту” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки бакалавра напряму 6.040101 Хімія.

**Предметом** вивчення навчальної дисципліни є завершальний етап хімічного аналізу, а саме математична обробка даних, які були отримані під час цього експерименту.

**Міждисциплінарні зв'язки:** хімія; обчислювальна математика; стандартизація, сертифікація та метрологія продукції; інформаційні технології.

Програма навчальної дисципліни складається з таких змістових модулів: Змістовий модуль 1. Похибки хімічного експерименту.

Змістовий модуль 2. Застосування методу найменших квадратів для оптимізації лінійних та нелінійних залежностей.

### **1. Мета та завдання навчальної дисципліни**

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни “Математична обробка хімічного експерименту” є ознайомлення студентів з правилами і законами, які дозволяють виявити, усунути або врахувати систематичні похибки хімічного аналізу і статистично оцінити випадкові похибки результатів хімічного аналізу.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни “Математична обробка хімічного експерименту” є

за допомогою методів та засобів обчислювальної математики навчити студентів отримувати надійну інформацію про хімічний склад об'єктів, що аналізують;

за допомогою комп'ютерних технологій навчити студентів представляти результати проведеного хімічного експерименту в електронному та друкованому вигляді.

1.3. Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти повинні:

#### **знати :**

- 1) Метрологічні основи хімічного аналізу.
- 2) Термінологію загальної теорії похибок і хімічної метрології згідно номенклатурним правилам ІЮПАК.
- 3) Класифікації похибок.
- 4) Основні характеристики методу аналізу.
- 5) Основні етапи математичної обробки результатів хімічного аналізу.

#### **вміти :**

- 1) Кваліфіковано аналізувати результати хімічного аналізу і оцінювати похибки різної природи.
- 2) Правильно представляти результати хімічного аналізу.

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 72 години / 2 кредита ЄКТС.

## **2. Інформаційний обсяг навчальної дисципліни**

### **Змістовий модуль 1. ПОХИБКИ ХІМІЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ**

#### **ТЕМА 1.1. Основні метрологічні поняття**

Основні метрологічні поняття: вимірювання, похибка. Аналітичний сигнал і перешкоди.

Основні етапи хімічного аналізу і джерела похибок. Класифікації похибок аналізу. Абсолютні і відносні похибки. Систематичні і випадкові похибки.

Основні характеристики методу аналізу: правильність і відтворюваність, коефіцієнт інструментальної чутливості, межа визначення, нижня і верхня межі визначення вмісту речовини.

#### **ТЕМА 1.2. Систематичні похибки хімічного аналізу**

Систематичні похибки I типу – відомої природи і відомої величини (індикаторні похибки в титриметричному аналізі, похибки при зважуванні в повітряному середовищі, похибки на дифузійний потенціал при точних вимірюваннях потенціалу та інше).

Систематичні похибки II типу – відомої природи, але невідомої величини (інструментальна, реактивна, методична, еталонна та інші).

Систематичні похибки III типу – невідомої природи та невідомої величини.

Релятивізація і рандомізація систематичних похибок хімічного аналізу.

#### **ТЕМА 1.3. Випадкові похибки хімічного аналізу**

Результат хімічного аналізу як випадкова величина. Поняття про генеральну і вибірккову сукупності в застосуванні до результатів хімічного аналізу.

Функції розподілу випадкових величин. Параметри розподілу випадкових величин – математичне сподівання і дисперсія випадкових величин. Закон нормального розподілу випадкових величин. (Закон нормального розподілу Гаусса). Наслідки із нормального закону розподілу випадкових величин. Довірчий інтервал і довірча ймовірність. Нормований стандартний розподіл. Функція Лапласа.

Перевірка нормальності розподілу результатів хімічного аналізу. Побудова гістограми.

Статистика малих вибірок. Розподіл Стюдента. Таблиця коефіцієнтів Стюдента при заданих величинах довірчої ймовірності. Залежність густини ймовірності від ширини довірчого інтервалу в розподілі Стюдента при різному числі ступенів вільності. Порівняння дисперсій і порівняння середніх

значень двох методів аналізу. Критерій Фішера. Метод оцінки правильності аналізу з використанням стандартного зразку.

## **Змістовий модуль 2. ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІ ЛІНІЙНИХ ТА НЕЛІНІЙНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ**

### **ТЕМА 2.1. Застосування методу найменших квадратів для оптимізації лінійних залежностей**

Графічні та аналітичні методи обробки досліджуваних даних. Регресійний аналіз. Метод найменших квадратів і його застосування в хіміко-аналітичних дослідженнях.

Застосування методу найменших квадратів для оптимізації лінійних залежностей. Підбір параметрів  $a$  і  $b$  градуовального графіка методом найменших квадратів. Статистична обробка параметрів градуовального графіка. Знаходження вмісту визначуваного компонента за допомогою рівняння градуовального графіка. Перевірка гіпотези лінійності градуовального графіка.

### **ТЕМА 2.2. Застосування методу найменших квадратів для обробки нелінійних залежностей**

Квадратична залежність.

Показникові залежності. Показникова залежність  $y = a \cdot e^{bx}$ .

Показникова залежність  $y = a \cdot b^x$ .

Степенева залежність.

## **3. Рекомендована література**

### **Базова:**

1. Мінаєва В. О. Математична обробка даних хімічного експерименту / В. О. Мінаєва, В. М. Бочарнікова, Т. А. Григоренко. – Черкаси: ЧНУ. – 2003. – 208 с.
2. Чарыков А. К. Математическая обработка результатов химического анализа / А. К. Чарыков. – Л.: Химия. – 1984. – 168 с.
3. Булатов М. И. Практическое руководство по фотоколориметрическим и спектрофотометрическим методам анализа / М. И. Булатов, И. П. Калинин – Л.: Химия. – 1976. – 376 с.
4. Черновьянц М. С. Систематические и случайные погрешности химического анализа / М. С. Черновьянц. Учебное пособие для вузов; под ред. – М.: ИКЦ «Академкнига». – 2004. – 145 с.
5. Брановицька С. В. Обчислювальна математика та програмування. Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології / С. В. Брановицька,

Р. Б. Медведев, Ю. Я. Фіалков. Підручник. – К.: ІВЦ «Видавництво «Політехніка»», ТОВ «Фірма «Періодика»». – 2004. – 220 с.

**Допоміжна:**

6. Дёрфель К. Статистика в аналитической химии / К. Дёрфель . – М.: Мир. – 1994. – 268 с.

7. Налимов В. В. Применение математической статистики при анализе вещества / В. В. Налимов . – М.: Физматгиз. – 1960. – 430 с.

8. Петерс Д. Химическое разделение и измерение: Теория и практика аналитической химии / Д. Петерс, Дж. Хайес, Г. Хифтье. – Т 1, 2. – М.: Химия. – 1978. – 816 с.

**4. Форма підсумкового контролю успішності навчання** – модульна контрольна робота.

**5. Засоби діагностики успішності навчання.**

Діагностика знань студентів здійснюється з допомогою:

- 1) усних опитувань на практичних заняттях;
- 2) письмових контрольних робіт;
- 3) контролю самостійної роботи
- 4) контролю індивідуальних завдань (за варіантом).

Автор

(В. О. Мінаєва)

Валентина Олександрівна Мінасва

# МАТЕМАТИЧНА ОБРОБКА ХІМІЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

**ПРОГРАМА**  
навчальної дисципліни  
підготовки \_бакалавра  
галузі знань \_\_\_0401 Природничі науки  
напряму \_6.040101 Хімія

Підписано до друку 29.08.2013. Формат 60×84/16.

Ум. друк. арк. 0,2. Тираж 50 пр.

Видавець Черкаський національний університет  
імені Богдана Хмельницького

Адреса: 18000, м.Черкаси, бул. Шевченка, 81, кімн.117.

Тел. (0472) 37-13-16, факс (0472) 37-22-33,

e-mail: vydav@cdu.edu.ua, <http://www.cdu.edu.ua>

Свідоцтво про внесення до державного реєстру суб'єктів видавничої справи ДК №3427 від  
17.03.2009 р.

Друк: ФОП Белінська О. Б.

Україна, м. Черкаси, вул. Університетська, 33, оф. 6

Тел/факс: (0472) 33-03-46.