

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи

“ _____ ” _____ 2018 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

СТАТИСТИЧНІ ТА ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ

рівень вищої освіти бакалавр

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 Хімія

освітня програма освітня-професійна програма “Хімія”

вид дисципліни обов’язкова

факультет хімічний

2018 / 2019 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету

“31” серпня 2018 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Холін Юрій Валентинович, д.х.н., професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства,
Іванов Володимир Венедиктович, д.х.н., професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства,
Христенко Інна Василівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри хімічного матеріалознавства,
Пантелеймонов Антон Віталійович, к.х.н., доцент, доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “31” серпня 2018 року № 1

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

_____ (підпис)

Коробов О.І.
_____ (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “31” серпня 2018 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ (підпис)

Єфімов П.В.
_____ (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Статистичні та хемометричні методи в хімії”
складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки бакалавра
спеціальності (напряму) __102 хімія

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни: навчити студентів використовувати статистичні та хемометричні засоби для обробки даних хімічного експерименту. Студенти навчаються як кваліфіковані користувачі персонального комп'ютера та використовують комп'ютерні технології для розв'язання типових навчальних та наукових задач, вивчають хемометричні методи для розв'язання прикладних хімічних задач.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

- знайомство студентів із комп'ютерними технологіями для розв'язання типових навчальних та наукових задач;
- оволодіння програмними засобами для розв'язання прикладних хімічних задач.

1.3. Кількість кредитів 4

1.4. Загальна кількість годин 120

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна	
Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Рік підготовки	
2-й	2-й
Семестр	
4-й	4-й
Лекції	
16 год.	4 год.
Практичні, семінарські заняття	
-	8 год.
Лабораторні заняття	
32 год.	-
Самостійна робота	
72 год.	108 год.
Індивідуальні завдання	
не передбачено	

1.6. Заплановані результати навчання

знати: засади статистичної обробки експериментальних даних, особливості хемометричних підходів до обробки даних хімічного експерименту.

вміти: використовувати комп'ютерні засоби обробки даних хімічного експерименту.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

Тема 1. Експериментальні дані. фактографічна та бібліографічна хімічна інформація

«Дані»: визначення, типи. Шкали: порядкова; відношень; інтервальна. Значення хемометрії й інформатики для хімії (хімічний аналіз, параметрична ідентифікація моделей, QSAR, молекулярна інформатика, автоматизація обробки даних експерименту тощо).

Джерела хімічної інформації, бази даних і пакети прикладних програм (Science Citation Index, CSD тощо). Хімічні періодичні видання. Друковані та електронні версії. Імпакт-фактори журналів. Пошук інформації в Інтернет. Статистика, хімічна інформатика, хемометрія.

Тема 2. Представлення та статистична обробка даних

Первинне представлення даних. Дескриптивне представлення даних. Гістограми.

Результат вимірювань як випадкова величина. Генеральна сукупність та виборка. Вибіркові оцінки. Моменти. Середнє. Стандартне відхилення. Дисперсія. Коваріаційні матриці. Коефіцієнти кореляції. Перетворення даних (масштабування, автомасштабне перетворення). Задачі обробки первинних експериментальних даних: дослідження однорідності виборки, визначення функції розподілу, кореляцій між змінними, класифікація, факторний аналіз. Структурна і параметрична ідентифікація моделей, перевірка адекватності. Статистичні розподіли випадкової величини. Дискретні й неперервні випадкові величини. Біноміальний розподіл. Розподіли неперервних величин: рівномірний, Гаусса, Лапласа, Пуассона, χ^2 . Центральна гранична теорема. Метод максимуму правдоподібності. Функція правдоподібності. Правдоподібні оцінки параметрів генеральної сукупності при нормальному та Лапласівському розподілах похибок.

Тема 3. Перевірка статистичних гіпотез

Задача перевірки статистичних гіпотез. Схема перевірки гіпотези. Помилки I та II родів. Потужність критеріїв. Перевірка гіпотез про функції розподілу. Критерій χ^2 , графічні способи перевірки гіпотез про функції розподілу.

Тема 4. Основи кореляційного та регресійного аналізу

Кореляційний аналіз. Приклади кореляцій в хімії, значення кореляцій. Принцип лінійності вільних енергій як основа багатьох хімічних кореляцій. Теоретичні засади методу найменших квадратів (МНК) та статистичні властивості оцінок МНК. Розрахункова схема МНК. Вибір найкращого набору регресорів: методи всіх регресій, покрокової регресії, вилучення регресорів. Приклади використання МНК у хімічних задачах. Лінійний та нелінійний МНК як приклад некоректної задачі (теоретичний аналіз та приклади), мультиколінеарність. Її формальні та неформальні причини. Способи подолання мультиколінеарності: α -регуляризація за Тихоновим, застосування ортогональних поліномів, сингулярний розклад. Типові приклади математично некоректних задач в хімії. Вплив викидів на оцінки МНК. Уявлення про робастні оцінки.

Тема 5. Класифікація та кластерний аналіз

Види класифікацій і їх значення для аналізу даних. Типи ознак. Міри схожості об'єктів. Класифікація без навчання. Ієрархічна класифікація, дендрограми. Найпростіші алгоритми ієрархічного кластерного аналізу сукупності об'єктів. Проблема стійкості класифікації. Факторний аналіз. Характеристика моделей з латентними змінними. Кореляційна та коваріаційна матриці – об'єкт факторного аналізу. Формулювання задачі

факторного аналізу. Матриця навантажень, вектори характеристик і загальностей. Основна факторна теорема. Експлораторний та конфірмаційний факторний аналіз. Алгоритми факторного аналізу. Факторний аналіз хроматографічних даних

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 6. Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.

Тема 7. Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.

Тема 8. Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .

Тема 9. Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.

Тема 10. Сингулярний розклад.

Тема 11. Підсумкове заняття

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу												
Тема 1. Експериментальні дані, фактографічна та бібліографічна хімічна інформація	6	2				4	9	1				8
Тема 2. Представлення та статистична обробка даних	10	4				6	14	2				12
Тема 3. Перевірка статистичних гіпотез	12	4				8	14	2				12
Тема 4. Основи кореляційного та регресійного аналізу	12	4				8	14	2				12
Тема 5. Класифікація та кластерний аналіз	8	2				6	11	1				10
Разом за розділом 1	48	16				32	62	8				54
Розділ 2. Лабораторні заняття												
Тема 1. Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.	10			4		6	8					8
Тема 2. Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.	13			6		7	13		1			12
Тема 8. Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .	13			6		7	14		2			12
Тема 9. Апроксимація концентраційних	13			6		7	13		1			12

частот виявлення неспадними функціями.										
Тема 10. Сингулярний розклад.	13		6		7	10				10
Тема 11. Підсумкове заняття	10		4		6					
Разом за розділом 2	72		32		40	58		4		54
Усього годин	120	16	32		72	120	8	4		108

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денне	заочне
1	Тема 6. Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.	4	
2	Тема 7. Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.	6	1
3	Тема 8. Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .	6	2
4	Тема 9. Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.	6	1
5	Тема 10. Сингулярний розклад.	6	
6	Тема 11. Підсумкове заняття	4	
	Разом	32	4

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	
		денне	заочне
1	Експериментальні дані. фактографічна та бібліографічна хімічна інформація	4	8
2	Представлення та статистична обробка даних	6	12
3	Перевірка статистичних гіпотез	8	12
4	Основи кореляційного та регресійного аналізу	8	12
5	Класифікація та кластерний аналіз	6	10
6	Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами	6	8
7	Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.	7	12
8	Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .	7	12
9	Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.	7	12
10	Сингулярний розклад	7	10
11	Підсумкове заняття	6	
	Разом	72	108

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

7. Методи контролю

Поточний контроль на лекціях. Виконання контрольних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

8. Схема нарахування балів

Для допуску до семестрового екзамену студенти мають виконати усі лабораторні і контрольні роботи.

Поточний контроль, самостійна робота								Екзамен	Сума	
Розділ 1					Розділ 2					Разом
T1	T2	T3	T4	T5	T6-T7	T8	T9-T10			
15					15	15	15	60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно
70 – 89	добре
50 – 69	задовільно
1 – 49	незадовільно

9. Рекомендована література

Основна література

1. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. Київ: Либідь, 2005.
2. Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. Київ: ІВЦ „Видавництво «Політехніка»”, ТОВ „Фірма «Періодика»”, 2004.
3. Математичні методи і хімії та хімічній технології / Рудавський Ю.К., Мокрий Є.М., Піх З.Г., Чип М.М., Куриляк І.Й. За ред. Рудавського Ю.К. Львів: Світ, 1993.
4. Худсон Д. Статистика для фізиків. М.: Мир, 1970.

Допоміжна література

1. Шараф М.А., Иллмэн Д.Л., Ковальски Б.Р. Хемометрика. М.: Химия, 1989.
2. Доерфель К. Статистика в аналитической химии. М.: Мир. 1994.
3. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессия. М.: Финансы и статистика, 1981.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна:
<http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk>
2. Сайт кафедри хімічного матеріалознавства
<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/>

Критерії оцінювання навчальних досягнень студентів з дисципліни «Статистичні та хемометричні методи в хімії»

Знання студентів оцінюється за наступними критеріями:

– «відмінно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент міцно засвоїв теоретичний матеріал, здатен вирішувати розрахункові завдання; впевнено володіє статистичними та хемометричними засобами обробки даних хімічного експерименту; впевнено володіє комп'ютерними технологіями при розв'язанні типових навчальних та наукових задач; здатен логічно проаналізувати одержані результати.

– «добре» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент засвоїв теоретичний матеріал, здатен вирішувати розрахункові завдання та володіє основними статистичними та хемометричними засобами обробки результатів даних хімічного експерименту; здатен вирішувати типові навчальні задачі за допомогою комп'ютерних технологій.

– «задовільно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент в основному засвоїв теоретичний матеріал, але не в повній мірі здатен використовувати засвоєний матеріал при вирішенні розрахункових завдань; невпевнено володіє основними засобами обробки даних хімічного експерименту за допомогою комп'ютерних технологій.

– «незадовільно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент не засвоїв теоретичний матеріал, не орієнтується у більшості основних тем курсу, не здатен виконати розрахункові завдання, не володіє засобами обробки даних хімічного експерименту за допомогою комп'ютерних технологій.

Теми лабораторних занять

Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.

Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.

Контрольна робота.

Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .

Контрольна робота.

Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.

Контрольна робота.

Сингулярний розклад.

Підсумкове заняття

Контрольна робота № 1.
Тема «Проста обробка експериментальних даних».
Варіант №1.

_____, X-1____

1. У потенціометричному титруванні отримано такі дані:

V	1.3	1.5	1.6	1.65	1.68	1.70	1.72	1.74	1.80
pH	1.78	3.03	3.34	3.64	4.03	6.98	9.96	10.36	10.66

Точка еквівалентності _____ (1 бал).

2. Мінімальна ступінь полінома, необхідного для апроксимації функції

$$f(x) = \frac{\pi \cdot x^2}{\exp(x)} + \sqrt{x+2} \quad \text{для } x = 0.5, 0.75, \dots, 3 \text{ (за умови, що стандартне відхилення}$$

апроксимації підкоряється подвійній нерівності $2 \cdot 10^{-4} < \sigma < 1 \cdot 10^{-2}$), дорівнює _____ (3 бали).

3. Для випадкової змінної x , що набуває значень в інтервалі [4.25-4.95] (крок 0.05) знайдіть середнє значення (_____), дисперсію (_____) і стандартне відхилення середнього (_____) (у дужках впишіть значення). (1 бал).

Площа під кривою Гауса (використовуйте для побудови знайдені параметри) в інтервалі [4.55; 4.75] зміни випадкової змінної складає _____, (2 бали); площа під кривою логістичного розподілу (з параметрами $a=4.6$, $k=0.12$) в інтервалі [4.55; 4.75] зміни випадкової змінної складає _____ (2 бали).

4. Побудуйте графік функції для наступних даних:

x	7.69E-05	1.28E-04	2.82E-04	4.87E-04	6.41E-04	8.72E-04	1.03E-03	1.21E-03
A	3.45E-05	7.87E-05	1.42E-04	1.60E-04	1.79E-04	1.80E-04	1.89E-04	2.15E-04

Опишіть експериментальні дані функцією вигляду: $A = t \frac{b \cdot x}{1 + b \cdot x}$, оцініть значення параметрів цього закону, і запишіть їх: _____ (3 бали);

Знайдіть значення критерію $U = \sum_{i=1}^N (A - \hat{A})^2$, де i – номер експериментальної точки, N –

загальне число експериментальних точок, A – експериментальне значення, \hat{A} – значення функції, розраховане по оцінках знайдених параметрів.

$U =$ _____. (3 бали).

Необхідні і достатні формули:

Функція густини розподілу Гауса:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$$

Функція густини логістичного розподілу:

$$f(x) = \frac{\exp\left(\frac{x-a}{k}\right)}{k \cdot \left(1 + \exp\left(\frac{x-a}{k}\right)\right)^2}$$

РАЗОМ _____ балів.

Контрольна робота № 2.

Тема «Перевірка нормальності розподілу результатів хімічного аналізу».

Варіант №1.

_____, X-1 ____

Завдання 1-5 виконуються для даних, що наведені в файлі *.dat, де * – номер варіанта

1. Середнє значення становить _____, дисперсія _____, відносне стандартне відхилення _____, стандартне відхилення середнього _____. **(1 бал)**.

2. Для наявних даних вкажіть інтервал значень випадкової величини (в чисельному вигляді), в якому імовірність виявити одиночне вимірювання складає 68% (_____). **(1 бал)**

3. Знайдіть вибіркові значення коефіцієнтів асиметрії (_____) та ексцесу (_____) **(1 бал)**.

4. При кроці побудови гістограми 0.02 згрупуйте дані таким чином, щоб в кожному біні було не менше 5 вимірювань. Значення статистики χ^2 при перевірці нормальності розподілу результатів аналізу складає _____, критичне значення статистики χ^2 при рівні значущості 1% та _____ ступенях свободи дорівнює _____ **(6 балів)**.

5. Гіпотезу про нормальний розподіл результатів аналізу слід _____, тому що _____ **(1 бал)**.

6. Вміст SiO_2 в зразку силікату за результатами гравіметричного аналізу складає (%): 43.10, 43.15, 43.25, 43.45, 43.20, 44.00, 43.50, 43.65.

6.1. Визначте, чи є значення 44.00 грубим промахом при довірчій імовірності 90%. Значення $Q_{\text{експ}}$ складає _____, значення $Q_{\text{теор}}$ складає _____, отже, значення 44.00 потрібно _____ **(2 бала)**.

6.2. Визначте довірчий інтервал при виявленні SiO_2 в силікаті. Довірча імовірність 95 %. Середнє значення складає _____, стандартне відхилення складає _____, коефіцієнт Стьюдента для _____ ступенів свободи складає _____, довірчий інтервал складає _____ **(3 бала)**.

Разом _____ балів.

Контрольна робота № 3.
Тема «Графічна перевірка гіпотез у візуально тестовому аналізі.
Варіант №1.

_____, X-1_____

Необхідні формули:

Закон нормального розподілу я: $P(c_i) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \int_0^{c_i} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{c_i - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] dc$

Закон логнормального розподілу: $P(c_i) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \int_0^{c_i} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{\ln(c_i / \mu)}{\sigma} \right]^2 \right\} dc$

Закон експонентного розподілу: $P(c_i) = 1 - \exp \left(-\frac{c_i - a}{b} \right)$

Для наведених в таблиці даних перевірте відповідність частот виявлення компоненту від його концентрації законам нормального, логнормального та експонентного розподілів.

c_i	n_i	N_i
0.96	34	300
0.99	78	280
1.04	132	300
1.18	181	280
1.41	240	300
1.47	275	300
1.53	293	305
1.59	297	305
1.61	296	300

Параметри розподілів (6 балів):

Експонентне		Нормальне		Логнормальне	
a =	$r^2 =$	$\mu =$	$r^2 =$	$\mu =$	$r^2 =$
b =		$\sigma =$		$\sigma =$	

Закон розподілу	Значення межі виявлення (концентрація на рівні ймовірності виявлення компоненту $P=0.99$) (3 бала)
нормальний	
логнормальний	
експонентний	

Залежність $P(c)$ підпорядковується закону _____ розподілу, тому що _____ (1 бал).

Значення статистики χ^2 для перевірки відповідності експериментальних частот виявлення компоненту теоретичному розподілу (котре найкращим чином описує експериментальні дані) становить _____ (4 бала). Критичне значення статистики χ^2 при числі ступенів свободи _____ і рівня значущості 1 % складає _____. Отже, гіпотезу потрібно _____ (1 бал).

РАЗОМ _____ **балів.**

ЗРАЗОК ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ ПИСЬМОВОГО ЕКЗАМЕНУ

Відповіді наводьте з правильною кількістю значущих цифр!

Функція нормального розподілу $P(u) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^u \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] dx$	Функція біноміального розподілу $p(X=i) = \frac{n!}{i!(n-i)!} p^i (1-p)^{(n-i)}$	Перевірка гіпотез про функцію розподілу $\chi_{\text{exp}}^2 = \sum_{i=1}^K \frac{(v_i - v_i^{\text{теор}})^2}{v_i}$	Перевірка гіпотез про адекватність регресійної моделі $\chi_{\text{експ}}^2 = \sum_{i=1}^N \xi_i^2$
--	---	---	--

1. **14 балів** У паралельних вимірюваннях знаходили вміст вуглецю в зразках сталі.

№	мас. %	№	мас. %	№	мас. %
1	2.01	5	2.04	8	2.06
2	2.01	6	2.02	9	2.05
3	2.04	7	2.05	10	2.11
4	2.03				

- 1.1. Знайдіть середнє значення, медіану, стандартне відхилення, відносне стандартне відхилення та стандартне відхилення середнього значення. **5 балів**
- 1.2. Приймаючи, що результати вимірювання маси розподілені за законом Гауса, а середнє значення та вибіркова дисперсія є добрими наближеннями до параметрів генеральної сукупності – математичного сподівання μ та дисперсії σ^2 , розрахуйте частки результатів вимірювань, що дають значення вмісту вуглецю в інтервалах а) 2.01-2.05, б) >2.07. **5 балів**
- 1.3. З урахуванням відповіді на питання 1.2.б поясніть, яку з величин (середнє значення чи медіану) доцільно використовувати як оцінку математичного сподівання μ ? **4 бали**

2. **Перенос похибок (9 балів)**. Зміну вільної енергії системи при сталому тиску виражають рівнянням

$\Delta G = -RT \ln K$, де K – константа рівноваги системи; R – універсальна газова стала 8.314 Дж/(моль·К), T – температура, К. У досліді одержали такі дані: $K = 1.30 \cdot 10^4$ ($s_K = 100$); $T = 293.1$ К ($s_T = 0.05$ К); всі вимірні величини є незалежними.

- 2.1. Розрахуйте зміну вільної енергії, її стандартне відхилення та відносне стандартне відхилення. **6 балів**
- 2.2. Яка з вимірних величин дає найбільший внесок у похибку (стандартне відхилення) зміни вільної енергії? Відповідь обґрунтуйте. **3 бали**

3. **10 балів** При вимірюванні масової частки оксиду фосфору (V) в добриві одержали такі результати:

Масова частка, %	Кількість дослідів	Масова частка, %	Кількість дослідів
менше 18	1	20.5-21	7
18-18.5	2	21-21.5	4
18.5-19	3	21.5-22	3
19-19.5	5	22-22.5	2
19.5-20	6	22.5-23	1
20-20.5	8	23-23.5	1

- 3.1. Побудуйте гістограму частот результатів аналізів. **3 бали**
- 3.2. За критерієм χ^2 перевірте гіпотезу про узгодження експериментальних даних з нормальним розподілом. **7 балів**

4. **10 балів** В цьому завданні ви повинні оцінити адекватність регресійної моделі за локальними та глобальним критерієм адекватності. В адсорбційних дослідженнях за залежністю адсорбції компоненту (A, моль·г⁻¹) від концентрації компоненту нелінійним методом найменших квадратів знайшли параметри закону, який описує адсорбцію. В таблиці наведено вимірні та розраховані за знайденим регресійним рівнянням (містить два підгоночні параметри) значення адсорбції. Відносне стандартне відхилення вимірних значень адсорбції становить 3.0%.

№ дослідів	A ^{експеримент}	A ^{розрахунок}	№ дослідів	A ^{експеримент}	A ^{розрахунок}
1	2.44 · 10 ⁵	2.50 · 10 ⁻⁵	5	1.69 · 10 ⁻⁴	1.46 · 10 ⁻⁴
2	7.37 · 10 ⁵	7.04 · 10 ⁻⁵	6	1.40 · 10 ⁻⁴	1.63 · 10 ⁻⁴
3	1.22 · 10 ⁴	1.18 · 10 ⁻⁴	7	1.89 · 10 ⁻⁴	1.80 · 10 ⁻⁴
4	1.20 · 10 ⁴	1.32 · 10 ⁻⁴	8	2.10 · 10 ⁻⁴	1.96 · 10 ⁻⁴

4.1. Розрахуйте статистичні ваги w_k та локальні критерії адекватності – зважені залишки $\xi_k = w_k^{1/2} \cdot (A^{\text{розрахунок}} - A^{\text{експеримент}})$. **4 бали**

4.2. Побудуйте графік залежності ξ_k від $A^{\text{розрахунок}}$ та зробіть висновок щодо адекватності регресійної моделі. **3 бали**

4.3. Перевірте гіпотезу про адекватність регресійної моделі на основі порівняння $\chi_{\text{експ}}^2$ з відповідним критичним значенням (для довірчої ймовірності 5%). **3 бали**

5. **7 балів** Гідроген має два стабільні нукліди, ¹H та ²H. Мольні частки цих нуклідів становлять, відповідно, 99.98% і 0.02%.

5.1. Визначте середнє значення та стандартне відхилення кількості атомів ²H в молекулі ортофосфорної кислоти H₃PO₄. **2 бали**

5.2. Якою є ймовірність зустріти в зразку ортофосфорної кислоти молекулу, що не містить жодного атома ²H? **5 балів**