

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Обработка результатов химического эксперимента**

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Квалификация
Бакалавр

Форма обучения
Очная

Томск 2015

1. Код и наименование дисциплины - Б1.В.ОД.6 «Обработка результатов химического эксперимента»

2. Цель дисциплины – знание основ теории вероятности и математической статистики, приобретение навыков метрологической обработки результатов химического эксперимента, умение применять статистические критерии при решении практических задач и осуществлять контроль качества результатов анализа в аккредитованных лабораториях с учетом требований стандартов.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения 2 год, 3 семестр

4. Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, 72 часа, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 36 часов составляет самостоятельная работа обучающегося).

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы
(заполняется в соответствии с картами компетенций)

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
Первый уровень (пороговый) (СК-2) – I – владение основами методов пробоотбора и пробоподготовки, идентификации и определения, математической статистики для обработки аналитической информации и умением их применять в анализе реальных объектов.	З (СК–2) – I – Знать: основы теории вероятности и математической статистики, закономерности распределения случайных величин и погрешностей; основы работы с выборкой и генеральной совокупностью результатов измерений. У (СК–2) – I – Уметь: провести статистическую обработку выборочных результатов измерений с использованием информационных технологий; применять на практике основные статистические критерии.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Раздел Дисциплины	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Семинары	
Химическая метрология. Задачи методов математической статистики. Классификация ошибок измерений. Источники погрешностей.	8	2	2	4
Элементы теории вероятности и математической статистики.	8	2	2	4
Теоретическое распределение случайных величин.	8	2	2	4
Статистика малых выборок.	8	2	2	4
Статистические методы проверки гипотез.	8	2	2	4
Однофакторный дисперсионный анализ. Статистика линейной связи. Функция регрессии. Прямая регрессия.	8	2	2	4
Метод наименьших квадратов.	8	2	2	4
ГОСТ Р ИСО 5725.1-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений.	8	2	2	4
Контроль качества результатов анализа в лабораториях аналитического контроля с учетом требований стандартов ГОСТ Р ИСО 5725, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17025-2010, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17011-2008, РМГ 76-2014»	8	2	2	4
ВСЕГО	72	18	18	36

6.2. Программа дисциплины «Обработка результатов химического эксперимента»

Тема 1. *Химическая метрология. Задачи методов математической статистики. Классификация ошибок измерений. Источники погрешностей.*

Рассматриваются основные задачи методов математической статистики. Роль русских ученых в развитии учения об измерениях. Источники погрешности различных методов анализа. Показатели качества измерений: точность, правильность, воспроизводимость, повторяемость.

Тема 2. *Элементы теории вероятности и математической статистики.* Основные понятия теории вероятности. Событие и его вероятность. Статистическая вероятность события. Основные теоремы теории вероятности. Сумма и произведение событий. Формула полной вероятности. Функция распределения: дифференциальная и интегральная. Статистические характеристики измерений. Математическое ожидание. Дисперсия: генеральная и выборочная. Ее свойства, закон сложения ошибок. Статистическое отклонение отдельного определения и среднего. Относительное стандартное отклонение. Приемы расчета среднего значения и дисперсии. Погрешности методов гравиметрии и титриметрии.

Тема 3. *Теоретическое распределение случайных величин.* Закон нормального распределения. Закон нормированного распределения. Доверительный интервал, доверительная вероятность

Тема 4. *Статистика малых выборок.* Распределение Стьюдента. Сравнение нормального распределения и распределения Стьюдента. Оценка результатов анализа. Однофакторный дисперсионный анализ.

Тема 6. *Статистика линейной связи.* Функция регрессии. Прямая регрессия. Постулаты регрессионного анализа. Проверка однородности дисперсий, воспроизводимости ординат измеряемой функции. Оценка параметров прямой и их погрешностей.

Тема 7. *Метод наименьших квадратов.* Оценка гипотезы линейности. Построение коридора ошибок для рассчитанной прямой. Сравнение двух градуировочных графиков. Сравнение параметров прямой с теоретически ожидаемыми значениями.

Тема 8. *ГОСТ Р ИСО 5725.1-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений.*

Терминология. Оценивание показателей качества измерений. Аттестация методик выполнения измерений.

Тема 9. *Контроль качества результатов анализа в лабораториях аналитического контроля с учетом требований стандартов ГОСТ Р ИСО 5725, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17025-2010, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17011-2008, РМГ 76-2014»*

Оперативный контроль за достоверностью выполняемых измерений. Статистический контроль за достоверностью выполняемых измерений.

6.3. Форма промежуточной аттестации – зачет

7. Ресурсное обеспечение дисциплины «Обработка результатов химического эксперимента»

7.1. Основная литература

2. Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии / А.Н. Смагунова, О.М. Карпукова. – Ростов-на-Дону: Феникс, 2012. – 346 с.
3. Терещенко А.Г. Внутривлабораторный контроль качества результатов анализа с использованием лабораторной информационной системы / А.Г. Терещенко, Н.П. Пикула, Т.В. Толстихина. – Томск: РИО ТПУ, 2012. – 312 с.
4. РМГ 76-2014 Государственная система обеспечения единства измерений. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа.

5. РМГ 61-2010 Государственная система обеспечения единства измерений. Показатели точности, правильности, прецизионности методик количественного химического анализа.

7.2. Дополнительная литература

1. Болотюк В.А. Практикум и индивидуальные задания по математической статистике / В.А. Болотюк, Л.А. Болотюк – Директ-Медиа, 2014. – 97 с.
2. Улахович Н.А. Математическая обработка результатов химического эксперимента: Учебно-методическое пособие для лекционного курса «Метрология» / Н.А. Улахович [и др.]. – Казань: Издательство Казанского (Приволжского) Федерального университета, 2010. – 66 с
3. Холин Ю.В. Метрологические характеристики методик обнаружения с бинарным откликом / Ю.В. Холин. – Харьков: Изд-во «Тимченко», 2008. – 128 с
4. Дерффель К. Статистика в аналитической химии / К. Дерффель. М.: Мир, 1994. – 268 с.
5. Марьянов Б.М. Математические методы обработки информации в аналитической химии / Б.М. Марьянов [и др.]. – Томск: Изд-во Том. Ун-та, 1988. – 147 с.
6. Лазарева Л.И. Теория вероятностей. Математическая статистика / Л.И. Лазарева. Томск: Изд-во Том. Ун-та, 1998.
7. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества / В.В. Налимов. М.: Физматгиз, 1969. – 430 с.
8. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа / А.К. Чарыков. Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1977. – 120 с.
9. Спиридонов В.П. Математическая обработка физико-химических данных / В.П. Спиридонов. М.: Изд-во МГУ, 1970. – 221 с.
10. Зайдель А.Н. Элементарные оценки ошибок измерений / А.Н. Зайдель. М.: Наука, 1968. – 88 с.
11. ГОСТ Р ИСО 5725.(1-6)-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Часть 1. Основные положения и определения.
12. МИ 2334-2002 Государственная система обеспечения единства измерений. Смеси аттестованные. Общие требования.
13. МИ 2335-2003 Государственная система обеспечения единства измерений. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа. МИ 2336-2002 Государственная система обеспечения единства измерений. Показатели точности, правильности, прецизионности методик количественного химического анализа. Методы оценки.
14. МИ 2345-95 Государственная система обеспечения единства измерений. Характеристики градуировочных средств измерений состава и свойств веществ и материалов. Методика выполнения измерений с использованием стандартных образцов.

7.3. Электронные ресурсы

1. Программа «Origin Pro 8» для статистической обработки результатов, рекомендации к использованию программы на сайте: <http://www.OriginLab.com>;
2. Оригинальные программы «Add-noise-v1.0» и «Titr-v1.0» для обработки кривых титрования, созданные на кафедре доцентом Зарубиным А.Г.
3. Интернет-ресурсы: <http://www.msu.ru/libraries/>
<http://www.intuit.ru/department/calculate/intromathmodel/> данный интернет источник – это сайт Интернет-Университета Информационных Технологий, на котором представлены материалы по Математическому моделированию, автор: Ю.В. Губарь

8. Преподаватель (автор): д.т.н., профессор В.И. Отмахов