

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ



Аннотированная рабочая программа дисциплины
«СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ И ПЛАНИРОВАНИЕ
ЭКСПЕРИМЕНТА»

основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки
научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению
04.06.01 - Химические науки

Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации

Рабочая программа разработана в соответствии с:

- самостоятельно устанавливаемым образовательным стандартом Национального исследовательского Томского государственного университета (НИ ТГУ) по направлению подготовки **04.06.01 – Химические науки** (уровень высшего образования - подготовка кадров высшей квалификации) (утв. Ученым советом НИ ТГУ, протокол № 5 от 25.05.2016 г.);

- основной образовательной программой по направлению подготовки **04.06.01 – Химические науки** (в ред. 2016 г., по решению Ученого Совета от 29.06.2016, протокол № 6);

- учебного плана по направлению подготовки **04.06.01 – Химические науки** (утв. Ученым советом НИ ТГУ, протокол № 6 от 29.06.2016 г.).

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании учебно-методической комиссии химического факультета, протокол № 31 от «18» 05 2016 года

Авторы-разработчики, преподаватели дисциплины:

профессор, д.т.н. Отмахов Владимир Ильич

доцент, к.х.н. Шелковников Владимир Витальевич

Рецензент (ы):

к.х.н., доцент кафедры неорганической химии, Мишенина Л.Н.

Согласовано:

Руководитель ООП по направлению 04.06.01 – Химические науки:

профессор кафедры физической химии, д.ф.-м.н., доцент Курзина И.А.

Цели дисциплины: изучение основ метрологической оценки результатов аналитических измерений при решении практических и исследовательских задач и статистических методов планирования химического эксперимента.

Изучение дисциплины предполагает выполнение следующих задач:

- знание закономерностей и основных положений теории вероятностного распределения случайных величин и погрешностей;
- умение применять методы математической статистики при решении различных задач количественного химического анализа;
- умение пользоваться справочными руководствами по математической статистике и техническими средствами при обработке результатов измерений;
- планирование экспериментальных исследований для решения задач оптимизации процессов и при исследовании механизма явлений.

Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «**Статистическая обработка результатов и планирование эксперимента**» (В.ОД.1.4) относится к обязательным дисциплинам вариативной части учебного плана.

Дисциплина изучается в соответствии с учебным планом по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа, из которых 16 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (8 часов занятия лекционного типа, 8 часов занятия практического (семинарского) типа), 56 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

Тесная взаимосвязь химии с метрологией, а так же такие направления химии, как аналитическое приборостроение, химические сенсоры, выделение сигнала на фоне шумов и т.д. тесно связаны с такими дисциплинами математического и естественнонаучного цикла, как математика, фундаментальные основы информатики и пользования вычислительной техникой.

Входные требования для освоения дисциплины

Для полноценного усвоения данной дисциплины аспирантам необходимо иметь знания по неорганической химии, аналитической химии, физической химии, коллоидной химии, органической химии, инструментальным методам анализа (в рамках курса специалитета или магистратуры).

В ходе изучения дисциплин гуманитарного профиля у аспирантов формируются общекультурные компетенции, необходимые при изучении дисциплины «Статистическая обработка результатов и планирование эксперимента». Для успешного освоения дисциплины обучающийся должен:

- обладать базовым набором понятий, терминов, принципов, фактов, моделей в той области знаний, где аспирант проводит исследования;
- иметь некоторый фонд самостоятельно полученных результатов исследований, для обсуждения на практических (семинарских) занятиях.

Общая трудоемкость дисциплины (модуля)

| Виды учебной работы | Объем | |
|--|---------------|--------------------|
| Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану | 2 з.е. | 72 ак. часа |
| Аудиторные занятия (контактная работа) | | 16 |
| Лекции | | 8 |
| Практические (семинарские) занятия | | 8 |
| Самостоятельная работа | | 56 |
| Вид контроля: зачет с оценкой | | |

Процесс изучения дисциплины «Статистическая обработка результатов и планирование эксперимента» направлен на формирование следующих компетенций:

1. Общефессиональных

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

- владением культурой научного исследования в области профессиональной деятельности (ОПК-2)

2. Профессиональных

- способностью к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук(PhD) (ПК-1).

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности
- основы теории вероятности и математической статистики, закономерности в распределении случайных величин;
- основы работы с генеральной совокупностью результатов измерений;
- основные алгоритмы проведения оперативного контроля за достоверностью выполняемых измерений в аналитических лабораториях;
- основные этапы и алгоритмы планирования эксперимента.

Уметь:

- выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования;
- навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований;
- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов;
- навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности;
- провести статистическую обработку выборочных результатов измерений;
- строить градуировочные характеристики с применением метода наименьших квадратов;
- применять на практике основные статистические критерии;

- представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях.

Владеть:

- основными алгоритмами проведения оперативного контроля за достоверностью выполняемых измерений в аналитических лабораториях;
- методикой проведения планирования эксперимента;
- практическими навыками обработки результатов исследования;
- основными алгоритмами проведения оперативного контроля за достоверностью выполняемых измерений в аналитических лабораториях;
- методикой проведения планирования эксперимента;
- практическими навыками обработки результатов исследования;
- методами планирования, подготовки, проведения научных исследований, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности подготовки.

В процессе обучения аспирант осваивает статистическую обработку выборочной и генеральной совокупности результатов измерений. Получает навыки метрологической аттестации методик измерений. Проводит оперативный контроль за достоверностью результатов измерений, получаемых в аналитических лабораториях.

В результате освоения дисциплины у аспиранта формируются следующие элементы компетенций:

| Код компетенции | Планируемые результаты обучения по модулю |
|--|--|
| <p>ОПК-1 - способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p> | <p>З (ОПК-1)-1 - современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности У (ОПК-1)-1 - выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования В (ОПК-1) -1 - навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований В (ОПК-1) -2 - навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов В (ОПК-1) -3 - навыками представления и продвижения результатов интеллектуальной деятельности</p> |
| <p>ОПК-2 - владением культурой научного исследования в области профессиональной деятельности</p> | <p>З (ОПК-2)-1 - основы теории вероятности и математической статистики, закономерности в распределении случайных величин З (ОПК-2)-2 - основы работы с генеральной совокупностью результатов измерений З (ОПК-2)-3 - основные алгоритмы проведения оперативного контроля за достоверностью выполняемых измерений в аналитических лабораториях З (ОПК-2)-4 - основные этапы и алгоритмы планирования эксперимента У (ОПК-2)-1 - провести статистическую обработку выборочных результатов измерений У (ОПК-2) -2 - строить градуировочные характеристики с применением метода наименьших квадратов У (ОПК-2) – 3 - применять на практике основные статистические критерии В (ОПК-2) – 1 - основными алгоритмами проведения оперативного контроля за достоверностью выполняемых измерений в аналитических лабораториях</p> |

| | |
|---|--|
| | В (ОПК-2) – 2 - методикой проведения планирования эксперимента В (ОПК-2) – 3 - практическими навыками обработки результатов исследования |
| ПК-1 – способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук(PhD) | У (ПК-1) – 1 - представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях В (ПК-1) – 1 - методами планирования, подготовки, проведения научных исследований, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности подготовки |

Наименование тем (разделов) и их краткое содержание

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. Ошибки 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.

Тема 5. Однофакторный дисперсионный анализ. Статистика линейной связи. Прямая регрессия.

Функция регрессии. Постулаты регрессионного анализа. Проверка однородности дисперсий, воспроизводимости ординат измеряемой функции. Оценка параметров прямой и их погрешностей.

Тема 6. Метод наименьших квадратов.

Оценка гипотезы линейности. Построение коридора ошибок для рассчитанной прямой. Сравнение двух градировочных графиков. Сравнение параметров прямой с теоретически ожидаемыми значениями.

Тема 7. ГОСТ Р ИСО 5725.1-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений.

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

Тема 8. Контроль качества результатов анализа в лабораториях аналитического контроля с учетом требований стандартов ГОСТ Р ИСО 5725, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17025-2006, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17011-2008, РМГ 76».

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

Тема 9. Методы факторного планирования эксперимента. Виды планов.

Полный факторный эксперимент. Дробный факторный эксперимент. Крутое восхождение по поверхности отклика. Ротатабельные и ортогональные планы второго порядка.

Тема 10. Расчет математической модели. Принятие решения по результатам планирования эксперимента.

Дисперсия воспроизводимости. Оценка значимости коэффициентов математической модели. Проверка адекватности модели. Принятие решения по результатам факторного планирования эксперимента.

Самостоятельная работа

Самостоятельная работа по видам учебных занятий предполагает следующие формы:

- самостоятельная проработка актуальных задач научной профессиональной деятельности, выполняемая с привлечением конспектов лекций, а также основной и дополнительной литературы;

Структура учебных видов деятельности

| Наименование разделов и тем | Контактная работа (час.) | | | | Форма контроля успеваемости |
|---|--------------------------|--------|------------------------------------|----|---|
| | Всего (час.) | Лекции | Практические (семинарские) занятия | СР | |
| Тема 1. Химическая метрология. Задачи методов математической статистики. Классификация ошибок измерений. Источники погрешностей. | 5 | 1 | | 4 | |
| Тема 2. Элементы теории вероятности и математической статистики. | 6 | 1 | 1 | 4 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |
| Тема 3. Теоретическое распределение случайных величин. | 7 | | 1 | 6 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |
| Тема 4. Статистика малых выборок | 7 | 1 | | 6 | |
| Тема 5. Однофакторный дисперсионный анализ. Статистика линейной связи. Прямая регрессия. | 7 | | 1 | 6 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |
| Тема 6. Метод наименьших квадратов | 8 | 1 | 1 | 6 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |
| Тема 7. ГОСТ Р ИСО 5725.1-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. | 8 | 1 | 1 | 6 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |
| Тема 8. Контроль качества результатов анализа в лабораториях | 8 | 1 | 1 | 6 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |

| | | | | | |
|---|-----------|----------|----------|-----------|---|
| аналитического контроля с учетом требований стандартов ГОСТ Р ИСО 5725, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17025-2006, ГОСТ Р ИСО/МЭК 17011-2008, РМГ 76» | | | | | |
| Тема 9. Методы факторного планирования эксперимента. Виды планов. | 9 | 1 | 2 | 6 | Опрос на практическом (семинарском) занятии |
| Тема 10. Расчет математической модели. Принятие решения по результатам планирования эксперимента. | 7 | 1 | | 6 | |
| Итоговый контроль: | | | | | зачет с оценкой |
| Всего: | 72 | 8 | 8 | 56 | |

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. А.Н. Смагунова Методы математической статистики в аналитической химии /Смагунова А.Н., Карпукова О.М. – Ростов на-Дону: «Феникс», 2012,346 с.
2. А.Г. Терещенко. Внутрिलाбораторный контроль качества результатов анализа с использованием лабораторной информационной системы / Терещенко А.Г., Пикула Н.П., Толстихина Т.В.– Томск: РИО ТПУ, 2012,312 с.
3. Расчеты ионных равновесий. Методы идентификации и разделения в аналитической химии : учебно-методический комплекс / Петрова Е. В., Скворцова Л. Н., Гудымович Е. Н. [и др.] ; Том. гос. ун-т, [Ин-т дистанционного образования]. - Томск : [ИДО ТГУ], 2011. - . URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000422985>

Дополнительная литература

1. К. Дерффель Статистика в аналитической химии М. Мир.1994 г.
2. Б.М. Марьянов и др. математические методы обработки информации в аналитической химии Томск, 1988 г.
3. В.В. Налимов Применение математической статистики при анализе вещества М. Физматгис. 1969 г.
4. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. - Л. Химия, 1984 г.
5. Спиридонов В.П. Математическая обработка физико-химических данных.-М.: Изд-во МГУ, 1970 г.
6. Зайдель А.Н. Элементарные оценки ошибок измерений М. Наука, 1968 г.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" необходимые для освоения дисциплины

1. Программа «OriginPro 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. ГОСТ Р ИСО 5725.1-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Часть 1. Основные положения и определения.

4. МИ 2334-2002 Государственная система обеспечения единства измерений. Смеси аттестованные. Общие требования.

МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Обучение по дисциплине:

- лекционная аудитория, оснащенная оборудованием для демонстрации презентаций и слайдов (аудитории № 311 6-го учебного корпуса НИ ТГУ);
- аудитория для проведения практических (семинарских) занятий - компьютерный класс химического факультета (405 ауд. 6-го учебного корпуса НИ ТГУ).