

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
И.о. декана
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Методы математической статистики в химии

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Химия

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
В.В. Шелковников

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.

ИОПК 4.2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.

ИОПК 4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

2. Задачи освоения дисциплины

– Получить базовые знания по статистической обработке результатов измерений, испытаний и анализов.

– Получить навыки обработки результатов с помощью автоматизированных программных комплексов.

– Приобрести умение проводить аттестацию методик выполнения измерений.

– Приобрести навыки оценки достоверности получаемых результатов по алгоритмам оценивания при проведении оперативного и статистического контроля.

– Познакомиться и уметь работать с нормативной документацией в области стандартизации и аккредитации испытательных лабораторий.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, зачет

Четвертый семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Математика» и «Информатика»

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

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.

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

Тема 4. Статистика линейной связи. Статистические методы проверки гипотез. Функция регрессии. Прямая регрессия. Постулаты регрессионного анализа. Проверка однородности дисперсий, воспроизводимости ординат измеряемой функции. Оценка параметров прямой и их погрешностей.

Тема 5. Метод наименьших квадратов. Оценка гипотезы линейности. Построение коридора ошибок для рассчитанной прямой. Сравнение двух калибровочных графиков. Сравнение параметров прямой с теоретически ожидаемыми значениями.

Тема 6. Обработка экспериментальных данных с использованием программного обеспечения MS Excel (статистика малых выборок). Статистическая обработка результатов анализа. Оценка равнозначности и правильности выполнения измерений, испытаний, анализов. Нахождение уравнения линейной регрессии, построение калибровочных графиков, расчет ошибок при определении коэффициентов линейной регрессии.

Тема 7. Статистика больших выборок. Показатели качества измерений методик испытаний, измерений и анализов. Аттестация методик выполнения измерений, испытаний и анализов. РМГ 61—2010. Государственная система обеспечения единства измерений Показатели точности, правильности, прецизионности, методик количественного химического анализа. Методы оценки

Тема 8. Внутрिलाбораторный оперативный контроль. Контроль стабильности результатов анализа в форме периодической проверки подконтрольности процедуры выполнения анализа. Контроль стабильности результатов анализа в форме выборочного статистического контроля внутрिलाбораторной прецизионности и погрешности результатов анализа. Контроль стабильности результатов анализа с использованием контрольных карт РМГ-76-2014 Государственная система обеспечения единства измерений. «Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа».

Тема 9. Внедрение стандартизованных методик в лаборатории с учетом требований Р 50.2.060-2008.

Тема 10. Аккредитация испытательных лабораторий.

Тема 11. Межлабораторные сличительные испытания (МСИ)

Тема 12. Обработка экспериментальных данных с использованием программного обеспечения MS Excel (статистика больших выборок). Аттестация методик выполнения

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения теоретических и расчётных домашних заданий, сдачи отчетов по семинарским заданиям и фиксируется в форме контрольной точки в семестре.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в третьем семестре проводится письменной тестовой форме и включает десять вопросов. Продолжительность зачета 1 час.

Зачет проставляется только при условии сдачи 4 отчетов по семинарским заданиям (домашнее решение задач). Домашние задания включают 4 задачи.

Две задачи теоретического характера предполагают синтетические ответы в развёрнутой форме, проверяющие РООПК 1.1.

Две задачи практического характера предполагают синтетические ответы в развёрнутой форме, проверяющие РООПК 1.2., РООПК 1.3 Приводится анализ решения поставленных задач и краткая интерпретация полученных результатов.

Зачет в четвертом семестре проводится письменной тестовой форме и включает десять вопросов. Продолжительность зачета 1 час.

Зачет проставляется только при условии сдачи 4 отчетов по семинарским заданиям (домашнее решение задач). Домашние задания включают 4 задачи.

Две задачи теоретического характера предполагают синтетические ответы в развёрнутой форме, проверяющие РООПК 1.1.

Две задачи практического характера предполагают синтетические ответы в развёрнутой форме, проверяющие РООПК 1.2., РООПК 1.3 Приводится анализ решения поставленных задач и краткая интерпретация полученных результатов.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронной образовательной среде iDO - <https://lms.tsu.ru/enrol/index.php?id=30464>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Отмахов В.И. Метрология количественного химического анализа (статистика малых выборок) (часть 1) Учебное пособие. Томск: РИО ТГУ, 2018. – 90 с.

– Улахович Н.А. Математическая обработка результатов химического эксперимента: Учебно-методическое пособие для лекционного курса «Метрология» Казань: Издательство Казанского (Приволжского) Федерального университета, 2010.–200 с.

– Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии Ростов-на-Дону: 2012.– 321 с.

– Терещенко А. Г. Внутрилабораторный контроль качества результатов анализа с использованием лабораторной информационной системы Томск: РИО ТПУ, 2012.–200 с.

– Болотюк В.А. Практикум и индивидуальные задания по математической статистике М.Директ-Медиа. 2012 .– 200 с.

б) дополнительная литература:

– ГОСТ Р ИСО 5725.1-2002 Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Госстандарт/России. –2002.

– РМГ 61—2010. Государственная система обеспечения единства измерений «Показатели точности, правильности, прецизионности, методик количественного химического анализа. Методы оценки» ФГУП "УНИИМ" г. Екатеринбург, 2010.

– РМГ-76-2014 Государственная система обеспечения единства измерений. «Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа». ФГУП "УНИИМ" г. Екатеринбург, 2014.

– Р 50.2.060-2008 Государственная система обеспечения единства измерений. Рекомендация. Внедрение стандартизованных методик количественного химического анализа в лаборатории. Подтверждение соответствия установленным ФГУП "УНИИМ" г. Екатеринбург, 2008.

– ИСО/МЭК17025-2017 Государственная система обеспечения единства измерений. Новые требования к компетентности испытательных и калибровочных лабораторий Всероссийский научно-исследовательский институт сертификации.– 2017.

в) ресурсы сети Интернет:

– Программа «Origin Pro 8» для статистической обработки результатов, рекомендации к использованию программы на сайте: <http://www.OriginLab.com>;

– Оригинальные программы «Add-noise-v1.0» и «Titr-v1.0» для обработки кривых титрования, созданные на кафедре доцентом Зарубиным А.Г.

Интернетресурсы:<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.

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа ((№ 405, компьютерный класс 6-го учебного корпуса), индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Отмахов Владимир Ильич, д-р. хим. наук, профессор, кафедра аналитической химии химического факультета ТГУ, профессор.