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

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ: И.о. декана химического факультета А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Статистическая обработка и современные методы анализа данных

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки : **Цифровая химия**

> Форма обучения **Очная**

Квалификация **Магистр**

Год приема **2023**

СОГЛАСОВАНО: Руководитель ОП А.С. Князев

Председатель УМК Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научноисследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках;

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности;

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- ИПК 1.1 Разрабатывает стратегию исследований реальных химико-технологических процессов, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий;
- ИПК 1.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов;
 - ИОПК-3.1. Использует современные ІТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля;
- ИОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности;
- ИОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием;

2. Задачи освоения дисциплины

Освоить математический аппарат статистической обработки данных.

Освоить обработку массивов данных применительно к химико-технологическим процессам.

Освоить регрессионный анализ применительно к химико-технологическим процессам.

Освоить базовую последовательность статистической оптимизации химикотехнологических процессов.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина является факультативной

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине Семестр 3, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Дисциплина «Статистическая обработка и современные методы анализа данных» является логическим продолжением в цепи дисциплин по направлению «химия». Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам:

Актуальные задачи современной химии 2;

Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;

Основы проектирования химических и нефтехимических производств;

Системы управления химико-технологическими процессами;

Математическое моделирование технологических процессов с использованием математического пакета Aspen.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

- лекции: 16 ч.;
- практические занятия: 16 ч.;
 - в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Раздел 1. Методологию ОИСАК (DMAIC)

Тема 1. Стадия «Определение»

Введение в 6 сигм и LEAN. Введение в методологию ОИСАК (DMAIC). Понятие дефекта. Определение границ проекта. Постановка проблемы. Определение метрик проекта. Определение цели проекта. Определение членов команды. Базисные статистики.

Тема 2. Стадия «Измерение»

Уточнение границ проекта. Карта процесса и способы упрощения задачи. Причинноследственные связи. Виды исходных данных — прямые, косвенные и комбинированные. Анализ системы измерений. Подготовка исходных данных. Специфика работы с реальными данными. Размер выборки. Доверительные интервалы. Анализ возможностей процесса.

Тема 3. Стадия «Анализ»

Графический анализ массивов данных. Анализ режима и воздействий отказов (APBO). Статистический анализ массивов данных – корреляционный и регрессионный анализ. Центральный предел. Доверительные интервалы. Проверка гипотез. Тестирование средних – t-тест и ANOVA.

Тема 4. Стадия «Совершенствование»

Планируемый эксперимент. Полные факторные эксперименты. Факторные дизайны 2k. Факториалы 2k с центральной точкой. Поверхность отзыва. Уточнение параметров системы по результатам планируемого эксперимента. Разработка мероприятий по модернизации на основе статистической модели.

Тема 5. Стадия «Контроль»

Внедрение мероприятий. Методы контроля - карты Шухарда и др. Статистический контроль процесса. Введение в непрерывны статистический контроль. Технологическая и финансовая оценка изменений.

Раздел 2 Современные методы анализа данных

Тема 6. Нейросети

Введение в автоматизированную обработку массивов данных. Введение в нейросети. Разбор работы нейросетей на примере Python. Системы автоматизированной обработки статистики.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и практических занятий, проведения занятий с презентациями студентов по

индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в третьем семестре проводится в письменной форме с последующей презентацией и защитой индивидуального курсового задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории и проверяет компетенции ИПК 1.1, ИПК 1.2 и ИОПК 3.1-3.3.

Индивидуальное задание представляет из себя выгруженный с реального производственного объекта массив данных КИП. Обозначена проблема производства (не достигается требуемое качество продукта, производительность или технологические параметры и тд.). Необходимо провести статистическую обработку данных, выявить проблему, дать рекомендации по устранению проблемы. Привести обоснование выданных рекомендаций.

Результаты презентации определяются оценками «зачтено» или «незачтено».

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы; содержание ответа изложено логично и последовательно; существенные фактические ошибки отсутствуют; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов билета. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «незачтено» выставляется студенту, если он не дал ответа на большенство вопросов при защите индивидуального задания; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более, чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя и студентов. «Незачтено» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя и студентов.

11. Учебно-методическое обеспечение

a) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» https://moodle.tsu.ru

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
- Кафаров, Виктор Вячеславович, Дорохов, Игорь Николаевич, Липатов, Лев Николаевич. Системный анализ процессов химической технологии. Статистические методы идентификации процессов химической технологии, [Текст], Академия наук СССР, Секция химико-технологических и биологических наук; [отв. ред. акад. Н. М. Жаворонков] Москва: Наука, 1982. 343, [1] с. .- ил.
- Буре В. М., Парилина Е. М. Теория вероятностей и математическая статистика. Лань, 2013. 416 с. (http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=10249)
- Кобзарь А.И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников.- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 816 с

б) дополнительная литература:

- Харлампиди, Х. Э. Общая химическая технология. Методология проектирования химико-технологических процессов: учебник / Х. Э. Харлампиди. 2-е изд., перераб. Санкт-Петербург: Лань, 2022. 448 с. ISBN 978-5-8114-1478-9. Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. URL: https://e.lanbook.com/book/213269;
- Химико-технологические системы: оптимизация и ресурсосбережение : учебное пособие для студентов высших технических учебных заведений / Н. В. Лисицын, В. К. Викторов, Н. В. Кузичкин. Санкт-Петербург : Менделеев, 2007. 310, [1] с. : ил., табл.; 24 см.; ISBN 5-94922-024-2 (В пер.)

- The Six Sigma Handbook: A Complete Guide for Green Belts, Black Belts, and Managers at All Levels, Pyzdek, Thomas, Published by McGraw-Hill Education (2014), ISBN 10: 0071840532 ISBN 13: 9780071840538
 - в) ресурсы сети Интернет:
 - свободно доступные ресурсы

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 OneNote, 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/
 - 9EC IPRbooks http://www.iprbookshop.ru/

14. Материально-техническое обеспечение

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для выполнения практических занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации, а также персональными компьютерами с установленным пакетом MS Office (MS Word, MS Excel) для выполнения практических заданий.

15. Информация о разработчиках

Норин Владислав Вадимович, ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ», ассистент кафедры неорганической химии ХФ НИ ТГУ;

Решетников Дмитрий Михайлович, начальник отдела предпроектной подготовки OOO «ИХТЦ»