


МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Тульский государственный университет»

Естественнонаучный институт
Кафедра «Химии»

Утверждено на заседании кафедры
«Химии»
«30» января 2023г., протокол № 6

Заведующий кафедрой


В.А. Алферов

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Обработка результатов химического эксперимента»

**основной профессиональной образовательной программы
высшего образования – программы бакалавриата**

по направлению подготовки
04.03.01. «Химия»

с направленностью
***Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая без-
опасность***

Форма обучения: очная

Идентификационный номер образовательной программы: 040301-01-23

Тула 2023 год

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ
рабочей программы дисциплины

Разработчик(и):

Зайцев М.Г., доц. каф. химии, к.х.н
(ФИО, должность, ученая степень, ученое звание)


(подпись)

1 Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

Целью изучения дисциплины является формирование навыков у студента к самостоятельным научным исследованиям с применением современных математических и статистических методов и компьютерных программ.

Задачами изучения дисциплины являются:

- формирование у студентов понимания роли химического анализа и места изучаемой дисциплины в системе наук.
- получение навыков по обработке и анализу полученных данных с помощью современных информационных технологий;
- получение знаний по выбору подходящей методики измерений и числа параллельных опытов;
овладение метрологически грамотной оценкой систематических и случайных погрешностей этих измерений

2 Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части основной профессиональной образовательной программы.

Дисциплина изучается в 4 семестре.

3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- 1) ОПК-3.1. Теоретические и полуэмпирические математические модели; механизм протекания химических процессов.
- 2) ОПК-4.1. Основные законы естественнонаучных дисциплин.
- 3) ОПК-5.1. Принципы представления и обработки информации; программное обеспечение для обработки результатов.

Уметь:

- 1) ОПК-3.2. Использовать стандартное программное обеспечение при обработке результатов химического эксперимента; применять модели при решении задач химической направленности.
- 2) ОПК-4.2. Использовать базовые знания в области математики и физики при планировании реального эксперимента; обрабатывать данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.
- 3) ОПК-5.2. Использовать современные компьютерные технологии при анализе, обработке и представлении результатов реального химического эксперимента.

Владеть:

- 1) ОПК-3.3. Теоретическими знаниями о составе, строении и свойствах веществ;
- 2) ОПК-4.3. Приемами решения задач естественнонаучных дисциплин; методами интерпретации результатов химических экспериментов.
- 3) ОПК-5.3. Основными типами программного обеспечения, необходимого для грамотной обработки и представления результатов.

4 Объем и содержание дисциплины

4.1 Объем дисциплины, объем контактной и самостоятельной работы обучающегося при освоении дисциплины, формы промежуточной аттестации по дисциплине.

Номер семестра	Формы промежуточной аттестации	Общий объем в зачетных единицах	Общий объем в академических часах	Объем контактной работы в академических часах						Объем самостоятельной работы в академических часах
				Лекционные занятия	Практические (семинарские) занятия	Лабораторные работы	Клинические практические занятия	Консультации	Промежуточная аттестация	
Очная форма обучения*										
4	ДЗ	4	144	64	32				0,25	47,75
Итого	-	4	144	64	32				0,25	47,75

Условные сокращения: Э – экзамен, ЗЧ – зачет, ДЗ – дифференцированный зачет (зачет с оценкой), КП – защита курсового проекта, КР – защита курсовой работы.

4.2 Содержание лекционных занятий

Очная форма обучения

№ п/п	Темы лекционных занятий
4 семестр	
1	Введение. Основные понятия и определения. Признаки и их классификация.
2	Математические модели и их классификация
3	Случайные события и их вероятности. Условная вероятность.
4	Формула полной вероятности, формула Байеса, формула Бернулли.
5	Контрольная работа №1
6	Случайные величины и их распределения.
7	Дискретные случайные величины: распределенные по дискретному равномерному закону; биномиально; по закону Бернулли; по закону Пуассона.
8	Непрерывные случайные величины: равномерно распределенные на отрезке, по экспоненциальному закону.
9	Распределение Стюдента, Фишера, хи-квадрат. Характеристики теоретических распределений.
10	Нормальное распределение Гаусса, стандартное (нормированное) нормальное распределение,
11	Случайная выборка и ее описание. Объем выборки, вариационный ряд, эмпирическая функция распределения.
12	Выборочные характеристики: выборочное среднее, медиана, мода, выборочная дисперсия,
13	Выборочные характеристики: коэффициент асимметрии, коэффициент эксцесса, размах варьирования.
14	Контрольная работа №2
15	Статистическое оценивание. Точечное и интервальное статистическое оценивание. Доверительная вероятность и доверительный интервал

№ п/п	Темы лекционных занятий
16	Тест для одного и двух выборочных средних. Парный t -тест. Статистический критерий согласия (χ^2 -тест).
17	Примеры применения статистических тестов для проверки гипотез. Исключение выпадающих результатов (Q -тест Диксона).
18	Сравнение воспроизводимостей двух серий данных (F -тест Фишера)
19	Применение различных видов распределений для описания экспериментальных выборок в химии и биологии.
20	Представление экспериментальных данных и расчет выборочных характеристик.
21	Распределения Пуассона, биномиальное, нормальное.
22	Использование компьютерных программ для статистической обработки результатов
23	Случайные погрешности (оценка воспроизводимости). Точечная и интервальная оценка воспроизводимости.
24	Систематическая погрешность (оценка правильности). Простой и модифицированный тест Стьюдента.
25	Контрольная работа №3
26	Градуировочная функция. Расчет параметров линейной регрессии.
27	Характеристики чувствительности
28	Математическая модель и матрица планирования.
29	Метод полного факторного эксперимента или методом дробных реплик
30	Уравнение регрессии и регрессионный анализ
31	Дробный факторный эксперимент
32	Оптимизация по методу крутого восхождения

4.3 Содержание практических (семинарских) занятий

Очная форма обучения

№ п/п	Темы практических (семинарских) занятий
4 семестр	
1	Условная вероятность. Формула полной вероятности, формула Байеса, формула Бернулли.
2	Дискретные случайные величины: распределенные по дискретному равномерному закону; биномиально; по закону Бернулли; по закону Пуассона.
3	Выборочные характеристики: выборочное среднее, медиана, мода, выборочная дисперсия, коэффициент асимметрии, коэффициент эксцесса, размах варьирования.
4	Точечное и интервальное статистическое оценивание. Доверительная вероятность и доверительный интервал
5	Виды погрешностей.
6	Значащие и незначащие цифры. Округление при арифметических действиях
7	Правила суммирования погрешностей
8	Оценка воспроизводимости. Точечное и интервальное оценивание воспроизводимости
9	Проверка гипотез. Выявление значимости различий двух средних и выборочного среднего и константы.
10	Сравнение выборок по воспроизводимости. Объединение выборок. Критерий Фишера
11	Простой и модифицированный тесты Стьюдента. Приближение Уэлча
12	Расчет параметров линейной регрессии

№ п/п	Темы практических (семинарских) занятий
13	Примеры расчета количественных оценок чувствительности: коэффициента чувствительности
14	Расчет предела обнаружения и нижней границы диапазона определяемых концентраций
15	Защита домашних расчетных заданий
16	Зачетное занятие

4.4 Содержание лабораторных работ

Занятия указанного типа не предусмотрены основной профессиональной образовательной программой

4.5 Содержание клинических практических занятий

Занятия указанного типа не предусмотрены основной профессиональной образовательной программой

4.6 Содержание самостоятельной работы обучающегося

Очная форма обучения

№ п/п	Виды и формы самостоятельной работы
<i>4 семестр</i>	
1	Домашняя контрольная работа: Выявление грубых погрешностей. Расчет выборочных характеристик и доверительных интервалов. Выявление значимости различий двух средних и среднего и константы. Корреляционный анализ. Расчет выборочных оценок параметров линейной регрессии. Расчет количественных оценок чувствительности
2	Подготовка к практическим занятиям
3	Подготовка к аудиторным контрольным работам
4	Подготовка к промежуточной аттестации и ее прохождение

5 Система формирования оценки результатов обучения по дисциплине в рамках текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося

Очная форма обучения

Мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося			Максимальное количество баллов
<i>4 семестр</i>			
Текущий контроль успеваемости	Первый рубежный контроль	Оцениваемая учебная деятельность обучающегося:	
		Посещение лекционных занятий	5
		Выполнение контрольной работы №1	15
		Выполнение контрольной работы №2	10
	Итого		30
Второй рубежный контроль		Оцениваемая учебная деятельность обучающегося:	

Мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающегося			Максимальное количество баллов
	контроль	Посещение лекционных занятий	5
		Выполнение контрольной работы №3	10
		Выполнение и защита домашней контрольной работы	15
		Итого	30
Промежуточная аттестация	дифференцированный зачет		40 (100)

Шкала соответствия оценок в стобалльной и академической системах оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Система оценивания результатов обучения	Оценки			
Стобалльная система оценивания	0 – 39	40 – 60	61 – 80	81 – 100
Академическая система оценивания (экзамен, дифференцированный зачет, защита курсового проекта, защита курсовой работы)	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Академическая система оценивания (зачет)	Не зачтено	Зачтено		

6 Описание материально-технической базы (включая оборудование и технические средства обучения), необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Для осуществления образовательного процесса по дисциплине требуется:

Для проведения лекционных занятий:

Мультимедийный проектор, ноутбук, совместимый с мультимедийным проектором, с соответствующим программным обеспечением для возможности демонстрации презентационного материала.

Для проведения практических занятий:

Мультимедийный проектор, ноутбук, совместимый с мультимедийным проектором, с соответствующим программным обеспечением для возможности демонстрации презентационного материала.

7 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

(Наличие указываемых изданий в библиотеке ТулГУ или в ЭБС ТулГУ обязательно)

7.1 Основная литература

1. Теория вероятностей и математическая статистика: учеб. пособие для вузов / В. Е. Гмурман. — 12-е изд., перераб. — М.: Высш. образование, 2006. — 479 с. : ил.

2. Гмурман, В. Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике : учеб. пособие для вузов / В. Е. Гмурман. — 9-е изд., стер. — М. : Высш. шк., 2004. — 405с.

3. Гмурман, В. Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике : учебное пособие для среднего профессионального образования / В. Е. Гмурман. — 11-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство

Юрайт, 2021. — 406 с. — (Профессиональное образование). — ISBN 978-5-534-08569-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/469941>

4. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика : учебник для среднего профессионального образования / В. Е. Гмурман. — 12-е изд. — Москва : Издательство Юрайт, 2021. — 479 с. — (Профессиональное образование). — ISBN 978-5-534-00859-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/469552>

7.2 Дополнительная литература

1. Вентцель, Е.С. Теория вероятностей и ее инженерные приложения: учеб. пособие для втузов / Е.С. Вентцель, Л.А. Овчаров. — 4-е изд., стер. — М.: Высш. шк., 2007. — 491с. : ил.
2. Отто, М. Современные методы аналитической химии: [учебник]: в 2 т. Т. I / М.Отто; пер.с нем. А.В.Гармаша. — М. : Техносфера, 2003. — 416с. : ил.
3. Отто, М. Современные методы аналитической химии: [учебник]: в 2 т. Т. II / М.Отто; пер.с нем. А.В.Гармаша. — М. : Техносфера, 2004. — 288с. : ил.
4. Баврин, И.И. Теория вероятностей и математическая статистика: учебник для высш.пед.учеб.заведений / И.И.Баврин. — М. : Высш.шк., 2005. — 160с.
5. Дорохова, Е.Н. Задачи и вопросы по аналитической химии / Е.Н. Дорохова, Г.В.Прохорова. — М. : Мир, 2001. — 267с. : ил.
6. Коренман, Я.И. Задачник по аналитической химии: Титриметрические методы анализа: Учеб. пособие для вузов / Я.И. Коренман, П.Т.Суханов, С.П. Калинкина; Науч.ред. Н.В.Макаров; Воронеж.гос. технолог.акад. — Воронеж, 2001. — 336с.
7. Степанова, Е. А. Метрология и измерительная техника: основы обработки результатов измерений : учебное пособие для вузов / Е. А. Степанова, Н. А. Скулкина, А. С. Волегов ; под общей редакцией Е. А. Степановой. — Москва : Издательство Юрайт, 2021 ; Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та. — 95 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00686-5 (Издательство Юрайт). — ISBN 978-5-7996-1878-0 (Изд-во Урал. ун-та). — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/472154>

8 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1 Общие поисковые системы: Google (www.google.com), Яндекс (www.yandex.ru), Рамблер (www.rambler.ru)

9 Перечень информационных технологий, необходимых для осуществления образовательного процесса по дисциплине

9.1 Перечень необходимого ежегодно обновляемого лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

1. Текстовый редактор Microsoft Word;

2. Программа для работы с электронными таблицами Microsoft Excel;
3. Программа подготовки презентаций Microsoft PowerPoint;

9.2 Перечень необходимых современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы не требуются.