

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТ-
ВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор института химии
д.х.н., проф. Горячева И.Ю.

"07" 06 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
Статистическая обработка результатов эксперимента

Направление подготовки бакалавриата
18.03.01 Химическая технология


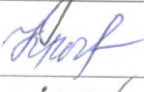

Профиль подготовки бакалавриата
Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов

Квалификация (степень) выпускника

Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов,
2023

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Гамаюнова Ирина Михайловна		07.06.2023
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		07.06.2023
Заведующий кафедрой	Казаринов Иван Алексеевич		07.06.2023
Специалист Учебного управления			

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Статистическая обработка результатов эксперимента» является формирование у будущего специалиста

- понимания теоретических основ дисциплины «Статистическая обработка результатов эксперимента»;
- навыков исследовательской работы;
- умения применять полученные знания и навыки для анализа типичных технологических задач;
- умения использовать программное обеспечение компьютеров для учебной, научной и производственной деятельности

2. Место дисциплины в структуре ООП бакалавриата

Дисциплина Б1.О.27 «Статистическая обработка результатов эксперимента» относится к обязательной части Блока 1 — Дисциплины (модули) рабочего учебного плана ООП по направлению подготовки 18.03.01 — Химическая технология, профиль «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов» и предлагается к освоению во втором семестре.

Материал дисциплины базируется на знаниях по математике (дифференциальное и интегральное исчисление, работа с матрицами), информатике (возможности программного обеспечения компьютера - программы excel, mathcad и т.п.) в объеме курсов ООП по направлению 18.03.01 «Химическая технология» и является основой для последующего изучения дисциплин «Аналитическая химия и физико-химические методы анализа», «Физическая химия», а также тех вариативных дисциплин, где необходимо грамотно планировать эксперимент и анализировать его результаты, разрабатывать теоретические модели протекающих процессов, правильно подготавливать научные публикации.

3 Результаты обучения по дисциплине «Статистическая обработка результатов эксперимента»:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	1.1_Б.УК-1. Анализирует задачу, выделяя её базовые составляющие. Осуществляет декомпозицию задачи. 2.1_Б.УК-1. Находит и критически анализирует информацию, необходимую для решения поставленной задачи. 3.1_Б.УК-1. Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивая их достоинство и недостатки.	Знать: – основные понятия, принципы и законы теории вероятностей, математической статистики, регрессионного анализа Уметь: - решать типовые задачи, связанные с основными разделами математической статистики; - применять прямые и косвенные методы измерения физических величин; - оформлять результаты экспериментальных исследований •Владеть: - математическим аппаратом разделов «Теория вероятностей и математическая статистика, «Регрессионный анализ»; - навыками решения практических задач по пройденным раз-

		делам; - методами обработки и анализа экспериментальной информации
<p>ОПК-5. Способен осуществлять экспериментальные исследования и испытания по заданной методике, проводить наблюдения и измерения с учетом требований техники безопасности, обрабатывать и интерпретировать экспериментальные данные</p>	<p>ОПК-5.1. Проводит экспериментальные исследования и испытания по стандартным методикам</p> <p>ОПК-5.3. Использует современные технологии сбора, анализа и обработки экспериментальных данных.</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> – способы представления и анализа результатов химического эксперимента с учетом статистической обработки; – ограничения расчётных (экспериментальных) методов оценки (определения) различных параметров химических процессов. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> – систематизировать, интерпретировать результаты расчётов и собственного эксперимента; – формулировать заключение по результатам выполненных вычислительных операций. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> – навыками обнаружения ошибки в собственных расчётах или собственно проведённой экспериментальной работе; – навыками планирования собственных расчётов или экспериментальной работы.

4. Структура и содержание дисциплины «Статистическая обработка результатов эксперимента»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы (144 часа).

№ п/п	Раздел дисциплины	Се- мес тр	Неде- ля семе- стра	Виды учебной работы, включая самостоятель- ную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Формы текущего контроля успеваемо- сти (по неделям се- местра) Формы промежу- точной аттестации (по семестрам)		
				Всего	Лек- ции	Практические занятия		Само- стоят.			Кон- троль
						Общая трудо- ем- кость	Из них – прак- тиче- ская подго- товка				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	
1	Введение Раздел 1. Статистическая обработка экс- периментальных данных	2	1-15	105	30	30		45			
1.1	Измерения и их погрешности	2	1-3	21	6	6		9		Дискуссия Многовариантные за- дания Коллективный разбор ситуационных задач	
1.2	Теория вероятностей	2	4-5	14	4	4		6		Многовариантные за- дания	
1.3	Числовые характеристики распре- деления. Законы распределения	2	6-8	21	6	6		9		Письменный отчет по практической работе Тестовый отчет	
1.4	Статистика малых выборок. Проверка статистических гипотез.	2	9-11	21	6	6		9		Письменный отчет по практической работе Тестовый отчет	

1.5	Статистическое оценивание аналитического сигнала.	2	12-13	14	4	4		6		Контрольное задание № 1
1.6	Регрессионный анализ: Линейная регрессия относительно одного параметра.	2	14	7	2	2		3		Письменный отчет по практической работе Тестовый отчет
1.7	Множественная линейная регрессия.	2	15	7	2	2		3		Письменный отчет по практической работе
2	Раздел 2. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий.	2	16-17	14	4	4		6		
2.1	Основные понятия Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Дробный факторный эксперимент (ДФЭ)..	2	16	7	2	2		3		Работа на семинаре
2.2	Оптимизация эксперимента в области крутого восхождения. Описание области, близкой к экстремуму	2	17	7	2	2		3		Контрольное задание № 2
3	Раздел 3 Разбор конкретных производственных проблем, возникающих в аналитических лабораториях	2	18	7	2	2		3		Дискуссия Допуск к экзамену
	Промежуточная аттестация	2		18					18	экзамен
	Итого	2	1-18	144	36	36	-	54	18	

Содержание лекционного курса

Введение

Раздел 1. Статистическая обработка экспериментальных данных.

1.1 Измерения и их погрешности

Роль статистической обработки данных химического и физико-химического эксперимента. Измерения и их погрешности. Проблема определения. Точность измерения. Классификация погрешностей. Систематические погрешности (понятие класса точности приборов: стрелочных, цифровых, химической посуды, весов, термометров и т.п.). Метрологическая характеристика «правильность измерения». Случайные погрешности. Метрологические характеристики «сходимость» и «правильность» результатов. Грубые ошибки или промахи, причины их возникновения при выполнении эксперимента: неправильное считывание со шкалы прибора, термометра и т.п. Методы устранения систематических погрешностей: метод релятивизации и метод рандомизации на примере фотоколориметрического анализа. Погрешности прямых и косвенных измерений. Математические действия с округленными числами

1.2 Теория вероятностей

Предмет теории вероятностей. Основные понятия теории вероятностей. Классификация событий. Совместные и несовместные события. Достоверные, невозможные и случайные события. События, образующие полную группу. Противоположные события. Сумма, произведение и разность событий. Вероятность событий как мера статистической устойчивости события. Правила сложения и умножения вероятностей зависимых и независимых событий. Формула полной вероятности. Формула Бернулли. Вероятнейшее число появления события.

1.3 Числовые характеристики распределения. Законы распределения

Понятия: случайная величина, закон распределения и функция распределения случайной величины. Способы задания закона распределения случайной величины на примере экспериментальных значений константы скорости реакции омыления эфира щелочью, полученных на учебном практикуме по физической химии. Вариационный ряд. Гистограммы распределения дискретной и непрерывной случайной величины. Интегральные кривые распределения случайной величины, их свойства. Плотность вероятности. Свойства дифференциальной функции распределения. Числовые характеристики распределения. Математическое ожидание. Свойства математического ожидания. Мода. Медиана. Дисперсия и среднее квадратичное отклонение. Свойства дисперсии.

Равномерное распределение. Закон Муавра, Лапласа – Гаусса. Кривая плотности нормального распределения. Свойства кривой. Интегральная функция нормального распределения. Дифференциальная и интегральная функции нормированного нормального распределения. Понятие доверительной вероятности и уровня значимости. Использование различных доверительных вероятностей в разных отраслях науки и техники.

1.4 Статистика малых выборок. Проверка статистических гипотез

Понятие о генеральной совокупности, выборке и оценке параметра. Понятие «наилучшей оценки». Несмещенная, эффективная и состоятельная оценка. Повторные и бесповторные выборки. Метод максимального правдоподобия и его использование для определения наилучших оценок. Метод наименьших квадратов. Среднее арифметическое как наилучшая оценка математического ожидания. Свойства среднего арифметического. Свойства дисперсии выборочного среднего. Наилучшая оценка дисперсии.

Распределение Стьюдента. Свойства функции распределения Стьюдента. Сопоставление кривых распределения Гаусса и Стьюдента. Интегральная оценка параметров распределения. Оценка доверительных интервалов дисперсии. Функция χ^2 – распределения Пирсона. Выявление грубых ошибок (промахов) в экспериментальных данных. Критерий Зб. Критерий Грэббса. Q – критерий для малых выборок.

Понятие о нулевой и альтернативной гипотезах. Критерии значимости. Проверка гипотезы о равенстве математического ожидания заданному числу. t – критерий Стьюдента (сравнение результатов количественного определения реагента с его содержанием в ГСО). Сравнение точности двух или более методов определения одной и той же физической величины: проверка гипотезы об однородности двух дисперсий, критерий Фишера; проверка гипотезы об однородности нескольких дисперсий с одинаковым объемом выборок, критерий Кохрена; проверка гипотезы об однородности нескольких дисперсий с разным объемом выборок, критерий Барлетта. Оценка воспроизводимости двух методов по t – критерию Стьюдента. Проверка гипотезы о принадлежности выборки генеральной совокупности (основная гипотеза).

1.5 Статистическое оценивание аналитического сигнала

Понятия аналитический сигнал и шум. Разрешающая способность аналитического сигнала. Предел обнаружения. Точечное оценивание предела обнаружения. Стратегия рисков. Кайзеровский предел обнаружения. Отношение сигнал / шум. Точность предела обнаружения.

1.6 Регрессионный анализ: Линейная регрессия относительно одного параметра

Роль регрессионного анализа в химическом эксперименте (примеры). Линейная регрессия относительно одного параметра на примере зависимости потенциала электрода от концентрации потенциалоопределяющих ионов. Использование метода наименьших квадратов для расчета коэффициентов уравнения линейной регрессии. Соотнесение коэффициентов уравнения A и B с реальными химическими и физическими величинами экспериментальной зависимости $E=f(c)$. Вычисление дисперсии адекватности. Оценка значимости коэффициентов по доверительным интервалам и по критерию Стьюдента. Расчет коридора ошибок. Оценка адекватности уравнения регрессии по критерию Фишера. Расчет выборочного коэффициента корреляции.

Преобразование различных функций к линейному виду (линеаризация интегральных кинетических кривых для простых необратимых реакций различных порядков, обратимых и параллельных мономолекулярных реакций).

1.7 Множественная линейная регрессия

Определение коэффициентов регрессии зависимости теплового эффекта химической реакции от температуры по методу наименьших квадратов и матричной форме. Использование стандартизованных переменных для расчета вектора оценок коэффициентов уравнения регрессии. Построение матрицы по экспериментальным данным. Операции с матрицами: транспонирование, умножение, обращение методом присоединенной матрицы, вычисление алгебраических дополнений и детерминанта методом разложения по элементам строки или столбца. Перевод стандартизованных переменных в натуральный масштаб. Проверка адекватности модели.

Раздел 2. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий

2.1 Основные понятия Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Дробный факторный эксперимент (ДФЭ).

Понятие фактора и факторного пространства. Параметр оптимизации. Требования, предъявляемые к факторам и параметрам оптимизации. Выбор математической модели для описания функции отклика. Требования, предъявляемые к модели. Область

восхождения по градиенту, крутое восхождение, почти стационарная область. Эффективность многофакторного эксперимента.

Матрица плана эксперимента. Построение матриц плана двух-, трех-, четырехфакторного и т.д. ПФЭ. Свойства матрицы плана эксперимента. Пример обработки результатов планированного эксперимента достижения максимального выхода продукта промышленной химической реакции в зависимости от температуры, давления, времени контакта. Определение основных уровней факторов и интервалов варьирования. Построение матрицы плана эксперимента в безразмерном и натуральном масштабе. Расчет коэффициентов уравнения регрессии. Расчет дисперсии воспроизводимости по результатам параллельных опытов и по серии опытов на основном уровне. Определение значимости коэффициентов по критерию Стьюдента. Проверка адекватности модели по критерию Фишера. Интерпретация результатов эксперимента

Понятие о дробных репликах. Понятие о генерирующем соотношении и определяющем контрасте. Разрешающая способность дробных реплик. Определение размера дробной реплики.

2.2 Оптимизация эксперимента в области крутого восхождения. Описание области, близкой к экстремуму

Оптимизация эксперимента в области крутого восхождения по поверхности отклика. Пошаговый метод Бокса и Уилсона. Определение шага измерения параметров. Реальные и «мыслимые» опыты.

Описание области, близкой к экстремуму. Построение композиционных планов второго порядка. Использование опытов в «звездных» точках и на основном уровне. Расчет минимального количества опытов. Определение «звездного» плеча. Свойства композиционных планов второго порядка.

Раздел 3. Разбор конкретных производственных проблем, возникающих в аналитических лабораториях

Внутрилабораторный контроль качества результатов испытаний, пределы повторяемости, контрольные карты Шухарта, проверка качества измерений по ГСО на примере гипотетической аналитической лаборатории.

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

Изучение дисциплины «Статистическая обработка результатов эксперимента» наряду с традиционными образовательными технологиями предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. К интерактивным формам проведения занятий относятся:

- 1) коллективный разбор ситуационных задач: применение методов математической статистики к конкретным задачам, возникающим у студентов при выполнении лабораторных работ по профессиональным дисциплинам
- 2) дискуссии по разделам дисциплины и темам практических работ, вырабатывающие у обучающихся навыки метрологической обработки экспериментальных данных;
- 3) рассматриваются конкретные производственные проблемы, возникающие в аналитических лабораториях (внутрилабораторный контроль качества результатов испытаний, пределы повторяемости, контрольные карты Шухарта, проверка качества измерений по ГСО).

Адаптивные технологии, применяемые при обучении студентов с ОВЗ и инвалидностью

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляется возможность дистанционного освоения её теоретической части путем распространения текста лекций, заданий и их контроля через интернет, а также индивидуальных консультаций с применением как электронной почты, так и визуального общения с использованием интернет-технологии «Скайп», при необходимости предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа студентов предполагает освоение теоретического материала [1-2], подготовку к практическим работам, применение полученных знаний и умений к оформлению экспериментальных работ на учебном практикуме, участие в интерактивных формах обучения. Форма текущего контроля – экзамен.

Вопросы для самоконтроля.

1. Измерения и их погрешности. Классификация погрешностей.
2. Метрологические характеристики «правильность измерения», «воспроизводимость измерения».
3. Метрологические характеристики «сходимость» и «воспроизводимость» результатов.
4. Методы устранения систематических погрешностей.
5. Прямые и косвенные измерения. Понятие значимых цифр. Математические действия с числами, имеющими погрешности
6. Основные понятия теории вероятностей. Классификация событий.
7. Понятие вероятности события.
8. Правила сложения и умножения вероятностей различных событий.
9. Формула полной вероятности. Формула Бернулли.
10. Понятия случайной величины, закона и функции распределения случайной величины
11. Интегральная и дифференциальная функции распределения. Их свойства.
12. Числовые характеристики распределения и их свойства. Расчет математического ожидания и дисперсии дискретных и непрерывных случайных величин.
13. Равномерное распределение.
14. Нормальное распределение случайных величин. Нормированное нормальное распределение случайных величин
15. Понятие о генеральной совокупности, выборке и оценке параметра
16. Понятие и свойства «наилучшей оценки».
17. Метод максимального правдоподобия
18. Наилучшая оценка математического ожидания и дисперсии
19. Распределение Стьюдента (статистика малых выборок) Построение доверительных интервалов дисперсии и среднего значения
20. Выявление грубых ошибок (промахов) всеми способами
21. Проверка гипотезы о равенстве среднего значения определенному числу
22. Проверка гипотез об однородности нескольких дисперсий. Критерии Фишера, Кохрена, Бартлетта.
23. Проверка гипотезы о принадлежности выборки генеральной совокупности (основная гипотеза).
24. Понятия аналитический сигнал и шум. Разрешающая способность аналитического сигнала. Стратегия рисков. Предел обнаружения. Точность предела обнаружения. Пределы повторяемости. Контрольные карты Шухарта.

25. Понятие значащих цифр. Математические действия с числами, имеющими погрешности.
26. Использование метода наименьших квадратов для расчета коэффициентов уравнения линейной регрессии относительно одной переменной
27. Оценка значимости коэффициентов разными способами
28. Оценка адекватности уравнения регрессии по критерию Фишера.
29. Множественная линейная регрессия. Определение коэффициентов регрессии по методу наименьших квадратов и матричной форме. Проверка адекватности модели
30. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий.
31. Полный факторный эксперимент. Матрица плана эксперимента и ее свойства
32. Дробный факторный эксперимент. Построение матрицы трехфакторного эксперимента. Расчет коэффициентов уравнения регрессии. Определение значимости коэффициентов. Проверка адекватности модели

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1 Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
2	0	0	24	15	0	30	31	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

2 семестр

Лекции - 0 баллов

(не оцениваются)

Лабораторные занятия - 0 баллов

не предусмотрены

Практические занятия – от 0 до 24 балла

(8 практических работ по 3 балла каждая).

Количество баллов за 1 практическую работу (всего предусмотрено 8 работ)	Критерий оценки
0	Работа не выполнена
1	Работа выполнена, но не оформлена
2	Работа выполнена и аккуратно оформлена
3	Работа выполнена самостоятельно, аккуратно оформлена и сдана в срок

Самостоятельная работа – 0-15 баллов

оцениваться уровень подготовки к занятиям в интерактивной форме (две дискуссии и 1 разбор конкретной ситуации)

	0	1-2	3-4	5
коллективный разбор ситуационных задач	Не работал	Принимал слабое участие в разборе ситуационных задач (менее 50% аудиторного времени)	Участвовал в разборе ситуационных задач, работая 50 - 79% аудиторного времени. Приводил уточ-	Предлагал конкретные ситуационные задачи. Участвовал в разборе, работая более 80% аудиторного времени

			няющие допол- нения	
Дискуссии (2)	Не участ- вовал в дискуссии	Способность вы- полнять задания, но отсутствие личной активнос- ти и самостоя- тельности при ра- боте в команде	Проявление инициативы в работе команды, но отсутствие способности грамотно пре- подносить мате- риал	Присутствуют груп- повые и индивиду- альные элементы ра- боты, активность и грамотная подача ма- териала

Автоматизированное тестирование – 0 баллов

Не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности от 0 до 30 баллов

из них

контрольные задания – 10 баллов (два контрольных задания по 5 баллов каждое) оцениваются правильность (3 балла), самостоятельность выполнения (1 балл), аккуратность (1 балл)

тестовые отчеты – 20 баллов (4 тестовых отчета по 5 баллов каждый)

Промежуточная аттестация (экзамен) — от 0 до 31 балл.

Экзамен проходит в виде устного опроса: знание основных определений и законов (5 баллов), умение записать итоговые уравнения (10 баллов), анализ основных уравнений, пределы их применимости, практическая значимость (16 баллов).

при проведении промежуточной аттестации

ответ на «отлично» оценивается от 25 до 31 баллов;

ответ на «хорошо» оценивается от 20 до 24 баллов;

ответ на «удовлетворительно» оценивается от 15 до 19 баллов;

ответ на «неудовлетворительно» от 0 до 14 баллов

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 2 семестр по дисциплине «**Статистическая обработка результатов эксперимента**» составляет 100 баллов.

Таблица 2.2 Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «**Статистическая обработка результатов эксперимента**» в оценку (экзамен):

<u>85-100</u> баллов	«отлично»
<u>70-84</u> балла	«хорошо»
<u>55- 69</u> баллов	«удовлетворительно»
<u>0- 54</u> баллов	«не удовлетворительно»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение

а) литература:

1. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высшее образование, 2010 480 с. (97 экз.)
2. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика [Текст]: Учебник / В.Е. Гмурман. – 12-е изд. – М.: изд-во Юрайт. 2010 – 479 с. - ISBN 978-5-9916-3461-8. В ЗНБ СГУ 2010 г. – 96 экз.
3. Гамаюнова И.М., Бурашникова М.М. «Ошибки прямых и косвенных измерений при выполнении химического эксперимента». Саратов: Изд-во Саратов. Ун-та, 2014. 40 с. (38 экз.).

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

1. Microsoft Excel версии 2003 или новее или соответствующий аналог свободно распространяемых пакетов офисных приложений;
2. Microsoft Word версии 2003 или новее или соответствующий аналог свободно распространяемых пакетов офисных приложений.
3. Манита А.Д. Теория вероятностей и математическая статистика. Интернет-учебник по теории вероятностей и математической статистике. <http://teorver-online.narod.ru/secpage.html>
4. И. М. Гамаюнова, М. М. Бурашникова. «Электронные тестовые задания по статистической обработке данных химического эксперимента» [Электронный ресурс], 34 с, 2014 г. http://elibrary.sgu.ru/uch_lit/868.pdf

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Учебная аудитория для чтения лекций
2. Мультимедийная установка.
3. Учебная лаборатория для выполнения практических работ, оснащенная необходимым оборудованием (компьютеры с лицензионным программным обеспечением Microsoft Office 2003, 2007, Mathcad, подключенные к системе Интернет).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 18.03.01 – Химическая технология и профилю подготовки «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов».

Автор:

доцент кафедры физической химии
к.х.н., доцент И.М. Гамаюнова

Программа одобрена на заседании кафедры физической химии от 07 июня 2023 года, протокол № 10.