

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

Т.А. Хагуров

«29» мая 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Б1.О.07 Методы статистического анализа в аналитической химии

(код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом)

Направление подготовки/ специальность 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) / специализация Аналитическая химия

Программа подготовки академическая

Форма обучения очная

Квалификация (степень) выпускника магистр

Краснодар 2021

Рабочая программа дисциплины МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОГО
АНАЛИЗА В АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ составлена в соответствии с
федеральным государственным образовательным стандартом высшего
образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки

04.04.01 Химия

код и наименование направления подготовки

Программу составил(и):

С.В. Ратнер, профессор, д.э.н., доцент



Рабочая программа дисциплины «МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОГО
АНАЛИЗА В АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ» утверждена на заседании
кафедры аналитической химии
протокол № 5 от 18 мая 2021 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Темердашев З.А.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии
и высоких технологий

протокол № 7 от 24 мая 2021 г.

Председатель УМК факультета

Беспалов А.В.



Рецензенты:

Горидько Н.П., старший научный сотрудник лаборатории экономической
динамики и управления инновациями Института проблем управления РАН,
кандидат экономических наук _____

Иосифов В.В, доцент кафедры наземного транспорта и механики Кубанского
государственного технологического университета, кандидат технических наук

1 Цели и задачи изучения дисциплины.

1.1 Цель освоения дисциплины.

Подготовка будущих высококвалифицированных специалистов в области аналитической химии к решению практических задач, связанных с обработкой больших массивов экспериментальных данных на предмет обнаружения и формализованного описания существующих статистических закономерностей, позволяющих установить причинно-следственную связь физико-химических процессов и явлений.

1.2 Задачи дисциплины.

Приобретение знаний по основам теории измерений; развитие умения планировать и организовывать проведение экспериментов различного рода; овладение навыками проведения оценки качества полученных экспериментальных данных; приобретение первоначальных знаний по основам многомерного статистического анализа; овладение математическим аппаратом, дискриминантного, факторного и кластерного анализа, а также непараметрической статистики; приобретение навыков работы в современных пакетах прикладных программ; развитие умения грамотно интерпретировать результаты статистического анализа и применять их в решении практических задач химического анализа.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Методы статистического анализа в аналитической химии» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана направления подготовки 04.04.01 «Химия»

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих общепрофессиональных компетенций (ОПК):

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	
ИПК-3.1. Способен использовать надстройки табличного процессора Excel для проведения дискриптивного, регрессионного и дисперсионного анализ экспериментальных данных	Знает математические основы дискриптивного и корреляционного-регрессионного анализа данных

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 7 зач.ед. (252 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице (для студентов ОФО).

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)			
			10			
Контактная работа, в том числе:						
Аудиторные занятия (всего):		128	128			
Занятия лекционного типа		32	32	-	-	-
Лабораторные занятия		80	80	-	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		16	16	-	-	-
Иная контактная работа:						
Контроль самостоятельной работы (КСР)		-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,3	0,3			
Самостоятельная работа, в том числе:						
<i>Курсовая работа</i>		-	-	-	-	-
<i>Проработка учебного (теоретического) материала</i>		30	30	-	-	-
<i>Выполнение индивидуальных заданий (подготовка расчетно-графических заданий)</i>		40	40	-	-	-
<i>Реферат</i>		-	-	-	-	-

№	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	Описательная статистика и методы формулировки статистических гипотез	28	4	4	8	12
2.	Методы обнаружения аномальных наблюдений и оценки качества измерений	28	4	4	8	12
3.	Методы обнаружения зависимостей между данными, измеренными в сильных шкалах	42	6	4	16	16
4.	Методы обнаружения зависимостей между данными, измеренными в слабых шкалах	42	6	4	16	16
5.	Многомерный анализ данных	38	6	-	16	16
6.	Возможности обработки данных в современных пакетах прикладных программ	38	6	-	16	16
	<i>Итого по дисциплине:</i>	216	32	16	80	88
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0,3				
	Подготовка к текущему контролю	18				
	Общая трудоемкость по дисциплине	252				

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа.

4.	Методы обнаружения зависимостей между данными, измеренными в слабых шкалах	Непараметрический корреляционный анализ. Непараметрические тесты Манна-Уитни и Крускала-Уоллиса. Непараметрический дисперсионный анализ Фридмана. Таблицы сопряженности.	<i>РГЗ</i>
5.	Многомерный анализ данных	Кластерный анализ: процедуры кластеризация, меры расстояния, правила объединения объектов в кластеры. Дискриминантный анализ: дискриминирующие функции, функции классификации	<i>РГЗ</i>
6.	Возможности обработки данных в современных пакетах прикладных программ	Дополнительные опции статистического анализа в ППП STATISTICA. Визуализация данных. Возможности составления отчетов.	<i>РГЗ</i>

2.3.2 Занятия семинарского типа.

№	Наименование семинарских (практических) занятий	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	Решение задач на формулировку исследовательских и статистических гипотез	Опрос
2.	Решение задач на оценку равноточности и воспроизводимости измерений.	Опрос
3.	Решение задач на оценку близости распределения данных, полученных в ходе измерений, к нормальному закону распределения	Опрос
4.	Решение задач однофакторного дисперсионного анализа	Опрос
5.	Решение задач на проведение теста Манна-Уитни	Опрос
6.	Решение задач на проведение теста Краскала-Уоллиса	Опрос
7.	Решение задач на расчет коэффициентов непараметрической корреляции Спирмена и Кендалла	Опрос
8.	Работа с академической литературой с целью идентификации использования в проведенных экспериментах методов статистического анализа, самостоятельная проверка полученных результатов.	Индивидуальная презентация

2.3.3 Лабораторные занятия.

№	Наименование практических работ	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	Проведение F-теста на равенство дисперсий в Excel	Отчет по лабораторной работе
2.	Проведение теста на равен	

4.	Проведение однофакторного, двухфакторного и многофакторного дисперсионного анализа в Excel и Statistica	Отчет по лабораторной работе
5.	Построение регрессионных моделей в Excel и Statistica	Отчет по лабораторной работе
6.	Проведение тестов Манна-Уитни в Statistica	Отчет по лабораторной работе
7.	Проведение тестов Краскелла-Уоллиса в Statistica	Отчет по лабораторной работе
8.	Непараметрическая корреляция в Statistica	Отчет по лабораторной работе
9.	Решение задач на кластеризацию наблюдаемых объектов по результатам измерений их свойств	Отчет по лабораторной работе
10.	Решение задач прогнозирования результатов эксперимента по классификационным функциям, построенным по обучающей выборке	Отчет по лабораторной работе
11.	Анализ модельного примера по построению нейронной сети в Statistica	Опрос
12.	Проведение статистического анализа данных, собранных в результате собственного эксперимента	Индивидуальная презентация

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы - не предусмотрены.

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Подготовка РГЗ	ГОСТ Р 8.736-2011 Государственная система обеспечения единства измерений (ГСИ). Измерения прямые многократные. Методы обработки результатов измерений. Основные положения http://docs.cntd.ru/document/1200089016

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения и слуха:

– в форме электронного документа,

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля.

Текущий контроль аудиторной работы студентов осуществляется в форме устного опроса и защиты отчета по практической работе.

Текущий контроль самостоятельной работы студентов проводится посредством защиты индивидуальных РГЗ на момент закрытия третьего, четвертого и пятого раздела курсов. Выполнение указанных работ является обязательным для всех обучающихся. Студенты, не выполнившие в полном объеме эти работы, не допускаются к сдаче экзамена, как не выполнившие график учебного процесса.

Примеры индивидуального расчетно-графического задания

Задание 1. По результатам измерения аналитического сигнала Al при оценке однородности химического состава CO в соответствии с различными методиками оцените (табл.1), оказывает ли выбор методики влияние на погрешность измерений.

Таблица 1 – Результаты измерений аналитического сигнала

Методика 1	Методика 2	Методика 3
1,7	1,12	1,10
1,10	1,13	1,11
1,8	1,15	1,12
1,9	1,16	
1,11		

Задание 2. Разброс результатов определения SiO_2 в глиноземе характеризуется коэффициентом вариации $V=8\%$, который установлен при количестве наблюдений $n=60$. Для пробы глиноземного сырья были получены следующие результаты (%):

0,062; 0,057; 0,066; 0,068; 0,062; 0,060; 0,046; 0,059; 0,066

Установить, является ли результат измерения 0,046 аномальным?

Задание 3. Необходимо оценить степень близости результатов определения вольфрама в быстрорежущих сталях к нормально

13	9,41	33	9,58	53	9,11	73	10,43
14	9,59	34	9,67	54	9,12	74	10,45
15	9,6	35	9,69	55	9,14	75	10,48
16	9,61	36	9,7	56	9,16	76	10,5
17	9,62	37	9,72	57	9,17	77	9,66
18	9,63	38	9,73	58	9,19	78	9,56
19	9,65	39	9,74	59	9,2	79	9,67
20	9,66	40	9,75	60	9,92	80	9,7

При проверке РГЗ преподавателем учитываются: правильность выбора статистических данных, правильность применения основных теоретических положений, правильность расчетов, правильность интерпретации полученных результатов расчетов.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

16. Алгоритм построения моделей парной линейной регрессии.
17. Алгоритм построения моделей множественной линейной регрессии.
18. Непараметрическая статистика: область применения и основные методы
19. Тест Манна-Уитни.
20. Тест Крускала-Уоллиса
21. Непараметрическая корреляция
22. Таблицы сопряженности
23. Кластерный анализ: теория и алгоритм реализации в ППП STATISTICA
24. Дискриминантный анализ, основные понятия: обучающая выборка, расстояние Махаланобиса, качество классификации
25. Дискриминантный анализ: методы построения классификационных функций в ППП STATISTICA
26. ППП Excel: возможности использования для статистических тестов
27. ППП STATISTICA: возможности использования для проведения статистических тестов
28. Критерии выбора статистических тестов для обработки данных эксперимента

Экзамены проводятся в устной форме. Экзамен проводится только при предъявлении студентом зачетной книжки и при условии выполнения всех контрольных мероприятий, предусмотренных учебным планом и рабочей программой по изучаемой дисциплине (сведения фиксируются допуском в электронной ведомости). Студентам на экзамене предоставляется право выбрать один из билетов. Время подготовки к ответу составляет 30 минут. По истечении установленного времени студент должен ответить на вопросы экзаменационного билета. Результаты экзамена оцениваются по четырехбалльной системе («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно») и заносятся в экзаменационную ведомость и зачетную книжку. В зачетную книжку заносятся только положительные оценки.

Критерии выставления оценок

Оценка «отлично»:

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам дисциплины, а также по основным вопросам, выходящим за пределы учебной программы;
- точное использование научной терминологии систематически грамотное и логически правильное изложение ответа на вопросы;
- безупречное владение инструментарием учебной дисциплины, умение его эффективно использовать в постановке научных и практических задач;
- выраженная способность самостоятельно и творчески решать сложные проблемы и нестандартные ситуации;
- полное и глубокое усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой по дисциплине;
- умение ориентироваться в теориях, концепциях и направлениях дисциплины и давать им критическую оценку, используя научные достижения других дисциплин;
- творческая самостоятельная работа на практических/семинарских/ла

- использование научной терминологии, лингвистически и логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием по дисциплине, умение его использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;
- усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой по дисциплине;
- самостоятельная работа на практических занятиях, участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий;
- средний уровень сформированности заявленных в рабочей программе компетенций.

Оценка «удовлетворительно»:

- достаточный минимальный объем знаний по дисциплине;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по дисциплине и давать им оценку;
- использование научной терминологии, стилистическое и логическое изложение ответа на вопросы, умение делать выводы без существенных ошибок;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении типовых задач;
- умение под руководством преподавателя решать стандартные задачи;
- работа под руководством преподавателя на практических занятиях, допустимый уровень культуры исполнения заданий;
- достаточный минимальный уровень сформированности заявленных в рабочей программе компетенций.

Оценка «неудовлетворительно»:

- фрагментарные знания по дисциплине;
- отказ от ответа (выполнения письменной работы);
- неумение использовать научную терминологию;
- наличие грубых ошибок;
- низкий уровень культуры исполнения заданий;
- низкий уровень сформированности заявленных в рабочей программе компетенций.

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

5.1 Основная литература:

1. Ратнер С.В., Киселева Н.В. Программные статистические комплексы в менеджменте качества. Кубанский гос.университет, 2012.
2. Смагунова А.Н., Карпукова О.М. Методы математической статистики в аналитической химии. – Ростов-на-Дону, «Феникс», 2012.
3. Ратнер С.В Непараметрические методы статистического анализа

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечных системах «Лань» и «Юрайт».

5.2 Дополнительная литература:

1. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика [Текст] : учебник для СПО : учебник для студентов образовательных учреждений среднего профессионального образования / В. Е. Гмурман. - 12-е изд. - Москва : Юрайт, 2016. - 479 с.
2. Сидняев, Н. И. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных [Текст] : учебное пособие для магистров : учебное пособие для студентов и аспирантов вузов, обучающихся по специальности "Прикладная математика" : учебник для студентов вузов, обучающихся по физико-математическим направлениям подготовки и специальностям / Н. И. Сидняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва : Юрайт, 2015. - 495 с.
3. Ивашкевич, В. Б. Практикум по управленческому учету и контроллингу [Текст] : учебное пособие для студентов / В. Б. Ивашкевич. - 2-е изд. - Москва : Финансы и статистика, 2014. - 193 с.
4. ГОСТ Р ИСО 5725-1-2002 – 5725-6-2002. ГСИ Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. – М.: Госстандарт России, 2002.
5. ГОСТ Р 50779.10-200 (ИСО 3534.1-93). Статистические методы. Вероятность и основы статистики. Термины и определения. – М.: Изд-во стандартов, 2001.

5.3. Периодические издания:

1. Научный журнал «Прикладная эконометрия», Москва, Издательство ООО «Синергия ПРЕСС»
2. Научный журнал «Приборы и техника эксперимента», Москва, Издательство «Наука»
3. Информационно-аналитический журнал «Вопросы статистики», Москва, Информационно-издательский центр «Статистика России»
4. Научный журнал «Экономика и математические методы», Москва, Издательство «Наука»
5. Научный журнал «Заводская лаборатория», Москва, Издательство «ТЕСТ-ЗЛ»

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

Редакционно-информационное агентство "Стандарты и качество". Средство массовой

качеству. Портал на украинском языке, но русские статьи даны в оригинале. Кроме того, можно прочитать в английском варианте.

<http://www.management.com.ua/qm/>

Всероссийский научно-исследовательский институт классификации, терминологии и информации по стандартизации и качеству является Главным информационным центром Государственного комитета по стандартизации и метрологии.

<http://www.vniiki.ru/>

Официальный сайт Государственного комитета Российской Федерации по стандартизации и метрологии.

<http://www.gost.ru/>

сайт Российской Ассоциации Деминга.

<http://www.deming.ru/>

Справочно-правовая система «Консультант Плюс» <http://www.consultant.ru>

Портал открытых данных Российской Федерации <https://data.gov.ru>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

По курсу предусмотрено проведение лекционных занятий, на которых дается основной систематизированный теоретический материал и практических занятий, на которых теоретические знания, полученные во время лекций, применяются для решения проблемных ситуаций, анализа тенденций инновационного развития, анализа кейсов крупнейших инновационных компаний и расчета различных количественных показателей изучаемых инновационных процессов.

Важной компонентой изучения дисциплины является самостоятельная работа студентов, объем которой превышает объем аудиторных занятий. Самостоятельная работа проводится в следующих формах: подготовка и написание реферата, выполнение расчетно-графического задания, самостоятельная проработка некоторых разделов курса. Презентация реферата как итога самостоятельной работы по третьему разделу курса «Методы обнаружения зависимостей между данными, измеренными в слабых шкалах» проводится на семнадцатой неделе семестра, а защита расчетно-графических заданий как итога самостоятельной работы по первому и второму разделу курса – на шестой и двенадцатой неделе

8.2 Перечень необходимого программного обеспечения.

Стандартные программы Windows, пакет прикладных программ STATISTICA.

8.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Электронная библиотечная система eLIBRARY.RU (<http://www.elibrary.ru/>)

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория, оборудованная презентационной техникой
2.	Лабораторные занятия	Аудитория, оснащенная персональными компьютерами с доступом к интернету, электронный раздаточный материал.
3.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория
4.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.