



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Иркутский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «ИГУ»)
Факультет химический

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета
« 19 » 06 2019 г.
Вильмс А.И./

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Индекс дисциплины по УП: Б1.В.ДВ.2.2

Наименование дисциплины: Математическая обработка
экспериментальных результатов

Направление подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре:
04.06.01 - Химические науки

Направленность подготовки Физическая химия

Форма обучения: очная / заочная

Согласовано с УМК химического факультета
протокол № 12 от « 17 » 06 2019 г.

Председатель УМК  Вильмс А.И./

Программа рассмотрена на заседании
кафедры физической и коллоидной химии
« 07 » 06 2019 г. Протокол № 11
Зав. кафедрой  / Шмидт А.Ф./

Иркутск 2019 г.

Содержание

стр.

1. Цели и задачи дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП.
3. Требования к результатам освоения дисциплины
4. Объем дисциплины и виды учебной работы
5. Содержание дисциплины
- 5.1 Содержание разделов и тем дисциплины
- 5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами
- 5.3 Разделы и темы дисциплин и виды занятий
- 5.4 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ.
6. Примерная тематика рефератов (при наличии)
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины :
 - а) основная литература;
 - б) дополнительная литература;
 - в) программное обеспечение;
 - г) интернет-ресурсы, базы данных, информационно-справочные и поисковые системы
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины .
9. Образовательные технологии
10. Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации
 - 10.1 Оценочные средства текущего контроля
 - 10.2 Оценочные средства для промежуточной аттестации

1. Цели и задачи дисциплины:

Цель дисциплины:

Дать аспирантам представление о современных методах математической обработки экспериментальных данных, организационной и технической сторонах проведения эксперимента, статистической обработке экспериментальных данных, современных методах оформления результатов исследований.

Задачи:

- сформировать углубленные знания о современном представлении результатов эксперимента с помощью математических моделей, статистической обработке экспериментальных данных

2. Место дисциплины в структуре ОПОП:

Дисциплина «Математическая обработка экспериментальных данных» относится к вариативной части профессионального цикла (Б1.В.ДВ.2.2) программы аспирантуры.

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

ОПК-1 – способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;

ПК-2 – самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов;

ПК-3 – использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентаций результатов диссертационной работы.

ПК-5 – представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций, иметь опыт профессионального участия в научных дискуссиях, уметь выстраивать логику рассуждений и формулировать обоснованные заключения;

УК-3 – готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

Знать:

основные принципы и подходы, направленные на решение научных и научно-образовательных задач в рамках изучаемой дисциплины; современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных для обработки и анализа экспериментальных данных; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных для обработки и анализа экспериментальных данных; основные принципы

и подходы, направленные на решение научных и научно-образовательных задач в рамках изучаемой дисциплины.

Уметь:

выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования; выстраивать логику рассуждений и формулировать обоснованные заключения на основании полученных результатов; использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных в профессиональной деятельности.

Владеть:

навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками по обработке и интерпретации получаемых результатов; навыками по обработке и интерпретации получаемых результатов; навыками планирования химических исследований, обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентаций результатов диссертационной работы с использованием специализированных вычислительных комплексов и баз данных.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц		Курс			
			2			
	очное	заочное	очное	заочное		
Аудиторные занятия (всего)	36/1	24/0.7	36/1	24/0.7		
В том числе:	-		-			
Лекции	18/0.5	12/0.3	18/0.5	12/0.3		
Практические занятия (ПЗ)						
Семинары (С)	18/0.5	12/0.3	18/0.5	12/0.3		
Лабораторные работы (ЛР)						
КСР						
Контактная работа (всего)	36/1	24/0.7	36/1	24/0.7		
Самостоятельная работа (всего)	72/2	84/2.3	72/2	84/2.3		
В том числе:	-		-			
Курсовой проект (работа)						
Расчетно-графические работы						
Вид промежуточной аттестации: зачет	+		+			
Общая трудоемкость	часы	108	108	108	108	
	зачетные единицы	3	3	3	3	

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов и тем дисциплины.

№	Наименование раздела	Содержание раздела дисциплины
1.	Введение. Технические и организационные стороны исследовательской работы	Цель и задачи курса. Выбор предмета исследования. Факторы, учитываемые перед началом исследований, связанных с производством. Приемы повышения компактности экспериментальной работы. Учет масштабных факторов. Использование принципов стандартизации в исследовательской работе.
2.	Статистическая обработка экспериментальных данных	2.1. Измерения и их погрешности. Числовые характеристики случайных распределений. Некоторые выборочные распределения, необходимые при статистических исследованиях. 2.2. Правила корректной статистической обработки результатов количественных измерений. Запись результатов измерений.
3.	Представление	3.1 Линейный регрессионный анализ. Метод наименьших

	результатов эксперимента с помощью математических моделей	квадратов. Дисперсионный анализ. 3.2 Представление экспериментальных данных без использования метода наименьших квадратов
4.	Приборное обеспечение эксперимента	Вопросы проектирования измерительных систем. Автоматизированные системы научных исследований
5.	Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей	Приемы упорядочения данных. Техника построения графиков. Краткие сведения о номограммах. Специальные применения графиков. О принципах извлечения максимальной информации из экспериментальных данных. «Странные» результаты и сглаживание

5.2. Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами

№ п/п	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	№ № разделов и тем данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин													
		2.1	2.2	3.1	3.2	4	5								
1.	Выполнение диссертационной работы.														

5.3. Разделы и темы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела	Наименование темы	Виды занятий в часах					
			Лекц.	Практ. зан.	Семина	Лаб. зан.	СРС	Всего
1.	Введение. Технические и организационные стороны исследовательской работы	Цель и задачи курса. Выбор предмета исследования. Факторы, учитываемые перед началом исследований, связанных с производством. Приемы повышения компактности экспериментальной работы. Учет масштабных факторов. Использование принципов стандартизации в исследовательской	2/0		2/0		5/9	9/9

		работе						
2.	Статистическая обработка экспериментальных данных	Измерения и их погрешности. Числовые характеристики случайных распределений. Некоторые выборочные распределения, необходимые при статистических исследованиях. Правила корректной статистической обработки результатов количественных измерений. Запись результатов измерений.	4/3		4/4		32/35	40/42
3.	Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей	Линейный регрессионный анализ. Метод наименьших квадратов. Дисперсионный анализ. Представление экспериментальных данных без использования метода наименьших квадратов	4/3		2/2		12/15	18/20
4.	Приборное обеспечение эксперимента	Вопросы проектирования измерительных систем. Автоматизированные системы научных исследований	2/2				5/5	7/7
5.	Обработка результатов эксперимента	Приемы упорядочения данных. Техника построения графиков. Краткие сведения о номограммах. Специальные применения графиков. О принципах извлечения максимальной информации из экспериментальн	6/4		10/6		18/20	34/30

		ых данных. «Странные» результаты и сглаживание						
--	--	---	--	--	--	--	--	--

5.4. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинарских работ	Трудоемкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1.	Введение.	Численные методы как особый раздел математики.	2/0	Входной контроль в виде тестового задания с открытыми вопросами. Устная беседа.	ОПК-1, УК-3
2	2. Статистическая обработка экспериментальных данных	Программное обеспечение для статистической обработки экспериментальных данных	4/4	Устная беседа. Проверка практических работ	ПК-2, ПК-3
3.	3. Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей	Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей.	2/2	Устная беседа.	ПК-2, ПК-5
4	5. Обработка результатов эксперимента	Обработка результатов эксперимента	10/6	Устная беседа.	УК-3, ПК-3

6. Примерная тематика рефератов, докладов, проектов (при наличии); перечень вопросов к зачетам, экзаменам и т.п.:

План самостоятельной работы аспирантов

№ п/п	Тема	Вид самостоятельной работы	Задание	Рекомендуемая литература	Количество часов
1	2	3	4	5	6
1.	Введение. Численные методы как особый раздел математики.	Работа над ошибками, при прохождении тестового	См. Тестовые задания с открытыми вопросами (входной контроль). Повторение пройденного на	В списке дополнительной литературы № 3.	5/9

		задания с открытыми вопросами. Закрепление теоретического материала.	лекциях материала.	В списке дополнительной литературы № 1 и № 2.	
2-7.	Статистическая обработка экспериментальных данных	Практические работы по расчету погрешностей в работах по физической химии. Закрепление теоретического материала.	Расчет абсолютной и относительной погрешностей при определении молекулярной массы вещества криоскопическим методом. Повторение пройденного на лекциях материала.	Методические рекомендации к практикуму «Физическая химия». В списке дополнительной литературы № 8 и № 9. В списке дополнительной литературы № 1 и № 2.	32/35
			Расчет абсолютной и относительной погрешностей при вычислении энергии активации по константам скоростей реакции инверсии тростникового сахара, измеренных при различных температурах. Повторение пройденного на лекциях материала.		
		Практические работы по расчету погрешностей в работах по физической химии, связанных с функциональными зависимостями и. Закрепление теоретического материала.	Расчет абсолютной погрешности, связанной с чувствительностью измерительных приборов при определении рН. Повторение пройденного на лекциях материала.	Методические рекомендации к практикуму «Физическая химия». В списке дополнительной литературы № 8 и № 9. В списке дополнительной литературы № 1 и № 2.	
			Расчёт $\varepsilon_{приб}$ при определении теплового значения калориметра и теплоты растворения соли. Повторение пройденного на лекциях материала.		
Вычисление абсолютной					

			<p>погрешности $\varepsilon_{\text{приб}}$ при определении сопротивления раствора электролита. Повторение пройденного на лекциях материала.</p> <p>Вычисление абсолютной погрешности $\varepsilon_{\text{приб}}$ при определении растворимости малорастворимой соли. Повторение пройденного на лекциях материала.</p>		
		<p>Практические работы по расчету случайных погрешностей в работах по физической химии. Закрепление теоретического материала.</p>	<p>Расчёт случайной погрешности в величине энергии активации для реакции инверсии тростникового сахара. Повторение пройденного на лекциях материала.</p>	<p>Методические рекомендации к практикуму «Физическая химия». В списке дополнительной литературы № 1 и № 2. В списке дополнительной литературы № 8 и № 9.</p>	
			<p>Расчёт суммарной погрешности при определении растворимости CuS по значению э.д.с. концентрационного элемента:</p> $\text{Cu} \left \begin{array}{c} \text{Na}_2\text{S} \\ \text{CuS} \end{array} \right\ \left\ \text{CuSO}_4 \right. \left. \text{Cu} \right.$ <p>Повторение пройденного на лекциях материала.</p>		
8-9.	Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей	Закрепление теоретического материала.	Повторение пройденного на лекциях материала.	В списке дополнительной литературы № 1 и № 2.	12/15
10.	Приборное обеспечение эксперимента	Закрепление теоретического материала.	Повторение пройденного на лекциях материала.	В списке дополнительной литературы № 1 и № 2.	5/5
11-	Обработка	Обработка	Корректное	В списке	18/20

12.	результатов эксперимента	результатов эксперимента. Закрепление теоретического материала.	составление таблиц и построение графиков по результатам диссертационной работы	дополнительной литературы № 8 и № 9. В списке дополнительной литературы № 1 и № 2.	
-----	--------------------------	---	--	--	--

Примерный список вопросов и заданий для зачета:

1. Проблемы, возникающие при масштабировании. Применение критериальных факторов.
2. Измерения и их погрешности
3. Нормальное распределение
4. Распределение Стьюдента
5. Распределение Пирсона
6. Вычисление среднего значения результата, определение выборочной дисперсии, коэффициента вариации, относительного стандартного отклонения выборки.
7. Точность цифрового выражения данных. Округление числовых данных. Арифметические действия с приближенными или округленными числами.
8. Линейная регрессия относительно одной независимой переменной.
9. Множественная линейная регрессия
10. Учет влияния измерительной системы на результаты измерений. Динамические характеристики измерительной системы. Аналоговая или цифровая форма.
11. Приемы упорядочения данных. Техника построения графиков

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

а) основная литература:

1. Смагунова, А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии [Электронный ресурс] : учеб. пособие для студ., обуч. по спец. 011000 - Химия / А. Н. Смагунова. - ЭВК. - Иркутск : ИГУ, 2008. - Режим доступа: . - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9624-290-1 :
2. Крянев, А.В. Метрический анализ и обработка данных [Текст] : учеб. пособие / А. В. Крянев, Г. В. Лукин. - М. : Физматлит, 2010. - 280 с. ; 22 см. - Библиогр.: с. 275-280. - ISBN 978-5-9221-1068-6 : 1 экз.
3. Крянев, А. В. Метрический анализ и обработка данных [Электронный ресурс] / А. В. Крянев. - Москва : Физматлит, 2012. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=59523. - Режим доступа: ЭБС "Издательства Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9221-1068-6 :
4. Эксперимент с компьютерной поддержкой [Электронный ресурс] : учеб. пособие. - ЭВК. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2014. - Режим доступа: . - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9624-1103-3 :

а) дополнительная литература:

1. Бахвалов, Н.С. Численные методы. Решения задач и упражнения : Учеб. пособие / Н. С. Бахвалов, А. А. Корнев, Е. В. Чижонков. - М. : Дрофа, 2009. - 394 с. : ил. ; 22 см. - (Высшее образование: Современный учебник). - Библиогр.: с. 393-394. - ISBN 978-5-358-03610-9 : 1 экз.
2. Чашкин, Ю.Р. Математическая статистика. Анализ и обработка данных [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов / Ю. Р. Чашкин. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 2010. - 237 с. : ил. ; 22 см. - (Высшее образование). - Библиогр.: с. 232-234. - ISBN 978-5-222-16474-7 : 1 экз.
3. Афанасьева, Н.Ю. Вычислительные и экспериментальные методы научного эксперимента [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов / Н. Ю. Афанасьева. - М. : КноРус, 2013. - 330 с. ; 22 см. - Библиогр.: с. 321-325. - Предм. указ.: с. 326-330. - ISBN 978-5-406-02431-7 : 2 экз.
4. Смагунова, А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии : учеб. пособие / А. Н. Смагунова, О. М. Карпукова ; Иркутский гос. ун-т. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2008. - 339 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 316-320. - ISBN 978-5-9624-290-1 : 42 экз.
5. Математическая обработка физико-химических данных и расчеты по графикам [Электронный ресурс] : метод. указ. / Иркутский гос. ун-т, Науч. б-ка ; сост. Д. С. Суслов. - ЭВК. - Иркутск : ИГУ, 2010. - Режим доступа: . - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ.
6. Фаддеев, М. А. Элементарная обработка результатов эксперимента [Текст] : учеб. пособие / М. А. Фаддеев. - М. : Лань, 2008. - 117 с. : ил. ; 20 см. - Библиогр.: с. 115. - ISBN 978-5-8114-0817-7 : 1 экз.

в) программное обеспечение

1. Microsoft Office Excel
2. Набор вычислительных алгоритмов WolframAlpha

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

База знаний WolframAlpha.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием и приборной базой, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 402, 426, 303)

- компьютерный класс кафедры физической и коллоидной химии (ауд. 303). Общее количество единиц вычислительной техники – 3 (персональные компьютеры). Имеется локальная сеть.

9. Образовательные технологии:

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. В частности, в рамках освоения дисциплины «Математическая обработка экспериментальных данных» аспирантами химического факультета предусмотрены

1) лекции с применением

- а) технологий объяснительно-иллюстративных объяснений,
- б) объяснительно-иллюстративный метода с элементами проблемного изложения;
- в) разбора конкретных ситуаций.

2) семинарские занятия, во время которых проводится решение типовых задач, обсуждаются вопросы лекций и домашних заданий;

3) самостоятельная работа аспирантов, включающая подготовку к семинарским занятиям в форме изучения теоретического материала лекций, выполнения практических работ по расчету различных погрешностей, решения задач по различным разделам дисциплины; подготовку к текущему контролю успеваемости;

4) консультирование аспирантов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

10. Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

10.1 Оценочные средства текущего контроля:

Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность у обучающихся компетенций: ОПК – 1; ПК - 2 -; ПК – 3; ПК - 5.; УК - 3

Для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации разработаны ОС, которые включают проверку отчетов по работам, устный опрос по темам

во время семинарских занятий, проверку закрепления теоретического материала в виде выполнения практических заданий.

Критерии оценивания см. *ФОС УМКД*.

10.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации:

Промежуточная аттестация (зачет) проводится в форме устного собеседования или в виде тестовых заданий с открытыми вопросами.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЗАЧЕТУ

1. Проблемы, возникающие при масштабировании. Применение критериальных факторов.
2. Измерения и их погрешности
3. Нормальное распределение
4. Распределение Стьюдента
5. Распределение Пирсона
6. Вычисление среднего значения результата, определение выборочной дисперсии, коэффициента вариации, относительного стандартного отклонения выборки.
7. Точность цифрового выражения данных. Округление числовых данных. Арифметические действия с приближенными или округленными числами.
8. Линейная регрессия относительно одной независимой переменной.
9. Множественная линейная регрессия
10. Учет влияния измерительной системы на результаты измерений. Динамические характеристики измерительной системы. Аналоговая или цифровая форма.
11. Приемы упорядочения данных. Техника построения графиков

Критерии оценивания см. *ФОС УМКД*.

Разработчики:



Д-р хим. наук, доцент

Д.С. Сулов

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии
«07» 06 2019 г.

Протокол № 11 Зав. кафедрой



/А.Ф. Шмидт /

**Лист согласования, дополнений и изменений
на 2020/2021 учебный год**

К рабочей программе **Б1.В.ДВ.2.2** «**Математическая обработка экспериментальных результатов**» по направленности программы подготовки кадров высшей квалификации (программы аспирантуры) **Физическая химия..**

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие дополнения:

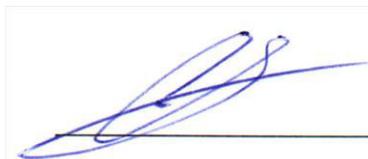
Нет дополнений

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие изменения:

Нет изменений

Изменения одобрены Ученым советом химического факультета,
протокол № 7 от 03.06.2020 г.

Зав. кафедрой физической и
коллоидной химии



/А.Ф. Шмидт /