

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ТГПУ)

Утверждаю
Проректор по учебной работе (Декан)


« 15 » 10 20 10 года

ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ОПД.В.01
ВВЕДЕНИЕ В ХИМИЧЕСКУЮ СТАТИСТИКУ

1. Цели и задачи дисциплины:

Целью курса "Введение в химическую статистику" является формирование у студентов базовых знаний по основам статистических методов представления, группировки и обработке материалов (результатов) химических исследований, получение практических навыков вычислений важнейших статистических показателей и закономерностей, характеризующих совокупности материалов и объектов.

Задачей курса "Введение в химическую статистику" является изучение основных понятия теории вероятностей и математической статистики, освоение практических навыков по методам статистических исследований в химии.

2. Требования к уровню освоения содержания дисциплины:

Студент должен знать: основные понятия теории вероятностей, основные метрологические понятия и их характеристики; совокупность (перечень) базовых данных (результатов) статистических исследований, их оценок; дескриптивные и графические методы анализа данных; методы и критерии статистической проверки гипотез, приемы исследования и построения зависимостей; основы методов многомерного статистического анализа и планирования эксперимента.

3. Объем дисциплины и виды учебной работы:

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры	
		4	
Общая трудоемкость дисциплины	150	150	
Аудиторные занятия	76	76	
Лекции	38	38	
Практические занятия			
Семинары			
Лабораторные работы (практические)	38	38	
И (или) другие виды аудиторных занятий			
Самостоятельная работа	74	74	
Курсовой проект (работа)			
Расчетно-графические работы			
Реферат и (или) другие виды самостоятельных работ		*	
Вид итогового контроля (зачет, экзамен)		зачет	

4. Содержание дисциплины:

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план):

№ п/п	Раздел дисциплины	Л	ПР (С)	ЛР (ПР)
1	Основные понятия теории вероятностей	8	—	2
2	Статистические данные	3	—	4
3	Дескриптивные и графические методы анализа данных	3	—	3

4	Основные метрологические понятия и их характеристики	3	–	3
5	Статистическое оценивание	3	–	4
6	Статистическая проверка гипотез	8	–	10
7	Исследование зависимостей	4	–	6
8	Методы многомерного статистического анализа	2	–	2
9	Планирования эксперимента	2	–	2
10	Программное обеспечение анализа данных на персональных компьютерах	2	–	2
Итого		38		38

4.2. Содержание разделов дисциплины:

4.2.1. *Основные понятия теории вероятностей.* Пространство элементарных исходов и случайные события. Операции над событиями: вероятности событий и их свойства. Условная вероятность и независимость событий, теорема Бернулли. Формула полной вероятности и формула Байесса. Формула Бернулли. Случайные величины и функция распределения вероятностей. Дискретные случайные величины. Непрерывные случайные величины и функция плотности вероятностей. Характеристики распределений случайной величины (математическое ожидание, дисперсия, медиана, мода и др). Примеры распределения случайных величин. Распределение Бернулли, биномиальное распределение, распределение Пуассона, непрерывное и дискретное равномерное распределение, нормальное и логнормальное распределения. Центральная предельная теорема. Распределения, связанные с нормальным (распределение хи-квадрат, распределение Стьюдента и распределение Фишера). Условные распределения и независимость случайных величин. Коэффициент корреляции. Двумерное нормальное распределение.

4.2.2. *Статистические данные.* Понятие случайной выборки. Примеры реальных химических экспериментов. Многомерные статистические данные: матрица экспериментальных данных, переменные и наблюдения, количественные, номинальные и ранговые переменные.

4.2.3. *Дескриптивные и графические методы анализа данных.* Гистограмма: эмпирическая функция распределения. Полигон частот. Таблица частот. Двумерные диаграммы рассеивания. Множественные двумерные диаграммы рассеивания. Трехмерные диаграммы рассеивания. Множественные трехмерные диаграммы рассеивания. Столбчатые диаграммы. Секторные диаграммы. Составные линейные диаграммы. Звездные графики. Лучевые графики. Оконные графики. Разведочный анализ данных.

4.2.4. *Метрологические категории.* Основные метрологические понятия и их характеристики. Доверительный интервал. Оценка систематической погрешности. Способы проверки и повышения правильности. Основные характеристики чувствительности.

4.2.5. *Статистическое оценивание.* Понятие статистической оценки. Свойства оценок: несмещенность, состоятельность, эффективность. Метод максимального правдоподобия. Точечное оценивание характеристик распределения (эмпирическая частота, выборочное среднее, выборочная дисперсия, выборочное среднее – квадратическое отклонение, выборочный коэффициент вариации, выборочный коэффициент асимметрии, выборочный коэффициент эксцесса, выборочная медиана, выборочные квартили и интерквартильный размах, выборочная мода, выборочные квантили, выборочный коэффициент корреляции). Интервальное оценивание. Доверительный интервал для неизвестной вероятности. Доверительные интервалы для математического ожидания и дисперсия нормального распределения. Доверительный интервал для коэффициента корреляции.

4.2.6. *Статистическая проверка гипотез.* Логика проверки статистических гипотез. Ошибки первого и второго рода, уровень значимости и мощность критерия. Одновыборочные и двухвыборочные *t*-критерий и *F*-критерий. Сравнение параметров биномиальных и пуассоновских распределений. Проверка значимости отличия от нуля коэффициента корреляции. Критерии согласия (χ^2 критерий, критерий Колмогорова-Смирнова). Непараметрические процедуры проверки гипотез.

4.2.7. *Исследование зависимостей.* Линейный регрессионный анализ. Множественная линейная регрессия. Метод наименьших квадратов. Доверительные интервалы и проверка гипотез в линейном регрессионном анализе. Множественный и частный коэффициенты корреляции. Пошаговый регрессивный анализ. Однофакторный и многофакторный дисперсионный анализ. Проверка гипотез в дисперсионном анализе. Оценивание связей между ранговыми и номинальными переменными. Градуировка. Погрешность градуировки.

4.2.8. *Методы многомерного статистического анализа.* Классификация методов многомерного статистического анализа (методы анализа связи между двумя системами переменных, методы анализа структуры многомерных данных). Корреляционный анализ. Дисперсионный анализ. Дискриминантный анализ. Кластерный анализ. Факторный анализ и анализ главных компонент. Применение дисперсионного анализа в аналитической химии.

4.2.9. *Планирования эксперимента.* Основы математического планирования эксперимента.

4.2.10. *Программное обеспечение анализа данных на персональных компьютерах.* Общая характеристика программного обеспечения анализа данных на персональных компьютерах. Представление данных для работы с пакетами прикладных программ по анализу данных. Системы программ для анализа данных AtteStat, Statistica.

5. Лабораторные (практические) работы:

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ
1	4.1.1	Основные понятия теории вероятностей. Законы

		распределения случайных величин
2	4.1.2	Статистические данные
3	4.1.3	Дескриптивные и графические методы анализа данных
4	4.1.3 4.1.4	Дескриптивные и графические методы анализа данных. Основные метрологические понятия и их характеристики
5	4.1.4	Основные метрологические понятия и их характеристики
6,7	4.1.5	Статистическое оценивание
8-11	4.1.6	Статистическая проверка гипотез
12-14	4.1.7	Исследование зависимостей
15	4.1.8	Методы многомерного статистического анализа
16	4.1.9	Планирования эксперимента
17	4.1.10	Программное обеспечение анализа данных на персональных компьютерах

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

6.1. Рекомендуемая литература

а) основная:

1. Статистика : учебник для вузов / В. С. Мхитарян [и др.] ; под ред. В. С. Мхитаряна. – М. : Экономистъ, 2006. – 669 с.
2. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика : учебное пособие для вузов / В. Е. Гмурман. – Изд. 11-е, стереотип. – М. : Высшая школа, 2005. – 478 с.

б) дополнительная:

1. Гусаров, В. М. Статистика: учебное пособие для вузов / В. М. Гусаров. – М. : ЮНИТИ-ДАНА, 2001. – 463 с.
2. Бородин, А. Н. Элементарный курс теории вероятностей и математической статистики: учебное пособие для вузов / А. Н. Бородин. – Изд. 3-е, испр. и доп. – СПб. : Лань, 2002. – 254 с.
3. Руденко, В. И. Статистика: Краткий курс: пособие для подготовки к экзаменам / В. И. Руденко. – М. : Дашков и К°, 2004. – 186 с.
4. Практикум по статистике: учебное пособие для вузов / под ред. В. М. Симчеры. – М. : Финстатинформ, 1999. – 259 с.
5. Елисеева, И. И. Общая теория статистики: учебник для вузов / И. И. Елисеева, М. М. Юзбашев; Под ред. И. И. Елисеевой. – Изд. 4-е, перераб. и доп. – М. : Финансы и статистика, 2002. – 479 с.

6.2. Средства обеспечения освоения дисциплины:

Методические указания к проведению вычислений в *Excel* и *Calc*.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Компьютерный класс.

8. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

В процессе освоения студентами курса "Введение в химическую статистику" предусматривается приобретение учащимися ряда важных дополнительных навыков:

1. использования знаний и умений, полученных ими ранее при изучении других дисциплин – информатики, математики и общей химии;
2. умение работать с научной, научно-популярной и научно-методической литературой, словарями и справочниками по данным отраслям знаний;
3. умение анализировать, делать обобщающие выводы при статистических исследованиях.

8.1. Методические рекомендации преподавателю:

В первой части семестре изучаются основные понятия теории вероятностей, виды статистических данных, дескриптивные и графические методы анализа данных. Основное внимание уделяется особенностям исследования материала химического эксперимента, анализу погрешностей аппаратуры, методам и подходам статистического оценивания и статистической проверке гипотез, исследованию зависимостей. Во второй части семестра упор делается на технику практического применения методов математической статистики для полного цикла обработки данных – начиная от их сбора, анализа аномальностей, исследования законов распределений, дисперсионного и регрессионного анализа и кончая способами представления результирующей информации. Также рассматриваются вопросы многомерного статистического анализа, планирования эксперимента и дается обзор программного обеспечения анализа данных на персональных компьютерах.

Промежуточный срез знаний проводится письменно (контрольные задания). Тестирование может осуществляться студентами и в качестве самостоятельной подготовки как по отдельным темам (по прилагаемым вопросам), так и по полному объему дисциплины. По изучаемому курсу студенты выполняют индивидуальные задания в виде домашних заданий, рефератов, курсовых работ, определенных вопросами преподавателя и рабочей программой дисциплины. Семестр заканчивается зачетом.

8.2. Перечень примерных вопросов и заданий для самостоятельной работы:

- ✓ Пространство элементарных исходов и случайные события.
- ✓ Операции над событиями: вероятности событий и их свойства.
- ✓ Условная вероятность и независимость событий, теорема Бернулли.
- ✓ Формула полной вероятности и формула Байесса. Формула Бернулли.
- ✓ Случайные величины и функция распределения вероятностей.
- ✓ Дискретные случайные величины. Непрерывные случайные величины и функция плотности вероятностей.
- ✓ Характеристики распределений случайной величины (математическое ожидание, дисперсия, медиана, мода и др). Примеры распределения случайных величин.
- ✓ Распределение Бернулли, биномиальное распределение, распределение

- Пуассона, непрерывное и дискретное равномерное распределение, нормальное и логнормальное распределения.
- ✓ Градуировка.
 - ✓ Методика планирования эксперимента.
 - ✓ Распределения, связанные с нормальным (распределение хи-квадрат, распределение Стьюдента и распределение Фишера). Условные распределения и независимость случайных величин. Коэффициент корреляции. Двумерное нормальное распределение.
 - ✓ Анализ статистических данных в пакетах Statistica и StatSoft.

8.3. Примерная тематика рефератов, курсовых работ:

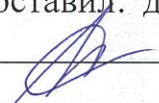
1. Методы обработки градуировочных данных.
2. Методы анализа нормальности закона распределения экспериментальных данных.
3. Многофакторный дисперсионный анализ в химии.
4. Особенности анализа данных химического эксперимента в пакетах Statistica и StatSoft.
5. Статистическая обработка данных по кинетике реакций.
6. Нелинейная регрессия в макрокинетике.

8.4. Примерный перечень вопросов к зачетам:

1. Основные понятия теории вероятностей, случайные события.
2. Условная вероятность и независимость событий.
3. Случайные величины и функция распределения вероятностей, дискретные случайные величины. Непрерывные случайные величины и функция плотности вероятностей.
4. Характеристики распределений случайной величины (математическое ожидание, дисперсия, медиана, мода). Примеры распределения случайных величин.
5. Распределение Бернулли, биномиальное распределение, распределение Пуассона, непрерывное и дискретное равномерное распределение, нормальное и логнормальное распределения.
6. Распределения, связанные с нормальным (распределение χ^2 , распределение Стьюдента и распределение Фишера).
7. Понятие случайной выборки. Примеры реальных химических экспериментов.
8. Статистические данные: матрица экспериментальных данных, переменные и наблюдения, количественные и ранговые переменные.
9. Дескриптивные и графические методы анализа данных. Гистограмма: эмпирическая функция распределения.
10. Столбчатые, секторные и составные линейные диаграммы. Звездные и лучевые графики.
11. Понятие статистической оценки. Свойства оценок: несмещенность, состоятельность, эффективность.
12. Метод максимального правдоподобия и точечное оценивание

- характеристик распределения (эмпирическая частота, выборочное среднее, выборочная дисперсия, выборочное среднее). Интервальное оценивание.
13. Доверительный интервал. Доверительные интервалы для математического ожидания и дисперсия нормального распределения.
 14. Логика проверки статистических гипотез. Ошибки первого и второго рода, уровень значимости и мощность критерия.
 15. Одновыборочные и двухвыборочные критерии. Сравнение параметров биномиальных и пуассоновских распределений.
 16. Критерии согласия (χ^2 критерий, критерий Колмогорова-Смирнова). Непараметрические процедуры проверки гипотез.
 17. Линейный регрессионный анализ, множественная линейная регрессия.
 18. Метод наименьших квадратов.
 19. Доверительные интервалы и проверка гипотез в линейном регрессионном анализе.
 20. Однофакторный и многофакторный дисперсионный анализ.
 21. Корреляционный и дисперсионный анализ.
 22. Градуировка.
 23. Методика планирования эксперимента.

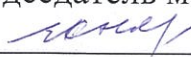
Программа составлена в соответствии с государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению: 540100 Естественнонаучное образование, Профессионально-образовательный профиль 540101 – «Химия».

Программу составил: д.ф.-м.н., с.н.с., профессор кафедры Общей биологии и экологии  Бондарчук С.С.

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры Общей биологии и экологии протокол № 1 от 30 августа 2010 года.

Зав. кафедрой Общей биологии и экологии  Долгин В.Н.

Программа учебной дисциплины одобрена методической комиссией биолого-химического факультета ТГПУ протокол № 1 от 15.10 2010 года.

Председатель методической комиссии биолого-химического факультета ТГПУ  Е.П. КНЯЗЕВА

Согласовано:

Декан БХФ, доцент  В.А. Дырин

Лист внесения изменений

Дополнения и изменения в программу учебной дисциплины «Введение в химическую статистику» на 2011-2012 учебный год.

В программе учебной дисциплины дополнений и изменений нет.

Программа утверждена на заседании кафедры общей биологии и экологии, протокол № 1 от 29.08.2011 года.

Заведующий кафедрой В.Н. Долгин В.Н. Долгин

Лист внесения изменений

Дополнения и изменения в программу учебной дисциплины «Введение в химическую статистику» на 2012-2013 учебный год.

В программе учебной дисциплины дополнений и изменений нет.

Программа утверждена на заседании кафедры общей биологии и экологии, протокол № 1 от 1.09.2012 года.

Заведующий кафедрой В.Н. Долгин В.Н. Долгин

Лист внесения изменений

Дополнения и изменения в программу учебной дисциплины «Введение в химическую статистику» на 2013-2014 учебный год.

В программе учебной дисциплины дополнений и изменений нет.

Программа утверждена на заседании кафедры общей биологии и экологии, протокол № 1 от 29.08.2013 года.

Заведующий кафедрой В.Н. Долгин В.Н. Долгин