



**МИНОБНАУКИ РОССИИ**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет математики и компьютерных наук

Кафедра прикладной математики



«Утверждаю»

Проректор по научной работе и  
инновациям

Н.А. Ашурбеков

« 1 июля » 2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ  
В ХИМИИ»**

**Образовательная программа**

По направлению подготовки: 04.06.01-Химические науки

Уровень образования:

подготовка кадров высшей квалификации (аспирантура)

Квалификация (степень) выпускника:

**«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

**Статус дисциплины:** вариативная часть обязательных дисциплин

**Махачкала 2018**

Рабочая программа дисциплины «Методы обработки информации в химии» составлена в 2018 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки: 04.06.01- химические науки, квалификация (степень) выпускника: «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

от «30» июля 2014 г. № 869.

Разработчики: кафедра прикладной математики,  
к.ф.-м.н., доцент Магомедов И.И.

Рабочая программа дисциплины одобрена:

На заседании кафедры прикладной математики от 14 июня 2018 г.,  
протокол № 10.

Зав. кафедрой Кадиев Р.И. Кадиев Р.И.

На заседании Методического Совета факультета математики и  
компьютерных наук от 27.06.2018 г., протокол № 6 .

Председатель Бейбалаев В.Д. Бейбалаев В.Д.

Рабочая программа дисциплины согласована с Управлением аспирантуры и  
докторантуры

«28» июня 2018 г. Рамазанова Э.Т. Рамазанова Э.Т.

## Аннотация

Дисциплина «**Методы обработки информации в химии**» входит в вариативную часть блока 1 «Обязательные дисциплины подготовки аспирантов по направлению 04.06.01 – Химические науки».

Дисциплина реализуется на химическом факультете Дагестанского государственного университета кафедрой прикладной математики.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов связанных с математической статистикой, математическими моделями и освоением методов решения экспериментальных задач, знакомство с современными направлениями обработки информации.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: универсальных: **УК-4**, общепрофессиональных, **ОПК-1** профессиональных **ПК-1, ПК-2**.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, практические занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля: текущий контроль успеваемости в форме контрольных работ, коллоквиумов и промежуточного контроля в форме зачета.

Объем дисциплины **2** зачетных единиц, в том числе **72** в академических часах по видам учебных занятий.

### **1. Область применения и нормативные ссылки**

Настоящая программа учебной дисциплины устанавливает минимальные требования к знаниям и умениям обучающегося в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации и определяет содержание и виды учебных занятий и отчетности.

Программа предназначена для преподавателей, ведущих данную дисциплину, и обучающихся направления подготовки 04.06.01 Химические науки, изучающих дисциплину методы обработки информации в химии.

Программа разработана в соответствии с:

- Федеральным государственным образовательным стандартом <http://science.dgu.ru/eduprogram\04.06.01.pdf>; утвержденным приказом Минобрнауки РФ от 30 июля 2014г.№869;

- Основной профессиональной образовательной программой 04.06.01 Химические науки;
- Учебным планом университета по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, утвержденным в 2018г.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе академических часов по видам учебных занятий 72 академических часа.

Семестр	Учебные занятия						СРС, в том числе зачет	Форма промежуточной аттестации (зачет)
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Всего	из них						
Лекции		Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	консультации			
	72	6	-	4	-	-	62	зачет

#### **Цели и задачи освоения дисциплины:**

Целями освоения дисциплины «Методы обработки информации в химии» являются формирование у аспирантов углубленных профессиональных знаний в области химии. Для этого необходимо производить случайный отбор из генеральной совокупности. Обработку полученной информации, составлению вариационных рядов.

Основными **задачами**, решаемыми в процессе изучения курса, являются развитие у обучающихся навыков по:

- сбору и обработке информации;
- получению числовых характеристик;
- построению линейных уравнений регрессии;
- проверке научной статистической гипотезы.

#### **2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре**

В результате освоения дисциплины программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине (модулю) и осваивает следующие компетенции:

Компетенции	Код по ФГОС	Дескрипторы – основные признаки освоения (показатели достижения результата)	Формы и методы обучения, способствующие формированию и развитию компетенций
Универсальные	УК-4	Готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	Лекции, решение задач на практических занятиях, самостоятельная работа, устный опрос, контрольная работа, коллоквиум.
Общепрофессиональные	ОПК-1	Способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий. Владеет методами математической статистики. Осуществляет интерпретацию полученных результатов. Знает, как получать и обрабатывать информацию по различным разделам химических дисциплин	Лекции, Практическая работа, самостоятельная работы, устный опрос, контрольная работа, коллоквиум.

Профессиональные	ПК-1	Имеет представление об обработке информации в химии. Проводит отбор информации и обработку. Умеет получать основные характеристики вариационных рядов.	Лекции, Практические занятия, самостоятельная работа, устный опрос, контрольная работа, коллоквиум.
Профессиональные	ПК-2	Выполнять необходимые математические операции над полученной информацией. Составлять вариационные и временные ряды. Приводить графические изображения полученных результатов. Получать характеристики рядов. Проводить проверку гипотез, получать точные и интервальные оценки. Проводить корреляционный анализ.	Лекции, Практические занятия, самостоятельная работа, устный опрос, контрольная работа, коллоквиум.

### 3. Место дисциплины в структуре ОПОП

Изучение данной дисциплины базируется на следующих дисциплинах, прохождении практик: высшей математики, теории вероятностей, математической статистики и численные методы.

Для освоения учебной дисциплины, обучающиеся должны владеть следующими знаниями и компетенциями: элементами теории вероятностей, математической статистики и численными методами и владеть компетенциями УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2.

### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

4.1. Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

## 4.2. Структура дисциплины

№ п/п	Раздел и темы дисциплины	семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости. Форма промежуточной аттестации .
			неделя семестра	лекции	практические занятия	лабораторные работы	контрольные, самостоятельные		
<b>Модуль 1. Вариационный ряд и его характеристики</b>									
1.	Способность отбора информации. Вариационные ряды. Вариационный ряд и его характеристики.			2				15	Устный опрос
2.	Точечные и интервальные оценки.			1	2			16	Устный опрос
	Итого по 1 модулю			3	2			31	Контр. раб
<b>Модуль 2. Корреляционный анализ</b>									
3.	Корреляционный анализ. Линейная корреляция.			2	2			16	Устный опрос
4.	Статистическая проверка гипотез			1				15	Устный опрос

	Итого по 2 модулю			3	2			31	Контр. раб
	Всего			6	4			62	

Для освоения учебной дисциплины, обучающиеся должны владеть следующими знаниями и компетенциями: УК-4, ОПК-1, ПК-1, ПК-2.

### **4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)**

#### **4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине**

##### ***Модуль 1. Вариационный ряд и его характеристики***

1. Способность отбора информации. Вариационные ряды.  
Вариационный ряд и его характеристики.

Способы отбора информации составление математической модели в виде вариационного ряда. Как дискретных, так и непрерывных. Графическое изображение таких рядов. Числовые характеристики в виде среднего арифметического, дисперсия, среднее квадратическое отклонение. Мода, медиана, размах вариационного ряда, коэффициент вариации.

2. Точечные и интервальные оценки.

Точечные оценки для теоретических характеристик вероятности события, функции распределения случайной величины, дисперсии, моды, медианы. Интервальные оценки для математического ожидания, дисперсии и среднего квадратического отклонения.

##### ***Модуль 2. Корреляционный анализ***

3. Корреляционный анализ. Линейная корреляция.

Элементы теории корреляции. Различные виды зависимости. Условное среднее. Выборочные управления регрессии. Корреляционная таблица. Отыскание параметров выборочного уравнения. Выборочный коэффициент корреляции. Методика вычисления выборочного коэффициента корреляции. Выборочное корреляционное отношение. Свойства. Простейшие случаи криволинейной и множественной корреляции.

4. Статистическая проверка гипотез.

Статистическая гипотеза. Нулевая и конкурирующая, простая и сложная гипотезы. Ошибки 1-го и 2-го рода. Статистический критерий проверки



нулевой гипотезы. Наблюдаемое значение критерия. Критическая область. Критические точки. Область принятия гипотезы.

#### **4.3.2. Содержание практических занятий по дисциплине**

##### ***Модуль 1. Вариационный ряд и его характеристики***

Способы отбора информации. Составление математической модели в виде вариационных рядов. Числовые характеристики рядов.

##### ***Модуль 2. Корреляционный анализ***

Примеры построения выборочного управления прямой линии корреляционной модели в виде математической модели.

#### **5. Оценочные средства для текущего контроля и аттестации обучающегося**

##### **Вопросы по текущему контролю**

##### ***Модуль 1. Вариационный ряд и его характеристики***

Примерные вопросы/задания для *самостоятельной работы, коллоквиума, домашнего задания*:

1. Как производится отбор выборочной совокупности?
2. Как обрабатывается полученная информация?
3. Какие бывают вариационные ряды?
4. Как строятся графики рядов и как их называют?
5. Какие числовые характеристики существуют для рядов?
6. Что такое среднее арифметическое?
7. Что определяет дисперсия?
8. По какой формуле можно найти среднее арифметическое?
9. Какие бывают точечные оценки для теоретических характеристик случайных величин?
10. Что такое доверительные интервалы?

##### ***Модуль 2. Корреляционный анализ***

1. Что такое регрессия?
2. Что означает корреляция?
3. Какие бывают уравнения регрессии?
4. Что такое метод наименьших квадратов?
5. Какой вид имеет уравнение линейной регрессии?
6. Как определить форму регрессии?
7. Какие виды математической модели имеет корреляция?

8. Что такое статистическая гипотеза?
9. Как определить область принятия гипотезы?
10. Как найти критические точки гипотезы и какими критериями пользуются для принятия гипотезы?

*Примерный перечень вопросов к зачету по всему курсу и к каждому промежуточному контролю для самопроверки обучающихся*

## **Вопросы по итоговому контролю**

### **Коллоквиум 1**

#### **Вариационные ряды и их характеристики**

1. Дискретный ряд.
2. Непрерывный вариационный ряд.
3. Среднее арифметическое вариационного ряда.
4. Частоты.
5. Переход от непрерывного ряда к дискретному и наоборот.
6. Графическое изображение рядов и их названия.
7. Гистограмма, полигон.
8. Кумулятивная кривая.
9. Ряд накопленных частот.
10. Огиба, круговая диаграмма.
11. Эмпирическая функция распределения.
12. Мода, медиана, медианный интервал, квинтили для непрерывных интервальных вариационных рядов.

### **Коллоквиум 2**

#### **Статистические характеристики рассеяния значений информационных вариационных рядов**

1. Размах вариационного ряда.
2. Линейные отклонения.
3. Дисперсия выборочная.
4. Исправленная дисперсия.
5. Среднее квадратическое отклонение.
6. Исправленное среднее квадратическое отклонение.
7. Условные средние.
8. Упрощенный расчет средней арифметической и дисперсии.
9. Асимметрия.

10. Точечные и интервальные оценки параметров распределения.
11. Доверительная вероятность.
12. Доверительный интервал.
13. Доверительный интервал для оценки мат ожидания.
14. Доверительные интервалы для оценки дисперсии и среднего квадратического отклонения.
15. Доверительные оценки для других характеристик генеральной совокупности.

### **Примерные вопросы к зачету**

1. Дискретные вариационные ряды.
2. Непрерывные вариационные ряды.
3. Графическое изображение различных рядов.
4. Переход от непрерывного ряда к дискретному и обратно.
5. Название и построение графических рядов.
6. Смысл моды, медианы, квинтили, децили.
7. Ряд накопленных частот.
8. Смысл эмпирической функции распределения.
9. Размах ряда.
10. Метод нахождения взвешенной средней арифметической.
11. Смысл дисперсии и исправленной дисперсии.
12. Условные средние.
13. Метод произведения для вычисления статистических характеристик информационных вариационных рядов.
14. Расчетная формула для вычисления дисперсии.
15. Статистические характеристики рассеяния значений признака вариационного ряда.
16. Упрощенные способы расчета характеристик рядов.
17. Понятие о статистических гипотезах.
18. Критическая область.
19. Область допустимых значений.
20. Ошибки 1-го и 2-го рода.
21. Нулевая и конкурирующая гипотезы.
22. Простая и сложная гипотезы.
23. Критические точки.
24. Левосторонняя критическая область.
25. Правосторонняя критическая область.
26. Двусторонняя критическая область.
27. Отыскание критических областей.

28. Определение  $K_{\text{факт}}$ .
29. Критерий согласия Пирсона.
30. Критерия «Хи» квадрат.

### **Индивидуальные задания для практических занятий**

На основании выборочных и расчетных данных требуется:

- 1) построить вариационный ряд частот и относительных частот;
- 2) перейти от дискретного ряда к интервальному;
- 3) построить полигон частот и гистограмму частот;
- 4) найти эмпирическую функцию распределения, разбив вариационный ряд на 7 промежутков, и построить график;
- 5) вычислить основные числовые характеристики: начальные и центральные моменты до четвертого порядка, моду, медиану, размах вариационного ряда, асимметрию и эксцесс;
- 6) считая, что выборка произведена из нормальной генеральной совокупности, найти интервальные оценки параметра  $m$  нормального распределения при известном и неизвестном  $\delta$ , а также среднеквадратического отклонения  $\delta$  при заданной доверительной вероятности  $\gamma = 1 - \alpha$ ;
- 7) ответить на вопросы: что происходит с длиной доверительного интервала при увеличении объема выборки, изменении величины доверительной вероятности?

### **Примерная тематика рефератов**

1. Способы отбора. Методы отбора информации. Обработка полученных результатов. Генеральная совокупность, выборочная совокупность. Смысл выборки. Смысл эксперимента, опыта.
2. Элементы теории множества. Операции над множествами элемента комбинаторики
3. Математическая модель химического процесса. Смысл.
4. Вариационные ряды. Дискретные и непрерывные. Переход от одного вида к другому.
5. Графики вариационных рядов смысл. Описание.
6. Основные характеристики вариационных рядов. Математическое ожидание. Дисперсия среднее квадратическое ожидание
7. Другие характеристики вариационных рядов. Их значение на практике
8. Точечные и интервальные оценки характеристик вариационных рядов
9. Функциональная зависимость между величинами. Статистическая зависимость. Корреляционная зависимость уравнения регрессии.

10. Виды уравнений регрессии. Уравнения линейной, квадратичной регрессии. Множественная регрессия.
11. Составление уравнения линейной регрессии по сгруппированным и несгруппированным данным
12. Статистическая проверка гипотез. Простая и сложная гипотеза. Критическая область. Отыскание практической области. Мощность критерия.
13. Сравнение двух дисперсий нормальных генеральных совокупностей. Сравнение двух средних нормальных генеральных совокупностей
14. Однофакторный дисперсионный анализ. Моделирование случайных величин методом Монте - Карло

## **6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **6.1. Основная литература**

1. Шпаков, П.С. Математическая обработка результатов измерений: учебное пособие / П.С. Шпаков, Ю.Л. Юнаков; Министерство образования и науки Российской Федерации, Сибирский Федеральный университет. - Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2014. - 410 с.: табл., граф., ил. - Библиогр.: с. 391. - ISBN 978-5-7638-3077-4; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=435837>
2. Механников А. И. Пособие для метрологов / Менделеево, 2011. <https://elibrary.ru/item.asp?id=21722755>
3. Ахмедов, Сулейман Абдулгамидович. Пособие по статистической обработке результатов измерений: Справоч. материалы для студентов хим. фак. / Н.Ш.Загиров, Н.К.Фаталиев; М-во образования РФ, Дагест. гос. ун-т. - Махачкала, 2002. - 115 с. - ISBN 5-7788-0382-6: 28-00.
4. Магомедов, Ибрагим Исмаилович. Математическая статистика: учеб. пособие / М-во образования и науки РФ, Дагест. гос. ун-т. - Махачкала : Изд-во ДГУ, 2011. - 78 с. - 46-50.

### **6.2. Дополнительная литература**

1. Новикова, Е.Н. Компьютерная обработка результатов измерений: учебное пособие / Е.Н. Новикова, О.Л. Серветник ; Министерство образования и науки РФ, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Северо-Кавказский федеральный университет». - Ставрополь: СКФУ, 2017. - 182 с.: ил.; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=483751>
2. Калинина, Вера Николаевна. Математическая статистика: [учебник по специальностям информатики и вычислительной техники] / В.Ф.Панкин. -

4-е изд., испр. - М. : Дрофа, 2002. - 335, [1] с. : ил. ; 22 см. - (Среднее профессиональное образование). - Допущено МО РФ. - ISBN 5-7107-6039-0: 140-00.

3. Математическая статистика: мет. указания и варианты лаб. работ / [сост.: Магомедов И.И., Назаралиев М.А.]; Минобрнауки России, Дагест. гос. ун-т. - Махачкала : Изд-во ДГУ, 2012. - 25-60.

4. Виленкин Н.Я. Комбинаторика. - М.: Наука, 1969. - 328 с.

### **6.3. Программное обеспечение**

1. Коммерческие пакеты для решения задач, математического программирования: GANS, AIMMS, GUROBI.

2. Некоммерческие пакеты для решения задач математического программирования GLPK.

### **6.4. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

1. eLIBRARY.RU [электронный курс]: электронная библиотека / Науч. электрон. библиотека. – Москва, 1999. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/default.asp> (дата обращения: 22.05.18). – Яз. рус., англ.
2. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный курс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ / Дагестанский гос. Ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgy.ru>, свободный (дата обращения: 22.05.2018).
3. ЭБС ibooks.ru [Электронный курс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://ibooks.ru/> (дата обращения: 22.05.2018).
4. ЭБС book.ru [электронный курс]: ]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: [www.book.ru/](http://www.book.ru/) (дата обращения: 22.05.2018).
5. Федеральный портал российского образования <http://edu.ru>
6. Электронная библиотека <http://elib.kuzstu.ru>

### **6.5 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины:**

Moodle [электронный курс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. Гос. Ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или

регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет.  
– URL: <http://moodle.dgy.ru/> (дата обращения: 22.05.2018 )

## **7. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованные учебные аудитории для проведения лекционных и практических занятий, помещения для лабораторных занятий, помещения для выполнения лабораторных работ на группу обучающихся из 12 человек и вспомогательное помещение для хранения химических реактивов и профилактического обслуживания учебного и учебно-научного оборудования.

Помещения для лекционных и практических занятий укомплектованы комплектами электропитания ЩЭ (220В, 2 кВт, в комплекте с УЗО), специализированной мебелью и оргсредствами (доска аудиторная для написания мелом и фломастером, стойка-кафедра, стол лектора, стул-кресло, столы аудиторные двухместные (1 на каждых двух обучающихся), стол аудиторный (1 на каждого обучающегося), а также техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком и программным обеспечением для слайд-презентаций).

## **8. Образовательные технологии:**

В ходе освоение дисциплины предусматривается применение следующих активных и интерактивных методов обучения:

- выполнение практических работ с элементами исследования.
- тематические проекты (по модулям)
- контрольные работы
- коллоквиумы