

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана химического факультета
А.С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Оптимизация химико-аналитических процессов

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
«Химия»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

– ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

– ПК-1. Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

– ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

– ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

– ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

– ИОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности.

– ИОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик.

– ИОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

– ИПК-1.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.

– ИПК-1.3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить навыки обработки результатов химического эксперимента, основные этапы и алгоритмы планирования эксперимента.

– Научиться составлять план эксперимента при поиске оптимальных условий проведения химико-технологического или химико-аналитического процессов.

– Научиться анализировать априорную информацию об объектах исследования с целью обоснованного выбора подобласти факторного пространства для планирования эксперимента.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

Дисциплина входит в Модуль Химия материалов

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 7, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия, физическая химия, физико-химические методы анализа, химическая технология, методы математической статистики в химии.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Планирование экстремальных экспериментов.

Общие сведения об эксперименте. Объект исследования, критерий оптимизации и факторы. Исследование поверхности отклика и ее математическая модель. Выбор экспериментальной области факторного пространства.

Тема 2. Экспериментально-статистические модели.

Ортогональные ротатабельные планы при изменении факторов на двух уровнях. Построение матриц планирования в полном факторном эксперименте. Основные эффекты и эффекты взаимодействия. Дробный факторный эксперимент. Свойства матриц планирования. Устранение влияния временного дрейфа.

Тема 3. Обработка результатов измерений. Вычисление коэффициентов регрессии и проверка их значимости. Проверка адекватности модели. Интерпретация модели и принятие решения для дальнейшего продвижения к оптимуму.

Тема 4. Крутое восхождение по поверхности отклика. Движение по градиенту. Реализация плана крутого восхождения.

Тема 5. Исследование поверхности отклика в районе экстремума. Ортогональное и ротатабельное планирование второго порядка. Каноническая форма уравнения регрессии.

Тема 6. Симплексный метод планирования эксперимента.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ по лекционному материалу, выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация – зачет, проводится в форме защиты кейса – комплексного задания, позволяющего оценить сформированность индикаторов достижения компетенций ИОПК-1.1, ИОПК-1.2, ИОПК-1.3, ИОПК-4.1, ИОПК-4.2, ИОПК-4.3, ИПК-1.1, ИПК-1.2. Зачет оценивается по двубальной системе: «Зачтено», «Не зачтено».

Пример кейса по курсу «Оптимизация химико-аналитических процессов»

Осаждение $\text{Fe}(\text{OH})_3$ (без коллектора) в присутствии 1000-кратного количества $\text{Cr}(\text{VI})$

Параметр оптимизации – полнота осаждения гидроксида железа (III) (в %).

В качестве матрицы планирования взята дробная реплика 2^{6-2} с генерирующими соотношениями: $x_5 = x_1x_2x_3x_4$ и $x_6 = x_2x_3x_4$.

- Факторы:
- x_1 – объем $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ (10 %-ный раствор) в мл, (a)
 - x_2 – объем NH_4OH (10 %-ный раствор) в мл, (b)
 - x_3 – концентрация $\text{Fe}(\text{III})$, моль/л, (c)
 - x_4 – температура, °C, (d)
 - x_5 – скорость приливания NH_4OH , мл/мин,
 - x_6 – ионная сила раствора.

Факторы	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
Нулевой уровень	10	6	$1,35 \times 10^{-5}$	80	4	0,20
Интервал варьирования	2	3	$0,45 \times 10^{-5}$	20	1	0,05

Матрица планирования плана 2^4 (основной план) была задана следующими соотношениями: c, ac, bc, abc, (1), a, b, ab, cd, acd, bcd, abcd, d, ad, bd, abd и опытом в центре плана.

После реализации плана получены следующие результаты:

№ опыта	Y_1	Y_2	№ опыта	Y_1	Y_2
1	94.28	95.50	9	95.60	95.64
2	95.42	95.69	10	91.24	91.20
3	98.00	98.36	11	95.90	96.06
4	98.41	98.67	12	96.25	96.45
5	97.00	97.16	13	95.50	95.74
6	93.60	94.00	14	87.00	87.44
7	94.80	94.98	15	83.51	83.65
8	94.79	94.99	16	85.00	85.08
			17	94.79	94.67

Найдите математическое описание процесса и примите решение о дальнейших действиях.

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=28535>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению лабораторных работ.
- д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Статистические методы планирования эксперимента в химии [Электронный ресурс]: электронное учебное пособие / В. В. Шелковников. – Том. гос. ун-т, Ин-т дистанционного образования. 2007.
 - Основы теории и техники физического моделирования и эксперимента [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н. Ц. Гатапова, А. Н. Колиух, Н. В. Орлова, А. Ю. Орлов. – Тамбов, 2014. – 77 с.
 - Введение в теорию планирования эксперимента: учеб. Пособие / Н. И. Сидняев, Н. Т. Вилисова. – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. – 463 с.
- б) дополнительная литература:
 - Любченко Е. А., Чуднова О. А. Планирование и организация эксперимента: учебное пособие. Часть 1. / Е. А. Любченко, О. А. Чуднова – Владивосток : Изд-во ТГЭУ, 2010. – 156 с.
 - Гмурман, В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В. Е. Гмурман. – М. : Высшее образование, 2009. – 480 с.
- в) ресурсы сети Интернет:
 - ИНТУИТ национальный открытый университет [Электронный ресурс]. Режим доступа свободный <http://www.intuit.ru>.
 - Образовательный математический сайт [Электронный ресурс]. Режим доступа <http://www.exponenta.ru>, свободный.
 - Общероссийская Сеть КонсультантПлюс Справочная правовая система. <http://www.consultant.ru>

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:
 - Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
 - ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных (*при наличии*):

– Университетская информационная система РОССИЯ – <https://uisrussia.msu.ru/>

– Единая межведомственная информационно-статистическая система (ЕМИСС) – <https://www.fedstat.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Шелковников Владимир Витальевич, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, заведующий кафедрой.