

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
И.о. декана
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Статистические методы планирования эксперимента в химии

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А. С. Князев

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских и/или производственных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 2.1 Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их

ИОПК 2.2 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ИОПК 3.3 Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

ИПК 1.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить основные этапы и алгоритмы планирования эксперимента, уметь составлять план эксперимента при поиске оптимальных условий проведения химико-технологического или химико-аналитического процессов.

– Научиться применять навыки обработки результатов химического эксперимента.

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

– Владеть навыками обоснования вида и формы аналитического сигнала; обсуждать полученные результаты анализа/исследования.

– Уметь применять теоретические основы статистических методов отбора, анализа и обработки экспериментальных данных.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

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

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

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

Первый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 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.

Тема 7. Планирование эксперимента при выяснении механизма явлений.

Линейные и нелинейные модели. Неравноточность измерений. Применение метода наименьших квадратов (МНК) к неравноточным измерениям. Нелинейный метод наименьших квадратов. Критерии оптимальности планов.

Тема 8. Математическое моделирование химико-аналитических процессов.

9. Текущий контроль по дисциплине

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

Пример контрольной работы:

1. Представьте результаты вычислений с учетом правил округления:
 - i. $3,02 \cdot 14,68 - 12,534 =$
 - ii. $2,680 + 14,72 - 18,1 \cdot 0,64 =$
 - iii. $3,62 \cdot 10^{-2} + 0,143 - 10,4 + 68 =$
2. Рассчитайте доверительный интервал для среднего значения содержания олова в латуни ($P=0,95$): 0,074; 0,074; 0,070; 0,092; 0,075; 0,075; 0,074; 0,073.
3. При определении марганца в стали получены следующие результаты (%): 0,80; 0,81; 0,78; 0,83 (фотометрическим методом) и 0,76; 0,70; 0,74 (спектральным методом). Оцените воспроизводимость полученных разными методами результатов. Можно ли объединить результаты определения марганца в стали, полученные разными методами, для нахождения истинного содержания?

4. При проведении полного факторного эксперимента, условия которого были заданы следующими условиями: a, abc, c, ab, b, (), ac, bc были получены следующие результаты соответственно: 0,92; 0,64; 0,68; 0,89; 0,25; 0,58; 0,14; 0,66. Оцените, как влияет второй фактор на величину критерия оптимизации в изученной области факторного пространства.
5. При разработке методики анализа изучалась воспроизводимость пяти различных вариантов и были получены следующие значения дисперсий: 0,025; 0,028; 0,036; 0,024; 0,027 (по 20 параллельным измерениям). Дают ли все 5 вариантов равнозначные результаты?
6. Теоретическое содержание углерода в карборунде (CSi) составляет 30,00 %. Аналитик определил 30,45%, стандартное отклонение среднего составило 0,36%. Оценить правильность полученных результатов ($n=5$).

Примеры кейсов:

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

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 $K_2Cr_2O_7$ (10 %-ный раствор) в мл, (a)
 - x_2 – объем NH_4OH (10 %-ный раствор) в мл, (b)
 - x_3 – концентрация $Fe(III)$, 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.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в первом семестре проводится в письменной форме. В качестве задания магистранту предлагается самостоятельно решить комплексную задачу, которая позволяет оценить сформированность всех заложенных в программу курса компетенций (ОПК-1.).

При выполнении задания магистранту необходимо:

1. Составить матрицу планирования эксперимента.
2. Оценить равнозначность полученных результатов для каждой строки в матрице планирования.
3. Исключить из рассмотрения грубые результаты.
4. Рассчитать математическую модель процесса.
5. Оценить значимость коэффициентов модели.
6. Оценить адекватность модели.
7. На основании математической модели принять решение о дальнейшей оптимизации процесса при продвижении к оптимальным условиям.

Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=22074>

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.

– Любченко Е. А., Чуднова О. А. Планирование и организация эксперимента: учебное пособие. Часть 1. – Владивосток : Изд-во ТГЭУ, 2010. – 156 с.

– Гмурман В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В. Е. Гмурман. – М. : Высшее образование, 2009. – 480 с.

б) ресурсы сети Интернет:

- открытые онлайн-курсы
- Журнал «Эксперт» - <http://www.expert.ru>
- Официальный сайт Федеральной службы государственной статистики РФ - www.gsk.ru
- Официальный сайт Всемирного банка - www.worldbank.org
- Общероссийская Сеть КонсультантПлюс Справочная правовая система. <http://www.consultant.ru>
- Libre Office Calc
- ИНТУИТ национальный открытый университет [Электронный ресурс]. Режим доступа свободный <http://www.intuit.ru>
- Режим доступа <http://www.exponenta.ru>, свободный.

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.