

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

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

**Оптимизация химико-аналитических процессов**

по направлению подготовки / специальности

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

**Фундаментальная и прикладная химия**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**химик-специалист, преподаватель**

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:

БК-1. Способен применять общие и специализированные компьютерные программы при решении задач профессиональной деятельности;

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии;

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

ПК-2. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РОБК 1.1 Знает правила и принципы применения общих и специализированных компьютерных программ для решения задач профессиональной деятельности

РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.

РООПК 1.2 Умеет систематизировать и интерпретировать результаты экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы

РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

РОПК 1.2 Умеет выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

РОПК 2.3 Умеет планировать и осуществляет работу с учетом результатов, составляет нормативную, методическую и дидактическую документацию.

## **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 «Дисциплина (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**

Седьмой семестр, 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 РОБК-1.1, РООПК-1.1, РООПК-1.2, РООПК-1.3, РОПК-1.1, РОПК-1.2, РОПК-2.3. 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  $\text{NH}_4\text{OH}$  (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  $\text{NH}_4\text{OH}$ , 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 практических занятий по дисциплине.

## 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/>

#### **14. Материально-техническое обеспечение**

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.