

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана

А. С. Князев

Оценочные материалы по дисциплине

Оптимизация химико-аналитических процессов

по специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Химик / Химик-специалист. Преподаватель химии

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

В.В. Шелковников

Томск – 2024

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

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. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

– задания для самостоятельного решения.

Пример:

Задания для самостоятельного решения (РОБК-1.1, РООПК-1.2, РООПК-1.3, РОПК-1.2),

При поиске оптимальных условий уменьшения примесей в продукте А был проведен эксперимент 25-2. Исходная матрица 2×3 была следующая: a, b, c, ab, ac, bc, abc, ().

Дополнительные столбцы заданы с помощью генерирующих соотношений:

$$x_4 = -x_1 x_2 x_3;$$

$$x_5 = x_1 x_3.$$

В результате реализации эксперимента были получены следующие значения функции отклика: 1,2; 1,5; 6; 0,5; 0,1; 30; 10; 0,8.

Задание:

Построить матрицу планирования

Рассчитать коэффициенты линейной модели

С помощью обобщающих определяющих контрастов выяснить оценки коэффициентов

Ответ:

Для плана 2^3 :

	a	b	c		X5			X4		
N	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁ x ₂	x ₁ x ₃	x ₂ x ₃	x ₁ x ₂ x ₃	-x ₁ x ₂ x ₃		y
1	+	-	-	-	-	+	+	-	a	1,2
2	-	+	-	-	+	-	+	-	b	1,5
3	-	-	+	+	-	-	+	-	c	6
4	+	+	-	+	-	-	-	+	ab	0,5
5	+	-	+	-	+	-	-	+	ac	0,1
6	-	+	+	-	-	+	-	+	bc	30
7	+	+	+	+	+	+	+	-	abc	10
8	-	-	-	+	+	+	-	+	()	0,8

$$b_0 = \frac{1}{8}(1,2 + 1,5 + 6 + 0,5 + 0,1 + 30 + 10 + 0,8) = 6,2625.$$

$$b_1 = \frac{1}{8}(+ 1,2 - 1,5 - 6 + 0,5 + 0,1 - 30 - 10 + 0,8) = -3,3125$$

$$b_2 = \frac{1}{8}(- 1,2 + 1,5 - 6 + 0,5 - 0,1 + 30 + 10 - 0,8) = 4,2375$$

$$b_3 = \frac{1}{8}(- 1,2 - 1,5 + 6 - 0,5 + 0,1 + 30 + 10 - 0,8) = 5,2625$$

$$b_4 = \frac{1}{8}(- 1,2 - 1,5 - 6 + 0,5 + 0,1 + 30 - 10 + 0,8) = 1,5875$$

$$b_5 = \frac{1}{8}(- 1,2 + 1,5 - 6 - 0,5 + 0,1 - 30 + 10 + 0,8) = -3,1625$$

$$y = 6,2625 - 3,3125 \cdot x_1 + 4,2375 \cdot x_2 + 5,2625 \cdot x_3 + 1,5875 \cdot x_4 - 3,1625 \cdot x_5$$

Умножим обе части генерирующих соотношений на x_4 и x_5

$$1 = -x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$$

$$1 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_5$$

Перемножим

$$1 = -x_1^2 \cdot x_2^2 \cdot x_3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

Определяющий контраст

$$1 = -x_3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

Алгебраическая сумма:

$$S = 1 - x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 + x_1 \cdot x_2 \cdot x_5 - x_3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

$$1) x_1 - x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 + x_2 \cdot x_5 - x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 \cdot x_5$$

$$b_1 = \beta_1 - \beta_{234} + \beta_{25} - \beta_{1345}$$

2) $x_2 - x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + x_1 \cdot x_5 - x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 \cdot x_5$
 $b_2 = \beta_2 - \beta_{134} + \beta_{15} - \beta_{2345}$

3) $x_3 - x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_5 - x_4 \cdot x_5$
 $b_3 = \beta_3 - \beta_{124} + \beta_{1235} - \beta_{45}$

4) $x_4 - x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 + x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 \cdot x_5 - x_3 \cdot x_5$
 $b_4 = \beta_4 - \beta_{123} + \beta_{1245} - \beta_{35}$

5) $x_5 - x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 \cdot x_5 + x_1 \cdot x_2 - x_3 \cdot x_4$
 $b_5 = \beta_5 - \beta_{12345} + \beta_{12} - \beta_{34}$

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

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: $x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$ и $x_6 = x_2 x_3 x_4$.

- 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: с, ас, бс, аbc, (1), а, 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.

Критерии оценивания:

Зачет оценивается по двухбалльной системе: «Зачтено», «Не зачтено».

Оценка «Зачтено» выставляется, если студент правильно выполнил задание кейса (составил матрицу планирования, на основании проведенных расчетов получил математическую модель, описывающую процесс, провел проверку адекватности полученной модели и сделал выводы, по результатам факторного планирования эксперимента) и в ходе текущего контроля выполнил все задания.

Оценка «Не зачтено» выставляется, если задания выполнены не в полном объеме и имеются или имеются существенные ошибки, требующие доработки.

Информация о разработчиках

Шелковников Владимир Витальевич, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии химического факультета ТГУ, зав. кафедрой.