

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

Избранные главы неорганической химии и материаловедения
Модуль II: Планирование эксперимента

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. 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 в различных областях химии;

ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;

ПК-5. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР;

ПК-6. Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

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

РООПК 2.1 Знает стандартные приемы и операции, используемые при получении веществ неорганической и органической природы

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования

РООПК 2.3 Умеет проводить стандартные синтезы по готовым методикам, выполнять стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов, а также использовать серийное научное оборудование для изучения их свойств

РОПК 5.1 Умеет готовить детальные планы отдельных стадий прикладных НИР и НИОКР

РОПК 5.2 Умеет выбирать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР

РОПК 5.3 Умеет проводить испытания инновационной продукции

РОПК 6.1 Умеет выполнять стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства

2. Задачи освоения дисциплины

– формирование начальных общепрофессиональных и профессиональных компетенций в области планирования эксперимента;

– изучение основных понятий и концепций теории математического эксперимента;

– определение направлений в организации химического эксперимента, выбор условий проведения опытов;

– оставление детальных планов экспериментов при выполнении прикладных научно-исследовательских работ.

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 Модуль Неорганическая химия и химическое материаловедение.

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

Девятый семестр, зачет

Девятый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия, физическая химия и химия ВМС, высшая математика, информатика, методы математической статистики в химии, физические методы исследования.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость модуля составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 16 ч

-практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Введение

Значение и использование основ кибернетики в научно-исследовательской работе. Математическое моделирование. Математические методы планирования эксперимента. Цель и задачи методов планирования эксперимента Общие сведения об эксперименте.

Объект исследования, критерий оптимизации, факторы и факторное пространство.

Тема 2. Концепции теории математического эксперимента

Планирование эксперимента с целью описания исследуемого объекта. Сбор, изучение и анализ имеющихся данных об объекте исследования.

Свойства матриц планирования. Выбор экспериментальной области факторного пространства. Кодирование переменных. Построение матриц планирования в полном факторном эксперименте. Построение математической модели. Вычисление коэффициентов регрессии и проверка их значимости. Проверка адекватности модели. Интерпретация модели, оценка влияния факторов на функцию отклика и принятие решения для дальнейшего продвижения к оптимуму.

Тема 3. Исследование поверхности отклика

Крутое восхождение по поверхности отклика. Движение по градиенту. Реализация плана крутого восхождения. Ортогональное планирование эксперимента второго порядка. Ротатабельное планирование эксперимента второго порядка. Каноническая форма уравнения регрессии.

Тема 4. Симплексный метод планирования эксперимента

Основные положения метода. Алгоритм проведения симплексного анализа. Достоинства, недостатки и области применения метода.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, тестов по лекционному материалу, выполнения

индивидуальных заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение модуля «Планирование эксперимента» в семестре завершается защитой индивидуального задания и итоговым тестом.

Зачет проводится по результатам выполнения и защиты индивидуального задания.

Индивидуальное задание включает:

1. Анализ экспериментальных данных, предоставленных преподавателем или полученных студентом при выполнении НИР (ОПК-1, ПК-5)
2. Выбор функции отклика, факторов и факторного пространства (ОПК-2, РООПК 1.1).
3. Построение матрицы планирования и расчет математической модели; (РООПК 1.2.).
4. Сравнение математической модели с априорной информацией и оценка влияния нескольких параметров на критерий оптимизации через анализ коэффициентов математической модели; (РООПК 1.3.).
5. Оценка адекватности полученной модели (РООПК 1.2).
6. Принятие решений после проведения факторного эксперимента при получении адекватной и неадекватной математической модели (РООПК 2.1).
7. Расчет «мысленных» опытов для оптимизации условий ведения эксперимента (РООПК 2.2.).

Пример задания. Необходимо оптимизировать условия возгонки германия из продуктов цинкового производства. В качестве функции отклика выбрана величина массовой доли германия в продуктах возгонки. Полученные результаты проведенных опытов приведены в таблице.

| Температура, °С | Время выдержки, мин. | Массовая доля восстановителя, % | Содержание германия в продукте, % |
|-----------------|----------------------|---------------------------------|-----------------------------------|
| 1100 | 30 | 2.3 | 5.2 |
| 900 | 30 | 2.3 | 4.1 |
| 1100 | 10 | 2.3 | 1.3 |
| 900 | 10 | 2.3 | 1.5 |
| 900 | 30 | 2.7 | 4.7 |
| 1100 | 30 | 2.7 | 6.8 |
| 900 | 10 | 2.7 | 2.4 |
| 1100 | 10 | 2.7 | 4.0 |

По результатам проведённого эксперимента вычислена дисперсия воспроизводимости, которая составила 0,246.

Задание:

- получите математическую модель и оцените ее адекватность. Проанализируйте влияние входных параметров на выход германия;
- на основании полученной математической модели проведите поиск оптимальных условий ведения технологического процесса.

Критерии оценивания.

Для получения оценки «зачтено» обучающийся демонстрирует:

- знание основных понятий и теорий планирования эксперимента;
- умение применять теоретические и полуэмпирические модели; обрабатывать данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик; интерпретировать математическую модель планового эксперимента;

– владеет приемами построения матриц планирования и расчета коэффициентов математической модели.

Оценку «не зачтено» получает обучающийся, ошибающийся в определениях, в построении и интерпретации математической модели, не умеющий реализовать крутое восхождение для оптимизации условий эксперимента.

На экзамен выносятся теоретические вопросы модуля «Планирование эксперимента» и тест. Содержание вопросов позволяет оценить степень сформированности компетенций. Продолжительность подготовки ответа по билету 1 час, ответ 20 мин.

Примерный перечень вопросов:

1. Математическое моделирование в химии и химической технологии. Основные понятия и определения планирования эксперимента.

2. Принципы выбора факторов и факторного пространства в химическом эксперименте.

3. Факторное пространство. Выражение функции отклика через уравнение регрессии в выбранном факторном пространстве. Кодирование факторов и построение математической модели.

4. Свойства матрицы планирования. Проверка адекватности полученной математической модели.

5. Ортогональное планирование эксперимента второго порядка. Ротатабельное планирование эксперимента второго порядка. Каноническая форма уравнения регрессии.

6. Основные положения симплексного метода планирования эксперимента. Достоинства, недостатки и области применения метода.

Критерии оценивания:

«отлично» – студент дает полные, развернутые, ответы на теоретические вопросы, применяет понятийный аппарат дисциплины,

«хорошо» – студент дает развернутые, логически построенные ответы на теоретические вопросы, применяет понятийный аппарат дисциплины, но допускает две-три ошибки, которые исправляет, основываясь на наводящих вопросах преподавателя.

«удовлетворительно» – студент не может дать полного ответ на один из теоретических вопросов билета, ошибается в ответах на дополнительные вопросы преподавателя.

«неудовлетворительно» – студент не может дать ответ на один из теоретических вопросов билета, не ориентируется в теоретическом материале, не дает ответа на дополнительные вопросы.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=00000>

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:

– ГОСТ 24026-80 «Исследовательские испытания. Планирование эксперимента. Термины и определения. М.,1980.

– Волосухин В. А. Планирование научного эксперимента. – М.: ИНФРА-М . 2014

- Щурин, К. В. Планирование и организация эксперимента / К. В. Щурин, Е. К. Волкова. СПб.: Лань, 2022. – 336 с.
- Статистические методы контроля качества и обработка экспериментальных данных: учебное пособие для среднего профессионального образования / Б. Б. Мойзес, И. В. Плотникова, Л. А. Редько. – 2-е изд. – Москва: Издательство Юрайт, 2019; Томск: Томский политехнический университет. – 118 с. – (Профессиональное образование).
- Адлер Ю. П. Введение в планирование эксперимента. – М. : Металлургия, 1969.
- Налимов В. В., Чернова Н. А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. – М. : Наука, 1971.
- Фиалко М. Б., Кумок В. Н. Лекции по планированию эксперимента. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 1977.
- Марьянов Б. М., Чащина О. В., Захарова Э. А. Математические методы обработки информации в аналитической химии. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 1988.
- Семенов С.А. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. Т.2. 2005. – 29 с.

б) дополнительная литература:

- Голованов А. Н. Планирование эксперимента учебное пособие : Том. гос. ун-т. - Томск : Томский государственный университет,
- URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000427154> 2011
- Яворский В. А. Планирование научного эксперимента и обработка экспериментальных данных : методические указания к лабораторным работам / В. А. Яворский. Москва : МФТИ, 2011.
- Математическое планирование эксперимента: Учебно-методическое пособие для студентов очного и заочного обучения специальностей «Технология обработки металлов давлением», «Динамика и прочность машин», «Компьютерная механика», «Компьютерная биомеханика». – Пермь: Перм. гос. техн. ун-т, 2011. – 35 с.
- Шелковников В. В. Статистические методы планирования эксперимента в химии : электронное учебное пособие / Шелковников В. В. ; Том. гос. ун-т, Ин-т дистанционного образования. - Томск: ИДО ТГУ, 2006. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000243764>.

в) ресурсы сети Интернет:

- открытые онлайн-курсы.

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 (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 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.

Обучение осуществляется на базе:

– лекционной аудитории, оснащенной мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации (аудитория № 402 6-го учебного корпуса ТГУ). В аудитории имеется интерактивная доска;

– лабораторной аудитории (№ 406, 6-го учебного корпуса ТГУ) для проведения практических занятий (компьютерный класс).

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

Автор программы: Каракчиева Наталья Ивановна, канд. хим. наук, старший научный сотрудник, кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

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