

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/ специализация:
Химия современных материалов и технологий

Форма обучения
Очная

Квалификация
Химик-исследователь

Год приема
2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А.С. Князев

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных научных приборов.

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

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

ПК-2 Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 1.1 Знает основные теоретические положения, экспериментальные и расчетные методы, применяемые в избранной области химии

РООПК 1.2 Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ для грамотного планирования научного исследования

РООПК 1.3 Умеет применять существующие и разрабатывать новые методики получении и характеризации веществ и материалов

РООПК 1.4 Умеет использовать современное научное оборудование, расчетно-теоретические методы и профессиональное программное обеспечение для решения задач в избранной области химии или смежных наук

РООПК 2.1 Знает основные требования к методам обработки и представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

РООПК 2.2 Умеет анализировать, интерпретировать и обобщать данные, представленные в литературе и полученные в результате проведенных исследований в избранной области химии или смежных наук

РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составлять 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 1.3 Умеет использовать современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в избранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования

РОПК 2.1 Умеет анализировать имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагать технические средства для решения поставленных задач

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.

– Овладеть 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, предлагается обучающимся на выбор.

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 3 з.е., 108 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.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в первом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из комплексной задачи. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

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 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, Инт-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.

в) ресурсы сети Интернет:

– открытые онлайн-курсы

– Журнал «Эксперт» - <http://www.expert.ru>

– Официальный сайт Федеральной службы государственной статистики РФ - www.gks.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	–
<u>http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system</u>	
– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ	–
<u>http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index</u>	
– ЭБС Лань – <u>http://e.lanbook.com/</u>	
– ЭБС Консультант студента – <u>http://www.studentlibrary.ru/</u>	
– Образовательная платформа Юрайт – <u>https://urait.ru/</u>	
– ЭБС ZNANIUM.com – <u>https://znanium.com/</u>	
– ЭБС IPRbooks – <u>http://www.iprbookshop.ru/</u>	

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.