

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины
Статистические методы планирования эксперимента в химии

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация (степень) выпускника
магистр

Форма обучения
очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ОД.5. Статистические методы планирования эксперимента в химии

2. **Цель изучения дисциплины:** сформировать целостное представление об основных математических моделях и методах планирования эксперимента, приемах обработки результатов при решении исследовательских и технических вопросов из области химии.

3. **Год и семестр обучения:** 2 год, 3 семестр.

4. **Общая трудоемкость дисциплины** составляет 4 зачетные единицы, 144 часа, из которых 34 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (16 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – практические занятия, 74 часа составляет самостоятельная работа обучающегося, 36 часов отведено на промежуточный контроль (экзамен).

5. **Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
(ОПК-2) – II Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	В (ОПК-2) – II <i>владеть:</i> навыками обработки результатов химического эксперимента
(ПК-1) – II Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	З (ПК-1) – II <i>знать:</i> основные этапы и алгоритмы планирования эксперимента У (ПК-1) – II <i>уметь:</i> составлять план эксперимента при поиске оптимальных условий проведения химико-технологического или химико-аналитического процессов
(ПК-2) – II Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	У (ПК-2) – II <i>уметь:</i> анализировать априорную информацию об объектах исследования с целью обоснованного выбора подобласти факторного пространства для планирования эксперимента
(СПК-3) – II владение основами методологии анализа и исследования объектов различной природы современными химическими и физико-химическими методами анализа, способность применять статистические методы обработки аналитической информации	З (СПК-3) – II <i>знать:</i> теоретические основы применения статистических методов отбора, анализа и обработки экспериментальных данных У (СПК-3) – II <i>уметь:</i> обосновывать вид и форму аналитического сигнала; обсуждать полученные результаты анализа/исследования

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
Введение. Общие сведения об эксперименте. Объект исследования, критерий оптимизации и факторы, поверхность отклика и ее линейная модель.	3	1		2
Основные этапы планирования эксперимента	3	1		2
Планирование экстремальных экспериментов. Матрица планирования. Свойства матриц планирования. Экспериментально-статистические модели.	4	2		2
Обработка результатов измерений.	18	2	4	12
Полный факторный эксперимент	10	2	2	6
Дробный факторный эксперимент.	10	2	2	6
Крутое восхождение по поверхности отклика.	9	1	2	6
Симплексные планы.	9	1	2	6
Исследование поверхности отклика в районе экстремума. Ортогональное и ротатабельное планирование второго порядка.	24	2	4	18
Планирование эксперимента при выяснении механизма явлений.	18	2	2	14
Промежуточная аттестация (экзамен)	36			
Итого:	144	16	18	74

6.2. Содержание дисциплины

1. Планирование экстремальных экспериментов.
 - 1.1. Общие сведения об эксперименте. Объект исследования, критерий оптимизации и факторы. Исследование поверхности отклика и ее математическая модель.
 - 1.2. Выбор экспериментальной области факторного пространства.
2. Экспериментально-статистические модели.
 - 2.1. Ортогональные ротатабельные планы при изменении факторов на двух уровнях.
 - 2.2. Построение матриц планирования в полном факторном эксперименте. Основные эффекты и эффекты взаимодействия. Дробный факторный эксперимент.
 - 2.3. Свойства матриц планирования.
 - 2.4. Устранение влияния временного дрейфа.
3. Обработка результатов измерений. Вычисление коэффициентов регрессии и проверка их значимости. Проверка адекватности модели. Интерпретация модели и принятие решения для дальнейшего продвижения к оптимуму.
4. Крутое восхождение по поверхности отклика. Движение по градиенту. Реализация плана крутого восхождения.

5. Исследование поверхности отклика в районе экстремума. Ортогональное и ротатабельное планирование второго порядка. Каноническая форма уравнения регрессии.
6. Симплексный метод планирования эксперимента.
7. Планирование эксперимента при выяснении механизма явлений.
 - 7.1. Линейные и нелинейные модели. Неравноточность измерений. Применение метода наименьших квадратов (МНК) к неравноточным измерениям. Нелинейный метод наименьших квадратов.
 - 7.2. Критерии оптимальности планов.
Математическое моделирование химико-аналитических процессов.

6.3. Форма промежуточной аттестации

Экзамен.

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Основная литература

1. Статистические методы планирования эксперимента в химии [Электронный ресурс]: электронное учебное пособие / Шелковников В. В.; Том. гос. ун-т, Ин-т дистанционного образования. 2007
2. 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.
3. Введение в теорию планирования эксперимента: учеб. Пособие / Н.И. Сидняев, Н.Т. Вилисова. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. – 463 с.
4. Любченко Е.А., Чуднова О.А. Планирование и организация эксперимента: учебное пособие. Часть 1. – Владивосток: Изд-во ТГЭУ, 2010. – 156 с.
5. Гмурман, В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман. - М.: Высшее образование, 2009. – 480 с.

7.2. Ресурсы информационно-коммуникационной сети «Интернет»

1. Libre Office Calc
2. ИНТУИТ национальный открытый университет [Электронный ресурс]. Режим доступа свободный <http://www.intuit.ru>.
3. Образовательный математический сайт [Электронный ресурс]. Режим доступа <http://www.exponenta.ru> , свободный

8. Автор программы: Шелковников Владимир Витальевич, канд. хим. наук, доцент кафедры аналитической химии ХФ ТГУ.