

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.01.01 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ
Планирование эксперимента

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

04.03.01.32 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2021

Красноярск 2023

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

Доцент, Сагалаков Сергей Андреевич

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью преподавания дисциплины является: изучение и освоение методики планирования экспериментов для построения моделей химических процессов.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачами изучения дисциплины являются: ознакомление студентов с основными понятиями и методами планирования эксперимента, как в лабораторных, так и в производственных условиях, обучение студентов применению полученных знаний в научно-исследовательской работе как в пределах университета, так и в дальнейшей производственной деятельности.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ПК-1: Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	
ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	
ПК-1.2: Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов исследований	
ПК-1.3: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач исследований	
ПК-1.4: Готовит объекты исследования	
ПК-3: Способен проектировать и осуществлять направленный синтез полифункциональных соединений и под руководством специалиста более высокой квалификации	
ПК-3.1: Проектирует направленный синтез полифункциональных материалов с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи	

ПК-3.2: Осуществляет направленный синтез соединений по заданию	
специалиста более высокой квалификации	

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	1,5 (54)	
занятия лекционного типа	0,5 (18)	
практические занятия	1 (36)	
Самостоятельная работа обучающихся:	1,5 (54)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	
Промежуточная аттестация (Экзамен)	1 (36)	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. 1. Введение. Предмет теории эксперимента									
	1. Введение. Предмет теории эксперимента. Причины появления, история развития и основные направления. Сравнение факторного планирования с традиционным методом выполнения химического эксперимента. Этапы исследования. Особенности и достоинства метода математического планирования эксперимента. Концепции теории эксперимента и его основные понятия: объект исследования, параметр оптимизации, факторы и др.	2							
	2. Безградиентные методы оптимизации. Симплексный метод оптимизации. Расчет вершин симплексов при угловой и центральной ориентации.			2					
2. 2. Основные этапы эксперимента Выбор основного уровня и интервала варьирования фактора									

1. Основные этапы эксперимента. Выбор основного уровня и интервала варьирования фактора. Методы отсеивания незначимых факторов. Метод ранжирования факторов.	2							
2. Методы отсеивания незначимых факторов. Метод ранжирования факторов. Выбор основного уровня и интервала варьирования факторов.			4					
3. 3. Регрессионный анализ в приложении к планированию эксперимента.								
1. Регрессионный анализ в приложении к планированию эксперимента.	2							
2. Регрессионный анализ. Расчет дисперсии эксперимента при различных вариантах дублирования эксперимента			2					
3. Расчет коэффициентов регрессии по формулами и по Йейтсу. Проверка правильности расчетов. Оценка значимости коэффициентов регрессии.			2					
4. 4. Полный факторный эксперимент								
1. Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Особенности многофакторного планирования. Формы записи и геометрическое представление планов ПФЭ. Свойства матриц и планов ПФЭ. Приемы построения матриц. Основные эффекты и эффекты взаимодействия факторов. Статистическая обработка результатов ПФЭ. Способ Йейтса для вычисления коэффициентов регрессии. Упрощенные варианты проверки адекватности линейной модели. Интерпретация математической модели. Правила выбора основного уровня и интервала. Варьирования факторов. Рандомизация условий выполнения эксперимента.	3							

<p>2. Полный факторный эксперимент. Построение математической модели с использованием ПФЭ 2к. Проверка ее адекватности стандартным и упрощенными способами.</p>			8					
<p>5. 5. Дробный факторный эксперимент</p>								
<p>1. Дробный факторный эксперимент (ДФЭ). Связь ПФЭ и ДФЭ. Сущность метода дробных реплик. Принципы построения матриц ДФЭ. Генерирующие соотношения и определяющие контрасты. Совместные оценки, условия смешивания, разрушающая способность дробных реплик. Типы дробных реплик. Метод перевала. Использование ДФЭ для устранения влияния временного дрейфа. Статистическая обработка результатов ДФЭ. Алгоритм Йейтса для расчета коэффициентов регрессии. Принятие решений после реализации планов ДФЭ и ПФЭ.</p>	3							
<p>2. Дробный факторный эксперимент. Построение математической модели с использованием ПФЭ 2к-р. Проверка ее адекватности стандартным и упрощенными способами.</p>			8					
<p>6. 6. Способы движения по градиенту</p>								

<p>1. Способы движения по градиенту. Различные метода оптимизации эксперимента: Гаусса-Зайделя, случайного поиска, градиента, симплексный и крутого восхождения. Их принципы, достоинства, недостатки и особенности осуществления Планирование экстремального эксперимента методом крутого восхождения. Алгоритм крутого восхождения, основные расчеты. Правила реализации мысленных опытов. Возможные ситуации при движении по градиенту. Принятие решений после эффективного и неэффективного крутого восхождения.</p>	4							
<p>2. Оптимизация эксперимента методом крутого восхождения. Выбор шага для факторов. Расчет точек КВ. Построение «мысленного» эксперимента. Оценка эффективного крутого восхождения.</p>			8					
<p>7. 7. Исследование почти стационарной области</p>								
<p>1. Исследование почти стационарной области. Планирование второго порядка. Общие представления о планах второго порядка. Критерии оптимальности планов. Ортогональные и ротабельные центральные композиционные планы, их свойства и особенности. Статистическая обработка результатов. Принятие решений по планам второго порядка. Анализ уравнений регрессии, приведение их к канонической форме. Поиск экстремума. Виды поверхностей отклика. Интерпретация результатов.</p>	2							
<p>2. Исследование почти стационарной области. Планы второго порядка. Построение математической модели второго порядка</p>			2					

3. Самостоятельная работа заключается в проработывании и изучении теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции, и решении задач, выдаваемых преподавателем на практических занятиях.							54	
4. По окончании изучения дисциплины студенты сдают письменный экзамен, в который входит два теоретических вопроса и комплексная задача (цикл) ПФЭ + КВ или ДФЭ = КВ.								
Всего	18		36				54	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Microsoft Office Professional Plus 2007.
2. Statistica 6 – система статистического анализа данных, включающая набор аналитических процедур и методов.

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU. Полнотекстовая коллекция «Российские академические журналы on-line» (издательство «Наука») включает 139 журналов. Заключено лицензионное соглашение (до ноября 2021 г.) об использовании ресурсов со свободным доступом с компьютеров университетской сети.- Режим доступа - <http://elibrary.ru/>.
2. Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology. Доступ через сеть Internet по IP адресам СФУ.
3. EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing) – электронные журналы. Всего более 7000 названий журналов, 3,5 тысячи рецензируемых журналов. Доступ через сеть Internet по IP адресам СФУ.
4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг).
5. Royal Society of Chemistry - журналы открытого доступа
6. Elsevier - доступ к Freedom Collection издательства Elsevier. В комплект подписки Freedom Collection издательства Elsevier входят электронные научные полнотекстовые журналы по всем областям науки, техники, медицины, размещенные на платформе ScienceDirect, (23 предметные коллекции), охват более- Режим доступа - 1900 названий журналов. Архив 2010-2014 гг.
7. Электронная химическая энциклопедия – он-лайн - Режим доступа - <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/>.
8. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений.- Режим доступа - <http://chemstat.com.ru/>
9. Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.

10. Электронно-библиотечная система Znaniium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет.
- Режим доступа - <http://znaniium.com/>

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.