

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)

наименование кафедры

Б.Н.Кузнецов

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ
ПЛАНИРОВАНИЕ
ЭКСПЕРИМЕНТА**

Дисциплина Б1.В.01.01 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ
Планирование эксперимента

Направление подготовки /
специальность _____

Направленность
(профиль) _____

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.03.01 Химия профиль подготовки 04.03.01.32 Физическая химия

Программу
составили

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

ПК-1:Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации
--

ПК-3:Способен проектировать и осуществлять направленный синтез полифункциональных соединений и под руководством специалиста более высокой квалификации

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина является базовой. Курсу «Планирование эксперимента» предшествует дисциплины: Аналитическая химия

Математические методы в химии

Математика. Теория вероятностей и математическая статистика

Математические методы в химии

Аналитическая химия

"Планирование эксперимента» является основой для изучения такой дисциплины, как «Химическая технология» и выполнения научно-исследовательской работы (курсовые и выпускная квалификационная работы).

Высокомолекулярные соединения

Преддипломная

Химическая технология

1.5 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)	Семестр
		5
Общая трудоемкость дисциплины	4 (144)	4 (144)
Контактная работа с преподавателем:	1,5 (54)	1,5 (54)
занятия лекционного типа	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	1 (36)	1 (36)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	1,5 (54)	1,5 (54)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Экзамен)	1 (36)	1 (36)

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	1. Введение. Предмет теории эксперимента	2	2	0	0	
2	2. Основные этапы эксперимента Выбор основного уровня и интервала варьирования фактора	2	4	0	0	
3	3. Регрессионный анализ в приложении к планированию эксперимента.	2	4	0	0	
4	4. Полный факторный эксперимент	3	8	0	0	
5	5. Дробный факторный эксперимент	3	8	0	0	
6	6. Способы движения по градиенту	4	8	0	0	
7	7. Исследование почти стационарной области	2	2	0	54	
Всего		18	36	0	54	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	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	0	0
2	2	Основные этапы эксперимента. Выбор основного уровня и интервала варьирования фактора. Методы отсеивания незначимых факторов. Метод ранжирования факторов.	2	1	0
3	3	Регрессионный анализ в приложении к планированию эксперимента.	2	1	0

4	4	<p>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.</p>	3	0	0
---	---	--	---	---	---

5	5	<p>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	1	0
---	---	--	---	---	---

6	6	<p>Способы движения по градиенту.</p> <p>Различные метода оптимизации эксперимента: Гаусса-Зайделя, случайного поиска, градиента, симплексный и крутого восхождения. Их принципы, достоинства, недостатки и особенности осуществления</p> <p>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	0	0
---	---	---	---	---	---

7	7	<p>Исследование почти стационарной области. Планирование второго порядка. Общие представления о планах второго порядка. Критерии оптимальности планов. Ортогональные и ротатбельные 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	1	0
Всего			18	4	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Безградиентные методы оптимизации. Симплексный метод оптимизации. Расчет вершин симплексов при угловой и центральной ориентации.	2	0	0
2	2	Методы отсеивания незначимых факторов. Метод ранжирования факторов. Выбор основного уровня и интервала варьирования факторов.	4	0	0

3	3	Регрессионный анализ. Расчет дисперсии эксперимента при различных вариантах дублирования эксперимента	2	0	0
4	3	Расчет коэффициентов регрессии по формулами и по Йейтсу. Проверка правильности расчетов. Оценка значимости коэффициентов регрессии.	2	0	0
5	4	Полный факторный эксперимент. Построение математической модели с использованием ПФЭ 2к. Проверка ее адекватности стандартным и упрощенными способами.	8	0	0
6	5	Дробный факторный эксперимент. Построение математической модели с использованием ПФЭ 2к-р. Проверка ее адекватности стандартным и упрощенными способами.	8	0	0
7	6	Оптимизация эксперимента методом крутого восхождения. Выбор шага для факторов. Расчет точек КВ. Построение «мысленного» эксперимента. Оценка эффективного крутого восхождения.	8	0	0
8	7	Исследование почти стационарной области. Планы второго порядка. Построение математической модели второго порядка	2	0	0
Итого			26	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№	№	Наименование занятий	Объем в акад. часах
---	---	----------------------	---------------------

п/п	раздела дисциплины		Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU.	http://elibrary.ru
Э2	Nature Publishing Group	
Э3	EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing)	
Э4	Cambridge University Press	
Э5	Royal Society of Chemistry	
Э6	Elsevier	
Э7	Электронная химическая энциклопедия	http://www.xumuk.ru/encyklopedia
Э8	Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений	http://chemstat.com.ru/

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Самостоятельная работа реализуется через изучение теоретического материала по литературе, рекомендуемой лектором после каждой лекции, и решение задач, выдаваемых преподавателем на практических занятиях.

1. Методы оптимизации: электрон. учеб.-метод. комплекс дисциплины / Е. С. Семенкин [и др.] ; Сиб. федерал. ун-т, Ин-т математики и фундаментальной информатики. - Версия 1.0. - Электрон. дан. (PDF ; 3.75 Мб). - Красноярск : ИПК СФУ, 2007.

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

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

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	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/ .
9.2.2	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.
9.2.3	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.
9.2.4	4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг).
9.2.5	5. Royal Society of Chemistry - журналы открытого доступа
9.2.6	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.
9.2.7	7. Электронная химическая энциклопедия – он-лайн - Режим доступа - http://www.xumuk.ru/encyklopedia/ .
9.2.8	8. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений.- Режим доступа - http://chemstat.com.ru/
9.2.9	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.
9.2.10	10. Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет. - Режим доступа - http://znanium.com/

10 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.