

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
Аналитической химии

Селеменев В.Ф.

15.06.2018 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.04 Основы планирования и оптимизации эксперимента

Код и наименование дисциплины в соответствии с Учебным планом

1. Шифр и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализации:

Аналитическая химия

3. Квалификация (степень) выпускника:

магистр

4. Форма обучения:

очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:

1002 аналитической химии

6. Составители программы: Паршина Анна Валерьевна, д.х.н.

(ФИО, ученая степень, ученое звание)

7. Рекомендована: НМС химического факультета № 5 от 24.05.2018

(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2019 / 2020 **Семестр:** 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Цель: формирование знаний по планированию и оптимизации многофакторного физико-химического эксперимента для извлечения наиболее важной информации об исследуемых физико-химических процессах и явлениях

Задачи:

1. осуществлять грамотно спланированный эксперимент в соответствии с заданной целью и сформулированными задачами;
2. интерпретировать и оптимизировать результаты эксперимента в рамках многомерных математических моделей.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: (блок Б1, базовая или вариативная часть, к которой относится дисциплина; требования к входным знаниям, умениям и навыкам; дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей)

Б1.В. Вариативная часть.

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: базовые знания фундаментальных разделов физики, физической и аналитической химии, навыки практической работы в области физики и химии, владение математическим аппаратом и основами информатики в объеме, необходимом для освоения теории вероятностей, математической статистики, многомерных математических методов.

Дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей: Химические методы анализа в криминалистике, Экоаналитическая химия, Компьютерные технологии в науке и образовании.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-2	Владение современными компьютерными технологиями планировании исследований, получение и обработка результатов научных экспериментов, сбор, обработка, хранение, представления в передаче научной информации	знать: основные математические функции, используемые в компьютерных программах математических и статистических методов применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента; уметь: составлять и применять математические алгоритмы многомерного анализа в основных компьютерных программах математических и статистических методов для решения задач аналитической химии, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации; владеть: основными компьютерными программами математических и статистических методов.
ПК-1	Способность проводить научные	знать: основы теории вероятности и математической

	исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования получать новые научные и прикладные результаты	статистики применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации; уметь: применять схемы полного факторного эксперимента при планировании исследований по теме магистерской диссертации; владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.
ПК-2	Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	знать: основы основные подходы к планированию и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации; уметь: применять математические алгоритмы планирования и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации; владеть: приемами хемометрики для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.
ПК-3	Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	знать: основные метрологические аспекты выполнения физико-химического эксперимента; уметь: обеспечить единство измерений и оценить показатели точности определения значений измеряемой величины при выполнении исследований по теме магистерской диссертации; владеть: основными приемами градуировки и оценки метрологических характеристик средств измерения.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 7 / 252

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) Экзамен.

13 Виды учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	По семестрам

		3 семестр	№ семестра	...
Аудиторные занятия	36	36		
в том числе: лекции	-	-		
практические	18	18		
лабораторные	18	18		
Самостоятельная работа	180	180		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – ___ час.)	экзамен	36		
Итого:	252	252		

13.1 Содержание разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Практические занятия		
1.1	Введение	Основные понятия математического планирования и оптимизации эксперимента. Факторы, параметры оптимизации. Модели. Реализация эксперимента.
1.2	Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.	Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента. Дисперсия воспроизводимости, дисперсия адекватности. Оценка значимости расчетных коэффициентов в уравнениях.
1.3	Корреляционный и регрессионный анализ применительно к задачам планирования и оптимизации физико-химического эксперимента.	Корреляционный и регрессионный анализ применительно к задачам планирования и оптимизации физико-химического эксперимента. Коэффициент корреляции, оценка значимости. Регрессионный анализ. Доверительные границы линии регрессии. Расчет значений доверительного интервала независимой переменной по данным регрессионной зависимости.
1.4	Дисперсионный анализ.	Планирование экспериментов при многофакторном дисперсионном анализе. Полноблочные и неполноблочные схемы. Латинские квадраты и кубы. Гиперлатинские квадраты. Элементы комбинаторики
1.5	Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент.	Выбор факторов, их уровней, интервалов варьирования. Планирование и реализация опытов. Рандомизация опытов. Математическая модель, получение и оценка параметров, проверка ее адекватности. Интерпретация результатов. Элементы теории оптимизации. Метод крутого восхождения Бокса-Уилсона. Симплекс метод.
1.6	Планирование эксперимента с независимыми количественными факторами.	Выделение существенных переменных многокомпонентных систем. Планирование эксперимента с качественными факторами. Многофакторные эксперименты, их особенности. Применение неполноблочных схем в планировании эксперимента для исследования качественных факторов.
1.7	Оптимизация эксперимента. Различные подходы к оптимизации.	Поверхность отклика. Метод крутого восхождения по поверхности отклика. Изучение области, близкой к экстремуму. Композиционные планы Бокса-Уилсона. Ротационные планы второго порядка. Бокса-Хантера. Критерии оптимальности планов.
2. Лабораторные работы		
2.1	Тема доклада №1	Метод главных компонент. Применение в аналитической химии.
2.2	Тема доклада №2	Метод регрессии на латентные структуры. Применение в аналитической химии.
2.3	Тема доклада №3	Метод регрессии на главные компоненты. Применение в аналитической химии.
2.4	Тема доклада №4	Кластерный анализ. Применение в аналитической химии.

2.5	Тема доклада №5	Непараметрические методы анализа. Применение в аналитической химии.
-----	-----------------	---

13.2 Разделы дисциплины и виды занятий:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)					Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Контроль	
1	Введение	0	0	0	0	0	0
2	Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.	0	3	3	30	4	40
3	Корреляционный и регрессионный анализ применительно к задачам планирования и оптимизации физико-химического эксперимента.	0	3	3	30	5	41
4	Дисперсионный анализ.	0	3	3	30	7	43
5	Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент.	0	3	3	30	7	43
6	Планирование эксперимента с независимыми количественными факторами.	0	3	3	30	7	43
7	Оптимизация эксперимента. Различные подходы к оптимизации.	0	3	3	30	6	42
Итого:		0	18	18	180	36	252

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Аналитическая химия: в 3 т./ под. ред. Л.Н. Москвина. – Т.3: Химический анализ. – М., 2010. – 368 с.
2	Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии / А.Н. Смагунова, О.М. Карпукова. – Учеб. пособие. — Ростов н/Д: Феникс, 2012. — 346 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Систематические и случайные погрешности химического анализа / М.С. Черновьянц [ред] – М.: Академкнига, 2004. – 156 с., ил.
3	Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман. – М.: Высш. шк., 2010. – 478 с.

4	<i>Дёрффель К. Статистика в аналитической химии / К. Дерффель. – М. : Мир, 1994. – 267 с.</i>
5	<i>Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа / А.К. Чарыков. – Л. : Химия, 1984. – 165 с.</i>
6	<i>Вентцель Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель. – М. : Высш. шк., 1998. – 575 с.</i>
7	<i>Основы аналитической химии : в 2-х кн. / Ю.А. Золотов [и др.]. – М., 1999. – Кн. 1 : Общие вопросы. – С. 21-57.</i>
8	<i>Вершинин В.И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента / В.И. Вершинин. – Омск : ОмГУ, 2005. – 263 с.</i>
9	<i>Шараф М.А. Хемометрика / М.А. Шараф, Д.Л. Илмэн, Б.Р. Ковальски. – Л. : Химия, 1989. – 269 с.</i>
10	<i>Ахназарова С.Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. – М. : Высш. шк., 1985. – 327 с.</i>
11	<i>Адлер Ю.П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий/ Ю.П.Адлер, Е.В.Маркова, Ю.В.Грановский – М. : Наука, 1976. – 279 с.</i>
12	<i>Пикула Н.П. Метрологическое обеспечение и контроль качества химического анализа / Н.П. Пикула, А.А. Бакибаев, Г.Б. Слепченко – Томск: ТПУ, 2012. - 216 с. (Учебное пособие)</i>
13	<i>Гармаш А.В. Метрологические основы аналитической химии / Н.М. Сорокина, А.В. Гармаш – Москва: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012. - 47 с. (Учебное пособие).</i>

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет):

№ п/п	Источник
8	http://www.anchem.ru/
9	http://www.chemweb.com
10	www.lib.vsu.ru/
11	http://www.chem.vsu.ru/sorbcr/

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	<i>Бобрешова О.В., Паршина А.В. Основы анализа многомерных данных: методические указания к семинарским занятиям / О.В. Бобрешова, А.В.Паршина. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2009. - 25 с.</i>
2	<i>Бобрешова О.В., Паршина А.В. Основы химической метрологии и хемометрики: методические указания к семинарским занятиям / О.В. Бобрешова, А.В.Паршина. - Воронеж: Изд-во ВГУ, 2007. - 15 с.</i>

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости):

- ноутбук;
- мультимедийный проектор EPSON.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

- (при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)
- ноутбук.

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины)	ФОС* (средства)
---	---	--	-----------------

	компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	или модуля и их наименование)	оценивания)
<p>ОПК-2 Владение современными компьютерными технологиями планировании исследований, получение и обработка результатов научных экспериментов, сбор, обработка, хранение, представления в передаче научной информации</p>	<p>знать: основные математические функции, используемые в компьютерных программах математических и статистических методов применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента.</p>	<p>Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.</p>	<p>Устный опрос</p>
	<p>уметь: составлять и применять математические алгоритмы многомерного анализа в основных компьютерных программах математических и статистических методов для решения задач аналитической химии, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>	<p>Корреляционный и регрессионный анализ применительно к задачам планирования и оптимизации физико-химического эксперимента; дисперсионный анализ.</p>	<p>Практические задания № 1-6</p>
	<p>владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для построения или отбора оптимальных условий эксперимента.</p>	<p>Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент; планирование эксперимента независимыми количественными факторами; оптимизация эксперимента; различные подходы к оптимизации.</p>	<p>Устный опрос, рефераты 1-5</p>
<p>ПК-1 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования получать новые научные и прикладные результаты</p>	<p>знать: основы теории вероятности и математической статистики применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>	<p>Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.</p>	<p>Устный опрос</p>
	<p>уметь: применять схемы полного факторного эксперимента при планировании исследований по теме магистерской диссертации.</p>	<p>Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент; планирование эксперимента независимыми количественными факторами; оптимизация эксперимента; различные подходы к оптимизации.</p>	<p>Устный опрос, рефераты 1-5</p>

	<p>владеть: теоретическими основами математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>	<p>Корреляционный и регрессионный анализ применительно к задачам планирования и оптимизации физико-химического эксперимента; дисперсионный анализ.</p>	<p>Практические задания № 1-6</p>
<p>ПК-2 Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p>	<p>знать: основы основные подходы к планированию и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>	<p>Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент; планирование эксперимента независимыми количественными факторами; оптимизация эксперимента; различные подходы к оптимизации.</p>	<p>Устный опрос, рефераты 1-5</p>
	<p>уметь: применять математические алгоритмы планирования и оптимизации физико-химического эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>	<p>Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент; планирование эксперимента независимыми количественными факторами; оптимизация эксперимента; различные подходы к оптимизации.</p>	<p>Устный опрос, рефераты 1-5</p>
	<p>владеть: приемами хемометрики для построения или отбора оптимальных условий эксперимента, в том числе в соответствии с темой магистерской диссертации.</p>	<p>Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент; планирование эксперимента независимыми количественными факторами; оптимизация эксперимента; различные подходы к оптимизации.</p>	<p>Устный опрос, рефераты 1-5</p>

ПК-3 Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	знать: основные метрологические аспекты выполнения физико-химического эксперимента.	Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.	Устный опрос
	уметь: обеспечить единство измерений и оценить показатели точности определения значений измеряемой величины при выполнении исследований по теме магистерской диссертации.	Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.	Устный опрос
	владеть: основными приемами градуировки и оценки метрологических характеристик средств измерения.	Основы математической статистики применительно к процессу планирования физико-химического эксперимента.	Устный опрос
Промежуточная аттестация			Комплект КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач, что соответствует полному освоению компетенций.	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, применять теоретические знания для решения практических задач, допускает незначительные ошибки, неточности, которые исправлены после замечания преподавателя, что соответствует не достаточно полному освоению компетенций.	Базовый уровень	Хорошо
Ответ на контрольно-измерительный материал неполный, без обоснований, объяснений. Демонстрирует частичные знания учебного материала, значительные затруднения в вопросах решения практических задач, что показывает недостаточное владение компетенциями. Ошибки устраняются по дополнительным вопросам преподавателя	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Ответ на контрольно-измерительный фрагментарный. Обучающийся демонстрирует несистематические, отрывочные знания, допускает грубые, принципиальные ошибки, которые не устранены после дополнительных наводящих вопросов, что соответствует не освоению компетенций.	–	Неудовлетворительно

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к экзамену:

1. Статистическая модель. Факторы и параметры эксперимента. Принципы планирования многофакторного эксперимента.
2. Факторы в хемометрическом анализе, параметры в хемометрическом анализе. Алгоритм корреляционного анализа.
3. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа. Применение в аналитической химии.
4. Алгоритм однофакторного регрессионного анализа для ортогональных схем эксперимента.
5. Алгоритм многофакторного регрессионного анализа для ортогональных схем эксперимента.
6. Алгоритм регрессионного анализа для неортогональных схем эксперимента.
7. Условия применения дисперсионного анализа. Применение в аналитической химии.
8. Алгоритм однофакторного дисперсионного анализа.
9. Алгоритм двухфакторного дисперсионного анализа.
10. Условия и основные принципы применения непараметрических методов обработки данных.
11. Алгоритм однофакторного непараметрического анализа.
12. Алгоритм двухфакторного непараметрического анализа.
13. Факторное математическое планирование. Полный и дробный факторный эксперимент.
14. Факторное математическое планирование. Планирование эксперимента с независимыми количественными факторами.
15. Оптимизация эксперимента, различные подходы к оптимизации.

19.3.2 Перечень практических заданий:

Практическое задание №1.

Выявить взаимосвязанные параметры и факторы среди пар признаков исследуемого объекта, на примере потенциометрического анализа растворов витаминов.

Практическое задание №2.

Найти градуировочное уравнение потенциометрического сенсора в растворах двух витаминов для ортогональной схемы эксперимента методом регрессионного анализа.

Практическое задание №3.

Найти градуировочное уравнение потенциометрического сенсора в растворах двух витаминов для неортогональной схемы эксперимента методом регрессионного анализа.

Практическое задание №4.

Оценить влияние вида галоидного алкила на процесс полимеризации методом однофакторного дисперсионного анализа.

Практическое задание №5.

Методом двухфакторного дисперсионного анализа из шести ингибиторов коррозии выбрать лучший (или доказать их одинаковую эффективность) а также сопоставить работу разных лабораторий, в которых проводились испытания данных ингибиторов.

Практическое задание №6.

Из шести ингибиторов коррозии выбрать лучший (или доказать их одинаковую эффективность) а также сопоставить работу разных лабораторий, в которых проводились испытания данных ингибиторов, если характер распределения результатов эксперимента неизвестен.

19.3.3. Темы рефератов:

1. Метод главных компонент. Применение в аналитической химии.
2. Метод регрессии на латентные структуры. Применение в аналитической химии.
3. Метод регрессии на главные компоненты. Применение в аналитической химии.
4. Кластерный анализ. Применение в аналитической химии.
5. Непараметрические методы анализа. Применение в аналитической химии.

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме письменных работ (контрольные и практические работы). Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя практические задания, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.