

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Костромской государственный университет»
(КГУ)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ
ИССЛЕДОВАНИЯ**

Направление подготовки 04.03.01 Химия

Направленность Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

**Кострома
2023**

Рабочая программа дисциплины «Планирование эксперимента и обработка результатов исследования» разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденному приказом МИНОБРНАУКИ РОССИИ от 17 июля 2017 г. № 671.

Разработал: Кусманов Сергей Александрович, директор ИФМЕН, д-р. техн. наук, доцент

Рецензент: Хитрова Валентина Ивановна, заместитель директора ФГБУ государственная станция агрохимической службы «Костромская», руководитель испытательной лаборатории, канд. с.-х. наук

ПРОГРАММА УТВЕРЖДЕНА:

На заседании кафедры химии:

Протокол заседания кафедры № 8 от 07.04.2023 г.

Заведующий кафедрой химии Кусманова Ирина Александровна, канд.пед.наук, доцент

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цель дисциплины: формирование готовности использовать математический аппарат для осуществления научно-исследовательской деятельности.

Задачи дисциплины:

- сформировать представления о способах планирования эксперимента и обработки экспериментальных данных;
- сформировать готовность осуществлять планирование эксперимента и обработку результатов исследования.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен освоить *компетенции:*

ПК-3: *Способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований*

ПК-3.2. Осуществляет сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований в соответствующей области знаний

ПК-3.3. Подготавливает предложения для составления планов и методических программ исследований и разработок, практических рекомендаций по исполнению их результатов

ПК-4: *Способен выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок*

ПК-4.1. Проводит эксперименты в соответствии с установленными полномочиями

ПК-4.2. Проводит наблюдения и измерения, составляет их описание и формулирует выводы

ПК-4.3. Составляет отчеты (разделы отчетов) по теме или по результатам проведенных экспериментов

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

- способы математической обработки экспериментальных данных;
- способы математического планирования эксперимента.

уметь:

- осуществлять обработку результатов экспериментов и исследований;
- подготавливать предложения для составления планов исследований с использованием методов математического планирования;
- применять математическую обработку и планирование эксперимента в составлении отчетов по результатам проведенных экспериментов.

владеть:

- навыками обработки результатов научных экспериментов с помощью математического аппарата;
- навыками составления планов научных исследований с использованием методов математического планирования.

Направление воспитания, связанные с содержанием дисциплины: профессионально-трудовое и научно-образовательное воспитание обучающихся посредством содержания дисциплины и актуальных воспитательных технологий.

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Дисциплина «Планирование эксперимента и обработка результатов исследования» относится к части учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Изучается в 4 семестре обучения.

Изучение дисциплины является основой для освоения последующих дисциплин/практик: «Методология научного исследования»; при выполнении научно-

исследовательской работы; при прохождении преддипломной практики.

Дисциплины и иные компоненты ОП, формирующие указанные выше компетенции:

- ПК-3 (способен проводить работы по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований) формируется при освоении дисциплин: «Планирование эксперимента и обработка результатов исследования»; «Методология научного исследования»; при выполнении научно-исследовательской работы; при прохождении преддипломной практики; при подготовке к процедуре защиты и во время процедуры защиты выпускной квалификационной работы.

- ПК-4 (способен выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок) формируется при освоении дисциплин: «Планирование эксперимента и обработка результатов исследования»; «Методология научного исследования»; при выполнении научно-исследовательской работы; при прохождении преддипломной практики; при подготовке к процедуре защиты и во время процедуры защиты выпускной квалификационной работы.

4. Объем дисциплины (модуля)

4.1. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием академических часов и виды учебной работы

Виды учебной работы	Очная форма
Общая трудоемкость в зачетных единицах	3
Общая трудоемкость в часах	108
Аудиторные занятия в часах, в том числе:	70
Лекции	16
Практические занятия	54
Лабораторные занятия	-
Практическая подготовка	6
Самостоятельная работа в часах	37,75
Форма промежуточной аттестации	Зачет в 4 семестре (0,25)

4.2. Объем контактной работы на 1 обучающегося

Виды учебных занятий	Очная форма
Лекции	16
Практические занятия	54
Лабораторные занятия	-
Консультации	-
Зачет (4 семестр)	-
Курсовая работа	-
Всего	70,25

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием количества часов и видов занятий

5.1 Тематический план учебной дисциплины

№ п/п	Название раздела, темы	Всего з.е/час	Аудиторные занятия		Самостоятельная работа
			Лекции	Практические	
1	Планирование эксперимента и подготовка к нему	1,28/46	6	24	16
2	Математическая обработка экспериментальных данных	1,713/61,75	10	30	21,75

ИКР (зачет)	0,007/0,25	-	-	-
Итого:	3/108	16	54	37,75

5.2. Содержание

Планирование эксперимента и подготовка к нему. Подготовка к эксперименту. Выбор факторов: контролируемость, регулируемость, точность задания, степень значимости. Отсевание незначимых факторов. Факторы в типичных химических исследованиях. Параметры оптимизации и требования к ним. Классификация параметров и примеры в химических исследованиях. Схемы решения многопараметрических задач (ограничения главного параметра, штрафные функции, обобщенные параметры). Функции Харрингтона. Планирование традиционного эксперимента при поочередном варьировании факторов.

Метрологические аспекты эксперимента. Способы оценки погрешности измерений в ходе планирования эксперимента. Выбор измерительной аппаратуры и способы ее поверки. Априорная оценка погрешности измерения параметров по известным погрешностям измерения факторов.

Планирование ПФЭ вида 2^k : сбор априорной информации, выбор области эксперимента, выбор центра плана, интервалов варьирования, уровней. Кодирование и раскодирование переменных. Построение нормированной ортогональной матрицы для эксперимента. Рандомизация. Проблема кратности измерений. Реплики.

Математическая обработка экспериментальных данных. Результат эксперимента как случайная величина. Погрешности измерений и погрешности пробоотбора. Варианты, их совокупности и выборки. Объем и размах совокупностей. Проблема репрезентативности выборки, закон больших чисел. Распределение результатов измерений в генеральной совокупности и в выборке. Заселенность (частота). Построение гистограмм и полигонов. Свойства реальных гистограмм (униmodalность, асимптотичность, симметрия). Статистические распределения вариант и проверка характера распределения с помощью выборочных параметров.

Выборочные параметры. Характеристики центра рассеяния и степени рассеяния вариант в выборке. Первичная обработка данных: запись результатов измерений с учетом цены деления, стабильности работы прибора и других факторов. Правила приближенных вычислений. Проверка наличия дрейфа. Определение характера распределения результатов измерений по выборочным параметрам. Проверка экспериментальных данных на внутреннюю однородность. Функции распределения и их связь с гистограммами. Вероятностная интерпретация гистограммы.

Обработка результатов эксперимента при нормальном распределении вариант. Понятие о нормальном распределении. Причины распространенности нормального распределения. Проверка экспериментальных данных на соответствие нормальному распределению по асимметрии и эксцессу. Другие способы проверки. Математическое описание нормального распределения. Функция Гаусса. Нормированное нормальное распределение. Вероятность попадания результата измерения в заданный интервал, ее расчет с помощью функций Лапласа. Геометрическое истолкование функции Лапласа. Прикладные задачи, решаемые химиками с применением функций Лапласа. Понятие о доверительном интервале. Расчет доверительных интервалов при известной воспроизводимости метода (через функции Лапласа). Влияние числа измерений на ширину доверительного интервала. Связь достоверности, кратности и точности измерений. Проверка значимости систематических погрешностей, проверка совместимости вариант и другие приемы обработки данных при нормальном распределении данных и известной воспроизводимости метода. Правило трех сигм.

Методы микростатистики. Распределение Стьюдента. Влияние объема выборки на

параметры t -распределения. Геометрическая модель. Нормированное распределение Стьюдента. Расчет интервалов варьирования. Расчет доверительных интервалов при неизвестной воспроизводимости метода. Вероятность попадания среднего арифметического в заданный интервал значений. Правила отбраковки промахов при нормальном распределении. Оценка параметров совокупности по выборочным параметрам.

Статистические гипотезы. Понятие статистической гипотезы. Нуль-гипотезы и альтернативы. Подход к выбору нуль-гипотезы в химических исследованиях. Общий алгоритм статистической проверки гипотез. Понятие о параметрических и непараметрических критериях проверки гипотез. Уровни значимости нуль-гипотезы для ошибок первого и второго рода. Параметрические критерии сравнения одномерных выборок. Сравнение выборок по воспроизводимости. Критерии Фишера, Кохрена, Бартлета. Важнейшие случаи сравнения серий экспериментальных данных в химических исследованиях. Сравнение средних по Стьюденту. Критерий соответствия Пирсона («хи-квадрат»).

Понятие о дисперсионном анализе. Однофакторный дисперсионный анализ с одинаковым и неодинаковым объемом сопоставляемых выборок. Двухфакторный дисперсионный анализ с применением параметрических критериев. Примеры применения дисперсионного анализа в химических исследованиях.

Понятие о корреляционном анализе. Двумерные и многомерные совокупности. Независимость варьирующих признаков, их закоррелированность и функциональная связь. Примеры корреляций в быту, технике и науке. Геометрическое представление корреляции. Прямая и обратная корреляция. Виды корреляций. Физический смысл и расчет коэффициента линейной корреляции. Кодирование переменных. Статистическая проверка гипотезы о закоррелированности сопоставляемых величин.

Понятие о непараметрических критериях. Критерий знаков. Критерий Вилкоксона-Манна-Уитни. Критерий Краскела-Уоллиса. Проверка влияния фактора на характер распределения значений параметра. Непараметрические критерии выявления грубых промахов. Непараметрические аналоги дисперсионного и корреляционного анализа.

Основные задачи и понятия регрессионного анализа. Важнейшие полиномы и выбор полинома в конкретном исследовании. Линеаризация. Минимальный объем эксперимента для нахождения уравнения регрессии. Условия применимости классического алгоритма регрессионного анализа, обработка данных при невыполнении этих условий. Понятие о методе наименьших квадратов. Расчет коэффициентов регрессии в однофакторном эксперименте. Оптимальный план однофакторного эксперимента.

Многофакторные регрессии. Расчет коэффициентов многофакторной регрессии для ортогональных экспериментов. Проверка значимости коэффициентов регрессии. Дисперсии воспроизводимости и адекватности. Способы проверки адекватности найденной регрессии. Возможные причины неадекватности модели и дальнейшие действия исследователя. Особенности расчета регрессии после проведения ПФЭ вида 2^k . Пакеты прикладных программ для обработки экспериментальных данных. Использование модели для прикладных расчетов. Интерполяционные формулы. Интерпретация модели (оценка независимости факторов, возможность сравнения факторов по значимости и т.п.). Оптимизационные задачи. Метод Бокса-Уильсона. Понятие о движении по градиенту. Выбор величины шага по каждому из факторов. Мысленный эксперимент. Возможные причины прекращения движения по градиенту. Исследования в квазистационарной области. Планы высших порядков. Понятие о симплексной оптимизации.

5.3. Практическая подготовка

Код, направление, направленность	Наименование дисциплины	Количество часов дисциплины, реализуемых в форме практической подготовки				
04.03.01 Химия, Химия	Планирование эксперимента и обработка результатов исследования	Всего	семестр 4			
			лекции	Пр.занятия	лаб.занятия	с/р
		6	0	6	0	0

Код компетенции	Индикатор компетенции	Содержание задания на практическую подготовку по выбранному виду деятельности	Число часов практической подготовки				
			Всего	лекции	Пр.занятия	лаб.занятия	с/р
ПК-3	ПК-3.2, 3.3	Планирование полного факторного эксперимента вида 2к: построение матрицы эксперимента, проблема кратности измерений, рандомизация.	2	-	2	-	-
ПК-3	ПК-4.3	Составить эмпирическую функцию распределения и построить график.	2	-	2	-	-
ПК-4	ПК-3.2, 4.3	Применение метода наименьших квадратов для обработки данных однофакторного и многофакторных экспериментов. Условие ортогональности. Расчет коэффициентов регрессии по методу МНК. Регрессионный анализ при обработке данных ПФЭ вида 2к.	2	-	2	-	-
Итого			6	-	6	-	-

6. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

6.1. Самостоятельная работа обучающихся по дисциплине (модулю)

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Задание	Часы	Методические рекомендации по выполнению	Форма контроля

				задания	
1	Планирование эксперимента и подготовка к нему	Проработка лекционного материала	8	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Планирование эксперимента	8	Проведение планирования эксперимента по своей научной работе	Защита результатов планирования
2	Математическая обработка экспериментальных данных	Проработка лекционного материала	8	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Обработка экспериментальных данных	13,75	Проведение математической обработки результатов собственных исследований	Защита результатов обработки экспериментальных данных

6.2. Тематика и задания для практических занятий

Семинар 2-8. Планирование эксперимента и подготовка к нему.

Осуществление планирования эксперимента по заданиям преподавателя.

1. Построение эмпирической модели первого порядка методом планирования эксперимента

2. Построение эмпирической модели с использованием дробного факторного эксперимента.

3. Построение эмпирической модели второго порядка.

4. Оптимизация параметров объекта исследования методом крутого восхождения.

Задание 1. Составить план эксперимента.

Задание 2. Провести эксперимент (получить данные у преподавателя), во всех точках факторного пространства повторив 5 раз опыты во всех точках факторного пространства (найти значения функции отклика Y).

Задание 3. Проверить однородность дисперсии по критерию Кохрена.

Задание 4. Найти коэффициенты уравнения регрессии.

Задание 5. С помощью критерия Стьюдента оценить значимость коэффициентов регрессии.

Семинар 9-18. Математическая обработка экспериментальных данных.

Осуществление обработки результатов эксперимента по заданиям преподавателя.

Задание 1. Построить интервальный вариационный ряд распределения.

Задание 2. Построить гистограмму частот интервального вариационного ряда.

Задание 3. Составить эмпирическую функцию распределения и построить график.

Задание 4. Рассчитать основные числовые характеристики вариационного ряда: моду и медиану; условные начальные моменты; выборочную среднюю; выборочную дисперсию, исправленную дисперсию генеральной совокупности, исправленное среднее квадратичное отклонение; коэффициент вариации; асимметрию; эксцесс.

Задание 5. Определить границы истинных значений числовых характеристик, изучаемой случайной величины с заданной надежностью.

Задание 6. Содержательная интерпретация результатов первичной обработки по условию задачи.

6.3. Тематика и задания для лабораторных занятий

Не предусмотрено

6.4. Методические рекомендации для выполнения курсовых работ (проектов)

Не предусмотрено

7. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная

1. Кулагина, Т.А. Планирование и техника эксперимента : учебное пособие / Т.А. Кулагина, О.П. Стебелева ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Сибирский Федеральный университет. - Красноярск : СФУ, 2017. - 56 с. : ил. - Библиогр. в кн. ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=497277>
2. Моисеев, Н.Г. Теория планирования и обработки эксперимента : учебное пособие / Н.Г. Моисеев, Ю.В. Захаров ; Поволжский государственный технологический университет. - Йошкар-Ола : ПГТУ, 2018. - 124 с. : ил. - Библиогр.: с. 121 - ISBN 978-5-8158-2010-4 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=494313> (08.05.2019)
3. Шурыгина, Л.И. Методы оптимизации химического эксперимента : учебное пособие / Л.И. Шурыгина, Э.П. Суровой. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2011. - Ч. II. Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента. - 67 с. - ISBN 978-5-8353-1171-2 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232735> (08.05.2019).

Дополнительная литература

1. Бондарь, Алла Григорьевна. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии : Алгоритмы и прим.: учеб. пособие для вузов. - Киев : Вища шк., 1980. - 263 с.: ил. - ЕН, ОПД, СД, ДС. - 0.70.
2. Адлер, Юрий Павлович. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий : Программир. введение в планирование эксперимента. - Москва : Наука, 1971. - 283 с. - ОПД. - 1.09.
3. Саутин, Станислав Николаевич. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. - Л. : Химия, 1975. - 48 с. - ОПД. - 0.16.
4. Спиридонов, Александр Александрович. Планирование эксперимента при исследовании технологических процессов. - Москва : Машиностроение, 1981. - 184 с.: ил. - ОПД, СД. - 0.60.
5. Ткалич, Олег Борисович. Планирование эксперимента в организации научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ : учеб. пособие. - Л. : ЛПИ, 1985. - 76 с. - ЕН. - 0.20.
7. Мусин, Ильгиз Азданович. Планирование эксперимента при моделировании погрешности средств измерений. - Москва : Изд-во стандартов, 1989. - 137 с.: ил. - ОПД, СД. - ISBN 5-7050-0023-5 : 0.65.
8. Монтгомери, Дуглас К. Планирование эксперимента и анализ данных : Сокр. пер. с англ. - Ленинград : Судостроение, 1980. - 383 с.: ил. - ОПД. - 3.20.
9. Сафин, Р.Г. Основы научных исследований. Организация и планирование эксперимента : учебное пособие / Р.Г. Сафин, Н.Ф. Тимербаев, А.И. Иванов ; Министерство образования и науки России, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет». - Казань : Издательство КНИТУ, 2013. - 154 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-7882-1412-2 ; То же [Электронный ресурс]. -

URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=270277> (08.05.2019).

10. Боярский, М.В. Планирование и организация эксперимента : учебное пособие / М.В. Боярский, Э.А. Анисимов ; Поволжский государственный технологический университет. - Йошкар-Ола : ПГТУ, 2015. - 168 с. : ил., схем., табл. - Библиогр.: с. 145-146 - ISBN 978-5-8158-1472-1 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=437056> (08.05.2019).

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Электронно-библиотечные системы:

- ЭБС Университетская библиотека онлайн, путь доступа <http://biblioclub.ru>;
- ЭБС «Znanium», путь доступа <http://znanium.com/>.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

- Web of Science, путь доступа: <http://webofscience.com>;
- Scopus, путь доступа: <https://www.scopus.com>;
- РИНЦ, путь доступа: <https://elibrary.ru>;
- СПС КонсультантПлюс;
- ФГБУ «Президентская библиотека имени Б.Н. Ельцина»;
- Аннотированная библиографическая база данных журнальных статей MAPC.

9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
Аудитория для занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; мультимедийный проектор; рабочее место преподавателя, оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; экран переносной; доска меловая; учебно-наглядные пособия, обеспечивающие наглядные иллюстрации; наборы демонстрационного оборудования	Windows XP по лицензии OEM Software (поставщик ООО «Системный интегратор», договор № 22 ГК от 16.12.2016 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Аудитория для занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; рабочее место преподавателя; учебно-наглядные пособия, обеспечивающие наглядные иллюстрации; мультимедийный проектор; ноутбук; доска меловая	Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Помещение для самостоятельной работы обучающихся	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; демонстрационная LCD-панель; принтеры, в т.ч. большеформатный и цветной; сканеры (форматы А2 и А4); web-камеры; микрофоны	Windows XP по лицензии OEM Software (поставщик ООО «Системный интегратор», договор № 22 ГК от 16.12.2016 г.); АИБС «Марк-SQL» (поставщик НПО «Информ-система», договор № 260420060420 от 26.04.2006 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)

<p>Помещение для самостоятельной работы обучающихся</p>	<p>Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; доска меловая</p>	<p>Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)</p>
---	--	--

Лист актуализации рабочей программы дисциплины

В рабочую программу дисциплины внесены следующие изменения:

1. обновлен перечень лицензионного программного обеспечения;
2. обновлен перечень основной и дополнительной литературы;
3. внесены изменения о практической подготовке.