

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета
Белорусского государственного университета

_____ Д.В. Свиридов

(дата утверждения)

Регистрационный № УД-_____/баз.

ТЕОРИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

**Учебная программа для специальности
1-31 05 01 Химия**

Направления специальности:

1-31 05 01-01 научно-производственная деятельность

2011 г

СОСТАВИТЕЛЬ:

А. В. Блохин, профессор кафедры физической химии Белорусского государственного университета, доктор химических наук, доцент

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

Н.Н. Горошко, доцент кафедры неорганической химии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;

Е. В. Павлечко, доцент кафедры электрохимии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии Белорусского государственного университета (протокол № ____ от ____);

Учебно-методической комиссией химического факультета Белорусского государственного университета

(протокол № ____ от ____);

Ответственный за редакцию: А.В. Блохин

Ответственный за выпуск: А.В. Блохин

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Специальный курс «Теория эксперимента» предназначен для студентов 3-го курса химического факультета по специальности 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)» специализации «Физическая химия» и «Химия твердого тела и полупроводников».

Цель курса: изучение основ современных методологических подходов к постановке, проведению и обработке результатов физико-химических исследований; изучение математических методов, применяемых при планировании и оптимизации эксперимента.

Задачей большинства физико-химических экспериментов является количественное изучение свойств веществ. Это изучение проводится путем измерения физической величины, характеризующей интересующее экспериментатора свойство, измерительным прибором с последующей обработкой полученных данных. Какова бы ни была конструкция прибора и степень его надежность, экспериментальные данные всегда содержат погрешности. Поэтому чтобы критически относиться к полученным данным, необходимо уметь количественно оценивать погрешности результатов измерений. Более того, в настоящее время огромное внимание уделяется методам оптимизации экспериментальных исследований, интерес к которым обусловлен как широкими масштабами опытных работ, так и значительным экономическим эффектом от оптимальной организации научных экспериментов.

В настоящее время ни одна область точных наук, использующих данные эксперимента, не может обойтись без применения математических методов обработки опытных данных. Однако студенты химического факультета недостаточно полно знакомятся в академических курсах, на семинарах и в практикумах с существующими методами обработки получаемых ими данных и правилами проведения расчетов. Поэтому возникает необходимость в чтении специального курса, в котором кратко и просто, но все же достаточно строго излагались бы основы математической статистики, теория ошибок, регрессионный анализ и основы численного анализа, методы планирования эксперимента, причем примеры были бы построены на основе типичных задач физико-химического практикума, результатов выполнения курсовых и дипломных работ студентами, результатов научных исследований преподавателей и сотрудников химического факультета.

Специальный курс «Теория эксперимента» является теоретической и методологической основой для всех последующих специальных курсов специализаций «Физическая химия» и «Химия твердого тела и полупроводников» и крайне необходим студентам 4-го и 5-го курсов для качественного проведения научных исследований и грамотного оформления результатов, полученных при выполнении курсовых и дипломных работ.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

№ п/п	Наименование разделов	Количество часов				
		Аудиторные				Самостоят. работа
		Лекции	Практ. занятия	Лаб. занятия	КСР	
1	Основные характеристики случайных величин.	6	2	–	1	3
2	Определение параметров функции распределения.	10	6	–	1	5
3	Методы корреляционного и регрессионного анализов.	4	4	–	1	5
4	Дисперсионный анализ.	2	–	–	–	3
5	Методы планирования и оптимизации эксперимента.	8	4	–	1	4
	Итого	30	16	–	4	20

1. Введение.

Понятие о результате эксперимента как случайной величине. Математическая модель объекта, факторное пространство и функция отклика.

2. Основные характеристики случайных величин.

Случайные величины. Классификация ошибок измерений. Прямые и косвенные измерения. Абсолютная и относительная погрешность. Оценка погрешностей функций приближенных аргументов. Распределение случайных величин. Функция распределения и плотность распределения случайной величины.

Числовые характеристики случайной величины. Свойства математического ожидания и дисперсии. Нормированная случайная величина. Квантили. Нормальное и стандартное распределения случайной величины. Функция Лапласа. Определение вероятности попадания результата единичного эксперимента в заданный интервал значений. Задача об абсолютном отклонении.

3. Определение параметров функции распределения.

Генеральная совокупность и случайная выборка. Выборочная функция распределения. Гистограммы; метод «сгруппированных» данных. Понятие об оценках параметров генерального распределения; состоятельные, несмещенные и эффективные оценки. Метод максимального правдоподобия. Оценка математического ожидания и дисперсии нормально распределенной случайной величины. Дисперсия среднего серии измерений.

Доверительные интервалы и доверительная вероятность, уровень значимости. Построение доверительного интервала для математического ожидания нормально распределенной случайной величины с известным генеральным стандартом. Проверка статистических гипотез, критерии значимости, ошибки первого и второго рода.

Оценка математического ожидания непосредственно измеряемой величины. Распределение Стьюдента. Оценка случайной и суммарной ошибки косвенных измерений. Оценка дисперсии нормально распределенной случайной величины; распределение Пирсона.

Сравнение двух дисперсий, распределение Фишера. Определение дисперсии по текущим измерениям. Сравнение нескольких дисперсий; критерии Бартлетта, Кохрена. Сравнение двух средних; расчет средневзвешенного значения. Проверка однородности результатов измерений. Сравнение выборочного распределения и распределения генеральной совокупности; критерии согласия Пирсона, Колмогорова.

4. Методы корреляционного и регрессионного анализ.

Системы случайных величин. Функция и плотность распределения системы двух случайных величин. Условные законы распределения. Стохастическая связь. Ковариация. Коэффициент корреляции, его свойства. Линии регрессии. Выборочный коэффициент корреляции; проверка гипотезы об отсутствии корреляции.

Приближенная регрессия; метод наименьших квадратов, его обоснование при нормальном распределении случайных величин на основе принципа максимального правдоподобия. Линейная регрессия от одного параметра. Регрессионный анализ: проверка значимости коэффициентов регрессии и адекватности уравнения регрессии, построение коридора ошибок. Аппроксимация, параболическая регрессия. Оценка тесноты нелинейной связи, корреляционный анализ. Метод множественной корреляции.

5. Дисперсионный анализ.

Дисперсионный анализ, его задачи. Проведение однофакторного и двухфакторного дисперсионного анализ. Планирование эксперимента при дисперсионном анализе, латинские квадраты.

6. Методы планирования и оптимизации эксперимента.

Постановка задачи при планировании экстремальных экспериментов. Полный факторный эксперимент. Планы типа 2^2 и 2^3 : матрица планирования, вычисление коэффициентов уравнения регрессии, проверка значимости коэффициентов и адекватности уравнения регрессии. Дробный факторный эксперимент. Планы типа 2^{k-1} .

Оптимизация методом крутого восхождения по поверхности отклика. Описание функции отклика в области, близкой к экстремуму. Композиционные планы Бокса-Уилсона. Ортогональные планы второго порядка, расчет коэффициентов уравнения регрессии. Метод последовательного симплекс-планирования.

ТЕМЫ СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ

- 1). Правила приближенных вычислений. Погрешности арифметических действий и погрешности вычисления функции одной или нескольких переменных.
- 2). Статистическая проверка гипотез. Использование критериев Стьюдента, Фишера, Пирсона и других.
- 3). Вычисление средних и выборочных дисперсий, их оценка и сравнение.
- 4). Оценка случайной и суммарной ошибки косвенных измерений. Расчет средневзвешенного значения.
- 5). Метод наименьших квадратов для описания линейных, квадратичных и некоторых других зависимостей.
- 6). Регрессионный анализ линейного уравнения приближенной регрессии: проверка адекватности уравнения, расчет погрешностей коэффициентов и оценка их значимости, вычисление коэффициента корреляции.
- 7). Планирование экстремального эксперимента. ПФЭ и ДФЭ в применении к задачам физической химии.
- 8). Методы крутого восхождения по поверхности отклика и последовательного симплекс-планирования в применении к экстремальным задачам физической химии и химической технологии.

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. М., Высш. школа, 1985. 327 с.
2. А.В. Блохин. Теория эксперимента. Курс лекций. В 2 ч. Ч. 1. - Мн.: БГУ, 2002. – 68 с.
3. А.В. Блохин. Теория эксперимента. Курс лекций. В 2 ч. Ч. 2. - Мн.: БГУ, 2003. – 67 с.
4. В.П. Спиридонов, А.А. Лопаткин. Математическая обработка физико-химических данных. М., МГУ, 1970. 221 с.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

5. Дж. Тейлор. Введение в теорию ошибок. М., Мир, 1985. – 272 с.
6. Л.М. Батунер, М.Е. Позин. Математические методы в химической технике. Л., Химия, 1971. – 824 с.
7. Систематические и случайные погрешности химического анализа: Учебное пособие для вузов / Под ред. М.С. Черновьянц. – М.: ИКЦ «Академ-книга», 2004. – 157 с.