

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Введение в технику современного эксперимента
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики организованных структур и химических процессов
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: А.В. Левченко, канд. хим. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики организованных структур и химических процессов
12.02.2024

Аннотация

Курс "Введение в технику современного эксперимента" предусматривает формирование у обучающихся специализированных представлений в области планирования научного эксперимента, приемах накопления, упорядочения, хранения экспериментальных данных, культуре оформления и представления данных в виде научных отчетов, сопровождаемых иллюстрациями, таблицами, графиками и диаграммами.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- формирование у обучающихся специализированных представлений в области планирования научного эксперимента, приемах накопления, упорядочения, хранения экспериментальных данных, культуре оформления и представления данных в виде научных отчетов, сопровождаемых иллюстрациями, таблицами, графиками и диаграммами.

Задачи дисциплины

- углубление базовых и формирование специализированных знаний и представлений о принципах работы с основными современными программными пакетами для проведения аналитических расчетов (MathCad, WolframMathematica и аналоги) и обработки больших массивов накопленных данных (OriginPro и аналоги), представления научных отчетов в графическо-текстовом формате, а также в формате электронных презентаций (MicrosoftOffice и аналоги), автоматизации проведения расчетов и экспериментов (AutoIt и аналоги), возможностях интерактивной среды для моделирования научных и технологических процессов (COMSOL Multiphysics и аналоги).

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные принципы планирования научного эксперимента;
- основные аналитические подходы для анализа полученных экспериментальных результатов;
- основные принципы и общепринятые формы представления результатов научных исследований, сопровождаемых иллюстративным материалом (эскизами, таблицами, графиками и диаграммами);
- основные подходы к исследованию химических источников тока (ХИТ) от материала до устройства.

уметь:

- упорядочивать полученные экспериментальные данные и эффективно их обрабатывать;
- обосновывать выбор того или иного алгоритма обработки данных исходя из общей его эффективности;
- представить результаты проведенного исследования в наглядном, непротиворечивом и внутренне согласованном отчетном материале с должной степенью детализации. Также уметь представлять результаты проведенных исследований в формате научных публикаций, подготовленных к рецензированию;
- построить максимально полную аналитическую цепочку исследований материалов для ХИТ, компонентов ХИТ и ХИТ в комплексе.

владеть:

- навыками обработки результатов эксперимента с помощью средств персонального компьютера, основными современными программными пакетами для накопления, упорядочения, хранения и обработки экспериментальных данных, в том числе с использованием программных пакетов, прилагаемых к типовому электрохимическому оборудованию для контроля электрохимических экспериментов;
- базовыми численными методами и математическими подходами для проведения анализа полученных результатов;
- основными современными программными пакетами для подготовки текстового и иллюстративного отчетного материала, содержащего результаты анализа первичных экспериментальных данных и отражающего научную суть проведенных исследований;
- навыками к интерпретации проведенных исследований, основываясь на полученных экспериментальных данных.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение в технику эксперимента	6			12
2	Автоматизация экспериментов и процесса обработки больших массивов накопленных данных	6			12
3	Проведение аналитических расчетов с использованием численных методов и математического аппарата	6			12
4	Представление научных исследований и результатов работы	6			12
5	Изучение интерактивной среды для моделирования научных и технологических процессов	6			12
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Введение в технику эксперимента

Основные требования к научному исследованию. Схема реализации научных исследований в РФ. Классификация научных исследований. Основные механизмы выполнения и финансирования научных исследований с позиции молодых ученых.

Основные принципы планирования научного эксперимента. Методология научного исследования. Организация эффективного рабочего места исследователя. Основы хеометрики. Описание и краткое введение по основным программным пакетам, изучаемым в рамках курса для:

- проведения аналитических расчетов (MathCad, WolframMathematica и аналоги),
- обработки больших массивов накопленных данных (OriginPro и аналоги),
- представления научных отчетов в графическо-текстовом формате, а также в формате электронных презентаций (MicrosoftOffice и аналоги),
- автоматизации проведения расчетов и экспериментов (AutoIt и аналоги),
- моделирования научных и технологических процессов (COMSOLMultiphysics и аналоги).

Описание возможностей по основным программным пакетам, изучаемым в рамках курса для:

- проведения аналитических расчетов (MathCad, WolframMathematica и аналоги),
- обработки больших массивов накопленных данных (OriginPro и аналоги),
- представления научных отчетов в графическо-текстовом формате, а также в формате электронных презентаций (MicrosoftOffice и аналоги),
- автоматизации проведения расчетов и экспериментов (AutoIt и аналоги),
- моделирования научных и технологических процессов (COMSOLMultiphysics и аналоги).

2. Автоматизация экспериментов и процесса обработки больших массивов накопленных данных

Освещение основных принципов оптимизации процедуры обработки больших массивов накопленных экспериментальных данных. Изучение основных подходов для записи и упорядочения первичных экспериментальных данных. Разбор примеров использования численных алгоритмов и методов частичной и полной автоматизации анализа упорядоченных экспериментальных данных, использование общедоступных программ и специализированного программного обеспечения для проведения анализа данных. Изучение возможностей программных комплексов, прилагаемых к типовому электрохимическому оборудованию (ПО «Элинс», Nova (Metrohm)) для проведения электрохимических исследований и контроля экспериментов.

Разбор и отработка типовых задач при обработке больших массивов накопленных экспериментальных данных: записи и упорядочения первичных экспериментальных данных, использования численных алгоритмов и методов частичной и полной автоматизации для анализа указанных данных. Оработка типовых примеров контроля электрохимических экспериментов с использованием программных комплексов, прилагаемых к типовому электрохимическому оборудованию.

3. Проведение аналитических расчетов с использованием численных методов и математического аппарата

Введение в численные методы и вычислительные алгоритмы. Планирование эксперимента с целью его максимальной алгоритмизации. Примеры проведения первичной обработки экспериментальных данных с помощью аналитических и численных методов, а также с привлечением основ математического аппарата. Рассмотрение возможностей современного компьютерного инструментария для проведения аналитических расчетов и выполнения анализа полученных экспериментальных данных.

Разбор и отработка типовых задач обработки экспериментальных данных с помощью аналитических и численных методов, а также с привлечением основ математического аппарата. Оработка примеров использования современного компьютерного инструментария для проведения аналитических расчетов и выполнения анализа полученных экспериментальных данных.

4. Представление научных исследований и результатов работы

Основные принципы представления результатов научных исследований и результатов работы. Введение в терминологию и классификация документов, описывающих результаты прикладных или фундаментальных исследований – отчет о ПНИ, программы и методики, протоколы и акты испытаний.

Разбор и отработка на типовых задачах и примерах основных подходов и приемов формирования наукоемких самосогласованных отчетных материалов в графическо-текстовом формате, а также в формате высокоструктурированных электронных презентаций, с применением средств создания иллюстраций, таблиц, графиков и диаграмм.

5. Изучение интерактивной среды для моделирования научных и технологических процессов

Программные комплексы интерактивной среды для моделирования научных и технологических процессов: основные задачи, методы решения и аналитические возможности таких комплексов. Рассмотрение аналитических и численных подходов к моделированию работы химических источников тока.

Отработка типовых задач и примеров моделирования электрохимических процессов, лежащих в основе работы химических источников тока.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, оснащенная меловой или маркерной доской, мультимедийным проектором и экраном. Самостоятельная работа студента обеспечивается доступностью библиотечного фонда.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Колмогоров Ю.Н., Сергеев А.П., Тарасов Д.А., Арапова С.П. Методы и средства научных исследований. Учебное пособие. Екатеринбург: изд-во Урал. Ун-та. 2017. - 152 с.
2. Митин И.В., Русаков В.С. Анализ и обработка экспериментальных данных. Учебно-методическое пособие. М.: изд-во НЭВЦ ФИПТ. 1998. - 48 с.
3. Brereton R.G. Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. 1st edition. Wiley. 2003. - 504 p.
4. Brereton R.G. Chemometrics: Data Driven Extraction for Science 2nd Edition. Wiley. 2018. - 464 p.

Дополнительная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия, 2006. - 672 с.

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

. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. -<http://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. Научная электронная библиотека РФФИ www.elibrary.ru
3. Доступ к базам данных WoS, Scopus
4. Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

При подготовке и чтении лекций может потребоваться следующее программное обеспечение: MSWord, MS PowerPoint.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания при решении заданий текущего контроля успеваемости.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех лекций, предусмотренных программой;
- ведения конспекта занятий;
- самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики организованных структур и химических процессов
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
Разработчик:	А.В. Левченко, канд. хим. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Введение в технику современного эксперимента» обучающийся должен:

знать:

- основные принципы планирования научного эксперимента;
- основные аналитические подходы для анализа полученных экспериментальных результатов;
- основные принципы и общепринятые формы представления результатов научных исследований, сопровождаемых иллюстративным материалом (эскизами, таблицами, графиками и диаграммами);
- основные подходы к исследованию химических источников тока (ХИТ) от материала до устройства.

уметь:

- упорядочивать полученные экспериментальные данные и эффективно их обрабатывать;
- обосновывать выбор того или иного алгоритма обработки данных исходя из общей его эффективности;
- представить результаты проведенного исследования в наглядном, непротиворечивом и внутренне согласованном отчетном материале с должной степенью детализации. Также уметь представлять результаты проведенных исследований в формате научных публикаций, подготовленных к рецензированию;
- построить максимально полную аналитическую цепочку исследований материалов для ХИТ, компонентов ХИТ и ХИТ в комплексе.

владеть:

- навыками обработки результатов эксперимента с помощью средств персонального компьютера, основными современными программными пакетами для накопления, упорядочения, хранения и обработки экспериментальных данных, в том числе с использованием программных пакетов, прилагаемых к типовому электрохимическому оборудованию для контроля электрохимических экспериментов;
- базовыми численными методами и математическими подходами для проведения анализа полученных результатов;
- основными современными программными пакетами для подготовки текстового и иллюстративного отчетного материала, содержащего результаты анализа первичных экспериментальных данных и отражающего научную суть проведенных исследований;
- навыками к интерпретации проведенных исследований, основываясь на полученных экспериментальных данных.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Основные требования к научному исследованию. Схема реализации научных исследований в РФ. Классификация научных исследований.
2. На примере представьте возможности основных инструментов, доступные для записи и упорядочения первичных экспериментальных данных. Предложите алгоритм упорядочения результатов при записи.
3. Основные принципы планирования научного эксперимента. Методология научного исследования. Организация эффективного рабочего места исследователя.
4. Представьте алгоритм планирования и решения следующей задачи: снятие зависимости величины протекающего в системе тока от напряжения в ходе выполнения вольтамперометрии с линейной разверткой потенциала с использованием программного обеспечения «Элинс». Отдельное внимание уделите разбиению всего алгоритма на группы последовательных шагов, выполняемых в соответствующих программных пакетах. Подробно опишите алгоритм записи первичных экспериментальных данных с помощью ПО «Элинс».
5. Основы хеометрики. Описание и краткое введение по основным программным пакетам, изучаемым в рамках курса для проведения аналитических расчетов (MathCad, WolframMathematica и аналоги).
6. Представьте алгоритм планирования и решения следующей задачи: снятие зависимости величины протекающего в системе тока от напряжения в ходе выполнения вольтамперометрии с линейной разверткой потенциала. Отдельное внимание уделите разбиению всего алгоритма на группы последовательных шагов, выполняемых в соответствующих программных пакетах. Подробно опишите алгоритм упорядочения полученных первичных экспериментальных данных и построения соответствующих графических зависимостей.
7. Описание и краткое введение по основным программным пакетам, изучаемым в рамках курса для обработки больших массивов накопленных данных (OriginPro и аналоги).
8. Представьте алгоритм планирования и решения следующей задачи: снятие вольт-амперной характеристики для 10 циклов заряда/разряда химического источника тока, запись и упорядочение полученных экспериментальных данных, построение графических зависимостей величины плотности тока (в расчете на единицу площади, если общая площадь кажущейся поверхности $S = 2 \text{ см}^2$) от величины наложенного напряжения для каждого цикла заряда и разряда с разработкой скрипта или подпрограммы автоматической обработки данных.
9. Описание и краткое введение по основным программным пакетам, изучаемым в рамках курса для представления научных отчетов в графическо-текстовом формате, а также в формате электронных презентаций (MicrosoftOffice и аналоги), а также автоматизации проведения расчетов и экспериментов (AutoIt и аналоги).
10. Представьте алгоритм планирования и решения следующей задачи: снятие зависимости токового транзистента в потенциостатическом режиме, запись и упорядочение полученных экспериментальных данных, расчет величины интегрального заряда, протекшего в системе за время эксперимента. Отдельное внимание уделите разбиению всего алгоритма на группы последовательных шагов, выполняемых в соответствующих программных пакетах.
11. Освещение основных принципов оптимизации процедуры обработки больших массивов накопленных экспериментальных данных. Изучение основных подходов для записи и упорядочения первичных экспериментальных данных.
12. Поясните чем отличаются явные и неявные численные схемы для решения задач.
13. Основные подходы для записи и упорядочения первичных экспериментальных данных. Примеры использования численных алгоритмов и методов частичной и полной автоматизации анализа упорядоченных экспериментальных данных.
14. Опишите основные принципы численного интегрирования функций одной переменной. Метод средних прямоугольников. Метод трапеций. Метод Симпсона.

15. Приведите примеры проведения первичной обработки экспериментальных данных с помощью аналитических и численных методов, а также с привлечением основ математического аппарата.
16. Опишите основные принципы численного решения дифференциальных уравнений. Метод Эйлера. Метод Рунге-Кутты четвертого порядка.
17. Опишите основные возможности программных комплексов, прилагаемых к типовому электрохимическому оборудованию (ПО «Элинс», Nova (Metrohm)) для проведения электрохимических исследований и контроля экспериментов.
18. Опишите основные численные методы решения нелинейных уравнений. Метод секущих. Метод ложного положения.
19. Поясните разницу в подходах математического моделирования на различных уровнях: а) разработка собственных численных алгоритмов, б) программирование с использованием встроенных библиотек в) использование программных комплексов с закрытым кодом, позволяющих решать задачу на уровне реальных физико-химических объектов и процессов. Опишите достоинства и недостатки каждого из указанных подходов.
20. Опишите основные численные методы решения нелинейных уравнений. Метод простых итераций. Метод Ньютона.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Оценка на дифференцированном зачете выставляется по результатам сдачи устного итогового коллоквиума. Опрос на коллоквиуме не должен превышать одного академического часа