

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ З ДИСЦИПЛІНИ

Інформаційні технології в наукових дослідженнях. (Статистична обробка даних за допомогою програми Statgraphics)

для аспірантів
спеціальностей «102 Хімія» та «161 Хімічні технології та інженерія»
денної і заочної форми навчання

ВСТУП

Мета викладання навчальної дисципліни «Інформаційні технології в наукових дослідженнях» є вдосконалення теоретичних і практичних знань аспірантів спеціальностей «102 Хімія» та «161 Хімічні технології та інженерія» з питань застосування комп'ютерних мереж для пошуку науково-технічної інформації та використання сучасних програмних засобів для обробки, систематизації і аналізу результатів наукових досліджень, а також для проведення математичного моделювання та/або обчислювального експерименту.

Під час опанування дисципліною «Інформаційні технології в наукових дослідженнях» аспірант здійснює пошук та систематизацію науково-технічної літератури за темою дисертаційної роботи з використанням баз даних ScienceDirect та Google Scholar, спеціалізованої програми Mendeleu, проводить математичну, статистичну та аналітичну обробку експериментальних даних за допомогою програмних пакетів Origin, Mathcad, Excel та Statgraphics.

Лабораторні заняття з даної дисципліни – важливий етап підготовки аспірантів до самостійного рішення інженерних задач. Її виконання дозволить закріпити і поглибити отримані в процесі навчання теоретичні і практичні знання про застосування комп'ютерних мереж для пошуку науково-технічної інформації та використання сучасних програмних засобів для обробки, систематизації і аналізу результатів наукових досліджень, а також для проведення математичного моделювання та/або обчислювального експерименту.

Теми лабораторних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Обробка та візуалізація експериментальних даних за допомогою пакету Origin. Функціональні можливості програмного продукту Origin. Стандартні інструменти. Графічне відображення та обробка графічних даних в Origin. Апроксимація графічних даних.	6
2	Застосування пакету комп'ютерної математики Mathsoft Mathcad у обчисленнях, моделюванні та оптимізації ХТП. Функціональні можливості та призначення Mathcad. Основи роботи в середовищі Mathcad: функція калькулятора, оператори присвоєння, функції та графіки, трансцендентні рівняння, системи рівняння, диференційне рівняння, імпорт та експорт даних, лінійна регресія, швидке перетворення Фур'є.	6
3	Моделювання в середовищі електронних таблиць. Автоматизація обчислень за допомогою електронної таблиці. Застосування електронних таблиць Excel для вирішення науково-технічних завдань. Обробка результатів експерименту, проведення однотипних розрахунків над великими наборами даних, побудова	6

	діаграм та графіків за наявними даними, проведення пошуку оптимальних значень параметрів.	
4	Статистична обробка даних за допомогою програми Statgraphics. Процедура використання модуля "Планування експерименту": визначення факторів, вибір плану, генерація робочої таблиці для збору та запису даних, підбір моделі, інтерпретація результатів.	6

Лабораторні роботи виконуються на об'єктах досліджень дисертаційної роботи аспіранта.

Лабораторна робота СТАТИСТИЧНА ОБРОБКА ДАНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ ПРОГРАМИ STATGRAPHICS

Statgraphics (статистична графічна система) є діалоговим статистичним пакетом для IBM/PC. Початкову DOS-версію створив у 1980 р. Dr. Neil Polhemus у Принстонському університеті для навчання студентів методам математичної статистики. Незабаром, в 1982 році, показавши свою ефективність, система була представлена публічно. Потім пакет став розвиватися і поширюватися американською корпорацією Manugistics. Найпопулярніша DOS-версія 3.0 була створена в 1988 році і займала лідируючі позиції у світі. У 1994 році вийшла версія для Windows. Відмінною особливістю всіх версій пакета є наявність об'ємного розділу «Планування експерименту», що дозволяє проводити планування експерименту. З 2017 року фірмою Statgraphics Technologies, Inc. поширюється версія Statgraphics Centurion 18, що включає понад 250 статистичних процедур, різноманітну графіку та перетворення даних.

Теоретичні відомості з планування експерименту в хімії та хімічній технології

Вирішення більшості проблем у хімії і хімічній технології пов'язане із проведенням складних і дорогих експериментів. Звідси зрозуміле значення методів оптимального планування експерименту, що дозволяють у ряді випадків істотно скоротити витрати часу і матеріальних ресурсів на виконання дослідницьких робіт.

Довгий час порядок проведення експерименту цілком визначався особистим досвідом і інтуїцією дослідників. Перші спроби застосування математичних методів для оптимального планування експерименту були зроблені англійським математиком Р. Фішером на початку 20-х років минулого сторіччя. Особливо швидкими темпами теорія планування експерименту стала розвиватися після 1951 р. в зв'язку з роботами Д. Бокса і К. Уілсона.

У сучасній математичній теорії оптимального планування експерименту існують два основних розділи:

1. Планування експерименту для вивчення механізмів складних процесів і властивостей багатокомпонентних систем;
2. Планування експерименту для оптимізації технологічних процесів і властивостей багатокомпонентних систем.

Основні поняття планування експерименту

Приступаючи до виконання експерименту в лабораторії, хіміки завжди визначають програму дій, що називається **плануванням експерименту**. Мета любого експерименту полягає в отриманні певного об'єму нової інформації про досліджувану речовину або про певний хіміко-технологічний процес її отримання. У ході виконання досліджу

використовується дороге обладнання, реактиви. Для того, щоб експеримент проходив оптимально, необхідно звести до мінімуму всі витрати на його здійснення. Тому, складаючи програму експериментальних досліджень, насамперед планується кількість дослідів та умови їх проведення.

Важливою задачею планування експерименту є мінімізація витрат при проведенні досліджень. При цьому, як правило, ставиться завдання одержання даних з максимальною точністю. Однак це вимагає підвищення числа експериментів, а виходить, збільшується і його вартість. Внаслідок цього виникає задача **оптимізації постановки експерименту**.

Методично експерименти можуть бути проведені різними способами. Традиційний метод постановки експериментів полягає в тому, що змінюють який-небудь із параметрів, а інші підтримують постійними. Цей прийом зветься однофакторним експериментом. Очевидно, що така постановка експериментів вимагає проведення великої кількості експериментів.

Метод багатофакторного експерименту передбачає дослідження спільної дії основних параметрів і дозволяє при правильній організації процесу дослідження істотно скоротити загальне число експериментів у порівнянні з однофакторним експериментом. Так, у випадку одночасного вивчення впливу чотирьох параметрів серіями із шести паралельних експериментів при однофакторному експерименті потрібно провести 1440 експериментів, а при багатофакторному експерименті для досягнення тих же результатів – 96 експериментів, тобто в 15 разів менше.

Для постановки задачі по плануванню експерименту необхідно, насамперед, визначитися з вибором типу моделі досліджуваного процесу – статистичної або детермінованої. При складності досліджуваного процесу, множинності факторів впливу і неочевидності вибору серед них основних факторів, що впливають на нього найбільш значимим образом, перевага віддається **моделі «чорного ящика»**. Для побудови такої моделі необхідно визначитися з вибором функції відгуку, що повинна бути величиною кількісної, з яким фізичним змістом і ефективно описувати властивості об'єкта дослідження. Також важливо визначитися з вибором факторів (параметрів) досліджуваного процесу – деякі незалежні змінні, які можна задати і фіксувати з достатнім ступенем точності.

Слід зазначити, що модель чорного ящика дозволяє одержати математичний опис процесу (тобто його математичну модель) навіть при відсутності відомостей про його механізм. При цьому до цієї моделі можна застосовувати методи оптимального планування експерименту.

В теорії математичного планування експерименту незалежні змінні величини, що впливають на перебіг хіміко-технологічного процесу називають **впливаючими факторами**. Так, впливаючими факторами можуть бути температура, тиск, склад вихідної реакційної суміші і т.д. Дані величини при плануванні експерименту позначають літерами x_1, x_2, x_n . Фактори, які характеризуються певними цифровими значеннями (температура, тиск, концентрація), називаються **кількісними**. Фактори, які не характеризуються цифровими значеннями (наприклад, наявність або відсутність каталізатору), називаються **якісними**.

Перебіг хіміко-технологічного процесу кількісно характеризується однією або декількома величинами (наприклад продуктивністю обладнання, собівартістю продукції і т.д.), що в теорії планування експерименту називають **функціями відгуку** та позначають, наприклад, літерами y_1, y_2, y_n . Функції відгуку залежать від впливаючих факторів.

Геометричний образ, що відповідає функції відгуку, називають **поверхнею відгуку** (рис.1), а координатний простір, по осях якого відкладені впливаючі фактори – **факторним простором**.

Для зручності поверхня відгуку може бути зображена на площині в координатах x_1 та x_2 лініями, що відповідають постійним значенням функції відгуку. Це робиться аналогічно до зображення рельєфу на географічних картах.

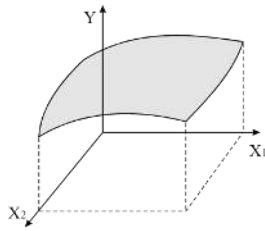


Рис.1. Поверхня відгуку та її проекція на факторний простір.

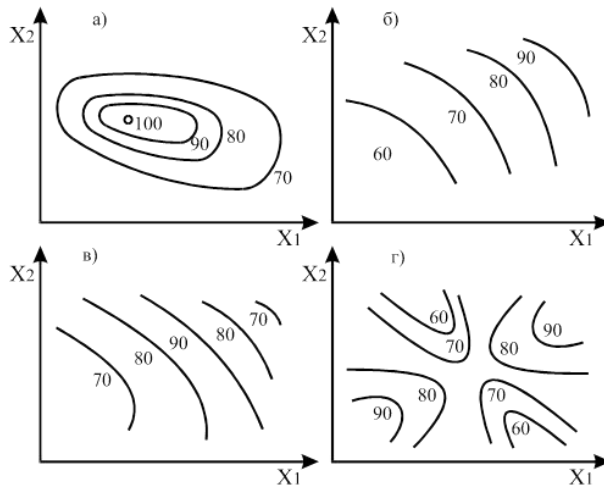


Рис.2. Типи поверхонь відгуку.

На рис.2 зображені деякі типи поверхонь відгуку. В якості прикладу функції відгуку беремо ступінь чистоти продукту хімічної реакції $A+B$, що надано у відсотках. На рис.2.а. поверхня відгуку має вигляд **“вершини”** та відповідає області значень факторів, де знаходиться максимум величини y . Аналогічний вигляд мають лінії постійного рівня у випадку мінімуму функції y (тип **“западина”**). Поверхня, що зображена на рис.2.б, характеризує повільне зростання функції відгуку зі збільшення значень факторів x_1 та x_2 . Такий тип поверхонь називають **“стаціонарним зростанням”** (протилежний випадок – **“стаціонарне зменшення”**). Поверхня, що наведена на рис.2.в називається **“хребтом”**. Його вершина відповідає найбільшим значенням функції відгуку. Аналогічно розташована лінія постійних значень функції відгуку у випадку типу поверхні **“яр”**, що відповідає мінімальним значенням функції відгуку. На рис.2.г зображено поверхню, що називається **“сідлом”**. На двох ділянках даної поверхні ми спостерігаємо зростання функції відгуку, а на двох інших - її зменшення. Слід зауважити, що на практиці зустрічаються поверхні відгуку більш складної форми, які являють собою комбінацію наведених типів поверхонь.

Отже, будь-який процес можна описати деякою математичною моделлю. У чому ж основна цінність такого математичного опису? У тім, що воно, по-перше, подає кількісну інформацію про вплив факторів; по-друге, дозволяє кількісно визначити значення функції відгуку при заданому режимі ведення процесу; по-третє, є основою для оптимізації процесу.

Розглянемо на прикладі недоліки однофакторного (класичного) експерименту по оптимізації процесу. Нехай якийсь процес або багатокомпонентний об'єкт описується математичною моделлю $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, де y – функція відгуку, а x_i – її фактори. Поставимо задачу визначити такі значення змінних x_1, x_2, \dots, x_n , при яких досягається максимальне (або мінімальне) значення функції y .

Для випадку двох змінних x_1 і x_2 функцію відгуку можна представити графічно у вигляді деякої поверхні в 3-хмірному просторі або кривих рівного рівня на площині (рис.3).

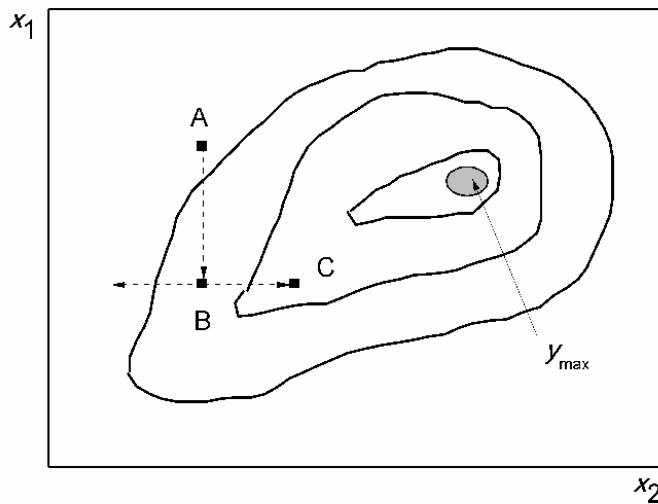


Рис.3. Графічна інтерпретація двохфакторної функції відгуку $y = f(x_1, x_2)$ на площині. (Криві на графіку представляють точки факторного простору з однаковими значеннями функції відгуку).

Сутність знаходження екстремуму функції класичним методом Гаусса-Затделя полягає в наступному: вибирається деяка точка A з координатами x_1^0 і x_2^0 . Потім фіксують одну зі змінних (наприклад, x_1) і вимірюють значення функції відгуку при різних значеннях другої змінної. На рис.3 це можна зобразити як рух уздовж осі x_1 . Знаходять, що в точці B при $x_2 = x_2^B$ величина y має максимальне значення. Потім із точки B рухаються уздовж осі x_2 уліво і вправо і знаходять, що в точці C функція досягає максимального значення. Це значення y у точці C є максимальне значення функції відгуку по даним двох однофакторних дослідів. Однак, як видно з рис.1, справжній максимум функції відгуку при цьому може перебувати в зовсім іншому місці факторного простору.

Оптимізація процесів методом Бокса-Уільсона

Для визначення дійсного екстремуму функції відгуку розроблене велике число різних математико-статистичних прийомів. Одним з них, що дає непогані результати, є метод Бокса-Уільсона, називаний також методом крутого сходження (або спуску, якщо екстремум функції – це мінімум). Цей метод дозволяє проводити оптимізацію процесу, використовуючи факторне планування, регресійний аналіз і рух по градієнту. Він дозволяє істотно скоротити число експериментів при відшуканні екстремуму функції відгуку.

Використання методу Бокса-Уільсона в постановці експерименту передбачає здійснення ряду етапів. Як і в класичному експерименті, спочатку вибирається точка A, що на підставі апріорної (тобто первісної чи попередньої) інформації є найкращою. У цій області проводиться багатофакторний експеримент, що дозволяє побудувати математичну модель об'єкта дослідження. На підставі цієї моделі можна визначити напрямку градієнта функції відгуку y . На другому етапі здійснюється постановка серії експериментів, що дозволяють здійснити покроковий рух у напрямку градієнта функції відгуку. Такий рух дає можливість найкоротшим шляхом досягти району екстремуму функції y .

Як відомо, будь-яку функцію можна розкласти в ряд Тейлора, а потім записати її з необхідним ступенем точності у вигляді рівняння регресії. Наприклад, для функції із двома змінними:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots, \quad (1)$$

де b_1 – коефіцієнти регресії; коефіцієнти b_1 і b_2 характеризують лінійні ефекти, коефіцієнти b_{11} і b_{22} – квадратичні ефекти; коефіцієнт b_{12} – ефект взаємодії параметрів.

Для рішення задачі оптимізації часто можна обмежитися рухом по градієнту до екстремуму функції y , описаної лінійним рівнянням регресії, у якому зневажають всіма коефіцієнтами крім лінійних:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2. \quad (2)$$

Величини коефіцієнтів регресії говорять про ступінь впливу факторів на параметр оптимізації, а знак при них указує на те, як треба змінити фактори для поліпшення функції відгуку. Коефіцієнти регресії визначаються експериментально на підставі обробки результатів багатфакторного експерименту.

Повний факторний експеримент

Повний факторний експеримент (ПФЕ) – це таке активне планування експерименту, коли для кожного фактору вибирається певне число рівнів і реалізуються всі можливі їхні комбінації. Дослідження починаються з вибору точки факторного простору, у якому значення функції відгуку найкращі. У цю точку переносять початок координат факторного простору і вона стає центром експериментального плану (точка 0 з координатами (x_{01}, x_{02})) на рис.4).

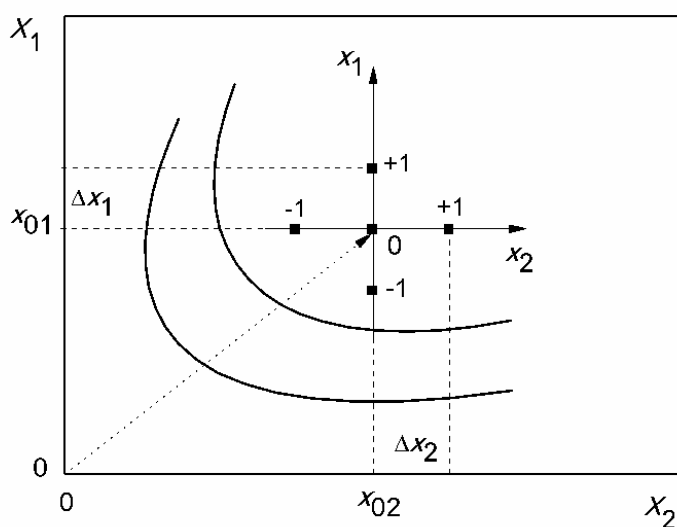


Рис.4. Введення кодованих змінних.

Із цією метою вводять нові змінні, названі кодованими:

$$x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta x_i}, \quad (3)$$

де x_i – кодоване значення i -го фактору; \tilde{x}_{i0} – значення фактору на нульовому рівні; \tilde{x}_i – поточне значення фактору; Δx_i – інтервал варіювання фактору.

Інтервали варіювання факторів вибирають, по суті, довільно. Однак варто враховувати, що при невеликих їхніх значеннях може створитися уявлення, що даний фактор не впливає на функцію відгуку. При великих значеннях інтервалів варіювання важко врахувати взаємодію факторів.

Після вибору інтервалів варіювання встановлюють значення рівнів і складають **матрицю планування експерименту**. Для зручності обчислень коефіцієнтів регресії всі фактори в ході ПФЕ варіюють тільки на двох рівнях, що відповідають значенням кодованих змінних +1 і -1. При двох рівнях факторів їхнього значення відповідають верхній і нижній границям інтервалу варіювання. У матриці планування фактори записуються в кодованому

виді. Матриця планування експерименту – це таблиця кодованих значень варійовних факторів, що включає умови проведення експериментів відповідно до обраного плану.

Приклад 1. Обчислити кодоване значення фактору для процесу фотометричного визначення концентрації, у якому світлопоглинання (A) розчину залежить від концентрації розчину і його рН: $y = A$, $x_1 = C$ (моль/л), $x_2 = \text{pH}$. Значення рН варіюють у ході експерименту від 5 до 10 ед. Очевидно, що для рН $\tilde{x}_{i0}=7,5$ і $\Delta x_i = 2,5$. Обчислимо значення кодової змінної для рН на верхньому і нижньому рівнях:

$$x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta x_i} = \frac{10 - 7,5}{2,5} = 1 \quad \text{та} \quad x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta x_i} = \frac{5 - 7,5}{2,5} = -1.$$

Приклад 2. Скласти матрицю планування ПФЕ по екстракційному розділенню, у якому варіюється концентрація екстрагенту (x_1) і тривалість екстракції (x_2). Нульовий рівень факторів: $x_{01} = 5$ моль/л, $x_{02} = 20$ хв.

Прийmemo, що інтервали варіювання будуть становити 3 моль/л і 10 хв, відповідно. Результати розрахунків рівнів факторів для проведення ПФЕ представлені в табл.1.

У табл.2 наведені всі можливі комбінації факторів при їхньому варіюванні на двох рівнях.

Табл.1. Рівні факторів і інтервали їхнього варіювання

Фактори	Основний рівень	Інтервали варіювання	Верхній рівень	Нижній рівень
x_1	5	3	8	2
x_2	20	10	30	10

Табл.2. Матриця планування ПФЕ типу 2^2 для двох незалежних змінних, що варіюються на двох рівнях

№ дослідю	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	-1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	y_4

Щоб продемонструвати основні принципи¹ побудови матриць планування ПФЕ в табл.3 наведені умови експериментів повного трьохфакторного експерименту.

Табл.3. Матриця планування ПФЕ типу 2^3 для трьох незалежних змінних, що варіюються на двох рівнях

№ дослідю	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	θ_1
2	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1	θ_2
3	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	θ_3
4	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	θ_4

¹ Основные принципы построения матриц планирования ПФЭ: уровни варьирования первого фактора чередуются от опыта к опыту, а частота смены уровней варьирования каждого последующего фактора вдвое меньше, чем у предыдущего.

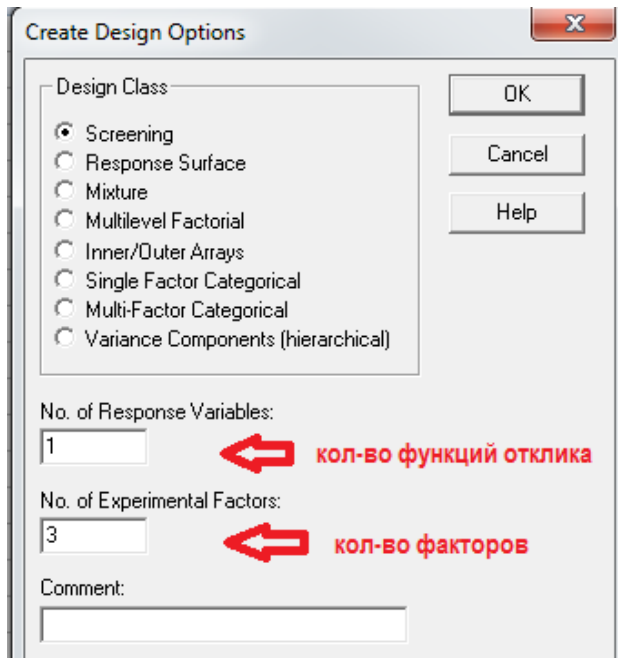
5	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	65
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	66
7	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	67
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	68

Очевидно, що зі збільшенням кількості факторів різко зростає кількість експериментів ПФЕ. Однак для знаходження коефіцієнтів регресії не завжди потрібно багато експериментів. Можливо використовувати метод дробового факторного експерименту.

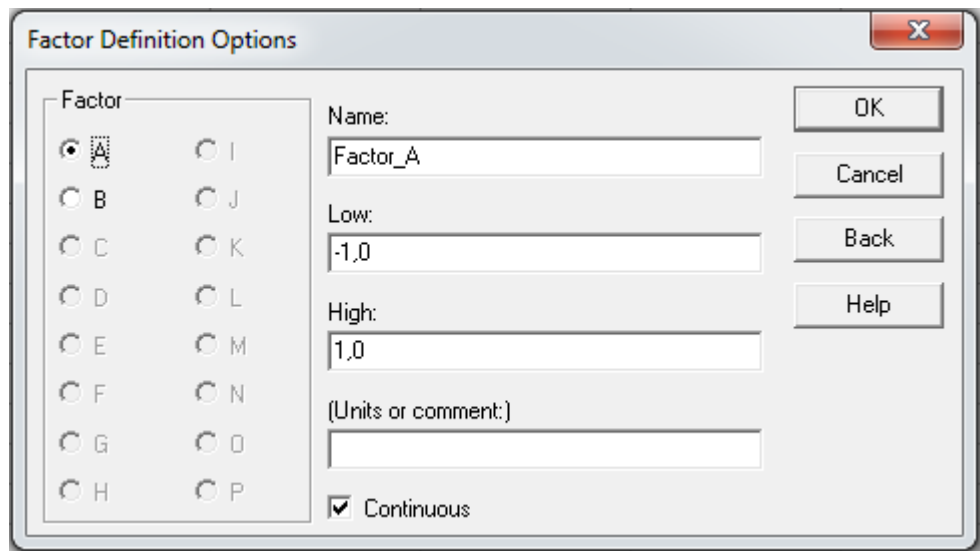
Інструкція до програм Statgraphics

Спочатку необхідно скласти матрицю експерименту:

1. DOE (Design of Experiment)--- Legacy DOE procedures--- Design Creation--- Create New Design.
2. Установіть значення «x» та «y», ОК



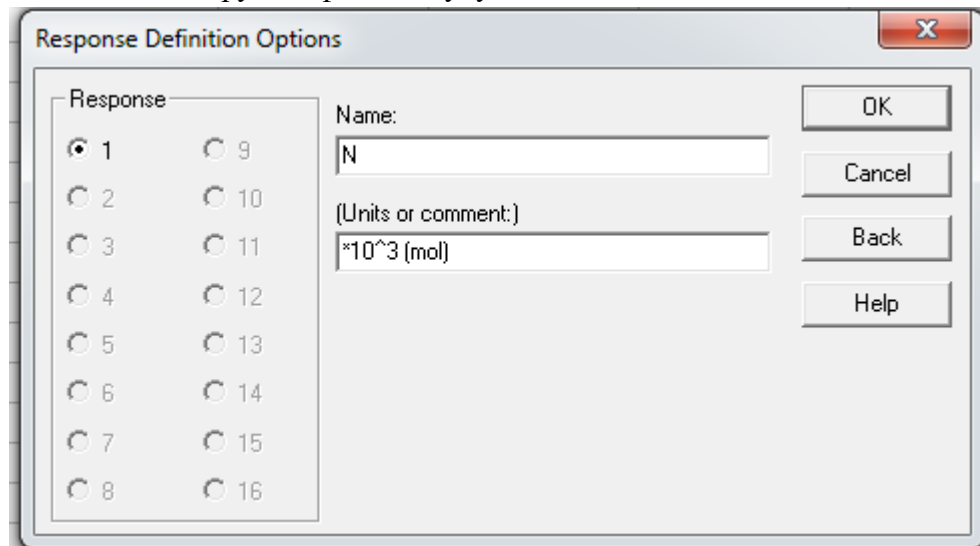
3. Введіть назви та одиниці виміру факторів. (замість закодованих змінних можна прописати числові значення). ОК.



The dialog box is titled "Factor Definition Options" and contains the following elements:

- Factor:** A list of radio buttons labeled A through P. Option A is selected.
- Name:** A text field containing "Factor_A".
- Low:** A text field containing "-1,0".
- High:** A text field containing "1,0".
- (Units or comment:)** An empty text field.
- Continuous:** A checked checkbox.
- Buttons:** OK, Cancel, Back, and Help.

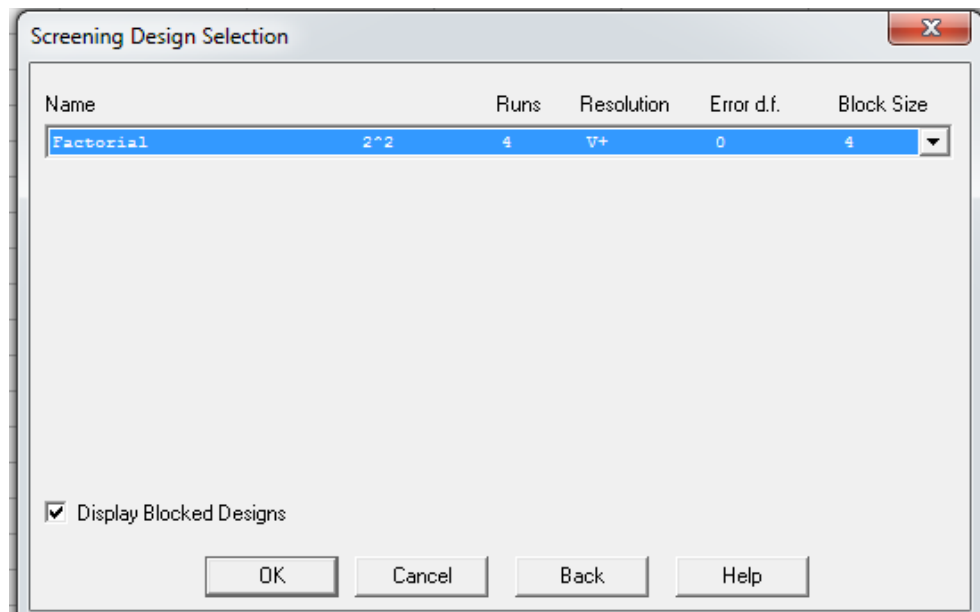
4. 4. Ім'я та одиниці виміру для ф-ції відгуку. ОК.



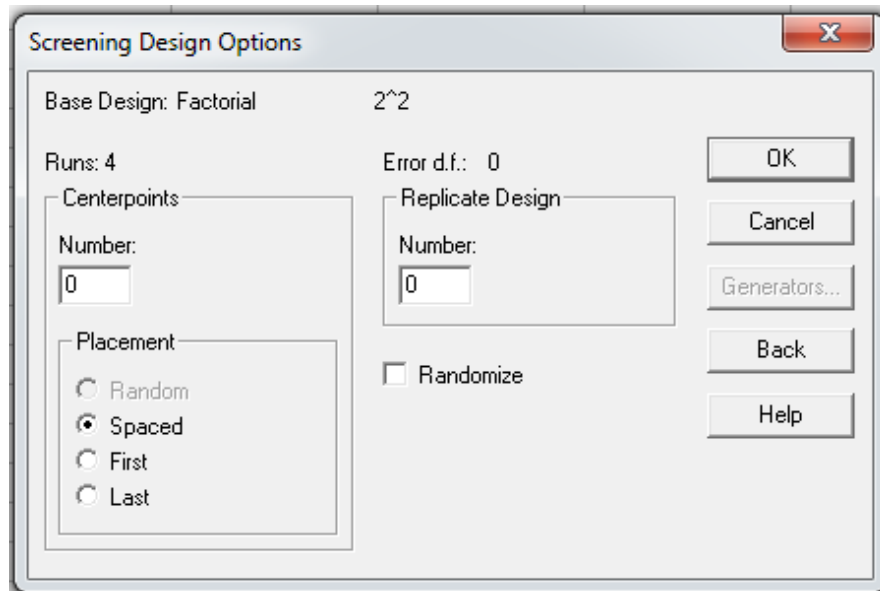
The dialog box is titled "Response Definition Options" and contains the following elements:

- Response:** A list of radio buttons labeled 1 through 16. Option 1 is selected.
- Name:** A text field containing "N".
- (Units or comment:)** A text field containing "*10^3 (mol)".
- Buttons:** OK, Cancel, Back, and Help.

5. Тут ОК, нічого не змінюємо.



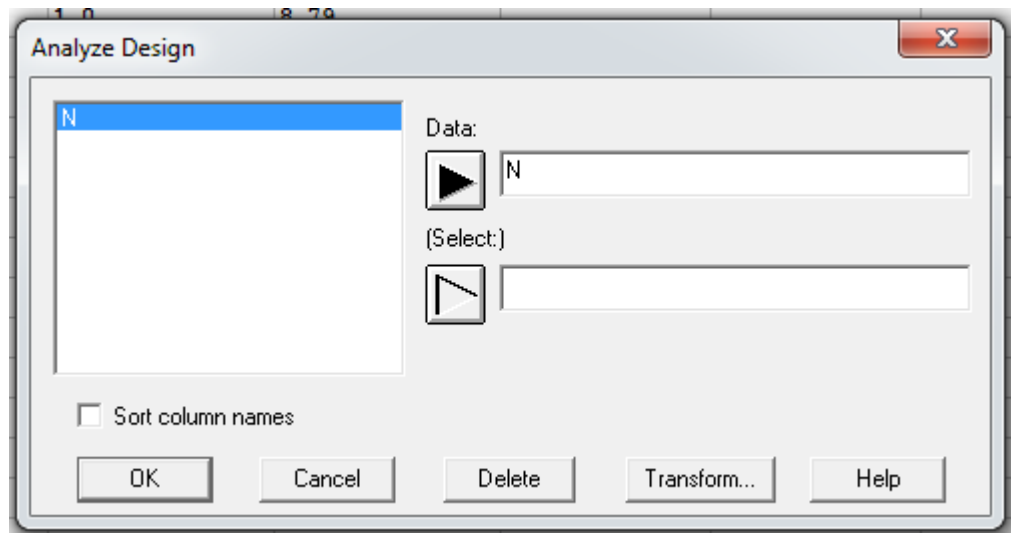
6. Галочку біля Randomize прибираємо. ОК.



7. Повертаємося в Data Book і прописуємо значення для уср

8. Для аналізу: DOE (Design of Experiment)--- Legacy DOE procedures--- Design Analysis--- Analyze Design

9. Вибираємо "y", ОК



7. ОК

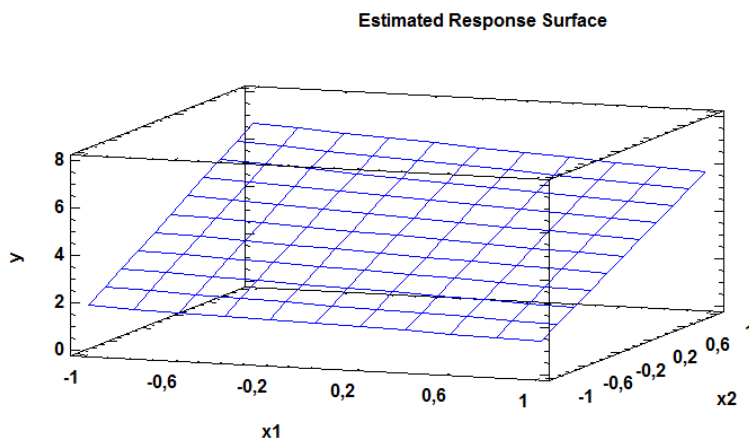
8. Далі необхідно вибрати розрахунки (таблиці) та графіки.
Натискаємо All, щоб ознайомитись подивитися, що може зробити програма.

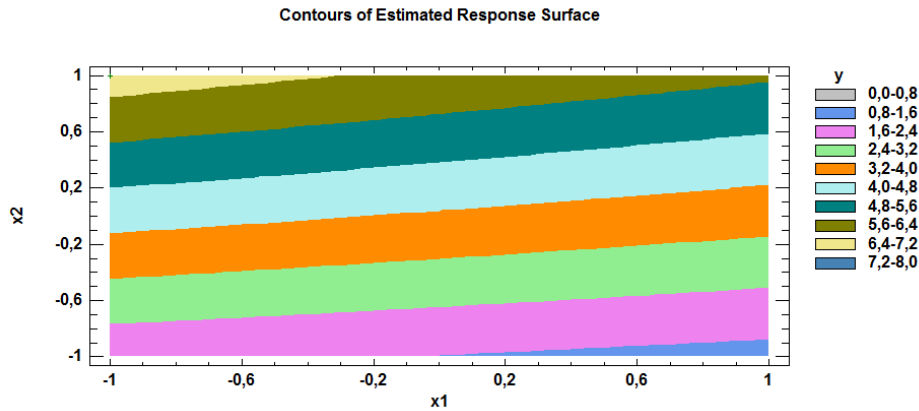
9. Подвійний клік відкриває та закриває вікно з таблицею або графіком.
Зображення з поверхнею можна обернути за допомогою смуг прокручування.

Як перейти від 3D поверхні до колірних областей:

- 1) На картинці з 3D поверхнею натискаємо ЛКМ
- 2) Pane options --- Contour --- Painted regions (ну або переглянути інші типи графіків)
- 3) Також у цьому меню, натиснувши на Factors, можна змінити масштаб або встановити постійне значення для одного з факторів.

Приклади результатів розрахунків:





Інтерпретація рівнянь регресії

Інтерпретація рівнянь регресії – найважливіший етап моделювання процесів при використанні планування експерименту. Інтерпретація включає аналіз, насамперед, впливу окремих факторів і їхніх взаємодій, а потім - особливостей поведження функції відгуку в різних частинах вивченої області факторного простору.

Спочатку оцінюється знак коефіцієнта b_n у змінної в рівнянні регресії, що показує в яку сторону – збільшення або зменшення – впливає на відгук даний фактор.

Потім порівнюються величини коефіцієнтів b_n у змінних: чим більше коефіцієнт регресії у якогось фактору, тим сильніше цей фактор впливає на функцію відгуку.

Подвійні взаємодії в рівнянні регресії, характеризуємі, наприклад, коефіцієнтом b_{12} , інтерпретують за умови, що один з факторів у такій взаємодії приймає значення $+1$, 0 і -1 . Аналіз одержуваних рівнянь дозволяє оцінити залежність значень одного фактору від значень іншого, а також і від збігу або розбіжності знаків при коефіцієнтах b_1 , b_2 і b_{12} .

У тому випадку, якщо, наприклад, коефіцієнти b_1 і b_2 мають однаковий знак і знак при коефіцієнті b_{12} – такий же, те має місце явище синергізма впливу факторів x_1 і x_2 : кожний з них при спільному збільшенні впливає сильніше, ніж якщо вони збільшуються порізно.

Якщо число факторів невелике (2-4), інтерпретації може допомогти побудова ліній рівня відгуку, аналогічних горизонталям географічної карти. Слід зазначити, що для практичного використання отриманої математичної моделі часто доцільно перейти в рівнянні регресії від кодованих змінних до фізичних.

Рекомендовані джерела інформації з дисципліни «Інформаційні технології в наукових дослідженнях»

Основна література:

1. Основи інформаційних систем / За ред. В.Ф. Ситника. – К.: КНЕУ, 2001. – 420 с.
2. Колесников А. Internet: для пользователя. – К.: Изд. группа ВНУ, 2000. – 304 с.
3. Кузнецов И.Н. Интернет в учебной и научной работе: Практическое пособие. – М.: Изд.-торг. корп. "Дашков и К", 2002. – 192 с.
4. Симонович С.В., Евсеев Г.А., Мураховский В.И. Internet: Лаборатория мастера: Практическое руководство по эффективным приемам работы в Интернете. – М.: Инфорком-Пресс, 2001. – 720 с.
5. Колесников О.В. Основи наукових досліджень: навч. посіб. – К. : Центр учбової літератури, 2011. – 144 с.
6. Єріна А.М., Захожай В.Б., Єрін Д.Л. Методологія наукових досліджень: Навч. посібник. – К.: ЦНЛ, 2004. – 212 с.

7. Метешкін К.О. Інформаційні системи і технології / К.О. Метешкін, О. Б. Костенко, Т.С. Сенчук. – Х.: ХНАМГ, 2010. – 240 с.
8. Вітлінський В.В. Математичне програмування: Навчально-методичний посібник для самост. вивч. дисц. – 2-е вид., без змін. / В.В. Вітлінський, С.І. Наконечний, Т.О. Терещенко. – К.: КНЕУ, 2006. – 248 с.
9. Ковальчук В.В. Основи наукового дослідження: навч. посібник / В.В. Ковальчук, Л.М. Моїсєєв. – К.: Видавн. дім «Професіонал», 2008. – 240 с.
10. Наконечний С.І. Математичне програмування: Навчальний посібник / С. І. Наконечний, С.С. Савіна – К.: КНЕУ, 2003. – 452 с.
11. Бондарь А.Г., Статюха Г.А. Планирование эксперимента в химической технологии. Основные положения, примеры и задачи – Киев: Вища школа, 1976. – 219 с.
12. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. Методы обнаружения и оценки ошибок. – Л.: Химия, 1984. – 168 с.
13. Організація наукових досліджень, написання та захист магістерських дисертацій / За ред. В.В. Пасічника: Навчальний посібник. – Львів: Новий Світ-2000, 2012. – 282 с.

Допоміжна література:

1. Румшинский Л.З. Математическая обработка результатов эксперимента. Справочное руководство. – М.: Наука, 1971. – 192 с.
2. Спиридонов В.П., Лопаткин А.А. Математическая обработка физико-химических данных. – М.: МГУ, 1970. – 220 с.
3. Дрозденко В.О. Maple в математиці: навч. посіб. / В.О. Дрозденко – Б.: БНАУ, 2019. – 322 с.
4. Ковальчук, В.В. Основи наукових досліджень: Навч. Посібн. // В.В. Ковальчук, Л.М. Моїсєєв и др.. – К., ВД «Професіонал», 2004. – 208 с.
5. П'ятницька-Позднякова, І.С. Основи наукових досліджень у вищій школі: Навч. посібн. – К.:ЦНЛ, 2003. – 116 с.
6. Шейко, В.М., Кушнарєнко Н.М. Організація та методика науково-дослідної діяльності: Підручник. – К.: Знання – Пресс, 2002. – 295 с.
7. Гужва В.М. Інформаційні системи і технології на підприємствах. – К.: КНЕУ, 2001. – 400 с.
8. Український інститут науково технічної інформації, сайт: <http://www.uitei.kiev.ua/viewpage.php?id=7>