

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки

Факультет хімії, екології та фармації
Кафедра органічної хімії та фармації

СИЛАБУС

нормативної навчальної дисципліни
СТАТИСТИЧНІ ТА ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ

підготовки бакалавра
галузі знань 10 -- Природничі науки
спеціальності 102 — Хімія
освітньо-професійної програми -- Хімія
форма навчання -- денна

Луцьк – 2021

Силабус навчальної дисципліни «СТАТИСТИЧНІ ТА ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ» підготовки бакалавра, галузі знань 10 -- Природничі науки, спеціальності 102 -- Хімія, освітньо-професійної програми — Хімія, форма навчання — денна за навчальним планом, затвердженим 2020 року.

Розробник: Супрунович С. В., доцент кафедри органічної хімії та фармації, кандидат хімічних наук, доцент

Силабус навчальної дисципліни затверджено на засіданні кафедри органічної хімії та фармації

протокол № 2 від 13 вересня 2021р.

Завідувач кафедри:

к.х.н., доцент


_____ (Сливка Н. Ю.)

I. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітня програма, освітній ступінь	Характеристика навчальної дисципліни
Денна форма навчання	10 – Природничі науки 102 – Хімія Хімія бакалавр	нормативна
Кількість годин/кредитів 120/4		Рік навчання – 3-й
ІНДЗ: є		Семестр - 5-й
		Лекції - 24 год.
		Лабораторні - 40 год.
		Самостійна робота - 48 год.
Консультації - 8 год.		
Форма контролю: екзамен		

II. Інформація про викладача

Прізвище, ім'я та по батькові: *Супрунович Сергій Васильович*

Науковий ступінь: *кандидат хімічних наук*

Вчене звання: *доцент кафедри органічної хімії та біоорганічної хімії*

Посада: *доцент кафедри органічної хімії та фармації*

Контактна інформація: +83097 589 3439, e-mail: Suprunovich.Sergey@eenu.edu.ua

Дні занять: <http://194.44.187.20/cgi-bin/timetable.cgi?teacher=101>

III. Опис дисципліни

1. Анотація курсу

Курс має на меті засвоєння студентами понять, пов'язаних з використанням математичних, статистичних та інших методів для конструювання оптимальних вимірювальних процедур і для вилучення достовірної хімічної інформації з експериментальних даних.

Даний курс знайомить студентів з найбільш поширеними математичними методами аналізу експериментальних даних в області хімії. Аналіз даних необхідний у будь-якій області науки. Можна виділити деякі загальні принципи аналізу даних, загальні методи обробки інформації. Часто ці методи засновані на статистичних процедурах, так як експериментальні дані, як правило, включають випадкову компоненту. При проведенні вимірювань практично неможливо врахувати всі чинники, що впливають на вимірювану величину. Практична хеометрика — це комп'ютеризація, кожен крок передбачає використання програмного забезпечення. Студенти знайомляться із зручними засобами роботи з великими масивами числових даних, зі спеціалізованими програмами, в яких реалізовані методи багатовимірної статистики. матеріал ілюструється конкретними прикладами з області хімії. В практичній частині курсу подаються навички обробки експериментальних даних з використанням програми статистичної обробки.

Для досягнення поставленої мети виділяються завдання курсу: знайомство з базовими математичними методами аналізу даних, оволодіння практичними навичками обробки експериментальних даних з використанням програмного середовища "R-статистика" на конкретних прикладах з області хімії.

2. Пререквізити та постреквізити:

Необхідною навчальною базою для вивчення дисципліни є курси «Інформаційні технології у галузі хімії», «Вища математика», «Аналітична хімія та інструментальні методи аналізу», «Хімічна метрологія та стандартизація».

3. Мета і завдання навчальної дисципліни

Метою викладання дисципліни «Статистичні та хемометричні методи в хімії» є ознайомлення студентів з хемометричними та статистичними методами обробки експериментальних даних, побудовою прогностичних моделей зокрема, візуальним представленням результатів обробки даних.

Завданням є формування та розвиток бази знань, умінь і навичок, необхідних для ефективного використання сучасних методів обробки та представлення результатів досліджень.

4. Результати навчання (Компетентності)

Загальні компетентності (ЗК):

- ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.
- ЗК 3. Здатність працювати у команді.
- ЗК 5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.
- ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.
- ЗК 11. Здатність бути критичним і самокритичним.

Фахові компетентності (ФК):

- ФК1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.
- ФК2. Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані (чи доцільні) методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.
- ФК4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.
- ФК5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.
- ФК8. Здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.

Програмні результати навчання (ПРН):

- ПРН 02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.
- ПРН 08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.
- ПРН 09. Планувати та виконувати хімічний експеримент, застосовувати придатні методики та техніки приготування розчинів та реагентів.

- ПРН 13. Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.
- ПРН 15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.
- ПРН 16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.
- ПРН 17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.
- ПРН 20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.
- ПРН 24. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.

5. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Усього	Лек.	Лаб.	Сам. роб.	Конс.	Форма контролю/Бали
Змістовий модуль 1. Статистичні методи обробки даних						
Тема 1. Основні поняття теорії ймовірностей.	6	2	0	4	0	ТР4
Тема 2. Основні поняття математичної статистики.	9	2	2	4	1	ТР4
Тема 3. Інтервальне оцінювання.	8	2	2	4	0	Т8
Тема 4. Порівняльні експерименти	9	2	2	4	1	Т4
Тема 5. Дисперсійний аналіз.	13	2	6	4	1	Т4
Тема 6. Регресійний аналіз.	15	2	6	6	1	КР6
Тема 7. Кластерний аналіз.	15	2	6	6	1	ІРС4
Тема 8. Дискримінаційний аналіз.	6	2	2	2	0	ТР8
Разом за модулем 1	81	16	26	34	5	42
Змістовий модуль 2. Оптимізація досліджень						
Тема 9. Планування досліджень.	7	2	2	2	1	ТР12
Тема 10. Попередня обробка даних.	11	2	6	2	1	ТР6
Тема 11. Методи оптимізації.	6	2	2	2	0	ТР6
Тема 12. Сигнали, виявлення та управління.	8	1	2	4	1	ТР6
Тема 13. Теорія графів.	7	1	2	4	0	ТР10
Разом за модулем 2	39	8	14	14	3	40
ІНДЗ 1						10
ІНДЗ 2						8
Всього годин/Бали:	120	24	40	48	8	100

*Форма контролю: ДС – дискусія, ДБ – дебати, Т – тести, ТР – тренінг, РЗ/К – розв’язування задач / кейсів, ІНДЗ / ІРС – індивідуальне завдання / індивідуальна робота студента, РМГ – робота в малих групах, МКР / КР – модульна контрольна робота/ контрольна робота, Р – реферат, а також аналітична записка, аналітичне есе, аналіз твору тощо.

6. Завдання для самостійного опрацювання

Тема 1. Основні поняття теорії ймовірностей.	Умовна ймовірність
Тема 2. Основні поняття математичної статистики.	Коефіцієнти асиметрії та ексцесу
Тема 3. Інтервальне оцінювання.	Розподіл Стьюдента
Тема 4. Порівняльні експерименти	Розподіл Фішера
Тема 5. Дисперсійний аналіз.	Багатомірний дисперсійний аналіз
Тема 6. Регресійний аналіз.	Інформаційні критерії
Тема 7. Кластерний аналіз.	Методи Варда
Тема 8. Дискримінаційний аналіз.	Нелінійна дискримінація
Тема 9. Планування досліджень.	Плани Шеффе
Тема 10. Попередня обробка даних.	Сплайни в пропущених даних
Тема 11. Методи оптимізації.	Метод Ньютона
Тема 12. Сигнали, виявлення та управління.	Визначення межі визначення
Тема 13. Теорія графів.	Молекулярні графи

IV. Політика оцінювання

Політика викладача щодо студента

Окремі студенти можуть на свій розсуд відвідувати лекції. Проте, якщо не приходить вся група, то всі студенти в групі одержують штрафні бали за зрив заняття. Матеріали зірваного заняття виносяться на самостійне опрацювання.

Студент завжди отримує максимальний бал за лабораторне заняття, якщо протягом заняття він активно працює, і намагається вирішити поставлене завдання самостійно, чи з допомогою колег або викладача. Оцінка знижується, якщо студент систематично відволікається на сторонні справи.

Політика щодо академічної доброчесності

Дотримання академічної доброчесності здобувачами освіти передбачає:
-- самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання;
-- посилення на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей.

Політика щодо дедлайнів та перескладання

Студенти одержують оцінки виключно під час практичних занять. Перескладання можливе, якщо були технічні проблеми з відправленням рішення.

Деякі завдання мають дедлайн. У цьому разі виставляється оцінка пропорційно ступеню виконання завдання.

V. Підсумковий контроль

Формою підсумкового семестрового контролю є екзамен. Якщо протягом семестру студент набрав 75 і більше балів, він може не складати екзамен.

Екзамен проводиться в усній формі. На екзамен виносяться три теоретичні питання, що охоплюють весь матеріал, що вивчався протягом курсу).

VI. Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Національна система	Ступінь засвоєння програми навчальної дисципліни
90 – 100	A	5 (відмінно)	Повно та ґрунтовно засвоїв всі теми навчальної програми вміє вільно та самостійно викласти зміст всіх питань програми навчальної дисципліни, розуміє її значення для своєї професійної підготовки, повністю виконав усі завдання кожної теми та поточного модульного контролю в цілому.
82 – 89	B	4 (дуже добре)	Недостатньо повно та ґрунтовно засвоїв окремі питання робочої програми. Вміє самостійно викласти зміст основних питань програми навчальної дисципліни, виконав завдання кожної теми та модульного і поточного контролю в цілому.
75 - 81	C	4 (добре)	Недостатньо повно та ґрунтовно засвоїв деякі теми робочої програми, не вміє самостійно викласти зміст деяких питань програми навчальної дисципліни. Окремі завдання кожної теми та модульного поточного контролю в цілому виконав не повністю.
67 -74	D	3 (задовільно)	Засвоїв лише окремі теми робочої програми. Не вміє вільно самостійно викласти зміст основних питань навчальної дисципліни, окремі завдання кожної теми модульного контролю не виконав.
60 - 66	E	3 (достатньо)	Засвоїв лише окремі питання навчальної програми. Не вміє достатньо самостійно викласти зміст більшості питань програми навчальної дисципліни. Виконав лише окремі завдання кожної теми та модульного контролю в цілому.
35 – 59	FX	2 (незадовільно)	Не засвоїв більшості тем навчальної програми не вміє викласти зміст більшості основних питань навчальної дисципліни. Не виконав більшості завдань кожної теми та модульного контролю в цілому.
1 – 34	F	2 (незадовільно)	Не засвоїв навчальної програми, не вміє викласти зміст кожної теми навчальної дисципліни, не виконав модульного контролю.

VII. Рекомендована література та інтернет-ресурси

Основна література:

1. Шараф М. А., Иллмен Д. Л., Ковальски Б. Р. Хемометрика / М. А. Шараф, Д. Л. Иллмен, Б. Р. Ковальски: Пер. з англ. – Л.: Химия, 1989, 272 с. Пер. вид.: США, 1986. – ISBN 5-7245-0361-1.
2. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. — 2-е изд. — М.: Высш. шк., 1985, 327 с.
3. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных / Д. К. Монтгомери. – Л.: Судостроение, 1980, 384 с.
4. Самолов Н.А. Моделирование в химической технологии и расчет реакторов: Учеб.пособие / Н.А. Самолов : Уфа ООО «Монография», 2005. – 224 с.
5. Гунич СВ., Янчуковская Е.В. Математическое моделирование и расчет на ЭВМ химико-технологических процессов. Примеры и задачи: учеб. пособие / С.В. Гунич, Е.В. Янчуковская. – Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2010. — 216 с.
6. ТОВАЖНЯНСКИЙ Л.Л. Вычислительная математика и программирование в химической технологии / Л.Л. ТОВАЖНЯНСКИЙ. – Х.:НТУ «ХПИ». 2005. – 258 с.
7. Солтис М.М., Закордонський В.П. Теоретичні основи процесів хімічної технології / М.М. Солтис, В.П. Закордонський — Львів: ЛНУ ім Івана Франка., 2003, 430 с.

Додаткова література :

8. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и приложения / Ю.В. Холин — Харьков: Фолио, 2000, 288 с.
9. Холоднов В.А., Хартманн К., Чепикова В.Н., Андреева В.П.. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико-технологических систем с материальными и тепловыми рециклами : учебное пособие./ В.А. Холоднов, К. Хартманн. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 160 с.
10. Загальна хімічна технологія: підручник/ В.Т. Яворський, Т.В. Перекупко, З.О. Знак, Л.В. Савчук. - Львів: видавництво НТУ «Львівська політехніка», 2005. – 552 с
11. Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика./ Ред.: М.В. Лобур. -Л.: Львів-Політехніка. 2004. -183 с

Internet-джерела

12. R: Анализ и визуализация данных / С. Мاستицкий, В. Шитиков. – режим доступу: <http://r-analytics.blogspot.com> [7.09.2021]
13. DataCamp / © 2021 DataCamp Inc. – режим доступу: <https://www.datacamp.com> [7.09.2021]