

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ФАКУЛЬТЕТ БІОЛОГІЧНИЙ  
КАФЕДРА ХІМІЇ

ЗАТВЕРДЖУЮ

Декан біологічного факультету



Л.С. Омелянчик

(ініціали та прізвище)

» \_\_\_\_\_ 2020

**СТАТИСТИЧНІ ТА ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ**  
(назва навчальної дисципліни)

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

підготовки бакалавра

(назва освітнього ступеня)

спеціальності 102 Хімія

(шифр, назва спеціальності)

освітньо-професійна програма Хімія

(назва)

Укладач: асистент Седаш Юрій Володимирович

Обговорено та ухвалено  
на засіданні кафедри хімії

Протокол № 5 від "24" 12 2019 р.  
Завідувач кафедри хімії

\_\_\_\_\_  
(підпис) О.А. Бражко  
(ініціали, прізвище)

Ухвалено науково-методичною радою  
біологічного факультету \_\_\_\_\_

Протокол № 6 від "09" 01 2020 р.  
Голова науково-методичної ради  
біологічного факультету

\_\_\_\_\_  
(підпис) Н.М. Притула  
(ініціали, прізвище)

2020 рік

## 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, рівень вищої освіти	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів 6	Галузь знань <u>10 Природничі науки</u>	Дисципліна вибору ЗВО	
		Цикл дисциплін професійної підготовки	
Розділів –2	Спеціальність <u>102 Хімія</u>	<b>Рік підготовки:</b>	
Загальна кількість годин – 180		1 -й	-й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 4 самостійної роботи студента –8	Спеціалізація / Предметна спеціальність	<b>Лекції</b>	
		30 год.	год.
	Освітньо-професійна програма <u>Хімія</u>	<b>Лабораторні</b>	
		30 год.	год.
	Рівень вищої освіти: <b>бакалаврський</b>	<b>Самостійна робота</b>	
120 год.		год.	
		<b>Вид підсумкового контролю:</b> залік	

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

**Метою** викладання навчальної дисципліни «Статистичні та хемометричні методи в хімії» є навчити студентів використовувати статистичні та хемометричні засоби для обробки даних хімічного експерименту та використовувати комп'ютерні технології для розв'язання типових навчальних та наукових задач.

Основними **завданнями** вивчення дисципліни «Статистичні та хемометричні методи в хімії» є знайомство студентів із комп'ютерними технологіями для розв'язання типових навчальних та наукових задач; оволодіння програмними засобами для розв'язання прикладних хімічних задач.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

**знати:** засади статистичної обробки експериментальних даних, особливості хемометричних підходів до обробки даних хімічного експерименту.

**вміти:** використовувати комп'ютерні засоби обробки даних хімічного експерименту.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти повинні досягти таких **компетентностей:**

**ІК** – Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми хімії або у процесі навчання, що передбачає застосування певних теорій та методів природничих наук і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

**ЗК 1** – Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

- ЗК 2 – Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.  
ЗК 4 – Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.  
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.  
СК 1 – Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.  
СК 2 – Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані (чи доцільні) методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.  
СК 3 – Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт виходячи із вимог хімічної метрології та професійних стандартів в галузі хімії.  
СК 4 – Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.  
СК 5 – Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.  
СК 6 – Здатність оцінювати ризики.  
СК 8 – Здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.  
СК 13 – Здатність застосовувати сучасні уявлення про теорію будови, номенклатуру, методи одержання та хімічні перетворення органічних сполук; взаємозв'язок будови, реакційної здатності та біологічної активності органічних сполук.  
СК 14 – Навички в практичному застосуванні теоретичних відомостей.

### **Міждисциплінарні зв'язки**

Викладання курсу «Статистичні та хемометричні методи в хімії» забезпечують дисципліни, які засвоювалися студентами під час навчання у середній загальноосвітній школі, та при отриманні базової вищої освіти: «Хімія», «Фізика», «Математика», «Інформатика».

Дисципліна «Статистичні та хемометричні методи в хімії» є вихідною для навчальної обчислювальної практики та інших професійних дисциплін де необхідна математична обробка експериментальних даних.

## **3. Програма навчальної дисципліни**

### **Розділ 1. Хімічна інформація.**

#### *Тема 1. Джерела хімічної інформації*

Джерела хімічної інформації, бази даних і пакети прикладних програм (Science Citation Index, CSD тощо). Хімічні періодичні видання. Друковані та електронні версії. Імпакт-фактори журналів. Пошук інформації в Інтернет. Статистика, хімічна інформатика, хемометрія Експериментальне визначення властивостей речовин. Джерела довідкової інформації. Розрахунки властивостей речовин. Емпіричні та неемпіричні розрахунки.

#### *Тема 2. Властивості речовин. Бази даних властивостей.*

#### *Тема 3. Кореляції структура-властивість. QSPR*

Побудова моделей залежності структура-властивість. Прогнозування властивостей на основі дескрипторних моделей.

#### *Тема 4. Основні поняття теорії моделювання.*

Загальні відомості про моделювання. Сутність і стадії математичного моделювання. Моделі-технологічних процесів. Ієрархічна структура хімічного

виробництва. Основні положення системного аналізу.

*Тема 5. Ризик-орієнтований аналіз.*

Ризик. Аналіз ризиків хіміко-технологічних процесів. Місце ризиків у системі управління якістю. Контрольні точки. Коригувальні дії. Принцип документованої інформації.

*Тема 6. Прикладне програмне забезпечення. Пакет ACD Labs*

Основний функціонал. Редактор формул chemsketch. Пакети обробки аналітичних даних.

*Тема 7. Локальні бази даних.*

Загальна характеристика локальних баз даних. Пакет ISIS Base. Інше програмне забезпечення. Представлення структурної інформації у базах даних.

*Тема 8. Бази даних Reaxys, Scifinder.*

Комерційні бази даних хімічної інформації. Бази даних з вільним доступом.

*Тема 9. Некомерційне програмне забезпечення*

Пакети програм доступні безкоштовно. Безкоштовні версії програмного забезпечення з обмеженим функціоналом, версії для навчання та ознайомлення.

## **Розділ 2. Статистичні методи в хімії**

*Тема 10. Похибки у експериментальних даних*

Види похибок. Емпіричні та теоретичні розподіли. Закон розповсюдження похибок. Випадкові та системні похибки. Методи перевірки.

*Тема 11. Представлення даних.*

Первинне представлення даних. Дескриптивне представлення даних. Гістограми. Результат вимірювань як випадкова величина. Генеральна сукупність та вибірка. Вибіркові оцінки. Моменти. Середнє. Стандартне відхилення. Дисперсія. Коваріаційні матриці. Коефіцієнти кореляції. Перетворення даних (масштабування, автомасштабне перетворення).

*Тема 12. Статистична обробка даних*

Задачі обробки первинних експериментальних даних: дослідження однорідності вибірки, визначення функції розподілу, кореляцій між змінними, класифікація, факторний аналіз. Структурна і параметрична ідентифікація моделей, перевірка адекватності. Статистичні розподіли випадкової величини. Дискретні й неперервні випадкові величини. Біноміальний розподіл. Розподіли неперервних величин: рівномірний, Гаусса, Лапласа, Пуассона,  $\chi^2$ . Центральна гранична теорема. Метод максимуму правдоподібності. Функція правдоподібності. Правдоподібні оцінки параметрів генеральної сукупності при нормальному та Лапласівському розподілах похибок.

*Тема 13. Перевірка статистичних гіпотез*

Задача перевірки статистичних гіпотез. Схема перевірки гіпотези. Помилки I та II родів. Потужність критеріїв. Перевірка гіпотез про функції розподілу. Критерій  $\chi^2$ , графічні способи перевірки гіпотез про функції розподілу

*Тема 14. Основи кореляційного та регресійного аналізу*

Кореляційний аналіз. Приклади кореляцій в хімії, значення кореляцій. Принцип лінійності вільних енергій як основа багатьох хімічних кореляцій. Теоретичні засади методу найменших квадратів (МНК) та статистичні властивості оцінок МНК.

Розрахункова схема МНК. Вибір найкращого набору регресорів: методи всіх регресій, покрокової регресії, вилучення регресорів. Приклади використання МНК у хімічних задачах. Лінійний та нелінійний МНК як приклад некоректної задачі (теоретичний аналіз та приклади), мультиколінеарність. Її формальні та неформальні причини. Способи подолання мультиколінеарності:  $\alpha$ -регуляризація за Тихоновим, застосування ортогональних поліномів, сингулярний розклад. Типові приклади математично некоректних задач в хімії. Вплив викидів на оцінки МНК. Уявлення про робастні оцінки.

#### Тема 15. Класифікація та кластерний аналіз

Види класифікацій і їх значення для аналізу даних. Типи ознак. Міри схожості об'єктів. Класифікація без навчання. Ієрархічна класифікація, дендрограми. Найпростіші алгоритми ієрархічного кластерного аналізу сукупності об'єктів. Проблема стійкості класифікації. Факторний аналіз. Характеристика моделей з латентними змінними. Кореляційна та коваріаційна матриці – об'єкт факторного аналізу. Формулювання задачі факторного аналізу. Матриця навантажень, вектори характеристик і загальностей. Основна факторна теорема. Експлораторний та конфірматорний факторний аналіз. Алгоритми факторного аналізу. Факторний аналіз хроматографічних даних.

### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви тематичних розділів і тем	Кількість годин							
	денна форма				заочна форма			
	усьо го	у тому числі			усьо го	у тому числі		
л		сем./п р./ лаб.	сам. роб.	л		сем./п р./ лаб.	сам. роб.	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
<b>Розділ 1. Хімічна інформація</b>								
Тема 1. Джерела хімічної інформації	12	2	2	8				
Тема 2. Властивості речовин. Бази даних властивостей.	12	2	2	8				
Тема 3. Кореляції структура-властивість. QSPR	12	2	2	8				
Тема 4. Основні поняття теорії моделювання.	12	2	2	8				
Тема 5. Ризик-орієнтований аналіз.	12	2	2	8				
Тема 6. Прикладне програмне забезпечення. Пакет ACDLabs	12	2	2	8				
Тема 7. Локальні бази даних.	12	2	2	8				
Тема 8. Бази даних Reaxys, Scifinder.	12	2	2	8				
Тема 9. Некомерційне програмне забезпечення.	12	2	2	8				
Разом за розділом 1	108	18	18	72				
<b>Розділ 2. Статистичні методи в хімії</b>								
Тема 10. Похибки у експериментальних даних	12	2	2	8				
Тема 11. Представлення даних	12	2	2	8				
Тема 12. Статистична обробка даних	12	2	2	8				
Тема 13. Перевірка статистичних гіпотез	12	2	2	8				
Тема 14. Основи кореляційного та регресійного аналізу	12	2	2	8				
Тема 15 Класифікація та кластерний аналіз	12	2	2	8				
Разом за розділом 2	72	12	12	48				
Всього годин	180	30	30	120				

### 5. Теми лекційних занять

№ теми з/прогр.	Назва теми	Кількість годин	
		д.ф.	з.ф.
1	Тема 1. Джерела хімічної інформації	2	
2	Тема 2. Властивості речовин. Бази даних властивостей	2	
3	Тема 3. Кореляції структура-властивість. QSPR	2	
4	Тема 4. Основні поняття теорії моделювання	2	
5	Тема 5. Ризик-орієнтований аналіз.	2	
6	Тема 6. Прикладне програмне забезпечення. Пакет ACD Labs	2	
7	Тема 7. Локальні бази даних.	2	
8	Тема 8. Бази даних Reaxys, Scifinder.	2	
9	Тема 9. Некомерційне програмне забезпечення	2	
10	Тема 10. Похибки у експериментальних даних	2	
11	Тема 11. Представлення даних	2	
12	Тема 12. Статистична обробка даних	2	
13	Тема 13. Перевірка статистичних гіпотез	2	
14	Тема 14. Основи кореляційного та регресійного аналізу	2	
15	Тема 15. Класифікація та кластерний аналіз	2	
Разом		30	

### 6. Теми лабораторних занять

№теми з/прогр.	Назва теми	Кількість годин	
		д.ф.	з.ф.
1	Тема 1.Знайомство з програмним пакетом ChemOffice	2	
2	Тема 2.Розрахунки властивостей речовин у ChemOffice	2	
3	Тема 3.Побудова дескриптор них моделей властивостей речовин	2	
4	Тема 4.Загальний аналіз хіміко-технологічних процесів	2	
5	Тема 5.Ризик орієнтований аналіз хіміко-технологічного процесу.	2	
6	Тема 6. Прикладне програмне забезпечення. Пакет ACD Labs	2	
7	Тема 7. Локальні бази даних.	2	
8	Тема 8. Бази даних Reaxys, Scifinder.	2	
9	Тема 9. Некомерційне програмне забезпечення	2	
10	Тема 10. Похибки у експериментальних даних	2	
11	Тема 11. Представлення даних	2	
12	Тема 12. Статистична обробка даних	2	
13	Тема 13. Перевірка статистичних гіпотез	2	
14	Тема 14. Основи кореляційного та регресійного аналізу	2	
15	Тема 15. Класифікація та кластерний аналіз	2	
Разом		30	

## 7. Самостійна робота

№ теми з/прогр.	Назва теми	Кількість годин	
		д.ф.	з.ф.
1	Тема 1. Джерела хімічної інформації	8	
2	Тема 2. Властивості речовин. Бази даних властивостей	8	
3	Тема 3. Кореляції структура-властивість. QSPR	8	
4	Тема 4. Основні поняття теорії моделювання	8	
5	Тема 5. Ризик-орієнтований аналіз.	8	
6	Тема 6. Прикладне програмне забезпечення. Пакет ACD Labs	8	
7	Тема 7. Локальні бази даних.	8	
8	Тема 8. Бази даних Reaxys, Scifinder.	8	
9	Тема 9. Некомерційне програмне забезпечення	8	
10	Тема 10. Похибки у експериментальних даних	8	
11	Тема 11. Представлення даних	8	
12	Тема 12. Статистична обробка даних	8	
13	Тема 13. Перевірка статистичних гіпотез	8	
14	Тема 14. Основи кореляційного та регресійного аналізу	8	
15	Тема 15. Класифікація та кластерний аналіз	8	
Разом		120	

## 8. Види контролю і система накопичення балів

При викладанні курсу використовується поточний і підсумковий контроль навчальних досягнень студентів. Контроль і оцінювання навчальної діяльності з дисципліни «Статистичні та хемометричні методи в хімії» здійснюється за 100-бальною шкалою. Співвідношення між поточним і підсумковим контролем у загальній оцінці навчальної діяльності студента з дисципліни становить 60:40.

Таблиця – Види контролю і система накопичення балів

	<i>Вид контрольного заходу</i>	<i>Кількість контрольних заходів</i>	<i>Кількість балів за 1 захід</i>	<i>Усього балів</i>
1	2	3	4	5
1	Виконання практичної роботи та її захист. Терміни виконання – тиждень після практичної роботи	14	0-1,5	21
2	Письмові опитування за темами лекцій	14	0-1,5	21
3	Контрольна робота за результатами вивчення матеріалу <i>Розділу 1, Розділу 2</i> (Проводиться в письмовому вигляді)	2	0-9	18
4	Підсумковий контроль – залік.	1	0-40	40
<b>Усього</b>		<b>31</b>		<b>100</b>

**Поточний контроль** передбачає письмові опитування за матеріалом Розділу 1, Розділу 2 – **0-1,5 балів**, захист практичної роботи **0-1,5 балів** та написання контрольних робіт за результатами вивчення матеріалу Розділу 1, Розділу 2 – **0-9 балів**. **Підсумковий контроль** складається у формі заліку **в письмовій формі за білетами**; тривалість заліку 1 академічна година. До складання **екзамену** допускаються студенти, які набрали мінімально 35 балів з 60 можливих.

#### Шкала оцінювання: національна та ECTS

За шкалою ECTS	За шкалою університету	За національною шкалою	
		Екзамен	Залік
A	90 – 100 (відмінно)	5 (відмінно)	Зараховано
B	85 – 89 (дуже добре)	4 (добре)	
C	75 – 84 (добре)	3 (задовільно)	
D	70 – 74 (задовільно)		
E	60 – 69 (достатньо)		
FX	35 – 59 (незадовільно – з можливістю повторного складання)	2 (незадовільно)	Не зараховано
F	1 – 34 (незадовільно – з обов'язковим повторним курсом)		

#### 9. Рекомендована література

##### Основна:

1. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник / О.С. Бондар Чернігів: ЧНПУ, 2017. 68 с.
2. Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. Київ: ІВЦ „Видавництво «Політехніка»”, ТОВ „Фірма «Періодика»”, 2004. 220 с.
3. Манаєнков О.В. Моделирование структуры химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem: учебное пособие / О.В. Манаєнков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман. Тверь: ТвГТУ, 2013. 84 с.
4. Математичні методи і хімії та хімічній технології / Рудавський Ю.К., Мокрий Є.М., Піх З.Г., Чип М.М., Куриляк І.Й. За ред. Рудавського Ю.К. Львів: Світ, 1993. 208 с.
5. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. Київ: Либідь, 2005. 256 с.
6. Солтис М.М., Закордонський В.П. Математичне моделювання у хімії та хімічній технології : навч. посібник. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2011. 328 с.
7. Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. Москва : Мир, 1985. 272 с.
8. Худсон Д. Статистика для физиков. Москва : Мир, 1970. 295 с.

##### Додаткова:

1. Poroikov V.V., Filimonov D.A. Abstr. Internat. Workshop "Virtual Screening. New approaches in drug design & discovery, Marburgh (Germany), 1999.



1. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессия. Москва: Финансы и статистика, 1981. 304 с.
2. Дёрффель К. Статистика в аналитической химии. Москва : Мир. 1994. 268 с.
3. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа: учеб. Пособие для вузов. – Львов:Химия, 1984. 168 с.
4. Шараф М.А., Иллмэн Д.Л., Ковальски Б.Р. Хемометрика. Москва: Химия, 1989. 272 с.

Погоджено

з навчальним відділом

\_\_\_\_\_

«\_\_\_\_\_»\_\_\_\_\_

## Доповнення та зміни до робочої програми навчальної дисципліни

«\_\_\_\_\_»

(назва)

Протокол засідання кафедри (дата та номер)	Внесені зміни	Підпис завідувача кафедри, дата