

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи

“ _____ ” _____ 2017 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Статистичні та хемометричні методи в хімії

спеціальність (напрямок) 102 Хімія

факультет хімічний

2017 / 2018 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету

“1” серпня 2017 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Холін Юрій Валентинович, д.х.н., професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства,

Іванов Володимир Венедиктович, д.х.н., професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства,

Христенко Інна Василівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри хімічного матеріалознавства,

Пантелеймонов Антон Віталійович, к.х.н., доцент, доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “28” серпня 2017 року № 1

В.о. завідувача кафедри хімічного матеріалознавства

_____ (підпис)

Коробов О.І.

_____ (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “28” серпня 2017 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ (підпис)

Єфімов П.В.

_____ (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Статистичні та хемометричні методи в хімії” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки бакалавра

спеціальності (напряму) 102 хімія

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни: навчити студентів використовувати статистичні та хемометричні засоби для обробки даних хімічного експерименту. Студенти навчаються як кваліфіковані користувачі персонального комп’ютера та використовують комп’ютерні технології для розв’язання типових навчальних та наукових задач, вивчають хемометричні методи для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

– знайомство студентів із комп’ютерними технологіями для розв’язання типових навчальних та наукових задач;

– оволодіння програмними засобами для розв’язання прикладних хімічних задач.

1.3. Кількість кредитів 4

1.4. Загальна кількість годин 120

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна	
Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Рік підготовки	
2-й	2-й
Семестр	
4-й	4-й
Лекції	
16 год.	4 год.
Практичні, семінарські заняття	
-	8 год.
Лабораторні заняття	
32 год.	-
Самостійна робота	
72 год.	108 год.
Індивідуальні завдання	
не передбачено	

1.6. Заплановані результати навчання

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

вміти: використовувати комп’ютерні засоби обробки даних хімічного експерименту.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу

Тема 1. Експериментальні дані. фактографічна та бібліографічна хімічна інформація

«Дані»: визначення, типи. Шкали: порядкова; відношень; інтервальна. Значення хеометрії й інформатики для хімії (хімічний аналіз, параметрична ідентифікація моделей, QSAR, молекулярна інформатика, автоматизація обробки даних експерименту тощо).

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, хеометрія.

Тема 2. Представлення та статистична обробка даних

Первинне представлення даних. Дескриптивне представлення даних. Гістограми.

Результат вимірювань як випадкова величина. Генеральна сукупність та виборка. Вибіркові оцінки. Моменти. Середнє. Стандартне відхилення. Дисперсія. Коваріаційні матриці. Коефіцієнти кореляції. Перетворення даних (масштабування, автомасштабне перетворення). Задачі обробки первинних експериментальних даних: дослідження однорідності виборки, 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, χ^2 . Центральна гранична теорема. Метод максимуму правдоподібності. Функція правдоподібності. Правдоподібні оцінки параметрів генеральної сукупності при нормальному та Лапласівському розподілах похибок.

Тема 3. Перевірка статистичних гіпотез

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

Тема 4. 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: α -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 5. 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 конфірмаційний факторний аналіз. Алгоритми факторного аналізу. Факторний аналіз хроматографічних даних

Розділ 2. Лабораторні заняття

Тема 6. Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.

Тема 7. Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.

Тема 8. Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .

Тема 9. Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.

Тема 10. Сингулярний розклад.

Тема 11. Підсумкове заняття

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Виклад теоретичного матеріалу												
Тема 1. Експериментальні дані, фактографічна та бібліографічна хімічна інформація	6	2				4	9	1				8
Тема 2. Представлення та статистична обробка даних	10	4				6	14	2				12
Тема 3. Перевірка статистичних гіпотез	12	4				8	14	2				12
Тема 4. Основи кореляційного та регресійного аналізу	12	4				8	14	2				12
Тема 5. Класифікація та кластерний аналіз	8	2				6	11	1				10
Разом за розділом 1	48	16				32	62	8				54
Розділ 2. Лабораторні заняття												
Тема 1. Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.	10			4		6	8					8
Тема 2. Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.	13			6		7	13		1			12
Тема 8. Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .	13			6		7	14		2			12
Тема 9. Апроксимація концентраційних	13			6		7	13		1			12

частот виявлення неспадними функціями.											
Тема 10. Сингулярний розклад.	13		6		7	10					10
Тема 11. Підсумкове заняття	10		4		6						
Разом за розділом 2	72		32		40	58		4			54
Усього годин	120	16	32		72	120	8	4			108

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денне	заочне
1	Тема 6. Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами.	4	
2	Тема 7. Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.	6	1
3	Тема 8. Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .	6	2
4	Тема 9. Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.	6	1
5	Тема 10. Сингулярний розклад.	6	
6	Тема 11. Підсумкове заняття	4	
	Разом	32	4

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	
		денне	заочне
1	Експериментальні дані. фактографічна та бібліографічна хімічна інформація	4	8
2	Представлення та статистична обробка даних	6	12
3	Перевірка статистичних гіпотез	8	12
4	Основи кореляційного та регресійного аналізу	8	12
5	Класифікація та кластерний аналіз	6	10
6	Елементарні засоби апроксимації експериментальних залежностей. Робота з програмними засобами	6	8
7	Вивчення властивостей деяких неперервних розподілів випадкових величин.	7	12
8	Перевірка нормальності розподілу випадкових величин за критерієм χ^2 .	7	12
9	Апроксимація концентраційних частот виявлення неспадними функціями.	7	12
10	Сингулярний розклад	7	10
11	Підсумкове заняття	6	

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

7. Методи контролю

Поточний контроль на лекціях. Виконання контрольних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

8. Схема нарахування балів

Для допуску до семестрового екзамену студенти мають виконати усі лабораторні і контрольні роботи.

Поточний контроль, самостійна робота								Екзамен	Сума	
Розділ 1				Розділ 2			Разом			
T1	T2	T3	T4	T5	T6-T7	T8		T9-T10		
15					15	15	15	60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно
70 – 89	добре
50 – 69	задовільно
1 – 49	незадовільно

9. Рекомендована література

Основна література

1. Неділько С.А. Математичні методи в хімії. Київ: Либідь, 2005.
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.
3. 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.
4. Худсон Д. Статистика для фізиків. М.: Мир, 1970.

Допоміжна література

1. Шараф М.А., Иллмэн Д.Л., Ковальски Б.Р. Хемометрика. М.: Химия, 1989.
2. Доерфель К. Статистика в аналитической химии. М.: Мир. 1994.
3. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессия. М.: Финансы и статистика, 1981.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна:
<http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk>
2. Сайт кафедри хімічного матеріалознавства
<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/>