

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально-науковий інститут високих технологій
кафедра нанofізики та наноелектроніки



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник директора
з науково-педагогічної роботи
Галина ГРАБЧУК
«22» березня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Статистична обробка даних в медичній хімії

для студентів

галузь знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **магістр**
освітня програма **Високі технології (Хемоінформатика)**
(назва освітньої програми)
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>третій</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>екзамен</u>

Викладачі: к.ф.-м.н., доцент Коваленко А.В., к.ф.-м.н., доцент Курашов В.Н.

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)


на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробники: к.ф.-м.н., доцент Коваленко А.В.
к.ф.-м.н., доцент Курашов В.Н.

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри
нанофізики та наноелектроніки


_____ Олександр ПРОКОПЕНКО

Протокол № 11 від «26» серпня 2022 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол № 4 від «13» травня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____



(Наталя РУСІНЧУК)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Ознайомлення студентів із елементами математичної статистики: методами опису та аналізу експериментальних даних та критеріями перевірки статистичних гіпотез; набуття навичок використання статистичних методів у наукових дослідженнях, в тому числі міждисциплінарних.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

- 1. математику на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія»;*
- 2. загальну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія»;*

Студент повинен вміти:

застосовувати інформаційні технології в хімії на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія», зокрема, користуватись табличним процесором Mscrosoft Excel та/або LibreOffice Calc (вільне програмне забезпечення)

3. Анотація навчальної дисципліни

У цій дисципліні вивчаються основи статистичної обробки результатів експерименту. Викладаються основи теорії ймовірності та математичної статистики, критерії перевірки статистичних гіпотез, елементи кореляційного та регресійного аналізу. Практичні заняття передбачають розв'язування задач із статистичної обробки експериментальних даних, отриманих у хімічних та медичних дослідженнях.

4. Завдання (навчальні цілі)

Вивчення цієї дисципліни розвиває у студентів такі компетентності:

ІК. Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми у галузі хімії або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології

ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК12. Здатність працювати автономно.

ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел

ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.

ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Поняття випадкової величини та вибіркової статистики	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
1.2	Методи перевірки статистичних гіпотез	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
1.3	Області застосування статистичних критеріїв	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
1.4	Принцип регресійного аналізу як статистичного методу, що дозволяє обчислити передбачувані відношення між залежною змінною та однією або кількома незалежними змінними.	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
1.5	Принцип факторного аналізу і методу головних компонент в хемометриці	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
1.6	Математичні основи визначення головних компонент експериментальних даних	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
1.7	Способи виявлення структури взаємних зв'язків між змінними, зокрема виявлення груп взаємозалежних змінних	<i>Лек., практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
2.1	Проводити первинну обробку експериментальних даних із використанням табличного процесора	<i>Практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	11%
2.2	Обирати адекватний статистичний критерій для перевірки статистичної гіпотези та проводити перевірку із застосуванням табличного процесора	<i>Практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	11%
2.3	Обґрунтовувати вибір рівняння регресії та розраховувати коефіцієнти регресії	<i>Практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	11%
2.4	Оцінювати вплив шумів і завад на достовірність отриманих експериментальних даних	<i>Практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	11%
2.5	Застосовувати метод головних компонент та SVD–процедуру для обробки даних хімічного експерименту	<i>Лек., самост. роб.</i>	<i>дом.роб.</i>	11%
3.1	Здатність правильно застосовувати фахову термінологію в усній та письмовій українській мові	<i>Практи. занят., самост. роб.</i>	<i>оцінюв. на практи., МКР, екзамен</i>	5%
3.2	Здатність працювати із англійськими джерелами	<i>Самост. роб.</i>	<i>оцінювання на практи., дом.роб.</i>	5%
4.1	Здатність до самостійного пошуку необхідної інформації у науковій та технічній літературі	<i>Самост. роб.</i>	<i>оцінювання на практи., дом.роб.</i>	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни \ Програмні результати навчання	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	3.1	3.2	4.1
РН1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+	+	+	+								+
РН3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.								+	+	+	+	+			
РН4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.								+	+	+	+	+			
РН7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.															+
РН8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.													+		
РН9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.								+	+	+	+	+			
РН10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.								+	+	+	+	+			+
РН14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+	+								+
РН15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.								+	+	+	+	+			

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Відповіді на практичних заняттях - 15 балів
2. Модульна контрольна робота 1 – 15 балів
3. Модульна контрольна робота 2 – 15 балів
4. Домашня контрольна робота. – 15 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота та співбесіда на основі неї. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 36 балів.

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи та домашня контрольна робота проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. Оцінювання роботи студента з розв'язування задач проводиться на практичних заняттях.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
1	Представлення експериментальних даних. Статистика вибірок.	1	1	2
2	Ймовірність. Нормальний розподіл.	1	1	2
3	Перевірка статистичних гіпотез. Критерій максимальної правдоподібності.	1	1	2
4	Помилки I та II роду. Критерії значущості. Рівень значущості, p – значення та потужність критерію.	1	1	2
5	z -критерій. Однобічний та двосторонній критерій.	1	1	2
6	t -критерій Стьюдента. Критерій Фішера. Значення об'єму вибірки.	1	1	2
7	Перевірка гіпотез про закон розподілу. Критерій Пірсона.	1	1	2
8	Завдання регресійного аналізу. Рівняння регресії. Проста лінійна регресія.	1	1	2

9	Оцінка статистичної значущості рівняння регресії. Коефіцієнт детермінації.	1	1	2
10	Класичний факторний аналіз і метод головних компонент.	1	1	2
11	Визначення головних компонент. Умова некорельованості коефіцієнтів розвинення.	1	1	2
12	Властивості головних компонент і власних значень.	1	1	2
13	Рахунки і навантаження, їх значення в аналізі.	1	1	2
14	Основні підходи до визначення необхідної кількості врахованих головних компонент.	1	1	2
15	Метод головних компонент як засіб класифікації даних. Навчаюча вибірка.	1	1	2

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекції – 15 год.

Практичні – 15 год.

Самостійна робота - 60 год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

1. Статистичні методи в хімії / О.В.Іщенко, В.М.Михальчук, Н.І.Біла, С.В.Гайдай, О.В.Білий. –Донецьк: ДонНУ. – 2012. – 505 с.
2. Статистичні та хемометричні методи в хімії : навчальний посібник / А. В. Пантелеймонов, І. В. Христенко, В. В. Іванов та ін. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2012. – 40 с.
3. Miller, J.C. and Miller, J.N., Statistics and chemometrics for analytical chemistry, 6th Edition, Pearson Education, Canada, 2010 – 278 p.
4. Brereton, R.G., Applied Chemometrics for Scientists, John Wiley & Sons, 2007. - 379 p.
5. Brereton, Richard G., Chemometrics : data analysis for the laboratory and chemical plant, John Wiley & Sons, 2003. - 489 p.
6. Бахрушин В.Є. Методи аналізу даних : навчальний посібник для студентів / В.Є. Бахрушин. – Запоріжжя : КПУ, 2011. – 268 с.