

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

 Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ**

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	обов'язкова компонента

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	2
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: доцент Гайдай Сніжана Вікторівна


Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.
на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2022

Розробник: Гайдай Сніжана Вікторівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від «02» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 30 » червня 2022 року

1. **Мета дисципліни** – формування навичок кількісного підходу з використанням елементів теорії ймовірностей до опису та аналізу результатів хімічного експерименту, отримання практичних умінь проводити такі розрахунки.
2. **Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни** – володіти базовими знаннями університетських курсів вищої математики (інтегрування, диференціювання), а також основ загальної хімії на рівні бакалаврату.
3. **Анотація навчальної дисципліни.** Курс «Статистичні методи в хімії» побудований таким чином, щоб здобувачі освіти детально розібралися із алгоритмами обчислень під час виконання лабораторних робіт з різних курсів хімії. В рамках курсу «Статистичні методи в хімії» вивчаються раціональні методи і підходи до статистичної обробки даних, отриманих при виконанні лабораторних робіт із фундаментальних курсів (фізичної хімії, аналітичної і хімії ВМС), детально розібраний метод МНК для різних функціональних залежностей, показано можливості методу під час роботи в програмі “Origin”, правила оформлення експериментальних результатів, розглянуто експеримент з точки зору «Теорії похибок». Базова дисципліна «Статистичні методи в хімії» є важливим етапом підготовки здобувачів освіти до роботи в хімічному практикумі і необхідна для формування цілісної системи поглядів, що включає обробку одержаних експериментальних даних.
4. **Завдання (навчальні цілі):** Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на формування здатності до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1); здатності вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2); здатності до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (ЗК10); здатності застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1); здатності оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт, виходячи з вимог хімічної метрології та професійних стандартів в галузі хімії (СК3); здатності здійснювати кількісні вимірювання (обчислення) фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (СК8).

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати місце статистичних методів в системі хімічних наук	лекції, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	5

1.2	Знати види випадкових величин, закони їх розподілу, основні чисельні характеристики характеристики випадкових величин.	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач), іспит	10
1.3	Знати алгоритм застосування методу найменших квадратів до різних функціональних залежностей.	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (розв'язання задач), іспит	15
1.4	Знати алгоритм обрахунку абсолютних і відносних похибок для опосередкованих вимірювань	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач), іспит	10
2.1	Вміти користуватися статистичними методами для опису результатів експерименту;	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач), іспит	10
2.2	Вміти отримувати в повному обсязі інформацію з експерименту для застосування її при обробці експериментальних даних	практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, усні опитування	15
2.3	Вміти аналізувати і обробляти інформацію, отриману після обробки експериментальних даних статистичними методами	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач), іспит	20
2.4	Вміти розраховувати абсолютні і відносні похибки опосередкованих вимірювань і представляти результати обробки експериментальних даних належним чином з урахуванням правил оформлення	лекції, практичні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання, розв'язання задач), іспит	15

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

ПРН	РНД (код)							
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	2.4
Р01. Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.	+	+	+	+				
Р02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.	+	+	+	+	+		+	+
Р03. Описувати хімічні дані у символічному вигляді.		+	+	+	+		+	+
Р13. Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.						+	+	+
Р15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем і процесів, обробки експериментальних даних.		+	+	+	+	+	+	+
Р20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.		+	+			+		
Р23. Грамотно представляти результати своїх досліджень у письмовому вигляді державною та іноземною мовами з урахуванням мети спілкування.		+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **100 балів/60 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.4, РН 2.4 – 35/21 бали.
2. Контрольна робота №2: РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3 – 35/21 бали.
3. Виконання розрахункових самостійних задач: РН 1.2, РН 1.4, РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4 – 20/12 балів
4. Усні опитування: РН 1.1, РН 2.2 – 10/6 балів

Підсумкове оцінювання (у формі заліку):

Семестровий контроль включає контрольні роботи, усні опитування і виконання

розрахункових самостійних робіт. Оцінювання здійснюється за 100-бальною системою. Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом під час семестрового оцінювання 100 балів/60 балів. Підсумкове оцінювання проводиться у формі заліку (письмової роботи, що включає весь матеріал курсу) для студентів, які протягом семестру набрали менше 60 балів.

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом під час заліку: **20 балів /12 балів.**

Результати навчання які будуть оцінюватись: **РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 2.3, РН 2.4**

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: тестові питання (на 12 балів) і задачі (на 8 балів).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни для студентів, яким потрібно писати залікову підсумкову роботу, оцінка за залік не може бути меншою 12 балів.

Студент допускається до заліку, якщо протягом семестру він:

набрав не менше, ніж **48 балів;**

виконав і здав розрахункові самостійні завдання

7.2. Організація оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 8 тижня семестру;

контрольна робота №2: не раніше 12 тижня семестру;

персональні завдання для виконання розрахункової самостійної роботи студенти отримують не пізніше, як за 5 тижнів до закінчення семестру;

оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Студенти мають право на одне перескладання контрольної роботи у визначений викладачем термін.

7.3. Шкала відповідності оцінок

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою
90 – 100	зараховано / passed
85 – 89	
75 – 84	
65 – 74	
60 – 64	
1 – 59	не зараховано / fail

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	практ.	сам. роб.
Змістовий модуль 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТЕОРІЇ ЙМОВІРНОСТЕЙ				
1	Тема 1 Основні поняття теорії ймовірностей. Випадкові величини.	2	2	6
2	Тема 2. Закони розподілу випадкових величин. Чисельні характеристики випадкових величин.	2	2	6
3	Тема 3. Нормальний закон розподілу випадкової величини. Чисельні характеристики для нормального розподілення. Функція Лапласа	2	2	4
4	Тема 4. Теорія похибок. Оцінка похибки. Розрахунки абсолютних і відносних похибок для опосередкованих вимірювань.	2	2	6
5	Тема 5. Рівноточні і нерівноточні вимірювання. Обробка експериментальних даних.	2	2	6
6	Модульна контрольна робота 1	1	1	
Змістовий модуль 2. МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ І ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ ДО ОБРОБКИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ				
7	Тема 6. Основні принципи методу найменших квадратів. Застосування методу найменших квадратів до різних математичних функцій.	2	2	5
8	Тема 7. Лінеаризація. Метод розкладу в ряд за параметрами.	2	2	6
9	Тема 8. Оцінка надійності параметрів.	2	2	6
10	Тема 9. Основи теорії кореляції.	2	2	5
11	Модульна контрольна робота 2	1	1	
	УСЬОГО	20	20	50

Загальний обсяг **90** год., в тому числі:

Лекцій – **20** год.

Практичних робіт – **20** год

Консультації – за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 4 тижні

Самостійна робота – **50** год.

Рекомендована література

Основна:

1. Іщенко О.В. Вступ до теорії ймовірності. – К.:Логос, 2006. – 44 с.
2. Іщенко О.В., Яцимирський В.К., Гайдай С.В. Статистичні методи. – К.: LAT&K, 2009. – 319 с.
3. Іщенко О.В., Михальчук В.М., Біла Н.І., Гайдай С.В., Білий О.В. Статистичні методи в хімії. –Донецьк: ДонНУ, 2012. – 505 с.
4. Медведєв М. Г., Колодінська О. В. Дослідження операцій: навч. посіб. – К.: Вид-во Європ. ун-ту, 2006. – 158 с.
5. Єріна А. М. Статистика: структурно-логічні схеми та задачі: навч. посіб. –Київ: КНЕУ, 2010. – 491 с.
6. Матковський С.О., Гальків Л.І., Гринькевич О.С., Сорочак О.З. Статистика: навчальний посібник. – Львів: «Новий Світ – 2000», 2009. – 430с.
7. Ткач Є. І., Сторожук В. П. Загальна теорія статистики: навч. посіб. Київ: Либідь, 2011. – 320 с.

Додаткова:

1. Асєєв Г. Г., Коноваленко О. Є., Рибін О. М. Теорія ймовірностей та математична статистика. – Х.: ХДАК, 2004. – 89с.
2. Бабак В. П., Марченко Б. Г., Фриз М. Є. Теорія ймовірностей, випадкові процеси та математична статистика. – К.: Техніка, 2004. – 288с.
3. Білушак Г. І., Бобик І. О., Ватаманюк О. З., Вовк М. І., Дрогомирецька Х. Т. Теорія ймовірностей і математична статистика. – Л. : Видавництво Національного ун-ту "Львівська політехніка", 2003. – 244с.
4. Білушак Г. І., Чабанюк Я. М. Теорія ймовірностей і математична статистика. – Л.: Край, 2002. – 540с.
5. Волощенко А. Б., Джалладова І. А. Теорія ймовірностей та математична статистика. – К.: КНЕУ, 2003. – 256с.

ПИТАННЯ НА ІСПИТ/ЗАЛІК

Визначення:

- подія;
- статистична частота;
- теорема Бернуллі;
- складні події – несумісні, сумісні;
- повна група;
- протилежні події;
- випадкова величина;
- середньоквадратичне відхилення;
- центральна гранична теорема;
- випадкова помилка та систематична похибка (співставлення);
- Теорема Чебишева.

2. Добуток сумісних подій.

3. Залежні та незалежні події.

4. Теорема множення для сумісних подій.

5. Теорема повторення дослідів (формула Бернуллі).

6. Розподілення Пуассона.

7. Рівномірне розподілення для безперервної випадкової величини.

8. Математичне сподівання.

9. Властивості математичного сподівання.

10. Математичне сподівання для дискретної випадкової величини, закон розподілення якої описується розподіленням Пуассона.

11. Математичне сподівання для безперервної випадкової величини, закон розподілення якої описується рівномірним розподіленням.

12. Дисперсія.

13. Властивості дисперсії.

14. Дисперсія випадкової величини, закон розподілення якої описується рівнянням Пуассона.

15. Дисперсія для безперервної випадкової величини, закон розподілення якої описується рівномірним розподіленням.

16. Другий початковий момент. Зв'язок із дисперсією.

17. Стандартна форма нормального розподілення (змінна z).

18. Нормальне розподілення (змінна t).

19. Функція Лапласа та її використання.

20. Критерії оцінки. Оцінка математичного сподівання.

21. Критерії оцінки. Оцінка дисперсії.

22. Оцінка математичного сподівання для нормального розподілення (перевірка вимог)

23. Оцінка дисперсії для нормального розподілення (перевірка вимог).

24. Правило трьох σ . Перевірка «випадкового значення» на входження в зону трьох σ .

26. Абсолютна та відносна похибка для опосередкованих вимірювань: $U=xy$, $U=x+y$, $U=x-y$.

27. Розв'язок проблеми різниці двох великих величин.

28. Нев'язка. Основне рівняння методу найменших квадратів. Сума квадратів невязок.

29. Застосування методу найменших квадратів для залежностей: $y=ax$; $y= ax+b$.

30. Лінеаризація в методі МНК.

31. Застосування методу найменших квадратів для залежності $y= ax^2+bx+c$.

32. Метод обрахунку, оснований на розкладі в ряд за параметрами.

33. Оцінка надійності параметрів.

34. Обрахунок $\tilde{\sigma}_o^2, \tilde{\sigma}_a^2, \tilde{\sigma}_b^2, \tilde{\sigma}_c^2$.

35. Обрахунок суми квадратів невязок.

36. Центральний змішаний момент.

37. Початковий змішаний момент.

38. Статистичний аналог центрального змішаного моменту.
39. Рівняння регресії.
40. Коефіцієнт кореляції.
41. Кореляційне співвідношення.