

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

хімічний факультет

Кафедра аналітичної хімії



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ХЕМОМЕТРИКА І ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ**

**для здобувачів освітньо-наукового рівня
доктор філософії**


галузь знань
спеціальність
освітній рівень
освітньо-наукова програма
вид дисципліни

**10 Природничі науки
102 Хімія
третій «освітньо-науковий»
Хімія
вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2021/2022**
Період навчання **2 рік**
Кількість кредитів ECTS **4**
Мова викладання,
навчання та оцінювання **українська**
Форма заключного контролю **іспит**

Викладач:

Іщенко Микола Володимирович, к.х.н., доцент кафедри аналітичної хімії

Пролонговано: на **2022/2023** н.р.  (Н.Усенко) « **13** » **05** 2022 р.
на **2023/2024** н.р. _____ (_____) « _____ » _____ -20 р.
на **2024/2025** н.р. _____ (_____) « _____ » _____ 20 р.

Київ - 2021

Розробник: **Іщенко Микола Володимирович**, к.х.н., доцент кафедри аналітичної хімії
Зінько Ліонель Степанівна, к.х.н., доц., доцент кафедри аналітичної хімії

Затверджено

Завідувач кафедри аналітичної хімії



Оксана ТАНАНАЙКО

Протокол № 10 від «14» квітня 2021 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол №7 від « 20 » квітня 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____
« 20 » вересня 2021 року



Олександр РОЇК

ВСТУП

1. Мета дисципліни – Формування у аспіранта системи знань та вмінь щодо планування ефективних експериментів з розробки та валідації методик визначення елементів та речовин різної природи, прийомів оптимізації наукових експериментів та технологічних процесів, а також математичної обробки результатів експериментів у галузі хімії.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

Знати: вищу математику, основи матричної алгебри, неорганічну хімію, аналітичну хімію, органічну та фізичну хімію, статистичні методи в хімії на рівні випускника магістратури за спеціальністю «Хімія»

Вміти: використовувати на практиці методи математичної статистики, загальні теоретичні положення спектральних методів досліджень, хроматографії та біоаналітичної хімії на рівні на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».

Володіти навичками пошуку інформації, її критичної обробки та представлення, застосовувати отримані знання для вирішення прикладних та теоретичних задач у галузі хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни. Дисципліна «Хемометрика і планування експерименту» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. В рамках курсу планується поглибити системні знання аспірантів в галузі математичної статистики, хемометрики та математичної обробки експериментальних даних. Значну увагу при читанні курсу планується приділити методам математичної обробки спектральних та хроматографічних даних, а також візуалізації результатів складних багатofакторних експериментів. В курсі будуть розглянуті методи хемометричної класифікації, багатовимірної регресії та задачі оптимізації з побудовою поверхонь відгуку.

4. Завдання: забезпечити підготовку аспірантів до дослідницької роботи в сучасних аналітичних та дослідницьких хімічних лабораторіях; розвинути навички планування та інтерпретації складних багатовимірних експериментів та здатності інтерпретувати дані, отримані при лабораторних експериментах та вимірюваннях і прив'язувати їх до відповідної теорії; сприяти розвиненню здатності розв'язувати комплексні проблеми в галузі хімії та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань в галузі інноваційних технологій в аналітичній хімії; сприяти розвитку абстрактного мислення, здатності формувати робочі гіпотези та перевіряти їх на практиці із застосуванням інноваційних технологій в аналітичній хімії; розвиток здатності до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

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	Знання інноваційних математичних і статистичних методів обробки спектральних і хроматографічних даних	лекції, аналітична робота	презентація, ПсК	10
1.2	Знання основ хемометричних методів класифікації та багатовимірної регресії	лекції, практичні,		15
1.3	Знання способів планування, дизайну, та оптимізації інноваційних наукових експериментів в галузі аналітичної хімії	лекції, практичні, аналітична робота		15

2.1	Вміння застосовувати методи дисперсійного аналізу та хемометричної обробки даних для оптимізації і обробки результатів досліджень	<i>практичні</i>	15
2.2	Вміння розв'язувати комплексні проблеми та завдання оптимізації та планування хімічних експериментів з елементами інновацій; вміння інтерпретувати дані, отримані при лабораторних експериментах та вимірюваннях і прив'язувати їх до відповідної теорії	<i>лекції аналітична робота</i>	10
2.3	Набуття універсальних навичок усної і письмової презентації результатів власного наукового дослідження; збір і критичний аналіз наукової літератури, у тому числі іноземної, за заданою темою	<i>практичні, доповідь, аналітична робота</i>	15
3.1	Застосування сучасних інформаційно-комунікаційних технологій для збору, аналізу, обробки та інтерпретації інформації у галузі інновацій у аналітичній хімії	<i>лекції, практичні, аналітична робота</i>	5
3.2	Вільне володіння науковою термінологією з метою вільного професійного спілкування з колегами щодо питань у галузі інновацій в аналітичній хімії, а також тих, що стосуються сфери наукових та експертних знань	<i>практичні, аналітична робота</i>	5
4.1	Аналіз проблеми, самостійне планування та інтерпретування результатів експерименту	<i>практичні, аналітична робота</i>	5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі аналітичної хімії	<i>Практичні, аналітична робота</i>	5

* підсумковий контроль **ПсК**

6. В результаті вивчення дисципліни аспірант отримає нові сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі аналітичної хімії; відпрацює вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції та здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях.

Все це допоможе йому навчитись ініціювати, організовувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності в аналітичній хімії, які приводять до отримання нових знань та відшліфувати вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, використовуючи при цьому сучасні інноваційні технології при плануванні експерименту, а також зборі, аналізі, обробці та інтерпретації експериментальних даних складних аналітичних досліджень.

7. Схема формування оцінки

7.1. Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100 - бальною шкалою . Модульний контроль включає 1 змістовний модуль і комплексний підсумковий модуль (іспит). Впродовж навчання передбачається написання 1 модульної контрольної роботи; 2 практичні заняття та одне консультаційне.

- семестрове оцінювання

презентація референсу останніх досліджень у галузі інновацій в аналітичній хімії
модульна контрольна робота.

- **підсумкове оцінювання** - іспит.

Максимальна оцінка за семестр: **60 балів**.

Максимальна оцінка на іспиті: **40 балів**.

Максимальна загальна оцінка за курс: **100 балів**.

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

Види робіт	Змістовий модуль1 (ЗМ1)	
	Min. – 36 балів	Max. – 60 балів
Презентація референсу останніх досліджень у галузі інновацій в аналітичній хімії	24	40
Модульна контрольна робота	12	20
Загальна сума	36	60

Оцінка за презентацію референсу (за результатами пошуку) включає в себе: теоретичне наповнення матеріалу – максимум 20 балів / мінімум 12 балів, мультимедійне оформлення – максимум 10 балів / мінімум 6 балів, презентація матеріалу – максимуму 10 балів / мінімум 6 балів. *Захист проводиться на останньому тижні занять.*

На передостанньому тижні занять проводиться тематична консультація, на якій обговорюються проблемні моменти, що можуть виникнути у аспіранта при підготовці реферансу та/або презентації.

При простому розрахунку ПО = ЗМ1 + КПМ отримаємо:

	ЗМ1	іспит	Підсумкова оцінка (ПО)
Максимум	60	40	100
Мінімум	36	24	60
Критичний мінімум	20	40	60

Теми для самостійного опрацювання також виносяться на іспит.

Для здобувачів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум* – **20 балів** для одержання допуску до іспиту обов'язково слід відпрацювати всі заборгованості та написати модульну контрольну роботу мінімум на 15 балів із 20.

У випадку відсутності здобувача з поважних причин відпрацювання та передачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
Відмінно / Excellent	90-100%
Добре / Good	75-89%
Задовільно / Satisfactory	60-74%
Незадовільно / Fail	0-59%

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

НАВЧАЛЬНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ Теми	Назва Теми	Кількість годин		
		Лекції	Практ. Заняття +конс.	Самост. робота
1	Вступ. Статистичні перевірки гіпотез, одно- та багатофакторний дисперсійний аналіз. Регресійний аналіз	2	-	-
	Множинна регресія.	-	-	6
2	Матриці та вектори. Основи матричної алгебри.	2	-	-
	Візуалізація експериментальних даних.	-	-	5
	Методи обробки та попередньої підготовки спектральних даних.	-	-	5
	Геометрична інтерпретація матриць.	-	-	10
3	Методи хемометричної класифікації та регресії..	4	-	-
	Метод головних компонент та часткових найменших квадратів	-	2	-
	Метод часткових найменших квадратів	-	-	10
	Кластерний аналіз.	-	-	10
4	Методи планування експериментів. Факторний дизайн експериментів.	2	-	-
	Частковий та повний дизайн експериментів.	2	-	-
	Метод латинських квадратів.	-	-	2
	Оптимізація хроматографічного розділення компонентів.	-	-	8
	Інноваційні методи оптимізації методик люмінесцентного визначення аналітів різної природи.	-	-	10
5	Дробні факторні плани. Факторний план Плакета-Бермана	4	-	-
	Факторний план 4*4	-	2	-
	Факторні плани при оцінюванні стійкості аналітичних методик	-	-	10
	Факторні плани при підборі умов хроматографічного визначення органічних компонентів методом ВЕРХ-МС.	-	-	10
6	Задачі оптимізації.	2	-	-
7	Побудова поверхонь відгуку.	-	2	-
8	Використання графічних пакетів для побудови поверхонь відгуку	-	-	10
Модульна контрольна робота		2		
ВСЬОГО		18	6	96

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекції – **18 год.**

Практичні заняття – **4 год**

Консультації - **2 год**

Самостійна робота – **96 год.**

9. Рекомендована література:

Основна

1. Хемометрика в аналитической химии / О. Е. Родионова, А. Л. Померанцев // Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, - 1999г - стр. 5, 9-10
2. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных. Избранные главы / Пер. с англ. С.В. Кучерявского; Под ред. О.Е. Родионовой. – Черногловка: Изд-во ИПХФ РАН. – 2005. – 160 с.
3. Хемометрика в Excel: учебное пособие / Алексей Померанцев при участии О. Е. Родионовой ; М-во образования и науки Российской Федерации, Федеральное гос. бюджетное образовательное учреждение высш. проф. образования "Нац. исследовательский Томский политехнический ун-т". - Томск : Изд-во Томского политехнического ун-та, 2014. - 434 с. : ил., табл.; 21 см.; ISBN 978-5-4387-0374-7
4. М. Отто, Современные методы аналитической химии, М. Техносфера, 2006.
5. Дёрффель К. Статистика в аналитической химии. М. Мир, 1994, 1994, 350 с.

Додаткова:

1. Chemometrics in chromatography / editors, Łukasz Komsta, Yvan Vander Heyden, Joseph Sherma. RC Press, 2018. Series: Chromatographic science. ISBN 9781498772532
2. Burgard, David R. Chemometrics : chemical and sensory data / David R. Burgard, James T. Kuznicki © 1990 by CRC Press, Inc, ISBN 13: 978-1-315-89150-7
3. Chemometrics in Analytical Spectroscopy, 2nd ed By Mike J. Adams (RMIT University, Melbourne, Australia). Royal Society of Chemistry: Cambridge. 2004. xi + 224 pp. ISBN 0-85404-595-3.
4. Chemometrics : data driven extraction for science / Richard G.Brereton, Second edition. | Hoboken, NJ : JohnWiley & Sons, 2018, ISBN 9781118904664.