

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“8” 05.2019 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ

для студентів

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **“бакалавр”**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **обов'язкова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019/2020**
Семестр **IV**

(V семестр програми підготовки за ОР «бакалавр»)

Кількість кредитів ECTS **2 кредити**

Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**

Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Гайдай Сніжана Вікторівна**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробник: **Гайдай Сніжана Вікторівна**, доц., к.х.н., доц.



ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії



_____ (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від “9” квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “08” 05 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____ (_____Роїк О.С._____)
“8” 05 2019 року

Протокол № від “ ” 2020 року

Голова науково-методичної комісії _____ (_____Роїк О.С._____)

Протокол № від “ ” 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ (_____Роїк О.С._____)

1. Мета дисципліни – формування навичок кількісного підходу до опису та аналізу результатів хімічного експерименту.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати основи хімії;

2. Володіти необхідним математичним апаратом, включаючи інтегрування та диференціювання.

3. Анотація навчальної дисципліни. 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).

4. Завдання: ознайомити студентів з поняттям випадкової величини і як її можна задавати, навчити студентів застосовувати положення теорії ймовірностей та математичної статистики щодо випадкових величин, а також використовувати програмне забезпечення (метод найменших квадратів для різних функціональних залежностей) для аналізу і обробки результатів експериментальних досліджень.

Зміст курсу входить в обов'язковий мінімум професійних знань хіміка, особливо науковця. Спеціальна навчальна дисципліна "Статистичні методи в хімії" є базовою для вивчення таких спеціальних дисциплін як "Фізична хімія", "Мас-спектрометрія", "Гетерогенний каталіз", "Кінетика хімічних реакцій" та інш.

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у під- сумкові й оцінці з дис- ципліни
1. Знання				
1.1	Знати місце статистичних методів в системі хімічних наук	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	5
1.2	Знати види випадкових величин, закони їх розподілу, основні чисельні характеристики характеристики випадкових величин.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10

1.3	Знати алгоритм застосування методу найменших квадратів до різних функціональних залежностей.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2. Вміння				
2.1	Вміти користуватися статистичними методами для опису результатів експерименту;	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	15
2.2	Вміти отримувати в повному обсязі інформацію з експерименту для застосування її при обробці експериментальних даних	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
2.3	Вміти аналізувати і обробляти інформацію, отриману після обробки експериментальних даних статистичними методами	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	15
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у різних галузях хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та фахове спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати, обробляти та відтворити результати експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

7. Схема формування оцінки

Оцінка складається з суми балів отриманих за активність на практичних заняттях, виконання домашньої самостійної роботи та за модульні контрольні роботи.

7.1. Форми оцінювання студентів:

Модульні контрольні роботи — 39 балів (МКР)

Індивідуальна робота: Усні відповіді на практичних заняттях, виконання домашньої самостійної роботи, доповнення, співбесіди за МКР — 21 бал (ІР)

1. Модульні контрольні роботи ЗМ1 та ЗМ2 складаються з 3-х частин:
2. мінімального базового набору задач (питань) однотипних для всіх студентів,
3. практичних задач
4. задачі на розкриття/розуміння теорії, або питання з теорії.
5. Модульні контрольні роботи ЗМ1 та ЗМ2 включають співбесіду щодо задачі на розкриття/розуміння теорії, або питання з теорії, та передбачає питання щодо цієї задачі або теоретичного питання, й додаткові питання на розуміння теоретичного матеріалу. Перелік теоретичних питань за модулями наведено нижче в кінці цієї програми.
6. Обов'язковим для отримання іспиту/заліку є написання двох модульних контрольних.

- підсумкове оцінювання іспит.

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

4 семестр

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Підсумковий контроль (іспит)	
	Min. – 18 балів	Max. – 31 балів	Min. – 18 балів	Max. – 29 балів	Min. – 24 бали	Max. – 40 балів
Усна відповідь (практичні заняття)	3	6	3	6		
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	4		
Модульна контрольна робота 1	12	20				
Модульна контрольна робота 2			12	19		
Підсумкова контрольна робота						
Підсумковий контроль (іспит)					24	40

4 семестр

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Іспит	Разом
Max. балів	31	29	40	100
Min. балів *	18	18	24	60

* рекомендований критичний мінімум

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Статистичні методи в хімії" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання модульних контрольних робіт, активність під час практичних занять), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (критично розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквіуму / МКР).

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

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності (за умови іспиту)

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно / excellent
85 – 89	4	добре / good
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно / satisfactory
60 – 64		
0 – 59	2	не задовільно / fail

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

4 СЕМЕСТР

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	Практ. роб	С/Р
Змістовий модуль 1 Метод мас-спектрометрії				
1	Тема 1 Основні поняття теорії ймовірності. Випадкові величини.	2	2	
2	Тема 2. Закони розподілу випадкових величин. Чисельні характеристики випадкових величин.	2	2	6
3	Тема 3. Теорія похибок. Оцінка похибки.	2		6
4	Тема 4. Нерівноточні вимірювання. Обробка експериментальних даних.	2	2	6
5	<i>Модульна контрольна робота 1</i>		2	
Змістовий модуль 2 ЕСХА та ГР-спектроскопія для фізико-хімічних досліджень.				
6	Тема 5. Основні принципи методу найменших квадратів. Застосування методу найменших квадратів до різних математичних функцій.	2	2	2
7	Тема 6. Лінеаризація. Метод розкладу в ряд за параметрами.	2	2	6
8	<i>Ситуативний тест</i>			
9	Тема 7. Основи теорії кореляції.	2		4
18	<i>Підсумкова модульна контрольна робота</i>		2	
ВСЬОГО				
		14	14	30

Загальний обсяг 60 год., в тому числі:

Лекцій – 14 год.

Практичних робіт – 14 год

Консультації – 2 год

Самостійна робота - 30 год.

Рекомендована література:

Основна:

1. Гмурман В.Е. Введение в теорию вероятностей и математическую статистику.- М.: Высшая школа.-1963.- 238 с.
2. Вентцель Е.С. Теория вероятностей.- М.: Высшая школа. – 2001. – 576 с.
3. Румшицкий Л.З. Элементы теории вероятностей.- М.:Наука. – 1970. – 256 с.
4. Іщенко О.В. Вступ до теорії ймовірності. – К.:ЛОГОС.- 2006. – 44 с.
5. Іщенко О.В., Яцимирський В.К., Гайдай С.В. Статистичні методи. – К.: LAT&K. – 2009. – 319 с.
6. Іщенко О.В., Михальчук В.М., Біла Н.І., Гайдай С.В., Білий О.В. Статистичні методи в хімії.–Донецьк: ДонНУ. – 2012. – 505 с.

Додаткова:

1. Асеев Г. Г., Коноваленко О. С., Рибін О. М. Теорія ймовірностей та математична статистика. — Х. : ХДАК, 2004. — 89с.
2. Бабак В. П., Марченко Б. Г., Фриз М. С. Теорія ймовірностей, випадкові процеси та математична статистика. — К. : Техніка, 2004. — 288с.
3. Білуцак 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. Білуцак Г. І., Чабанюк Я. М. Теорія ймовірностей і математична статистика. — Л. : Край, 2002. — 540с.
5. Бондарев Б. В., Дзундза А. И. Теория вероятностей и математическая статистика. — Донецк : Кассиопея, 1998. — 226с.
6. Бочаров П. П., Печинкин А. В. Математическая статистика. — М. : Изд. Рос. ун-та Дружбы народов, 1994. — 164с.
7. 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 $\sigma_o^2, \sigma_a^2, \sigma_b^2, \sigma_c^2$.
 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.