

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Навчально-науковий інститут хімії та екології
Кафедра органічної та фармацевтичної хімії

СИЛАБУС
вибіркового освітнього компонента
«Основи аналізу даних у хімії»
підготовки Бакалавра

Силабус освітнього компонента «Основи аналізу даних у хімії» підготовки бакалавра.

Розробник:

Супрунович С. В., кандидат хімічних наук, доцент кафедри органічної та фармацевтичної хімії

Погоджено


Гарант освітньо-професійної програми



Світлана КОРОЛЬЧУК

Силабус освітнього компонента затверджено на засіданні кафедри органічної та фармацевтичної хімії

Протокол № 7 від 3 лютого 2026 р.

Завідувач кафедри:  д.х.н., професор Сливка Н. Ю.

I. Опис освітнього компонента

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітньо-професійна програма, освітній рівень	Характеристика освітнього компонента
Денна форма навчання	Галузь знань: Е Природничі науки, математика та статистика Спеціальність: ЕЗ Хімія Освітньо-професійна програма: Хімія	Вибірковий
Кількість годин / кредитів: 150 / 5		Рік навчання: 2-ий
		Семестр: 3-ій
ІНДЗ: €		Лекції: 10 год
		Практичні: 20 год
		Самостійна робота: 110 год
	Консультації: 10 год	
	Форма контролю: залік	
Мова навчання		українська

II. Інформація про викладача

Прізвище, ім'я та по батькові: *Супрунович Сергій Васильович*

Науковий ступінь: *кандидат хімічних наук*

Вчене звання: *доцент кафедри органічної хімії та біоорганічної хімії*

Посада: *доцент кафедри органічної та фармацевтичної хімії*

Контактна інформація: +83 087 589 34 39 e-mail: Suprunovich.Sergey@vnu.edu.ua

Дні занять: <https://ps.vnu.edu.ua/cgi-bin/timetable.cgi?teacher=101>

III. Опис освітнього компонента

1. Анотація курсу

Силабус вибіркового освітнього компонента «Основи аналізу даних у хімії» складено з урахуванням можливості формування індивідуальної освітньої траєкторії здобувачів освіти першого (бакалаврського) рівня.

Даний освітній компонент спрямований на формування у здобувачів освіти навичок статистичної обробки та візуалізації експериментальних результатів, побудови математичних моделей хімічних процесів. У межах курсу здобувач освіти опановує сучасні методи обробки та інтерпретації даних, що забезпечує високу точність наукових висновків.

2. Мета і завдання освітнього компонента

Освітній компонент «Основи аналізу даних у хімії» покликаний навчити здобувачів освіти методології системного підходу до обробки хімічної інформації з використанням сучасних програмних інструментів методів. Завдання курсу передбачають навчання здобувача освіти коректно оцінювати похибки вимірювань та перевіряти статистичні гіпотези щодо значущості отриманих результатів. Окрім того, освітній компонент спрямований на розвиток умінь прогнозувати властивості хімічних систем шляхом побудови та аналізу регресійних моделей.

Основними завданнями вивчення дисципліни є:

1. вивчення алгоритмів перевірки однорідності дисперсій, значущості розбіжностей між середніми значеннями та виявлення викидів у результатах хімічного аналізу;
2. набуття навичок використання методу найменших квадратів для встановлення кількісних залежностей «склад — властивість»;
3. навчитися розраховувати межі виявлення, точність, правильність та відтворюваність методик згідно з сучасними стандартами;
4. оволодіння інструментами для автоматизованої обробки великих масивів даних з використанням мови R;
5. вивчення методів оптимізації умов проведення реакцій для мінімізації кількості дослідів та максимізації інформативності результатів;

3. Soft skills

Критичне мислення, аналітичні здібності, цифрова грамотність, уважність до деталей, комунікативність, здатність до самоосвіти.

4. Структура освітнього компонента

Назви змістових модулів і тем	Усього	Лек.	Практ.	Сам. роб.	Конс.	Форма контролю/ Бали
Змістовий модуль 1. Основи аналізу даних у хімії						
Тема 1. 0D-дані. Первинна обробка вибіркового даних	30	2	4	22	2	ТР / 15
Тема 2. 1D-дані. Статистичні методи порівняння та перевірки хімічних гіпотез	30	2	4	22	2	ТР / 15
Тема 3. 2D-дані. Методи аналізу та інтерпретації спектральних даних	30	2	4	22	2	ТР / 15
Тема 4. Багатомірні дані. Обробка та аналіз цифрових зображень і розподілів у хімії	30	2	4	22	2	ТР / 15
Тема 5. Сучасні цифрові технології візуалізації та програмування в середовищі R	30	2	4	22	2	ТР / 15
Разом за модулем 1						75
ІНДЗ						ІНДЗ / 25
Всього годин:	150	10	20	110	10	

Форма контролю: ТР – тренінг, ІНДЗ – індивідуальне завдання.

IV. Політика оцінювання

Політика викладача щодо студента: студент повинен відвідувати лекції та лабораторні заняття. Матеріали пропущених лекційних занять виносяться на самостійне опрацювання. Пропущені лабораторні роботи відробляються дистанційно з використанням університетської системи дистанційного навчання Moodle.

Політика щодо академічної доброчесності: усі індивідуальні завдання студент повинен виконувати самостійно. При залученні сторонніх матеріалів мають бути посилання на джерела інформації.

Політика щодо дедлайнів та перескладання: випадку дедлайну оцінка виставляється пропорційно ступеню виконання завдання, перескладання завдань, за які одержана оцінка, не допускається.

Результати навчання, отримані через неформальну та інформальну освіту (сертифіковані онлайн-курси, стажування, тренінги), можуть бути визнані та перераховані після підтвердження їхньої відповідності програмі компонента. Результати формальної освіти визнаються шляхом перерахування кредитів на підставі академічної довідки або диплома.

Можливість отримати додаткові (бонусні) бали: додаткові бали можуть нараховуватися за наукову та творчу активність студента (публікації, участь у конференціях, олімпіадах) згідно з рішенням деканату. Нарахування бонусів здійснюється відповідно до чинного Положення про оцінювання результатів навчання в університеті.

V. Підсумковий контроль

Вивчення освітнього компонента «Основи аналізу даних у хімії» здійснюється впродовж одного семестру на другому році навчання (3-й семестр). За результатами поточної навчальної діяльності виставляється залік.

Семестровий залік – це форма підсумкового контролю, що полягає в оцінці засвоєння студентом навчального матеріалу з елементоорганічної хімії на підставі результатів виконання ним усіх видів навчальних робіт, передбачених навчальною програмою. Семестровий залік виставляється за результатами поточного контролю на лабораторних заняттях та індивідуальних завдань. Якщо протягом семестру студент набрав 60 і більше балів, він отримує залік.

У випадку незадовільної підсумкової оцінки (менше 60 балів) здобувач освіти складає залік під час ліквідації академічної заборгованості. У цьому випадку бали, набрані під час поточного оцінювання анулюються. Максимальна кількість балів на залік під час ліквідації академічної заборгованості становить 100 балів.

Перелік завдань до заліку:

1. На основі масиву паралельних визначень масової частки компонента в зразку виконати перевірку даних на наявність викидів, розрахувати вибіркові характеристики.
2. За результатами двох серій вимірювань, виконаних різними методами, провести їх порівняння та встановити значимість у відтворюваності методів.
3. Використовуючи результати аналізу стандартного зразка з відомим вмістом речовини зробити висновок про наявність систематичної похибки.
4. На основі масиву даних про вихід продукту при різних температурах провести дисперсійний аналіз та зробити висновок про вплив експериментальних факторів на перебіг реакції.
5. За даними вимірювань серії стандартних розчинів побудувати рівняння регресії та оцінити адекватність моделі.
6. На основі масиву значень оптичної густини від довжини хвилі провести математичну деконволюцію спектральних сигналів для визначення характеристик індивідуальних смуг поглинання.
7. За експериментальними даними розмірів часток побудувати гістограму, апроксимувати дані логнормальним розподілом.

8. На основі результатів аналізу серії проб з низьким вмістом речовини розрахувати межу виявлення та межу кількісного визначення аналітичної методики.
9. За масивом вмісту кількох домішок у зразках провести розрахунок матриці парних коефіцієнтів кореляції та виявити найбільш статистично значущі зв'язки між ними.
10. Побудувати у R кореляційну діаграму на основі даних із зовнішнього файла.

Шкала оцінювання

Оцінка в балах	Лінгвістична оцінка
90–100	Зараховано
82–89	
75–81	
67–74	
60–66	
1–59	Незараховано (необхідне перескладання)

VI. Рекомендована література та інтернет-ресурси

Основні:

1. Супрунович С. В., Кормош Ж. О., Сливка Н. Ю. Статистичні та хемометричні методи в хімії : навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. Луцьк: ВНУ імені Лесі Українки, 2022. 210 с. URI: <https://evnuir.vnu.edu.ua/handle/123456789/21170>
2. Супрунович С. В. Статистичні та хемометричні методи в хімії : методичні рекомендації для студентів факультету хімії, екології та фармації / Луцьк: ВНУ ім. Лесі Українки, 2021. 80 с.
3. Супрунович С. В., Кормош Ж. О., Сливка Н. Ю. Статистичні та хемометричні методи в хімії : курс лекцій / Луцьк: ВНУ ім. Лесі Українки, 2021. 90 с.

Додаткові:

4. Miller J. N., Miller J. C. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry / Harlow : Prentice Hall, Pearson Education Limited,. 6th Edition. 278 p. ISBN: 978-0-273-73042-2
5. Brown S.D. The chemometrics revolution re-examined / Journal of Chemometrics. 2017;31:e2856. doi: 10.1002/cem.2856.BROWN

6. Internet-джерела

7. DataCamp / © 2025 DataCamp Inc. – URL: <https://www.datacamp.com> (дата звернення: 29.08.2025)
8. Супрунович С.В. Основи аналізу даних у хімії. Дистанційний курс LMS Moodle. ВНУ імені Лесі Українки, 2025 р. URL: <https://moodle.vnu.edu.ua/course/view.php?id=3196> (дата звернення: 29.08.2025). Режим доступу: через авторизацію.