

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ

**НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ О.О. БОГОМОЛЬЦЯ**

**МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ
до лекцій**

Навчальна дисципліна	Основи хімічної метрології
Галузь знань	22 «Охорона здоров'я»
Спеціальність	226 «Фармація, промислова фармація»
Спеціалізація	226.01 «Фармація»
Форма навчання	Вечірня
Кафедра	Аналітичної, фізичної та колоїдної хімії

Затверджено на засіданні кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії
Протокол № 1 від 29 серпня 2024 р.

Розглянуто та затверджено на засіданні ЦМК зі спеціальності 226 «Фармація,
промислова фармація»
Протокол № 1 від 30 серпня 2024 р.

Автор: к.хім.н., доцентка, доцентка закладу вищої освіти кафедри аналітичної,
фізичної та колоїдної хімії Пушкарьова Я.М.

ЗМІСТ

Лекція № 1 «Метрологія як наука про вимірювання та її роль у фармації та медицині»	3
Лекція № 2 «Похибки вимірювань: загальні положення та класифікація; джерела похибок у хімічному аналізі».....	7
Лекція № 3 «Метрологічні характеристики фармацевтичного аналізу».....	11
Лекція № 4 «Валідація аналітичних методик і випробувань».....	14
Лекція № 5 «Основні ідеї регресійного аналізу та кореляційного аналізу. Закони розподілу дискретних та неперервних випадкових величин».....	17
Лекція № 6 «Огляд основних хемометричних методів та їх застосування у фармації та медицині»	21

Лекція № 1 «Метрологія як наука про вимірювання та її роль у фармації та медицині»

Вид лекції: традиційна (інформаційна).

Компетентності:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати задачі дослідницького та/або інноваційного характеру у сфері фармації.

– **загальні:**

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 01).
2. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності (ЗК 02).
3. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 03).
4. Здатність працювати в команді (ЗК 06).

– **фахові:**

1. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації / промислової фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах (ФК 01).
2. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації (ФК 02).

Мета:

- 1) дидактична мета – сформувати систематизовані знання щодо основних етапів розвитку метрології; розкрити поняття «фізична величина» та «вимірювання»; проаналізувати Закон України «Про метрологію та метрологічну діяльність»; розкрити значення хімічної метрології відповідно до потреб та інтересів галузі охорони здоров'я; сформувати систематизовані знання щодо ключових аспектів ролі хімічної метрології у фармації та медицині;
- 2) виховна мета – сприяти формуванню наукового світогляду;
- 3) розвивальна мета – розвивати інтелектуальні здібності, мислення, самостійність.

Обладнання лекції: мультимедійна система, відповідне програмне забезпечення.

Завдання лекції:

- 1) знати предмет, об'єкт та завдання метрології;
- 2) уміти класифікувати величини та вимірювання;
- 3) знати сфери застосування хімічної метрології у фармації та медицині;
- 4) уміти ідентифікувати завдання та значимість метрології у відповідних сферах фармації та медицини.

План лекції:

Назва етапу лекції	Зміст етапів	Освітня мета етапу	Час
Вступна частина	<p>Представити інформацію щодо необхідності цілеспрямованої політики, направленої на ефективне функціонування систем метрології, стандартизації та сертифікації.</p> <p>Представити сучасні дані щодо ролі хімічної метрології у фармацевтичній промисловості.</p>	Розкрити актуальність теми лекції; ознайомити студентів з планом лекції.	5 хвилин
Основна частина	<p>1. Основні етапи розвитку метрології: розкрити зміст шести етапів розвитку метрології.</p> <p>2. Вимірювання та фізична величина: визначення понять; класифікація вимірювань; вимірювання у хімічному аналізі; класифікація величин.</p> <p>3. Закон України «Про метрологію та метрологічну діяльність»: загальні положення, одиниці вимірювання та сфери законодавчо регульованої метрології. Підкреслити, що перелік сфер законодавчо регульованої метрології включає захист життя та охорони здоров'я громадян, контроль якості та безпеки харчових продуктів і лікарських засобів.</p>	<p>Оволодіти знаннями щодо становлення метрології як науки про вимірювання.</p> <p>Оволодіти знаннями щодо понять «вимірювання» та «фізична величина»; усвідомити значущість вимірювання у сфері хімії та фармації.</p> <p>Проаналізувати Закон України «Про метрологію та метрологічну діяльність».</p>	30 хвилин

	<p>4. Сфери застосування хімічної метрології у фармації:</p> <p>1) статистичне оброблення результатів аналізу;</p> <p>2) метрологічне обґрунтування методики фармацевтичного аналізу;</p> <p>3) отримання валідаційних характеристик методик фармацевтичного аналізу.</p> <p>5. Метрологія у медицині. Акцентувати увагу на необхідності забезпечення єдності вимірювань у медичній практиці.</p>	<p>Розкрити значення та основні завдання метрології фармацевтичного аналізу:</p> <p>Розкрити значення метрології у сфері медицини.</p>	
Підсумки	Виокремити значущість вимірювання у сфері хімії та фармації, а також важливість хімічної метрології для фармації (медицини).	Підсумувати викладений матеріал; підкреслити визначення, роль та основну мету метрології, а також необхідність знань і розумінь основ хімічної метрології для професійної підготовки майбутніх магістрів фармації.	5 хвилин
Відповіді на запитання	Активні діалог / дискусія / обговорення.	Роз'яснити незрозумілі та найбільш складні моменти лекції.	5 хвилин

Рекомендована література:

Основна

1. Пушкарьова Я. М., Зайцева Г. М. Основи хімічної метрології: навчально-методичний посібник. [Електронне видання]. Національний медичний університет імені О.О. Богомольця. – Київ, 2024. – С. 7-10. URL: <http://ir.librarynmu.com/handle/123456789/11217> (дата звернення: 23.07.2024).

2. Про метрологію та метрологічну діяльність : Закон України від 05.06.2014 р. № 1314-VII : станом на 1 січ. 2022 р. (розділи 1-3). URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1314-18#Text> (дата звернення: 23.07.2024).

3. Настанова Eurachem «Термінологія аналітичного вимірювання. Вступ до VIM 3». Вид. офіц. Київ : ТОВ «Юрка Любченка», 2015. – С. 1-11. URL: https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/TAM_2011_UA2dISBN.pdf (дата звернення: 23.07.2024).

4. Про затвердження переліку категорій законодавчо регульованих засобів вимірювальної техніки, що підлягають періодичній повірці : Постанова Каб. Міністрів України від 04.06.2015 р. № 374 : станом на 1 січ. 2022 р. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/374-2015-п#Text> (дата звернення: 23.07.2024).

Додаткова

1. Біофізика. Фізичні методи аналізу та метрологія : підручник / Е. І. Личковський, В.О. Тіманюк, О.В. Чалий [та ін.] ; за ред. Е. І. Личковського, В. О. Тіманюка. – Вінниця : Нова Книга, 2014. – С. 425-429.

2. 42-7.8:2021. Настанова. Лікарські засоби. Біоаналітична частина дослідження. Чинний від 2021-03-22. Вид. офіц. Київ, 2021. – С 1-10. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v0522282-21#Text> (дата звернення: 23.07.2024).

Інформаційні ресурси

1. <https://nmuofficial.com/zagalni-vidomosti/kafedri/departament-medical-general-chemistry/>

2. <https://likar.nmu.kiev.ua/md/course/view.php?id=8225>

Питання для самопідготовки студента до лекції:

1. Поняття «метрологія», «вимірювання» та «фізична величина».
2. Об'єкт, предмет та завдання метрології.
3. Сфери законодавчо регульованої метрології.
4. Основні завдання метрології фармацевтичного аналізу.
5. Проаналізувати Постанову Каб. Міністрів України від 04.06.2015 р. № 374 щодо переліку категорій законодавчо регульованих засобів вимірювальної техніки, що підлягають періодичній повірці, та виокремити засоби вимірювальної техніки, що мають відношення до фармації / медицини.

Методична розробка складена: к.хім.н., доценткою, доценткою закладу вищої освіти кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії Пушкарьовою Я.М.

Лекція № 2 «Похибки вимірювань: загальні положення та класифікація; джерела похибок у хімічному аналізі»

Вид лекції: традиційна (інформаційна).

Компетентності:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати задачі дослідницького та/або інноваційного характеру у сфері фармації.

– загальні:

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 01).
2. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності (ЗК 02).
3. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 03).
4. Здатність працювати в команді (ЗК 06).

– фахові:

1. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації / промислової фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах (ФК 01).
2. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації (ФК 02).

Мета:

- 1) дидактична мета – розкрити суть та значення похибки виміру; проаналізувати класифікацію похибок; продемонструвати та проаналізувати алгоритми перевірки однорідності вибірки за допомогою критерію Q та $3s$ -критерію; проаналізувати специфіку хімічного аналізу як метрологічної дисципліни; розкрити причини та джерела виникнення похибок у хімічному аналізі;
- 2) виховна мета – сприяти формуванню наукового світогляду;
- 3) розвивальна мета – розвивати інтелектуальні здібності, мислення, самостійність.

Обладнання лекції: мультимедійна система, відповідне програмне забезпечення.

Завдання лекції:

- 1) знати класифікацію похибок;
- 2) уміти ідентифікувати тип похибки;
- 3) знати особливості застосування критерію Q та $3s$ -критерію;
- 4) уміти визначати грубі похибки;
- 5) знати специфіку хімічного аналізу як метрологічної дисципліни;
- 6) знати причини та джерела виникнення похибок у хімічному аналізі;
- 7) уміти визначати та прогнозувати можливі причини та джерела виникнення похибок при виконанні експериментального дослідження.

План лекції:

Назва етапу лекції	Зміст етапів	Освітня мета етапу	Час
Вступна частина	<p>Представити інформацію щодо необхідності дослідження отриманих експериментальних даних з метою оцінки похибок і внесення відповідних поправок у кінцевий результат.</p> <p>Представити інформацію, що хімічний аналіз вивчає методи і засоби вимірювання хімічних властивостей речовин та складу зразків.</p>	Розкрити актуальність теми лекції; ознайомити студентів з планом лекції.	5 ХВИЛИН
Основна частина	<p>1. Класифікація похибок: за способом вираження; за залежністю від значення вимірюваної величини; за характером поведінки у часі та відповідно до режиму вимірювань.</p> <p>2. Перевірка однорідності вибірки: алгоритми перевірки однорідності вибірки за допомогою критерію Q та $3s$-критерію.</p> <p>3. Специфіка хімічного аналізу як метрологічної дисципліни: проведення вимірювань різних параметрів; застосування різноманітних методів вимірювання; використання стандартних зразків речовин; нелінійні залежності; обробка складних багатовимірних даних.</p>	<p>Оволодіти знаннями щодо класифікації похибок вимірів та уміннями ідентифікувати тип похибки.</p> <p>Оволодіти уміннями визначати наявність / відсутність промахів (грубих похибок) у результатах хімічного аналізу.</p> <p>Сформувати розуміння специфіки хімічного аналізу як метрологічної дисципліни.</p>	30 ХВИЛИН

	4. Причини виникнення похибок у хімічному аналізі: систематичні та випадкові похибки; інструментальні похибки; методичні похибки; обчислювальні похибки; особисті похибки.	Оволодіти знаннями щодо основних причин та джерел виникнення похибок у хімічному аналізі; сформувати уміння визначати та прогнозувати можливі причини та джерела виникнення похибок при виконанні експериментального дослідження.	
Підсумки	Виокремити факт, що однорідність вибірки є необхідною умовою для забезпечення достовірності статистичної обробки результатів кількісного аналізу. Виокремити думку, що у хімічному аналізі важливо враховувати похибки, які можуть виникнути на різних етапах аналізу.	Підсумувати викладений матеріал; підкреслити практичну цінність знань щодо класифікації похибок та умінь виключати грубі похибки з вибірки експериментальних результатів. Підкреслити важливість умінь визначати та прогнозувати можливі причини та джерела виникнення похибок при виконанні експериментального дослідження.	5 хвилин
Відповіді на запитання	Активні діалог / дискусія / обговорення.	Роз'яснити незрозумілі та найбільш складні моменти лекції.	5 хвилин

Рекомендована література:

Основна

1. Пушкарьова Я. М., Зайцева Г. М. Основи хімічної метрології: навчально-методичний посібник. [Електронне видання]. Національний медичний університет імені О.О. Богомольця. – Київ, 2024. – С. 21-32. URL: <http://ir.librarynmu.com/handle/123456789/11217> (дата звернення: 23.07.2024).

2. Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». – 2-е вид. – Доповнення 2. Харків : Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів», 2018. – 5.3.N.1. Статистичний аналіз результатів хімічного експерименту (розділи 1.2 та 2.4).

Додаткова

1. Bettencourt da Silva R., Ellison S. L. R. (eds.). Eurachem/CITAC Guide: Assessment of performance and uncertainty in qualitative chemical analysis. First Edition. Eurachem, 2021. 48 p. URL: https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/AQA_2021_EN_v01a.pdf (дата звернення: 23.07.2024).

2. Термінологія аналітичного вимірювання. Вступ до VIM 3: за ред. В. Барвік та Е. Прічард: переклад першого видання настанови Eurachem 2011 р. – К.: ТОВ «Юрка Любченка», 2015. – С. 13-16, 33-36. URL: https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/TAM_2011_UA2dISBN.pdf (дата звернення: 23.07.2024)

Інформаційні ресурси

1. <https://nmuofficial.com/zagalni-vidomosti/kafedri/department-medical-general-chemistry/>
2. <https://likar.nmu.kiev.ua/md/course/view.php?id=8225>

Питання для самопідготовки студента до лекції:

1. Класифікація похибок.
2. Поняття «промах» або «груба похибка». Виключення значень варіант, що випадають.
3. Характеристика хімічного аналізу як метрологічної дисципліни.
4. Поняття «систематична похибка», «випадкова похибка», «інструментальна похибка», «методична похибка», «особиста похибка», «обчислювальна похибка».

Методична розробка складена: к.хім.н., доценткою, доценткою закладу вищої освіти кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії Пушкарьовою Я.М.

Лекція № 3 «Метрологічні характеристики фармацевтичного аналізу»

Вид лекції: традиційна (інформаційна).

Компетентності:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати задачі дослідницького та/або інноваційного характеру у сфері фармації.

– **загальні:**

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 01).
2. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності (ЗК 02).
3. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 03).
4. Здатність працювати в команді (ЗК 06).

– **фахові:**

1. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації / промислової фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах (ФК 01).
2. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації (ФК 02).

Мета:

1) дидактична мета – проаналізувати формули для розрахунку основних метрологічних характеристик методики аналізу; сформувані систематизовані знання щодо їх практичної значущості; сформувані вміння інтерпретувати результати обчислень;

2) виховна мета – сприяти формуванню наукового світогляду;

3) розвивальна мета – розвивати інтелектуальні здібності, мислення, самостійність.

Обладнання лекції: мультимедійна система, відповідне програмне забезпечення.

Завдання лекції:

1) знати формули для розрахунку основних метрологічних характеристик методики аналізу;

2) вміти розраховувати основні метрологічні характеристик методики аналізу;

3) вміти представляти результати кількісного аналізу із застосуванням статистичної обробки;

4) вміти інтерпретувати результати обчислень.

План лекції:

Назва етапу лекції	Зміст етапів	Освітня мета етапу	Час
Вступна частина	Представити інформацію, що метрологічні характеристики методики аналізу встановлюють шляхом статистичної обробки отриманої експериментальної вибірки.	Розкрити актуальність теми лекції; ознайомити студентів з планом лекції.	5 хвилин
Основна частина	Демонструвати формули для розрахунку основних метрологічних характеристик методики аналізу та аналізувати їх на конкретних прикладах, а саме: середнє вибірки, стандартне відхилення, дисперсія, стандартне відхилення середнього значення, відносна дисперсія, відносне стандартне відхилення, відносне стандартне відхилення середнього результату, довірчий інтервал.	Оволодіти знаннями та уміннями щодо розрахунку основних метрологічних характеристик методики аналізу та представлення результатів кількісного аналізу.	30 хвилин
Підсумки	Виокремити значущість статистичної обробки результатів кількісного хімічного аналізу.	Підсумувати викладений матеріал; підкреслити важливість і актуальність отриманих знань для роботи дослідницького та / або інноваційного характеру майбутніх магістрів фармації.	5 хвилин
Відповіді на запитання	Активні діалог / дискусія / обговорення.	Роз'яснити незрозумілі та найбільш складні моменти лекції.	5 хвилин

Рекомендована література:

Основна

1. Пушкарьова Я. М., Зайцева Г. М. Основи хімічної метрології: навчально-методичний посібник. [Електронне видання]. Національний медичний університет імені О.О. Богомольця. – Київ, 2024. – С. 33-48. URL: <http://ir.library.nmu.com/handle/123456789/11217> (дата звернення: 23.07.2024).

2. Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». – 2-е вид. – Доповнення 2. Харків : Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів, 2018. – 5.3.N.1. Статистичний аналіз результатів хімічного експерименту (розділи 1.1, 1.4 та 1.5).

Додаткова

1. Біофізика. Фізичні методи аналізу та метрологія : підручник / Е. І. Личковський, В.О. Тіманюк, О.В. Чалий [та ін.] ; за ред. Е. І. Личковського, В. О. Тіманюка. – Вінниця : Нова Книга, 2014. – С. 433-436.

Інформаційні ресурси

1. <https://nmuofficial.com/zagalni-vidomosti/kafedri/departament-medical-general-chemistry/>

2. <https://likar.nmu.kiev.ua/md/course/view.php?id=8225>

Питання для самопідготовки студента до лекції:

1. Формули для розрахунку основних метрологічних характеристик методики аналізу.

2. Представлення результатів кількісного аналізу.

Методична розробка складена: к.хім.н., доценткою, доценткою закладу вищої освіти кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії Пушкарьовою Я.М.

Лекція № 4 «Валідація аналітичних методик і випробувань»

Вид лекції: традиційна (інформаційна).

Компетентності:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати задачі дослідницького та/або інноваційного характеру у сфері фармації.

– загальні:

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 01).
2. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності (ЗК 02).
3. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 03).
4. Здатність працювати в команді (ЗК 06).

– фахові:

1. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації / промислової фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах (ФК 01).
2. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації (ФК 02).

Мета:

1) дидактична мета – сформувати систематизовані знання щодо валідації аналітичних методик і випробувань; проаналізувати аналітичні випробування і методики, які підлягають валідації; пояснити валідаційні характеристики і вимоги; усвідомлювати значущість валідації аналітичних методик і випробувань для фармації та медицини;

2) виховна мета – сприяти формуванню наукового світогляду;

3) розвивальна мета – розвивати інтелектуальні здібності, мислення, самостійність.

Обладнання лекції: мультимедійна система, відповідне програмне забезпечення.

Завдання лекції:

- 1) знати аналітичні випробування і методики, які підлягають валідації;
- 2) знати валідаційні характеристики і вимоги;
- 3) вміти визначати перелік необхідних валідаційних характеристик для різних випробувань і методик.

План лекції:

Назва етапу лекції	Зміст етапів	Освітня мета етапу	Час
Вступна частина	Представити інформацію, що валідація методик є надзвичайно важливим	Розкрити актуальність теми лекції; ознайомити студентів	5 хвилин

	процесом у наукових дослідженнях, фармації та медицині. Валідація є процедурою перевірки точності, надійності і придатності методики або інструменту, що використовується для вимірювання, оцінки або контролю даних.	з планом лекції.	
Основна частина	<p>1. Аналітичні випробування і методики, які підлягають валідації: випробування на ідентифікацію; кількісні випробування для визначення домішок; випробування на граничний вміст для контролю домішок.</p> <p>2. Валідаційні характеристики і вимоги: правильність, прецизійність; специфічність; межа виявлення; межа кількісного визначення; лінійність; діапазон застосування.</p>	<p>Оволодіти знаннями щодо призначення та практичного застосування аналітичних методик і випробувань, що підлягають валідації.</p> <p>Оволодіти знаннями щодо практичної значимості валідаційних характеристик і вимог, а також уміннями визначати перелік необхідних валідаційних характеристик для різних випробувань і методик.</p>	30 хвилин
Підсумки	Виокремити значущість валідації аналітичних методик і випробувань у фармації та медицині, що полягає у забезпеченні наукової обґрунтованості, точності і довіри до вимірювань і результатів.	Підсумувати викладений матеріал; підкреслити важливість і актуальність отриманих знань для роботи дослідницького та / або інноваційного характеру майбутніх магістрів фармації.	5 хвилин
Відповіді на	Активні діалог / дискусія /	Роз'яснити	5

запитання	обговорення.	незрозумілі та найбільш складні моменти лекції.	хвилин
-----------	--------------	-------------------------------------------------	--------

Рекомендована література:

Основна

1. Пушкарьова Я. М., Зайцева Г. М. Основи хімічної метрології: навчально-методичний посібник. [Електронне видання]. Національний медичний університет імені О.О. Богомольця. – Київ, 2024. – С. 75-79. URL: <http://ir.librarynmu.com/handle/123456789/11217> (дата звернення: 23.07.2024).

2. Настанова Eurachem «Термінологія аналітичного вимірювання. Вступ до VIM 3». Вид. офіц. Київ : ТОВ «Юрка Любченка», 2015. – С. 38-47. URL: https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/TAM_2011_UA2dISBN.pdf (дата звернення: 23.07.2024).

3. Настанова Eurachem «Придатність аналітичних методів для конкретного застосування. Настанова для лабораторій з валідації методів та суміжних питань»: за ред. Б. Магнуссона та У. Ернемарка: переклад другого видання 2014 р. – К.: ТОВ «Юрка Любченка», 2016. – С. 9-62. URL: https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/MV_guide_2nd_ed_UA.pdf (дата звернення: 23.07.2024).

Додаткова

1. 42-7.8:2021. Настанова. Лікарські засоби. Біоаналітична частина дослідження. Чинний від 2021-03-22. Вид. офіц. Київ, 2021. – С. 12-22. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v0522282-21#Text> (дата звернення: 23.07.2024).

Інформаційні ресурси

1. <https://nmuofficial.com/zagalni-vidomosti/kafedri/department-medical-general-chemistry/>

2. <https://likar.nmu.kiev.ua/md/course/view.php?id=8225>

Питання для самопідготовки студента до лекції:

1. Аналітичні випробування і методики, які підлягають валідації.
2. Валідаційні характеристики і вимоги.

Методична розробка складена: к.хім.н., доценткою, доценткою закладу вищої освіти кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії Пушкарьовою Я.М.

Лекція № 5 «Основні ідеї регресійного аналізу та кореляційного аналізу. Закони розподілу дискретних та неперервних випадкових величин»

Вид лекції: традиційна (інформаційна).

Компетентності:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати задачі дослідницького та/або інноваційного характеру у сфері фармації.

– загальні:

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 01).
2. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності (ЗК 02).
3. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 03).
4. Здатність працювати в команді (ЗК 06).

– фахові:

1. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації / промислової фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах (ФК 01).
2. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації (ФК 02).

Мета:

- 1) дидактична мета – сформувати систематизовані знання щодо основ регресійного та кореляційного аналізу; проаналізувати рівняння лінійної регресії та розрахунок її параметрів; проаналізувати види нелінійної регресії; проаналізувати розрахунок коефіцієнта кореляції; проаналізувати розрахунок межі виявлення; усвідомлювати практичну значущість розглянутих методів; проаналізувати закони розподілу дискретних випадкових величин (біноміальний розподіл, розподіл Пуассона); проаналізувати закони розподілу неперервних випадкових величин (показниковий розподіл, нормальний закон розподілу);
- 2) виховна мета – сприяти формуванню наукового світогляду;
- 3) розвивальна мета – розвивати інтелектуальні здібності, мислення, самостійність.

Обладнання лекції: мультимедійна система, відповідне програмне забезпечення.

Завдання лекції:

- 1) знати основи регресійного аналізу;
- 2) вміти розраховувати параметри лінійної регресії;
- 3) знати види нелінійної регресії;
- 3) знати основи кореляційного аналізу;
- 4) вміти розраховувати коефіцієнт кореляції;
- 5) вміти розраховувати межу виявлення.
- 6) вміти проводити розрахунки відповідно до формули Бернуллі;

7) знати основні характеристики біноміального розподілу та розподілу Пуассона;

8) знати основні характеристики показникового розподілу та нормального закону розподілу.

План лекції:

Назва етапу лекції	Зміст етапів	Освітня мета етапу	Час
Вступна частина	Представити інформацію, що при використанні багатьох хімічних і фізико-хімічних методів кількісного аналізу безпосередньому вимірюванню піддається деяка величина y , що є лінійною функцією шуканої концентрації (кількості) x визначуваної речовини або елемента. Навести приклади застосування дискретних статистичних розподілів у фармацевтичному аналізі.	Розкрити актуальність теми лекції; ознайомити студентів з планом лекції.	5 хвилин
Основна частина	<p>1. Лінійні та нелінійні регресії: демонструвати відповідні графічні залежності та математичні рівняння; розрахунок параметрів лінійної регресії та коефіцієнта кореляції.</p> <p>2. Статистична оцінка межі виявлення: поняття та значення цієї валідаційної характеристики; розрахунок межі виявлення.</p> <p>3. Закони розподілу дискретних випадкових величин: біноміальний розподіл та розподіл</p>	<p>Оволодіти знаннями щодо основ регресійного та кореляційного аналізу та уміннями проводити необхідні обчислення.</p> <p>Оволодіти знаннями щодо практичної значимості знань основ регресійного аналізу та уміннями обчислювати межу виявлення.</p> <p>Оволодіти знаннями щодо основних характеристик біноміального</p>	30 хвилин

	Пуассона. 4. Закони розподілу неперервних випадкових величин: показниковий (експоненційний) розподіл, нормальний закон розподілу.	розподілу та розподілу Пуассона, а також проаналізувати їх застосування у фармацевтичному аналізі. Оволодіти знаннями щодо основних характеристик показникового розподілу та нормального закону розподілу, а також проаналізувати їх значущість та практичне значення.	
Підсумки	Виокремити значущість лінійної залежності для багатьох хімічних і фізико-хімічних методів кількісного аналізу та практичне значення межі виявлення як валідаційної характеристики. Виокремити значущість та актуальність розглянутих питань в сучасних умовах, коли на перший план у створенні нових лікарських засобів виходить попереднє комп'ютерне моделювання їх структури та прогнозування властивостей.	Підсумувати викладений матеріал; підкреслити важливість і актуальність отриманих знань для роботи дослідницького та / або інноваційного характеру майбутніх магістрів фармації.	5 хвилин
Відповіді на запитання	Активні діалог / дискусія / обговорення.	Роз'яснити незрозумілі та найбільш складні моменти лекції.	5 хвилин

Рекомендована література:

Основна

1. Пушкарьова Я. М., Зайцева Г. М. Основи хімічної метрології: навчально-методичний посібник. [Електронне видання]. Національний медичний університет

імені О.О. Богомольця. – Київ, 2024. – С. 80-97. URL: <http://ir.library.nmu.com/handle/123456789/11217> (дата звернення: 23.07.2024).

2. Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». – 2-е вид. – Доповнення 2. Харків : Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів», 2018. – 5.3.N.1. Статистичний аналіз результатів хімічного експерименту (розділи 7 та 11).

Додаткова

1. Руденко В. М. Математична статистика. Навч. посіб. – К.: Центр учбової літератури, 2012. – С. 94-128.

Інформаційні ресурси

1. <https://nmuofficial.com/zagalni-vidomosti/kafedri/department-medical-general-chemistry/>

2. <https://likar.nmu.kiev.ua/md/course/view.php?id=8225>

Питання для самопідготовки студента до лекції:

1. Лінійні та нелінійні регресії.
2. Межа виявлення: визначення, практична значущість, розрахунок.
3. Функції випадкових величин.

Методична розробка складена: к.хім.н., доценткою, доценткою закладу вищої освіти кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії Пушкарьовою Я.М.

Лекція № 6 «Огляд основних хеометричних методів та їх застосування у фармації та медицині»

Вид лекції: традиційна (інформаційна).

Компетентності:

– **інтегральна компетентність:** здатність розв'язувати задачі дослідницького та/або інноваційного характеру у сфері фармації.

– **загальні:**

1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 01).
2. Знання та розуміння предметної області; розуміння професійної діяльності (ЗК 02).
3. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 03).
4. Здатність працювати в команді (ЗК 06).

– **фахові:**

1. Здатність інтегрувати знання та розв'язувати складні задачі фармації / промислової фармації у широких або мультидисциплінарних контекстах (ФК 01).
2. Здатність збирати, інтерпретувати та застосовувати дані, необхідні для професійної діяльності, здійснення досліджень та реалізації інноваційних проєктів у сфері фармації (ФК 02).

Мета:

1) дидактична мета – сформувати систематизовані знання щодо основних завдань хеометрії та основних хеометричних методів; проаналізувати принципи основних хеометричних методів; проаналізувати задачі та проблеми фармацевтичного аналізу, що можуть бути вирішені чи оптимізовані за допомогою хеометричних методів;

2) виховна мета – сприяти формуванню наукового світогляду;

3) розвивальна мета – розвивати інтелектуальні здібності, мислення, самостійність.

Обладнання лекції: мультимедійна система, відповідне програмне забезпечення.

Завдання лекції:

- 1) знати аспекти реалізації основних хеометричних методів;
- 2) знати практичне застосування основних хеометричних методів;
- 3) вміти пропонувати необхідний хеометричний метод до вирішення відповідних задач кількісного аналізу;
- 4) знати практичне застосування основних хеометричних методів у сфері фармації;
- 5) вміти пропонувати необхідний хеометричний метод до вирішення відповідних задач фармацевтичного аналізу.

План лекції:

Назва етапу лекції	Зміст етапів	Освітня мета етапу	Час
Вступна частина	<p>Представити інформацію, що хемометрія це наука на стику прикладної математики та хімії і наразі є сучасним та ефективним засобом вирішення широкого кола задач.</p> <p>Представити інформацію, що хемометричні методи, успішно та ефективно використовуються у фармацевтичній промисловості від встановлення специфікацій контролю якості сировини, порошків і лікарських форм до контролю різних процесів і етапів виробництва.</p>	Розкрити актуальність теми лекції; ознайомити студентів з планом лекції.	5 ХВИЛИН
Основна частина	<p>1. Основні сфери застосування хемометрії: створення та управління базами даних з хімії; прогнозування властивостей хімічних сполук і матеріалів; фармакофори та фармакофорний пошук; молекулярна подібність та пошук по молекулярній подібності; віртуальний скринінг, комп'ютерний синтез, візуалізація та дослідження хімічного простору, молекулярний дизайн хімічних сполук з заданими властивостями.</p> <p>2. Огляд головних хемометричних методів: метод головних</p>	<p>Оволодіти знаннями щодо основних сфер застосування хемометрії як міждисциплінарної науки; усвідомити значущість хемометрії для фармацевтичного аналізу.</p> <p>Оволодіти знаннями щодо принципів застосування та</p>	30 ХВИЛИН

	<p>компонент; дерева класифікації та регресії; формальне незалежне моделювання аналогій класів; метод опорних векторів; проекція на латентні (приховані) структури; штучні нейронні мережі.</p> <p>3. Застосування хемометричних методів у фармації: прогнозування різних видів активності хімічних сполук; прогнозування токсичності; контроль процесу фармацевтичного виробництва; ідентифікація та класифікація.</p>	<p>алгоритмів дії основних хемометричних методів.</p> <p>Оволодіти знаннями щодо практичного застосування основних хемометричних методів у сфері фармації.</p>	
Підсумки	<p>Виокремити значущість хемометрії при створенні нових лікарських засобів, при дослідженні автентичності лікарських засобів, при вирішенні задач ідентифікації та класифікації.</p> <p>Виокремити значущість хемометричних методів в сучасних умовах потужного розвитку інструментальних методів аналізу, необхідності опрацювання багатовимірних експериментальних масивів даних та практичних запитів на масовий аналіз проб складного складу у нових предметних галузях.</p>	<p>Підсумувати викладений матеріал; підкреслити важливість і актуальність отриманих знань для роботи дослідницького та / або інноваційного характеру майбутніх магістрів фармації.</p>	5 хвилин
Відповіді на запитання	Активні діалог / дискусія / обговорення.	Роз'яснити незрозумілі та	5 хвилин

		найбільш складні моменти лекції.	
--	--	-------------------------------------	--

Рекомендована література:

Основна

1. Хемометричні методи в розв'язанні задач якісного хімічного аналізу та класифікації фізико-хімічних даних : монографія / Ю. В. Холін, Я. М. Пушкарьова, А. В. Пантелеймонов, А. Н. Некос. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2016. – 184 с.

Додаткова

1. Gummadi S., Chandaka P. K. Chemometrics Approach to Drug Analysis – An Overview. *American Journal of PharmTech Research*. 2019. Vol. 9, no. 1. P. 1–13. URL: <https://doi.org/10.46624/ajptr.2019.v9.i1.001> (дата звернення: 23.07.2024).

Інформаційні ресурси

1. <https://nmuofficial.com/zagalni-vidomosti/kafedri/department-medical-general-chemistry/>
2. <https://likar.nmu.kiev.ua/md/course/view.php?id=8225>

Питання для самопідготовки студента до лекції:

1. Завдання хемометрії та її практичне застосування.
2. Основні хемометричні методи.
3. Які сучасні умови сприяють розвитку хемометричних методів?
4. Застосування хемометричних методів у фармацевтичному аналізі.

Методична розробка складена: к.хім.н., доценткою, доценткою закладу вищої освіти кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії Пушкарьовою Я.М.