



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централна: (032) 261 261
Декан: (032) 261 402 факс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Спектрохимичен анализ (задочно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Компютърни методи за обработка и интерпретация на спектрална информация

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Магистър

Година на обучение

първа

Семестър

II

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Доц. д-р Пламен Пенчев

Анотация

Курсът “Компютърни методи за обработка и интерпретация на спектрална информация” цели задълбочаване и надграждане на знанията на студентите по дисциплината “Съвременни насоки в молекулния спектрален анализ”. Това надграждане е по посока на систематизиране и разширяване на знанията им за разнообразните математически методи и техните компютърни реализации, които се прилагат при поддържането, обработката и търсенето на спектрална информация. Курсът е ориентиран към конкретни приложения на тези методи. Лекциите и упражненията обхващат приложението на методите за библиотечно търсене, използването на експертни системи и разнообразни хемометрични методи за интерпретация на спектрална информация, както и количествен анализ на компонентите на смеси.

Курсът е съобразен със съвременните тенденции за прилагане на компютърните методи в спектроскопията, основната от които е химикът да е образован потребител на разнообразните програмни продукти за обработка на химична и спектрална информация.

В семинарните занятия акцент е поставен върху работа с професионални програмни продукти, които реализират методите, въведени в лекциите. Допълнително студентите изучават конкретните реализации на методите като работят с малки по обем извадки от спектрални данни в среда на програмата Excel.

Получените знания дават необходимата основа на студентите да прилагат творчески тези методи в заводски и научно-изследователски лаборатории.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- Същността, принципите, областите на приложимост, ограниченията и предимствата на методите за компютърна обработка и интерпретация на спектрални данни.
- Как се поддържа спектрална и химическа информация в цифров вид на компютрите.
- Основите на методите за търсене на ИЧ, Раман, ¹³C-ЯМР и маспектри в съответните спектрални библиотеки.
- Основните подходи за интерпретация на резултатите от търсене на компютър на спектрална и химическа информация.
- Някои от основните методи за компютърна интерпретация на спектрална информация.
- Комплексното прилагане на всички компютърни методи за интерпретация на спектрална информация.
- Методите за извършване на количествен анализ, когато се използва цялата спектрална крива, а също така и подходите за корекция на спектралните пречения.
- Математическите и аналитичните основи на многокомпонентния анализ.

2. Ще могат:

- Да боравят професионално със спектрални сбирки в атласи и таблици със спектروструктурни корелации, както и да ползват спектралните бази от данни по Интернет.
- Да интерпретират спектри на органични съединения на по-високо ниво от предишния курс.

- Да работят с програми за търсене на ИЧ, Раман и ¹³C-ЯМР спектри и обработват резултатите от търсенето.
- Да работят с експертни системи за интерпретация на вибрационни и ЯМР спектри.
- Да извършват многокомпонентен анализ на смеси от техните спектри и спектри на стандарти.
- Да прилагат метода "Анализ на множество криви" при различни спектрални измервания на протичането на реакции.
- Да обработват малка извадка от данни, чрез директно прилагане на математични методи, чрез работа с програмата *Excel*.
- Да обработват средни и големи извадки от данни, чрез директно прилагане на математични методи, чрез работа с професионалния софтуер *Statistica*.
- Да прилагат различните математични методи за обработка на резултатите от търсенето в спектрални библиотеки.

Начин на преподаване

Аудиторно: 40 ч.

- Лекции (20 часа),
- Упражнения (20 часа)

Извънаудиторно: 110 ч

- Самостоятелна подготовка
- Курсова работа
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете в бакалаварското си ниво, еквивалентни на **Линейна алгебра и аналитична геометрия** и **Компютри и софтуер**. Задължително студентите трябва да са си взели изпита по двете дисциплини от първи семестър на магистратурата, **Съвременни насоки в молекулния спектрален анализ и Компютърна обработка на структурна и химична информация**.

Студентите трябва да имат познания по следните теми:

- Да познават и боравят свободно с основните математични понятия като *вектор, матрица, детерминанта, производна*.
- Да са запознати с операционната система *Windows*.
- Да имат задълбочени познания за работа с програмите *Word* и *Excel*.
- Да разбират и боравят свободно с основните понятия от базите данни и програмирането.
- Да знаят основите на химичната информатика.
- Да са запознати задълбочено с основните понятия от последната дисциплина, цитирана по-горе: *таблица на свързаност, търсене на подструктури, Фурие трансформация* и пр.
- Да са запознати задълбочено с еднопроменливата регресия и нейното приложение за калибрирането по сигнал/концентрация.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Масспектрометрия с индуктивно свързана плазма, Комбинирани хроматографски техники и Разкриване на структурата на органични съединения с методите на молекулната спектроскопия.

Техническо осигуряване на обучението

- Две компютърни зали с 20 компютъра, работещи в среда на *Windows*; компютрите са свързани в обща мрежа и с Интернет, и разполагат с програмите *Word* и *Excel*.
- 60 909 мас-спектри на органични съединения (безплатно предлаганата спектрална сбирка на NIST)
- Спектрална библиотека от 38 225 напълно отнесени ¹³C-ЯМР спектри на органични съединения, предоставена за научна и учебна работа от проф. М. Мънк от Аризонския държавен университет (ASU), САЩ.
- Спектрална библиотека от 1 400 напълно отнесени ¹³C-ЯМР спектри на природни съединения, публикувани в списанието *Phytochemistry*, и които са набрани и проверени от лектора и негова дипломантка.
- 13 484 ИЧ спектри, предоставена на научна и учебна работа от *Chemical Concepts* (тези и всички изредени по-долу ИЧ спектри са заснети на апарат с Фурие трансформация и се съпровождат от структурите на съединенията)
- 1000 ИЧ спектри на органични съединения, закупени по предишен проект на колектив от катедрата.
- Програма ***InferCNMR***, работеща в среда на *Windows* и програмирана от лектора, която поддържа и използва гореизброените ¹³C-ЯМР спектрални библиотеки.
- 900 ИЧ спектри на органични съединения, измерени от лектора, негови дипломанти и колеги от катедрата.
- 200 Раман спектри на органични съединения, измерени на RAM II (Bruker Optics) от лектора и негова дипломантка.
- Програма ***IRIS***, работеща в среда на *Windows* и програмирана от лектора, която поддържа и използва гореизброените ИЧ и Раман спектрални библиотеки.
- Софтуер на апаратите VERTEX 70 FT-IR spectrometer (Bruker Optics) и RAM II, в който има програма за търсене в спектрални библиотеки и различни процедури за обработка на спектрална информация.
- Демонстрационна сбирка от 350 ИЧ спектри и софтуер, към апарата VERTEX 70 FT-IR spectrometer
- Демонстрационна сбирка от 246 Раман спектри и софтуер, към Раман спектрометъра RAM II.
- Един лиценз на професионалната статистическа програма *Statistica 10 (2010 г.)*, закупена по предишен проект на колектив от катедрата, както и по-раншните свободни версии от същата серия, които са инсталирани на компютрите в залата.
- Програма ToSim за подструктурно търсене и прилагане на максималната обща подструктура. Програмата е предоставена безплатно от проф. Курт Вармуца, от Техническият университет във Виена.

Съдържание на курса

Курсът включва преподаване на теоретичните основи, предимствата и ограниченията на компютърните методи за поддържане и обработка на спектрална информация. Теоретичните основи се разглеждат с помощта на разбираема за студентите математика и в по-голямата си част представляват задълбочаване в теорията на отделните спектрални методи. Преподават се допълнително и елементарните основи на дисциплини, които не се изучават в курсовете по химия – *теория на информацията, математическата логика и хемометрия*.

В курса от лекции се набляга предимно на структурата и начина на работа на програмните средства, които използват рутинните методи и подходи: експертни системи, търсене в спектрални библиотеки, Интернет търсачки, както и статистически програми от общ характер. Обърнато е внимание на ограниченията на различните компютърни подходи,

както и на възможните области на тяхното приложение. Разглежда се подробно и представянето на спектрална информация в различните програми, а знанията за компютърното представяне на структурна и химична информация (придобити от съответната дисциплина от първи семестър) се използват активно. Акцентува се и върху сравнението между резултатите, получени при прилагане на компютърни методи и тези, извлечени от експерта-спектроскопист: като цяло, преподаването се придържа към тезата, че в изследователската практика се използват компютри в съчетание с интерпретацията от специалист по съответния метод за инструментален анализ. Наред с рутинните методи за търсене в библиотеки от ИЧ, Раман, ^{13}C -ЯМР и масспектри, многокомпонентен анализ с тях и тяхната многомерна статистическа обработка, в курса се застъпват съвременни концепции и подходи, като тези на *максималната обща подструктура*, *изкуствените невронни мрежи* и *интерпретационното библиотечно търсене*, които са били и са тема на научната работа на лектора.

Семинарите имат за цел да дадат практически знания и опит за решаване на задачи от ежедневната изследователска практика, по начина, по който те се решават в различните производствени и изследователски лаборатории. Подробно и в детайли, чрез конкретни примери, се разглеждат (1) представянето в компютъра на различните по характер спектри, структури и химична информация, (2) поддържането и използването на тази информация, (3) схемата на разнообразните компютърни алгоритми, (4) вида и съдържанието на получените резултати, както и тяхното последваща обработка с други компютърни методи.

В семинарните занятия различните методи се прилагат за малки извадки от спектрални данни, чрез работа в програмите Excel и Statistica, както и за реални извадки от данни - на софтуера на спектралния апарат. Поради изключително високата цена на професионалния софтуер за спектрална обработка, в упражненията се използва софтуера на ИЧ апарата (програмата OPUS, която извършва търсене в библиотеки от спектри, анализ на главните компоненти и кластерен анализ, както и множество процедури за обработка на спектрите), а също и програмиран професионален софтуер от лектора на курса (програмата IRIS, достъпна от интернет страницата на преподавателя).

Студентите се поощряват да работят самостоятелно на софтуера на апарата, както по двойки на всеки компютър от залата, където дискусиата между тях запълва празнотите в техните теоретични знания. Те също се поощряват, всеки от тях да има собствена тетрадка, която могат да използват при изпита по дисциплината. По време на практическите занятия, студентите се запознават с различни справочни пособия, като референтни книги за свойствата на съединенията, спектрални атласи и сбирки на спектри.

В курса е предвидена и **курсова работа**, чрез която студентите се запознават с оригинални научни публикации и работят с данни от тях.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции по дисциплината

Тема

часове

- | | |
|---|---|
| 1. Преговор на спектралните методи за анализ. Физични основи на ЯМР, инфрачервената, Раман, електронната и мас- спектроскопии. Тип и числов формат на извличаната от тях спектрална информация. | 2 |
|---|---|

- | | |
|---|---|
| 2. Интерпретация на спектрални данни (ИЧ, Раман, УВ/Вид, ЯМР и мас-спектри от спектроскопистите. Работа с колекции от спектри и спектро-структурни корелации във вид на атласи и таблици. Адитивни схеми, за предсказване в електронната и ^1H - и ^{13}C ЯМР спектроскопии. | 2 |
| 3. Компютърни програми, реализиращи адитивна схема за предсказване на химическото отместване в ^1H - и ^{13}C ЯМР спектри. Програмите <i>ChemOffice</i> и <i>ChemDoodle</i> . | 1 |
| 4. Поддържане на спектрална информация от компютрите. Обхват, формат и нормиране на спектралните данни. Спектрални криви, пикови таблици и ЯМР сигнали. Поддържане на неспектрална информация (химична структура, молекулна формула, физикохимични и библиографски данни). Спектрални библиотеки. | 3 |
| 5. Търсене на ИЧ и Раман спектри в спектрални библиотеки по спектралната крива. Мерки за спектрално подобие. | 1 |
| 6. Търсене на ИЧ и Раман спектри в спектрални библиотеки по пикове. Мерки за спектрално подобие. | 1 |
| 7. Компютърна интерпретация на ИЧ спектри. Експертни системи. Използване на хеометрични методи. Прилагане на концепцията за изкуствени невронни мрежи. | 2 |
| 8. Търсене на ^{13}C ЯМР спектри в библиотека от напълно отнесени ^{13}C ЯМР спектри. | 2 |
| 9. Търсене на масспектри в спектрална библиотека. | 1 |
| 10. Идентификация на химични съединения. Анализ на спектри на смеси. Количествен анализ на смеси (многокомпонентен анализ). Метода на "Анализ на множество криви" и използването му при различни спектрални измервания на протичането на химични реакции. | 3 |
| 11. Обработка на резултатите от търсенето в спектрални библиотеки. Метод на най-близките съседи и максималната обща подструктура. | 2 |

Общ брой часове: 20

Форми на текущ контрол:

Поради това, че магистратурата е задочна, единствено е възможно поставянето на **текуща оценка** върху изпълнение на задачите от семинарите. Има само две оценки – 6.00 (методите са програмирани на компютъра от студентите или те са извършили изчисленията в тетрадката) и 2.00 (не е извършена планираната работа или студентът отсъства). Текуща оценка се формира от всяко едно упражнение чрез осредняване.

Б/ Семинари по дисциплината	
тема	часове
1. Инструктажа за безопасност. Работа със спектрални атласи и корелационни таблици. Интерпретация на ИЧ спектри от експерт/спектроскопист.	2
2. Работа с компютърната програма IRIS, която поддържа библиотеки ИЧ и Раман спектри.	1
3. Търсене по спектралната крива на ИЧ и Раман спектри с компютърната програма IRIS в спектрални библиотеки. Мерки за спектрално подобие.	2
4. Търсене по пикове на ИЧ и Раман спектри с компютърната програма IRIS в спектрални библиотеки.	2
5. Компютърна интерпретация на ИЧ спектри с компютърната програма IRIS. Експертни системи. Използване на хемометрични методи - класификация на ИЧ спектри по центроидите на класовете и концепцията на изкуствените невронни мрежи.	2
6. Търсене на ^{13}C ЯМР спектри в библиотека от напълно отнесени ^{13}C ЯМР спектри. Работа с програмата InferCNMR.	2
7. Построяване на адитивна схема с програмата Excel за предсказване на химичното отместване на метиловата група при протонни спектри.	2
8. Търсене на масспектри в спектрална библиотека с компютърната програма IRIS.	1
9. Идентификация на химични съединения. Анализ на спектри на смеси. Количествен анализ на смеси. Многокомпонентен анализ на електронните спектри на смеси от фенилаланин, триптофан и тирозин с помощта на Excel.	3
10. Обработка на резултатите от търсенето в спектрални библиотеки. Прилагане на метода на максималната обща подструктура с помощта на програмата ToSiM.	2
11. Работа със софтуера на ИЧ и Раман апаратите. Кластерен анализ и анализ на главните компоненти на сбирка от Раман спектри. Търсене на ИЧ и Раман спектри в демонстрационните спектрални библиотеки.	1
Общ брой часове:	20

В/ Самостоятелна подготовка:

Студентите трябва да изработят **курсова работа**, състояща се във въвеждане на химични структури с програмата ISISDraw (свободна за използване за академични цели) и последващо вкарване на сигналите от ^{13}C -ЯМР спектъра на съединенията. За целта в Интернет

страницата на преподавателя се поставя Excel файл със задачите и статии от научни списания в PDF формат. До началото на седмицата, в която се провежда изпита, студентите изпращат своята работа на лектора по електронната поща. Изработването на курсова работа е задължително и е свързано със заверката на семестъра. За нейното изпълнение се поставя оценка, която е линейна функция от правилността на въведените данни, и която оценка участва с коефициент при формиране на крайната оценка от изпита.

Библиография			
Автор	Заглавие	Издателство	Година
Андреев Г.	Молекулна Спектроскопия	Изд. ПУ	2010
Lambert J.B., Mazzola E.P.	Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. An Introduction to Principles, Applications, and Experimental Methods	Pearson Education	2004
Eberhard Breitmaier	Structure Elucidation By NMR In Organic Chemistry: A Practical Guide.	John Wiley & Sons	2002
Brereton R.G.	Applied Chemometrics for Scientists	John Wiley & Sons	2007
Zupan J. (Ed.)	Computer-supported Spectroscopic Data Bases	Ellis Horwood	1986
Пенчев, П.	Свитък с помощни материали по дисциплината. Обновяван всяка година.	Интернет PDF и печатна версия	2010-2012
Пенчев, П.	Ръководство на програмата IRIS за търсене в библиотеки от ИЧ спектри (на английски)	PDF файл по Интернет	2012

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, в която са дадени основния принцип и работна схема на съответния компютърен метод, графики и друго представяне на данните, както и схематичното описание на някои от алгоритмите. Самата презентация е достъпна за студентите от Интернет страницата на лектора <http://web.uni-plovdiv.bg/plamenpenchev>.

Допълнително в лекциите се извеждат от преподавателя на дъската някои от основните уравнения и зависимости, за да се покаже на студентите физическия смисъл на различните числови критерии, използвани в алгоритмите, мерките за спектрално подобие и получаваните аналитични резултати при многокомпонентния анализ. Също така на лекции се извършват изчисления от преподавателя на разстояния в пространството на образите (мерки за спектрално подобие), както и редица действия с матрици при многокомпонентния анализ. В хода на лекциите лекторът прожектира с мултимедийния проектор извършването на редица търсения с професионалния софтуер и обработката на резултатите от търсенето.

Лекциите са придружени с практически курс, който се състои от упражнения, провеждани в обзаведената за целта компютърна зала и лабораторията по молекулна спектроскопия. Упражненията са задължителни. Занятията включват:

- подробен инструктаж за правилата за безопасност при работа в лаборатория и с компютри
- изчисления в тетрадките на мерките за подобие при търсене по пикове в ИЧ и Раман спектрални библиотеки

- работа в програмата Excel с образи при (1) класификацията на спектрални образи, (2) изготвянето на адитивни схеми за предсказване на сигналите на протонни ЯМР спектри и (3) при многокомпонентен анализ на смеси от техните УВ-Вид спектри
- работа в програмата Statistica и софтуера на ИЧ и Раман апаратите при прилагане на различните хеометрични методи върху спектралните данни
- работа с Windows програмите за библиотечно търсене
- Работа с програмите ChemDraw и ChemDoodle с цел предсказване на сигналите в ^1H - и ^{13}C ЯМР спектри на съединение с дадена структура

Упражнението се оценява от преподавателя с две оценки – 6.00 (методите са програмирани на компютъра от студентите или в тяхната тетрадка са извършени изчисленията) и 2.00 (не е извършена планираната работа или студентът отсъства). Текущата оценка се формира от оценките на всяко едно упражнение чрез осредняване. Тя влиза с коефициент в крайната оценка.

В рамките на курса има планирана самостоятелна курсова работа.

Методи и критерии на оценяване

Изпитването по дисциплината се състои от провеждане на един колоквиум с практическа работа на компютрите и тест, който е комбинация от конкретни изчисления и различни въпроси с даден набор от отговори. Крайният изпит е по време на изпитната сесия.

При изпита, и в двете му части, студентът има право да използва всички учебни материали, отбелязани в литературата по дисциплината, и единствено своята тетрадка без никакви “хвърчащи” листове. Оценка под 2.99 се закръглява на 2.00. Оценката от двете части на крайния изпит се изчислява до стотни от съответните точки по линейна формула и се взима с тегло при формиране на крайната изпитна оценка.

Оценяване:

Крайната оценка по дисциплината се формира като средно геометрично (което наказва по-силно най-слабата оценка, сравнено със средно аритметичното). Оценката се формира по следната формула от текущата оценка, TO , от оценката на курсовата работа, KP , от оценката на колоквиума, Ko и оценката от теста, $Тест$:

$$Оценка = 1 / (0.10 / TO + 0.30 / KP + 0.30 / Ko + 0.30 / Тест)$$

Всички писмени работи (от теста) и всички файлове (от курсовата работа и колоквиума), заедно с тетрадката за присъствие и текуща оценка на студентите се съхраняват в продължение на 3 години от датата на провеждане на семестриалния изпит.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Пламен Николов Пенчев