



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ПРИРОДНИЧИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ХІМІЇ ТА МЕТОДИКИ ЇЇ НАВЧАННЯ

ТЕХНОЛОГІЇ НАВЧАННЯ ХІМІЇ У ШКОЛІ ТА ЗВО

*Збірник тез доповідей
Всеукраїнської науково-практичної інтернет-конференції*

30 листопада 2018 року

КРИВИЙ РІГ 2018

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

УДК 37.016:54(082)

Технології навчання хімії у школі та ЗВО : Збірник тез доповідей Всеукраїнської науково-практичної інтернет-конференції за заг.ред. Т. В. Старова (вид. 1-е). – Кривий Ріг : КДПУ, 2018. – 145 с.

У збірнику тез доповідей висвітлено реалізацію завдань сучасної хімічної освіти у школі та ЗВО при використанні новітніх технологій навчання та впровадженні компетентнісного підходу до організації процесу вивчення хімії. Розглянуто теоретико-практичні проблеми підготовки вчителя хімії з урахуванням сучасних педагогічних інновацій організації навчального процесу у школі та ЗВО.

***Рекомендовано до опублікування Вченою радою
Криворізького державного педагогічного університету
(протокол № __ від _____ 2018 року).***

***Рекомендовано вченою радою
природничого факультету Криворізького державного педагогічного
університету до розміщення у репозитарії наукової бібліотеки КДПУ
(протокол № 4 від 21 листопада 2018 року).***

Матеріали опубліковані з авторських оригіналів.

Редакційна колегія:

Старова Т.В. доцент, кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та методики її навчання Криворізького державного педагогічного університету;

Столяренко В.Г. доцент, кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та методики її навчання Криворізького державного педагогічного університету;

Нечипуренко П.П. кандидат педагогічних наук, старший викладач кафедри хімії та методики її навчання Криворізького державного педагогічного університету

УДК 37.016:54(082)

© Автори статей, 2018

Зміст

Секція 1: Інформаційно-комунікаційні технології в хімічній освіті	5
<i>Підгорна Т. В.</i> Мерcury як засіб візуалізації та дослідження кристалічних структур.....	5
<i>Семеріков С. О.</i> Застосування методів машинного навчання у навчанні моделювання майбутніх учителів хімії	10
<i>Виноградова Т. В.</i> Використання інформаційно-комунікаційних технологій у процесі викладання хімії	20
<i>Колбасіна С. М.</i> Екологічна освіта та виховання школярів на уроках хімії з використанням новітніх інформаційних технологій.....	24
<i>Столяренко В. Г.</i> Перспективи використання AR – технологій у процесі вивчення хімічних дисциплін	28
<i>Купчина Ю. І.</i> Персональний сайт вчителя як засіб організації навчально-пізнавальної діяльності учнів з хімії.....	31
<i>Бурдейна Т. Ю.</i> Впровадження мобільного навчання в освітній процес	34
<i>Нечипуренко П. П., Максина А. А.</i> Хімічний контент сайтів мережі Internet у процесі навчання хімії в школі	38
Секція 2: Сучасні методичні підходи до викладання хімії в різних освітніх просторах.....	43
<i>Чувасова Н. О.</i> Формування творчого потенціалу майбутніх учителів хімії та біології як показник якості вищої освіти	43
<i>Васильєва І. Г.</i> Соціалізація особистості в сучасному освітньому просторі як необхідна складова формування комунікативної компетентності	47
<i>Єфремова О. П.</i> Перспективи інтеграції інформатики з хімією та їх дидактичне забезпечення	49
<i>Колчанова М. І.</i> Стилї навчання за системою Фелдера-Соломан як засіб вдосконалення процесу шкільної освіти (на матеріалі тем органічної хімії у 9-му класі)	52
<i>Альохін М. М., Альохіна Т. М.</i> Інтегрований курс «природничі науки» як альтернатива природознавчим дисциплінам у профільній школі: переваги та недоліки.....	56
<i>Білик Ю. О., Ісаєва І. С.</i> STEM як інноваційний освітній інструмент та його застосування у проекті: «Кривий Ріг-Марс. Траєкторія зростання»	62
<i>Долгих Р. А.</i> Пропедевтичне формування хімічних знань на заняттях інтегрованого гуртка «Весела наука»	66
<i>Наумова К. О.</i> Аналіз міжнародного досвіду курсу Солтерса у навчанні хімії в середніх навчальних закладах.....	70

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

<i>Чигрина Л. В.</i> Використання елементів продуктивного навчання на уроках хімії	74
<i>Ярова А. С.</i> Інтерактивні методи навчання у вищих навчальних закладах	78
<i>Кібенко В. А.</i> Сучасні методичні підходи до викладання хімії в різних освітніх просторах.....	83
<i>Денисевич М. С.</i> Групова робота учнів на уроках хімії як один із сучасних методичних прийомів до її викладання	88
<i>Старова Т. В.</i> Етапи розробки інтерактивних заходів з хімії	91
<i>Лук'янцева С. І.</i> Нові аспекти реформування сучасної освіти.....	93
<i>Селіванова Т. В.</i> Викладання курсу «Фізична та колоїдна хімія» при поєднанні традиційних та інноваційних освітніх технологій	96
<i>Ліпіліна В. О.</i> Творчо-розвивальні та інтерактивні технології навчання на уроках хімії	98
<i>Тарасенко О. Л.</i> Міжпредметна інтеграція як засіб збагачення змісту сучасного уроку.....	101
<i>Бондаренко Н. О.</i> Застосування принципів stem-освіти в роботі літньої природо-дослідницької школи.....	110
Секція 3: Реалізація компетентнісного підходу до організації навчання хімії у школі та ЗВО	114
<i>Косяк Т. С.</i> Формування здоров`язберігаючої компетентності учнів шляхом застосування технології розвитку критичного мислення	114
<i>Федорова А. С., Томіліна О. В.</i> Умови формування метапредметних вмінь при розв'язуванні задач.....	118
<i>Томіліна Л. І., Шитко Ю. І.</i> Формування соціальних компетентностей на інтегрованих уроках хімії та технології.....	122
<i>Старова Т. В.</i> Зміст результатів навчання при вивченні органічної хімії в процесі підготовки студентів спеціальності «Середня освіта (Хімія)»	127
<i>Лук'янцева С. І.</i> Формування мовленнєвої та читацької компетентностей учнів на уроках української мови та літератури, використовуючи ІКТ	133
<i>Боговіченко Ю. О.</i> Шляхи формування ключових компетенцій.....	141
<i>Кичук С. Є.</i> Формування інформаційно-цифрової компетентності на уроках хімії	144

Застосування методів машинного навчання у навчанні моделювання майбутніх учителів хімії

С. О. Семеріков

*професор кафедри інформатики та прикладної математики,
Криворізький державний педагогічний університет, Кривий Ріг*

Починаючи з 2018-2019 н.р., для магістрантів з додатковою спеціальністю «Інформатика» уведено навчальну дисципліну «Чисельні методи та моделювання», спрямованої на формування у студентів системи теоретичних знань з основ апарату чисельних методів і практичних навичок їх використання для розробки та дослідження математичних моделей. Одним із провідних завдань дисципліни є надання комплексу знань, необхідних для розуміння проблем, які виникають під час побудови та при використанні сучасних інтелектуальних систем, та ознайомлення студентів з основними принципами нейромережевого моделювання[1]:

- загальними характеристиками біологічних та штучних нейронів;
- штучною нейронною мережею Хебба, класичним та модифікованими перцептронами;
- видами функцій активації, що набули поширення в штучних нейронних мережах;
- технологією проектування одношарових та багатошарових штучних нейронних мереж;
- алгоритмами навчання нейронних мереж.

Вказані питання в останні десятиріччя розглядаються у межах машинного навчання (Machine Learning) – розділу штучного інтелекту, що розглядає методи побудови алгоритмів та на їх основі програм, здатних «навчатися» шляхом подання емпіричних даних (прецедентів або спостережень), в яких виявляються закономірності, та на їх основі будуються моделі, що надають можливість у подальшому прогнозувати певні характеристики для нових об'єктів.

На жаль, класичний (і найбільш популярний у світі) курс машинного навчання Е. Іна (Andrew Ng), розміщений на платформі Coursera [2], зорієнтований насамперед на студентів-початковців інформатичних спеціальностей – це надає можливість пропонувати його для самостійного опрацювання, але не розв'язує основну проблему: надання змістовних моделей, що відображають специфіку основної спеціальності – хімія.

У 2013-2016 рр. авторським колективом під керівництвом І. І. Баскіна було підготовано серію навчальних посібників з основ хемоінформатики (зокрема, [3; 4]) – мультидисциплінарного наукового напрямку, що виник на стику хімії, біології, фармакології, математики та інформатики і займається опрацюванням накопичених експериментальних даних про існуючі хімічні елементи, а також розвиває підходи, що надають можливість прогнозувати хімічні, фізичні та біологічні властивості нових, у тому числі ще не синтезованих сполук.

Основними поняттями хемоінформатики є:

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

– хімічний простір – набір хімічних об'єктів, для яких визначено відношення, яке описує їх схожість один з одним;

– дескриптор – числовий результат деякого стандартного експерименту або математичної процедури, яка однозначно співставляє число структурним даним про хімічний об'єкт.

Основними напрямками хемоінформатики є:

– створення та застосування хімічних база даних (баз даних з відомостями про хімічну структуру);

– дослідження зв'язку між структурами хімічних сполук та їх властивостями;

– планування синтезу хімічних сполук та прогнозування шляхів хімічних перетворень;

– молекулярний дизайн з використанням даних по структурам біологічних мішеней.

Розв'язання задачі пошуку кількісних співвідношень «структура-властивість» передбачає створення статистичних моделей, які на підставі структури надають можливість передбачити їх властивості. Історично ці методи асоціюються із дослідженням біологічної активності молекул, тому за галуззю закріпилася назва QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships). Моделювання «структура-властивість» широко використовується у створенні полімерів, каталізаторів, композитів, реагентів, екстрагентів, ПАР, іонних рідин і в цілому для передбачення корисних для практичних цілей властивостей: спектрів, розчинності, температур плавлення, кипіння тощо.

Методи машинного навчання активно використовуються у синтетичній хімії для планування синтезу, аналізу та візуалізація реакційних даних, прогнозування кількісних характеристик реакцій, дизайну каталізаторів [4], надаючи відповіді на запитання [5]:

1. Як синтезувати задану хімічну сполуку із доступних реагентів?
2. Як синтезувати хімічну сполуку, що має задану активність?
3. Як буде виглядати і як синтезувати комбінаторну бібліотеку хімічних сполук, орієнтовану на заданий тип біологічної активності?
4. Що вийде в результаті реакції, якщо змішати задані хімічні сполуки в заданих умовах?
5. У яких умовах слід проводити задану реакцію? Як оптимізувати такі умови (температура, розчинник, каталізатор, добавки)?
6. Який ймовірний механізм заданої реакції?
7. Як збільшити вихід у заданій реакції?
8. Яка синтетична доступність заданої сполуки?
9. Які будуть кінетичні та термодинамічні характеристики простих реакцій та вихід складних реакцій?

Класичний посібник [6] може бути застосований для початкового опанування методів нейромережевого моделювання студентами хімічних спеціальностей, що не спеціалізуються в інформатиці. В якості середовища моделювання для них доцільно застосувати електронні таблиці (хмаро орієнтовані електронні таблиці Google Sheets із додатковим хмаро

орієнтованим компонентом (доповненням) Solver (аналогом доповнення «Пошук рішення» для Excel Online) – історично одним із найперших середовищ нейромережевого моделювання [7], що має високий рівень наочності. Останнє його видання [6], що вийшло 2018 року – «Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods» та «Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities» – спрямовані на магістрів та аспірантів у галузі хімії та інформатики.

Так, у 10 главі [6] розглядається набір даних з [8], який фіксує відсотковий склад 8 жирних кислот (1 – пальмітинової, 2 – пальмітолеїнової, 3 – стеаринової, 4 – олеїнової, 5 – лінолевої, 6 – ліноленої, 7 – арахідонової, 8 – ейкозенової), що знаходяться в ліпідній фракції 572 італійських оливкових олій, що являють собою зразки, взяті з 9 італійських регіонів: 1 – Північна Апулія (25 зразків), 2 – Калабрія (56), 3 – Південна Апулія (206), 4 – Сицилія (36), 5 – Внутрішня Сардинія (65), 6 – Прибережна Сардинія (33), 7 – Східна Лігурія (50), 8 – Західна Лігурія (50), 9 – Умбрія (51). Набір даних є Інтернет-доступним у наступному кодуванні: group.id – номер регіону, X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8 – відсотковий внесок кожної з кислот, помножений на 100.

Головне запитання, на яке необхідно відповісти: *як відрізнити олії з різних регіонів Італії на основі їх поєднання жирних кислот?* Для відповіді на це питання побудуємо тришарову нейронну мережу із такою архітектурою (рис. 1):

– вхідний шар – восьмивимірний арифметичний вектор $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8)$, компонентами якого є відповідні відсоткові склади 8 жирних кислот (X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8 – усі поділені на 100);

– прихований шар матиме розмірність 10 та описуватиметься вектором $(h_1, h_2, h_3, h_4, h_5, h_6, h_7, h_8, h_9, h_{10})$;

– вихідний шар – дев'ятивимірний арифметичний вектор $(y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7, y_8, y_9)$, компонентами якого є ймовірності того, що набір жирних кислот відповідає оливковій олії одного із 9 італійських регіонів.

До нейронів вхідного та прихованого шарів додається нейрон зміщення (bias), значення якого завжди дорівнює одиниці (на рис. 1 його позначено червоним кольором). Особливістю нейронів зміщення є те, що вони не мають вхідних синапсів, а тому не можуть бути розташовані на вихідному шарі.

Спочатку внесемо дані про олію до електронних таблиць. Для виразимо вміст кожної із кислот у відсотках, поділивши значення X1-X8 з набору даних (<http://www.public.iastate.edu/~maitra/stat501/datasets/olive.dat>) на 100 та обравши в якості десяткового роздільника точку замість коми за допомогою американської локалізації (рис. 2).

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

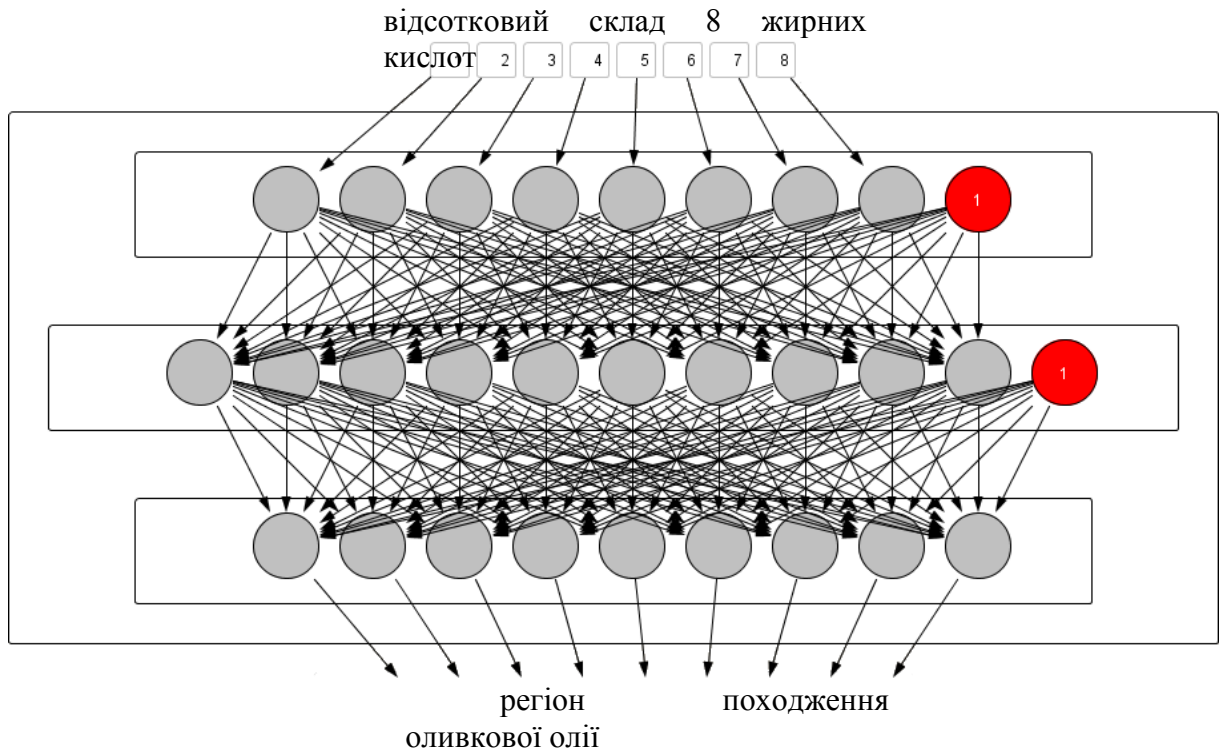


Рис. 1. Архітектура нейронної мережі для розв'язання задачі класифікації оливкової олії за регіоном походження

Параметри електронної таблиці

Загальні Обчислення

Мова

Сполучені Штати

Це вплине на форматування функцій, дат, валюти тощо.

Часовий пояс

(GMT+02:00) Kiev

Час занесення записів у журнал електронної таблиці відповідатиме цій часовій зоні. Це впливатиме на всі функції, пов'язані з часом.

Мова інтерфейсу: Українська

Завжди використовувати англійські назви функцій

Рис. 2. Налаштування параметрів електронної таблиці

У комірки таблиці занесемо наступні значення: A1 – регіон, B1:I1 – X1-X8. Діапазон комірок A2:I573 міститиме власне дані про олію (рис. 3).

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	region	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8
2	1	10.75	0.75	2.26	78.23	6.72	0.36	0.6	0.29
3	1	10.88	0.73	2.24	77.09	7.81	0.31	0.61	0.29
4	1	9.11	0.54	2.46	81.13	5.49	0.31	0.63	0.29
5	1	9.66	0.57	2.4	79.52	6.19	0.5	0.78	0.35
6	1	10.51	0.67	2.59	77.71	6.72	0.5	0.8	0.46
7	1	9.11	0.49	2.68	79.24	6.78	0.51	0.7	0.44
8	1	9.22	0.66	2.64	79.9	6.18	0.49	0.56	0.29
9	1	11	0.61	2.35	77.28	7.34	0.39	0.64	0.35

Рис. 3. Фрагмент таблиці із даними про олію

Відповідно до обраної архітектури, приєднаємо до 8 нейронів вхідного шару нейрон зміщення. Для цього у комірку J1 внесемо його назву (x_9), а у діапазон J2:J573 – його значення (1). На цьому кроці вхідний шар сформовано у вигляді ($x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9$).

Наступним кроком є кодування регіонів із стовпця А. Кожен регіон закодуємо дев'ятивимірним арифметичним вектором: для регіону з номером i встановлюємо i -тий компонент у 1, а інші – у 0. Для цього уводимо наступні значення у комірки: L1:T1 – Y1-Y9, L2 – =if(value(right(L\$1,1))=\$A2,1,0)

Далі копіюємо формулу із комірки L2 у діапазон L2:T573 та отримуємо такі еталонні коди дев'яти регіонів: для 1 регіону (Північна Апулія) – (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0), для 2 регіону (Калабрія) – (0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0), ..., для 9 регіону (Умбрія) – (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1).

Наступний крок – передавання сигналу із вхідного шару нейронної мережі на прихований. Для визначення сили сигналу необхідно мати вагові коефіцієнти нейронної мережі. Позначимо через w_{ij}^{xh} ваговий коефіцієнт синапсу, що пов'язує нейрон x_i ($i=1, 2, \dots, 8, 9$) вхідного шару із нейроном h_j ($j=1, 2, \dots, 10, 11$) прихованого шару, а через w_{jk}^{hy} ваговий коефіцієнт синапсу, що пов'язує нейрон h_j прихованого шару із нейроном y_k ($k=1, 2, \dots, 9$) вихідного шару. Тоді сила сигналу, що приходить до нейрону h_j прихованого шару, визначатиметься як скалярний добуток значень сигналу на вхідному шарі та відповідних вагових коефіцієнтів. Для визначення сигналу, який піде далі на вихідний шар, застосуємо логістичну функцію активації $f(S) = 1/(1+e^{-S})$, де S – відповідний скалярний добуток. Формули для визначення сигналів на прихованому та вихідному шарах матимуть вигляд:

$$h_j = f\left(\sum_{i=1}^{8+1} x_i w_{ij}^{xh}\right), y_k = f\left(\sum_{j=1}^{10+1} x_i w_{jk}^{hy}\right).$$

Відповідно необхідно створити дві матриці: матриця w^{xh} розмірністю 9×10 містить вагові коефіцієнти зв'язків 9 нейронів вхідного шару (перші вісім містять характеристики жирних кислот, а дев'ятий є нейроном зміщення) з

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

нейронами прихованого шару, а матриця w^{hy} розмірністю 11×9 містить вагові коефіцієнти зв'язків 11 нейронів прихованого шару (з них десять обчислюються, а одинадцятий є нейроном зміщення) з нейронами вихідного шару. Для «ненавченої» нейронної мережі початкові значення вагових коефіцієнтів можна встановити або у випадковий спосіб, або залишити невизначеними, або рівними нулеві. Для реалізації останнього способу заповнимо комірки такими значеннями: $V1 - w^{xh}$, $V2 - w^{xh}$, $W2 - 1$, $X2 - =W2+1$, $V3 - 1$, $V4 - =V3+1$, $W3 - 0$, $V13 - w^{hy}$, $V14 - w^{hy}$, $W14 - 1$, $X14 - =W14+1$, $V15 - 1$, $V16 - =V15+1$, $W15 - 0$

Для створення матриць необхідно виконати копіювання комірки X2 у діапазон X2:AF2, V4 – у V4:V11, W3 – у W3:AF11, X14 – у X14:AE14, V16 – у V16:V25, W15 – у W15:AE25 (рис. 4).

fx =if(value(right(L\$1,1))=\$A2,1,0)

	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y	Z	AA	AB	AC	AD	AE	AF
1	X9		Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Y6	Y7	Y8	Y9		WXH										
2	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0		вихідний/прихований	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
3	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			9	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0												
13	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0		WHY										
14	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0		прихований/вихідний	1	2	3	4	5	6	7	8	9	
15	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			5	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			7	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			9	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1		1	0	0	0	0	0	0	0	0			11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Рис. 4. Фрагмент електронної таблиці після кодування регіонів та створення матриць вагових коефіцієнтів

Для обчислення скалярного добутку вектор-рядка значень вхідного шару на вектор-стовпець матриці вагових коефіцієнтів w^{xh} доцільно скористатись функцією множення матриць: AH1:AR1 – H1-H11, AH2 – =1/(1+exp(-mmult(\$B2:\$J2,W\$3:W\$11))), AR2 – 1.

Далі копіюємо комірку AR2у діапазон AR2:AR573, а AH2 – уAH2:AQ573.

Ураховуючи, що всі елементи матриці вагових коефіцієнтів w^{xh} дорівнюють нулю, після копіювання формул всі обчислювані елементи прихованого шару дорівнюватимуть 0,5.

Аналогічно виконаємо обчислення елементів вихідного шару: AT1:BB1 – у1-у9, AT2 – =1/(1+exp(-mmult(\$AH2:\$AR2,W\$15:W\$25)))

Далі копіюємо комірку AT2у діапазон AT2:BB573 (рис. 5).

$f_x = 1/(1+\exp(-\text{mmult}(\$AH3:\$AR3, X\$15:X\$25)))$

	AH	AI	AJ	AK	AL	AM	AN	AO	AP	AQ	AR	AS	AT	AU	AV	AW	AX	AY	AZ	BA	BB
1	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11		y1	y2	y3	y4	y5	y6	y7	y8	y9
2	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	1		0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500
3	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	1		0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500	0.500

Рис. 5. Фрагмент електронної таблиці обчислення прихованого та вихідного шару за початкових значень вагових коефіцієнтів

Навчання нейронної мережі відбувається шляхом варіювання вагових коефіцієнтів у такий спосіб, щоб із кожним кроком навчання різниця між обчисленими значеннями вихідного шару та бажаними (еталонними) зменшувалась. Для розв’язуваної задачі еталонними є дев’ятивимірні вектори, отримані у результаті кодування 9 регіонів Італії.

Для визначення різниці між обчисленим та еталонним вихідними векторами застосуємо евклідову відстань: $BD1$ – відстань, $BE1$ – сума відстаней, $BD2 = \sqrt{\sum_{x=y}^2(L2:T2, AT2:BB2)}$, $BE2 = \sum(BD2:BD573)$

Далі копіюємо комірку $BD2$ у діапазон $BD2:BD573$. Комірка $BE2$ міститиме загальне відхилення обчислених вихідних векторів від еталонних.

За такої постановки навчання нейронної мережі може розглядатися як задача оптимізації, у якій цільова функція – сума відстаней у комірці $BE2$ – підлягатиме мінімізації шляхом варіювання вагових коефіцієнтів матриць w^{xh} (діапазон $W3:AF11$) та w^{hy} (діапазон $W15:AE25$). Для розв’язання цієї задачі стандартних засобів електронних таблиць Google Sheets недостатньо, тому необхідним є встановлення доповнення Solver (рис. 6).

Доповнення

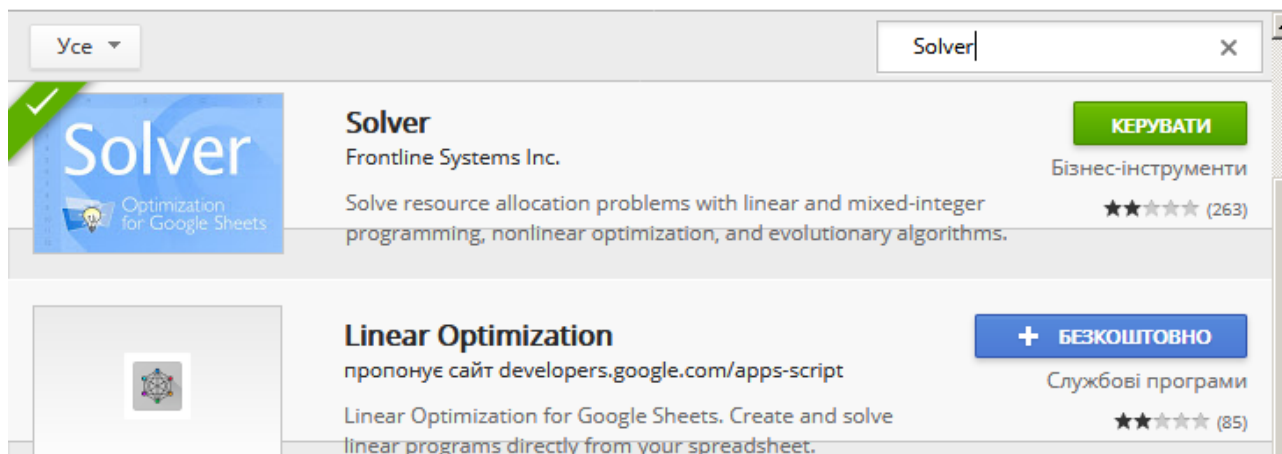


Рис. 6. Встановлення доповнення Solver у електронних таблицях Google

На рис. 7 показані налаштування Solver для розв’язання поставленої задачі: цільова функція (SetObjective) мінімізується (To: Min) шляхом зміни значень (ByChanging) матриць вагових коефіцієнтів у діапазоні (SubjectTo) від -10 до $+10$ одним із методів оптимізації (SolvingMethod).

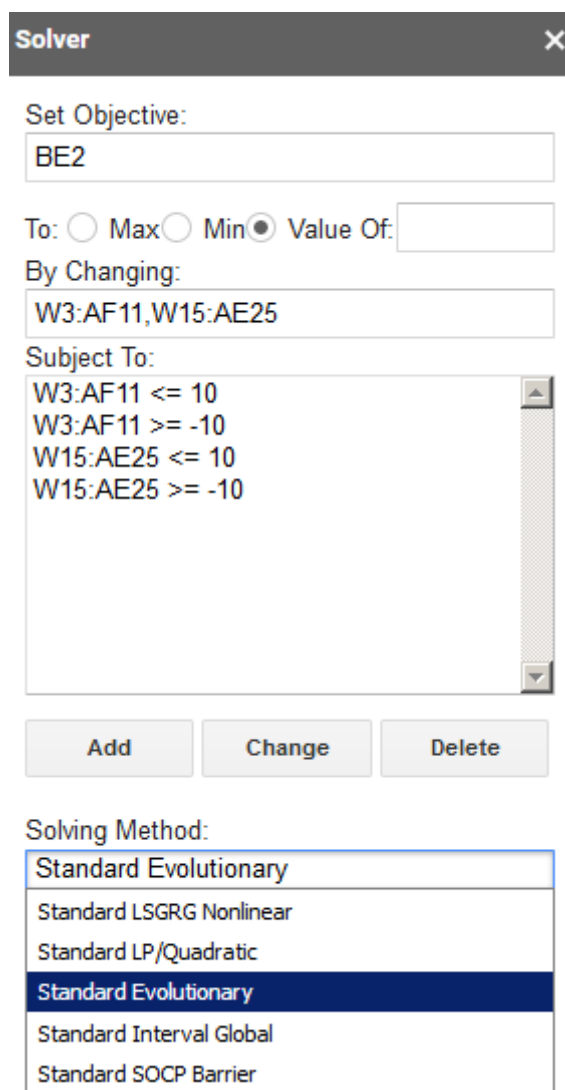


Рис. 7. Налаштування доповнення Solver

Для зменшення суми відстаней дії з Solver можуть бути виконані багаторазово: доцільно поекспериментувати із комбінованим використанням різних методів оптимізації, змінюючи межі варіювання вагових коефіцієнтів. При цьому необов'язково намагатись довести значення суми відстаней до нуля – це може бути й більше (достатньо невелике) значення (рис. 8).

Виходячи з обраного способу кодування, вихідний вектор фактично містить дев'ять ймовірностей: y_i – ймовірність того, що даний зразок олії походить з регіону i . Тоді для з'ясування регіону походження оливкової олії за поданим на вхід вектором $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8)$ із відсотковим внеском кожної з кислот необхідно визначити компонент із найбільшою ймовірністю.

Технології навчання хімії у школі та ЗВО

AQ	AR	AS	AT	AU	AV	AW	AX	AY	AZ	BA	BB	BC	BD	BE
H10	H11		y1	y2	y3	y4	y5	y6	y7	y8	y9		відстань	сума відстаней
0.000	1		0.971	0.003	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0304616	6.642611409
0.000	1		0.907	0.002	0.025	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000		0.0959681	
0.000	1		0.975	0.002	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0268442	
0.000	1		0.975	0.002	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0268708	
0.000	1		0.973	0.003	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0282038	
0.000	1		0.975	0.002	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0268421	
0.000	1		0.975	0.002	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0268476	
0.000	1		0.952	0.003	0.013	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0494576	
0.000	1		0.971	0.003	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0300742	
0.000	1		0.975	0.003	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0271652	
0.000	1		0.975	0.003	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0271321	
0.000	1		0.974	0.003	0.009	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0272289	
0.000	1		0.969	0.003	0.010	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000		0.0323145	

Рис. 8. Результат оптимізації

Для цього заповнимо комірки у такий спосіб:

BF1 – Визначений регіон

BG1 – з ймовірністю

BI1 – Помилки:

BF2 – =if(AT2=BG2,"1 - Північна Апулія",if(AU2=BG2,"2 - Калабрія",if(AV2=BG2,"3 - Південна Апулія",if(AW2=BG2,"4 - Сицилія",if(AX2=BG2,"5 - Внутрішня Сардинія",if(AY2=BG2,"6 – Прибережна Сардинія",if(AZ2=BG2,"7 - Східна Лігурія",if(BA2=BG2,"8 - Західна Лігурія","9 - Умбрія"))))))))

BG2 – =max(AT2:BB2)

BH2 – =if(value(LEFT(BF2,1))=A2,"правильно","неправильно")

BI2 – кількість

BJ2 – =countif(BH2:BH573,"неправильно")

BI3 – відсоток

BJ3 – =BJ2/counta(BH2:BH573)*100

Далі діапазон BF2:BH2копіюємо у діапазон BF573:BH573.

Отриманий результат надає можливість унаочнити процес розпізнавання образів, змодельований в електронних таблицях. Побудовану модель буде точною, якщо для всіх 572 випадків стовпець BHміститиме значення "правильно", і задовільною за невеликого відсотку помилок.

Для перевірки меж застосовності побудованої моделі спробуємо подати на вхід вектор значень, що не співпадає із жодним еталонним вхідним вектором. Для цього скопіюємо 573 рядок таблиці у 575 та видалимо зміст комірок A575, L575:T575, BH575. У комірки B575:I575 уведемо відсоткові значення вмісту 8 жирних кислот у оливковій олії торгівельної марки «Варто», що позиціонується як суміш олій з італійської сировини – дані можна отримати, наприклад, методом газової хроматографії за методикою, описаною у[9]. Це надасть можливість як визначити найбільш ймовірне місце походження сировини, так й конкретизувати, олія з яких регіонів наявна у суміші.

За описаною методикою можна реалізувати основні задачі машинного навчання. Єдине обмеження – не стільки граничний обсяг електронної таблиці, скільки обсяг пам'яті та швидкість пристрою для її опрацювання – на пропонуваннях у курсі [1] проектах якщо й досягається, то лише стає поштовхом для зміни середовища моделювання на більш адекватне.

Список використаних джерел

1. Електронний навчальний курс «Чисельні методи та моделювання» [Електронний ресурс] / [С. О. Семеріков, В. М. Соловійов, С. В. Шокалюк, О. М. Степанюк]. – [Кривий Ріг], [2018]. – Режим доступу : <https://moodle.kdpu.edu.ua/course/view.php?id=299>.
2. MachineLearning [Electronicresource] / AndrewNg // Coursera. – [2015]. – Accessmode : <https://www.coursera.org/learn/machine-learning/>
3. Баскин И. И. Введение в хемоинформатику : учеб. пособие. Ч. 4. Методы машинного обучения / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А. А. Варнек. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2016. – 330 с.
4. Баскин И. И. Введение в хемоинформатику : учеб. пособие. Ч. 5. Информатика химических реакций / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А. А. Варнек. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2017. – 244 с.
5. Батин М. Применение искусственного интеллекта в синтетической химии : интервью с профессором Игорем Баскиным, доктором физико-математических наук, ведущим научный сотрудник физического факультета МГУ [Электронный ресурс] / Михаил Батин, Сергей Марков // Хабрахабр. – 26 декабря 2017. – Режим доступа : <https://habr.com/post/371135>.
6. ZupanJ. Neural Networks for Chemists: An Introduction / Jure Zupan, Johann Gasteiger. – New York :VCH Publishers, 1993. – 305 p.
7. Semerikov S. O. Computer Simulation of Neural Networks Using Spreadsheets: The Dawn of the Age of Camelot [Electronicresource] / Serhiy O. Semerikov, Illia O. Teplytskyi, Yuliia V. Yechkalo // arXiv:1807.00018 [cs.CY]. – 29 Jun 2018. – 26 p. – Access mode : <https://arxiv.org/pdf/1807.00018>.
8. Forina M. Classification of olive oils from their fatty acid composition / M. Forina, C. Armanino, S. Lanteri, E. Tiscornia// Food Research and Data Analysis / Eds : H. Martens & H. Russwurm Jr. – London : AppliedScience Publishers, 1983. – P. 189-214. – Access mode :https://www.researchgate.net/publication/239459050_Classification_of_olive_oils_from_their_fatty_acid_composition.
9. Хасанов В.В. Состав жирных кислот и стероидов растительных масел / В.В. Хасанов, Г.Л. Рыжова, К.А. Дычко, Т.Т. Куряева // Химия растительного сырья. – 2006. – № 3. – С. 27-31.