

## ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

1. รหัสวิชา 2302733
2. จำนวนหน่วยกิต 3
3. ชื่อวิชา Spec Top Phys Chem (Chemometrics for pattern recognition)
4. คณะ/ภาควิชา เคมี คณะวิทยาศาสตร์
5. ภาควิชาการศึกษาศึกษา ปลาย
6. ปีการศึกษา 2553
7. ชื่อผู้สอน อ. ดร. ศุภมาส วงษ์ระวี (ห้อง 1013 ชั้น 10)
8. เงื่อนไขรายวิชา
  - 8.1 วิชาที่ต้องเรียนมาก่อน -
  - 8.2 วิชาบังคับร่วม -
  - 8.3 วิชาควบ -
9. สถานภาพของวิชา วิชาเลือก
10. ชื่อหลักสูตร วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิตและดุขุภุมิบัณฑิต
11. วิชาระดับ ปริญญาโทและเอก
12. จำนวนชั่วโมงที่สอน/สัปดาห์ 3
13. เนื้อหารายวิชา

Introduction of Chemometrics, Preprocessing methods, Experimental Designs, Exploratory Data Analysis, Calibration, Evolutionary Signals, Supervised Pattern Recognition, Validation and Optimisation, Variable Selections and Bayesian Methods

### 14. ประมวลการเรียนรายวิชา (Course Outline)

#### 14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม (Learning Objectives / Behavioral Objectives)

- เพื่อให้บัณฑิตสามารถอธิบายหลักการทางเคมีเมทริกซ์ (Chemometrics) ได้
- เพื่อให้บัณฑิตประยุกต์ใช้หลักการทาง Chemometrics ในการแก้ปัญหาทางเคมีได้

#### 14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์ (Learning Contents)

ครั้งที่ / คาบ/ วันที่	หัวข้อเรื่อง	รายละเอียด
1 / 3 / 3 พย 2553	Introduction to Chemometrics	-History and Development in Chemometrics -Important of Chemometrics in data analysis -Examples of application using Chemometrics

2 / 3 / 10 พย 2553	Experimental Design (Part I)	-Basic principle of Experimental Design -Types of Experimental Design * Factorial Design * Central Composite Design
3 / 3 / 17 พย 2553	Experimental Design (Part II)	- Mixture Designs - Optimization methods
4 / 3 / 24 พย 2553	Preprocessing Method	-Data Scaling -Linear Filters -Strategies for data preprocessing
5 / 3 / 1 ธค 2553	Pattern Recognition Exploratory Data Analysis (EDA) Part I	-Introduction to Pattern Recognition -Basic Principle of EDA * Principal Component Analysis (PCA) * Cluster Analysis (CA)
6 / 3 / 8 ธค 2553	Pattern Recognition Exploratory Data Analysis (EDA) Part II	-Principal Co-ordinate Analysis (PCO) -Self Organizing Maps (SOM) -Disadvantages and Advantages of each method
7 / 3 / 15 ธค 2553	Evolutional Signals	-Determining Composition -Resolution of overlapping peak -Multivariate Curve Resolution (MCR)
20 – 24 ธค 2553	<b>สัปดาห์กลางภาค</b>	
8 / 3 / 29 ธค 2553	Pattern Recognition Classification Part I	-Performance Indices -Euclidean Distance Analysis (EDA) -Linear Discriminant Analysis (LDA) -Quadratic Discriminant Analysis (QDA)
9 / 3 / 5 มค 2553	Pattern Recognition Classification Part II	-Partial Least Square Discriminant Analysis (PLSDA) -Learning Vector Quantization (LVQ) -Support Vector Machines (SVM) - Disadvantages and Advantages of each method
10 / 3 / 12 มค 2553	Optimization and Validation	-Contingency tables

		-Related Concepts -Correct procedure for validation (iterative approach)
11 / 3 / 19 มค 2553	Calibration	-Univariate Calibration -Multiple Linear Regression (MLR) -Principal Component Regression (PCR) -Partial Least Squares (PLS)
12 / 3 / 26 มค 2553	Variable Selection (Part I)	-Basic Concepts -Statistical Indicators and their Rank * T-statistic * Fisher weights * ANOVA
13 / 3 / 2 กพ 2553	Variable Selection (Part II)	-Empirical method (Monte Carlo) -Probabilistic Approaches
14 / 3 / 9 กพ 2553	Bayesian Methods	-Bayes's Theorem -Bayesian Extensions to Classifiers
15 / 3 / 16 กพ 2553	Work Shop (MATLAB) I	-EDA -Evolutional Signals
16 / 3 / 23 กพ 2553	Work Shop (MATLAB) II	-Classification -Variable Selection
28 กพ – 11 มีค 2553	<b>สอบปลายภาค</b>	

#### 14.3 วิธีจัดการเรียนการสอน (Method)

- |                                                                                                                                                                                                                             |                            |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|----|
| <input checked="" type="checkbox"/> การบรรยาย (Lecture)                                                                                                                                                                     | ชั่วโมง/ครั้ง/คาบ/ร้อยละ   | 70 |
|                                                                                                                                                                                                                             | (hour/time/period/percent) |    |
| <input checked="" type="checkbox"/> การบรรยายเชิงอภิปราย (Lecture and discussion)                                                                                                                                           | ชั่วโมง/ครั้ง/คาบ/ร้อยละ   | 10 |
|                                                                                                                                                                                                                             | (hour/time/period/percent) |    |
| <input checked="" type="checkbox"/> การระดมสมอง และการอภิปรายกรณีศึกษา<br>เพื่อให้รู้จักการวิเคราะห์ และการแก้ปัญหา<br>(Brainstorming and discussion of case study so that<br>students learn to analyze and solve problems) | ชั่วโมง/ครั้ง/คาบ/ร้อยละ   | 10 |
|                                                                                                                                                                                                                             | (hour/time/period/percent) |    |

- การสรุปประเด็นสำคัญ หรือการนำเสนอ  
ผลของการสืบค้นหรือผลของงานที่ได้รับมอบหมาย (hour/time/period/percent) 10  
(Making a summary of the main points or presentation  
of the results of researching or the assigned tasks)
- อื่น ๆ (Others) ..... ชั่วโมง/ครั้ง/คาบ/ร้อยละ.....  
(hour/time/period/percent)

#### 14.4 สื่อการสอน (Media)

- แผ่นใสและแผ่นทึบ (Transparencies and opaque sheets)
- สื่อนำเสนอในรูปแบบ (Powerpoint media)
- สื่ออิเล็กทรอนิกส์ / เว็บไซต์ (Electronics and website media)
- อื่น ๆ (Others) .....การใช้โปรแกรม MATLAB .

#### 14.5 การมอบหมายงาน ผ่านระบบเครือข่าย (Assignment through Network System)

14.5.1 ข้อกำหนดวิธีการมอบหมายงาน และส่งงาน (Assigning and Submitting Method)

14.5.2 ระบบจัดการการเรียนรู้ที่ใช้ (Learning Management System)

#### 14.6 การวัดผลการเรียน (Evaluation)

- 14.6.1 การประเมินความรู้ทางวิชาการ ร้อยละ 80  
(Assessment of academic knowledge) (percent)
- 14.6.2 การประเมินการทำงานหรือกิจกรรมในชั้นเรียน ร้อยละ 10  
(Assessment of work or classroom activities) (percent)
- 14.6.3 การประเมินผลงานที่ได้มอบหมาย ร้อยละ 10  
(Assessment of the assigned tasks) (percent)
- 14.6.4 อื่น ๆ (Others) ..... ร้อยละ.....  
(percent)

#### 15. รายชื่อหนังสืออ่านประกอบ (Reading List)

##### 15.1 หนังสือบังคับ (Required Text)

- R.G. Brereton, Chemometrics for Pattern Recognition, Wiley, 2009
- R.G. Brereton, Chemometrics : Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley, 2003

##### 15.2 หนังสืออ่านเพิ่มเติม (Supplementary Texts)

- R. Kramer, Chemometrics Techniques for Quantitative Analysis, Marcel Dekker, 1998
- J.N. Millers and J.C. Millers, Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, Prentice Hall, 2000.

##### 15.3 บทความวิจัย/บทความวิชาการ (ถ้ามี) Research Articles / Academic Articles (If any)

15.4 สื่ออิเล็กทรอนิกส์ หรือ เว็บไซต์ที่เกี่ยวข้อง (Electronic Media or Websites)

- [http://www.chemometrics.se/index.php?option=com\\_content&task=blogcategory&id=14&Itemid=27](http://www.chemometrics.se/index.php?option=com_content&task=blogcategory&id=14&Itemid=27) (Chemometrics Tutorial)

16. การประเมินผลการสอน (Teacher Evaluation) โปรดระบุการดำเนินการในเรื่องต่างๆ ดังนี้

16.1 การประเมินการสอน ใช้รูปแบบใดจาก 12 รูปแบบ ของมหาวิทยาลัย หรือรูปแบบอื่น (กรณีที่ใช้รูปแบบอื่นกรุณาส่งให้ส่วนประกันคุณภาพด้วย) (Which of the 12 types of teacher evaluation provided by the University is used in your class? If another form is used, please submit the form to The Quality Assurance Division)

#### 04 ประเมินผลการสอนแบบบรรยาย

16.2 การปรับปรุงจากผลการประเมินการสอนครั้งที่ผ่านมา (ระบุว่าได้ดำเนินการในเรื่องใดบ้าง เช่น ปรับปรุงเนื้อหา สื่อการสอน วิธีการสอน เป็นต้น) (Changes made in accordance with the previous evaluation e.g. adjustments in content, teaching media, teaching method)

16.3 การอภิปรายหรือการวิเคราะห์ที่เสริมสร้างคุณลักษณะบัณฑิตที่พึงประสงค์ของ **จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย** (ระบุว่าได้ดำเนินการคุณลักษณะด้านใด ซึ่งมหาวิทยาลัยกำหนด คุณลักษณะ 4 ด้าน ได้แก่ สติปัญญาและวิชาการ ทักษะและวิชาชีพ คุณธรรม และสังคม) (Discussion or analysis which creates desirable qualifications of Chulalongkorn University graduates (specifying what aspect(s) required by the University which has been achieved. The four required aspects include intellect and academic knowledge, skills and professional knowledge, ethics, and social responsibility)

จะดำเนินการให้นิสิตมีความรู้ทางด้าน Chemometrics ซึ่งเป็นการเพิ่มพูนสติปัญญาและวิชาการ จากนั้นจะมี workshop เพื่อให้นิสิตสามารถนำความรู้ไปประยุกต์ใช้ได้กับปัญหาทั่วไปซึ่งเป็นการพัฒนาทักษะและวิชาชีพ และจะดำเนินการให้นิสิตนำความรู้ไปใช้อย่างถูกต้อง (คุณธรรม) และมีประโยชน์ต่อสังคม