

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 31.10.2023 16:51:46
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В. Пекаревский
« 20 » мая 2019г.

Рабочая программа дисциплины
ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

Направление подготовки

09.03.03 Прикладная информатика

Направленность программы бакалавриата

Прикладная информатика в химии

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **информационных технологий и управления**

Кафедра **автоматизации процессов химической промышленности**

Санкт-Петербург

2019

Б1.О.29

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Заведующий кафедрой		профессор Л.А. Русинов

Рабочая программа дисциплины «Хемометрические методы» обсуждена на заседании кафедры автоматизации процессов химической промышленности
протокол от «24» апреля 2019г. № 5

Л.А. Русинов

Заведующий кафедрой

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления
протокол от «15» мая 2019г. №9

В.В. Куркина

Председатель

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Прикладная информатика»		Т.Б. Чистякова
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Объем дисциплины.....	5
4. Содержание дисциплины.....	6
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий	6
4.2. Занятия лекционного типа	6
4.3. Занятия семинарского типа	7
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	8
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	9
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	9
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	9
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	10
10.1. Информационные технологии.....	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	11
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	11
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	11
Приложение № 1	12

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ОПК-1 Способен применять естественно-научные и общепрофессиональные знания, методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования в профессиональной деятельности	ОПК-1.7 Решение стандартных профессиональных задач с применением естественнонаучных и общепрофессиональных знаний, методов математического анализа и моделирования	Знать: <ul style="list-style-type: none">- принципы работы основных методов многомерного анализа, их предпочтительные области применения (ЗН-1);- методы обработки аналитической информации (ЗН-2);- требования к формированию и предобработке исходных данных для их анализа (ЗН-3); Уметь: <ul style="list-style-type: none">- использовать математический аппарат статистики в организации эксперимента (У-1);- строить МГК- и ПЛС- модели исходных данных (У-2). Владеть: <ul style="list-style-type: none">- навыками анализа внутренней структуры данных (В-1).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части Блока 1 (Б1.О.29) и изучается на 4 курсе в 8 семестре. В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Математика», «Физика», «Метрологическое и методическое обеспечение автоматизированных информационных систем», «Теория вероятностей и математическая статистика».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Хемометрические методы» знания, умения и навыки могут быть использованы при прохождении как научно-производственных и научно-исследовательских практик, так и для научно-исследовательской деятельности по выполнению бакалаврской квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
	Очная форма
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	58
занятия лекционного типа	28
занятия семинарского типа, в т.ч.	28
семинары, практические занятия	28
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	2
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	50
Формы текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе, КР, КП)	-
Форма промежуточной аттестации (зачет, экзамен)	зачет

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Введение Предмет и задачи хеометрики	2			4	ОПК-1	ОПК-1.7
2.	Линейный метод главных компонент (МГК)	8	6		12	ОПК-1	ОПК-1.7
3.	Регрессия на латентные структуры	4	6		8	ОПК-1	ОПК-1.7
4.	Многомерная градуировка	4	4		6	ОПК-1	ОПК-1.7
5.	Нелинейные методы главных компонент	6	6		12	ОПК-1	ОПК-1.7
6.	Применение МГК	4	6		8	ОПК-1	ОПК-1.7
	Итого	28	28		50		

4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Введение. Предмет и задачи хеометрики</u> Многомерность данных. Скрытые структуры данных. Основные статистические характеристики данных. Проекционный подход к многомерному анализу.	2	Слайд-презентации
2	<u>Линейный метод главных компонент (МГК)</u> Понятие главных компонент. Матрицы главных компонент (нагрузок) и проекций исходных данных на главные компоненты (матрицы счетов). Задачи МГК. Отличие МГК-анализа от факторного анализа. Интерпретация графиков нагрузок и счетов. Модели главных компонент, состав. Определение числа главных компонент, критерии. Алгоритмы вычисления главных компонент. Особенности построения моделей МГК.	8	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
3	<u>Регрессия на латентные структуры</u> Метод проекций на латентные структуры (ПЛС). ПЛС-модели. Алгоритмы вычисления. Процедуры для улучшения модели. Множественная регрессия и регрессия на главные компоненты	4	
4	<u>Многомерная градуировка</u> Цели и виды градуировок (на примере градуировки спектрофотометров). Формирование исходных данных (обучающих массивов). Градуировка в пространстве главных компонент.	4	
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Нелинейные МГК, характеристики. Виды керн-функций. Керн-МГК. Алгоритмы вычисления.	6	
6	<u>Применение МГК</u> МГК в анализе данных. МГК в системах мониторинга состояния технологических процессов. МГК в системах диагностики нарушений в ходе технологических процессов.	4	

4.3. Занятия семинарского типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<u>Линейный метод главных компонент (МГК)</u> Матрицы главных компонент (нагрузок) и проекций исходных данных на главные компоненты (матрицы счетов). Алгоритмы вычисления. Интерпретация графиков нагрузок и счетов. Модели главных компонент, состав. Определение числа главных компонент, критерии. Особенности построения моделей МГК.	6	Презентация, обсуждение
3	<u>Регрессия на латентные структуры</u> ПЛС-модели. Алгоритмы вычисления. Процедуры для улучшения модели. Множественная регрессия и регрессия на главные компоненты	6	Презентация, обсуждение
4	<u>Многомерная градуировка</u> Формирование исходных данных (обучающих массивов). Классическая калибровка. Обратная калибровка. Калибровка на латентных переменных. Сравнение различных методов	4	Презентация, обсуждение
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Керн-МГК. Виды керн-функций. Алгоритмы вычисления.	6	Презентация, обсуждение

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
6	<u>Применение МГК</u> МГК в анализе данных. МГК в системах мониторинга состояния технологических процессов.	6	Презентации, обсуждение

4.4. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1.	<u>Введение. Предмет и задачи хемометрики</u> Многомерность данных. Скрытые структуры данных. Основные статистические характеристики данных. Проекционный подход к многомерному анализу.	4	Устный опрос
2.	<u>Линейный метод главных компонент (МГК)</u> Понятие главных компонент. Матрицы главных компонент (нагрузок) и проекций исходных данных на главные компоненты (матрицы счетов). Задачи МГК. Отличие МГК-анализа от факторного анализа. Интерпретация графиков нагрузок и счетов. Модели главных компонент, состав. Определение числа главных компонент, критерии. Алгоритмы вычисления главных компонент. Построение моделей главных компонент с использованием вычисления собственных векторов корреляционной матрицы и методом NIPALS..	12	Устный опрос
3	<u>Регрессия на латентные структуры</u> Метод проекций на латентные структуры (ПЛС). ПЛС-модели. Алгоритмы вычисления. Процедуры для улучшения модели. Множественная регрессия и регрессия на главные компоненты	8	Устный опрос
4	<u>Многомерная градуировка</u> Цели и виды градуировок (на примере градуировки спектрофотометров). Формирование исходных данных (обучающих массивов). Градуировка в пространстве главных компонент.	6	Устный опрос
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Нелинейные МГК, характеристики. Виды керн-функций. Керн-МГК. Алгоритмы вычисления.	12	Устный опрос
6	<u>Применение МГК</u> МГК в анализе данных. МГК в системах мониторинга состояния технологических процессов. Мониторинг технологического процесса с использованием линейного и нелинейного МГК с различными керн-функциями.	8	Устный опрос

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Методические указания для студентов по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медиа: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине для очной формы обучения проводится в виде зачета.

Зачет предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуется вопросами (заданиями) двух видов: теоретические вопросы (для проверки знаний) и практический вопрос (для проверки умений и навыков).

При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 40 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

Вариант № 1

1. Хемометрика. Области исследования .Основные задачи.
2. Матрицы счетов. Графическое представление счетов. Интерпретация графиков

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1. Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «удовлетворительно».

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Русинов, Л.А. Методы и системы мониторинга и диагностики нарушений в технологических процессах производства химических наноматериалов / Л.А.Русинов, В.В.Куркина - СПб.: СПбТИ(ТУ), 2012 - 44с.
2. Советов, Б.Я. Представление знаний в информационных системах: учебник для вузов / Б. Я. Советов, В. В. Цехановский, В. Д. Чертовской. - М.: Академия, 2011. - 143с.
3. Советов, Б.Я. Интеллектуальные системы и технологии / Б.Я.Советов, В.В.Цехановский, В.Д.Чертовской. - М.: Академия, 2013. - 318 с.
4. Злобин, В.К. Нейросети и нейрокомпьютеры / В. К. Злобин, В. Н. Ручкин. - СПб. : БХВ-Петербург, 2011. - 252 с.

б) электронные учебные издания

1. Шачнева, Е. Ю. Хемометрика. Базовые понятия : Учебно-методические пособия / Е. Ю. Шачнева. - СПб. ; Москва; Краснодар : Лань, 2017. - 160 с. (ЭБС «Лань»)

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.technolog.edu.ru>
- по цифровой обработке сигналов на сайтах: <http://prodav.exponenta.ru>;
<http://sernam.ru>.

- по мониторингу и контролю качества на сайтах:
<http://www.gosthelp.ru/text/GOSTR507794096Statistiche.html>;
<http://www.statsoft.ru/home/textbook/modules/stquacon.html>;

Электронно-библиотечные системы:

1. «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
2. «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>
3. www.elibrary.ru - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине «Вычислительные машины, системы и сети» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

Рабочей программой дисциплины «Хеометрические методы» предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 50 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;

- подготовку к практическим и лабораторным занятиям;
- работу с Интернет-источниками;
- подготовку к зачету.

Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из рекомендованных литературных источников.

По дисциплине предусмотрены следующие виды текущего контроля:

устные опросы по темам, предложенным для самостоятельного изучения (в дни практических занятий);

По окончании изучения дисциплины в 8-м семестре проводится зачет. При подготовке рекомендуется сначала несколько раз прочитать весь конспект лекций, дополненный сведениями из литературы.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

10.1. Информационные технологии

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
семинарские занятия с презентацией и последующим ее обсуждением.

10.2. Программное обеспечение

- Microsoft Office Std, Академическая лицензия, sublicензионный договор №02(03)15 от 20.01.2015, с 20.01.2015 бессрочно;

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

<http://borovic.ru> - база патентов России.

<http://1.fips.ru/wps/portal/Register> - Федеральный институт промышленной собственности

<http://gost-load.ru>- база ГОСТов.

<http://elibrary.ru> – Российская поисковая система научных публикаций.

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для проведения занятий в интерактивной форме используются следующие помещения и оборудование:

- кафедра автоматизации процессов химической промышленности, аудитория №13, оснащение: специализированная мебель (30 посадочных мест), доска, демонстрационный экран, компьютер, проектор;
- кафедра автоматизации процессов химической промышленности, помещение для проведения практических занятий, аудитория №14, оснащение: специализированная мебель (20 посадочных мест), маркерная доска.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014г.

Приложение № 1
к рабочей программе дисциплины
Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации
по дисциплине «Хеометрические методы»

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ОПК-1	Способен применять естественнонаучные и общетеchnические знания, методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования в профессиональной деятельности	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачет» (пороговый)
ОПК-1.7 Решение стандартных профессиональных задач с применением естественнонаучных и общетеchnических знаний, методов математического анализа и моделирования	Знает принципы работы основных методов многомерного анализа, их предпочтительные области применения (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы № 1-12.	Имеет представление о методе главных компонент, их вычисления и интерпретации графиков счетов и нагрузок
	Знает методы обработки аналитической информации (ЗН-2).	Правильные ответы на вопросы № 6, 20-21	Ориентируется в методах предобработки данных для построения МГК- и ПЛС-моделей и их использования для построения градуировочных зависимостей
	Знает требования к формированию и предобработке исходных данных для их анализа (ЗН-3).	Правильные ответы на вопросы № 13 и 17	Имеет слабое представление об особенностях работы с нелинейным МНК

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачет» (пороговый)
	Умеет использовать математический аппарат статистики в организации эксперимента (У-1);	Правильные ответы на вопросы № 14-19	Имеет представление о возможностях и способах применения хемометрических методов для анализа и обработки данных
	Умеет строить МГК- и ПЛС-модели исходных данных (У-2).	Правильные ответы на вопросы № 3, 6, 11-13	Строит МГК и ПЛС модели, но допускает некоторые неточности
	Владеет навыками анализа внутренней структуры данных (Н-2).	Правильные ответы на вопросы №2,7,8, 11,14,18	Представляет хемометрические методы анализа внутренней структуры данных

3. Типовые контрольные вопросы для проведения промежуточной аттестации.

Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенциям ОПК-1:

1. Основные статистические характеристики данных
2. Многомерность данных. Скрытые структуры данных.
3. Методы предварительной обработки данных для построения МГК-моделей.
4. Алгоритм NIPALS вычисления матриц счетов и нагрузок.
5. Вычисление главных компонент с помощью сингулярного разложения матрицы данных.
6. Построение МГК-моделей данных. Определение числа главных компонент, учитываемых в модели.
7. Внутренняя структура данных. Интерпретация графиков счетов.
8. Внутренняя структура данных. Интерпретация графиков нагрузок.
9. РГК - регрессия на главные компоненты.
10. Множественная регрессия и РГК - регрессия на главные компоненты.
11. ПЛС - регрессия на латентные структуры.
12. Методы проверки адекватности МГК- и ПЛС-моделей.
13. Нелинейные МГК. Построение керн-МГК. Примеры керн-функций.
14. Определение выбросов в зашумленных данных с помощью МГК и ПЛС.
15. Статистики Q и T² и их использование для обнаружения нарушений в ходе технологического процесса.
16. Мониторинг состояния технологического процесса с помощью методов хемометрики.
17. Мониторинг состояния нестационарных технологических процессов с помощью хемометрических методов.
18. Диагностика причин нарушений по вкладам главных компонент.

19. Методы градуировки многомерных анализаторов. Классическая калибровка. Обратная калибровка.
20. Градуировка многомерных анализаторов с использованием МГК

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета. Шкала оценивания на зачёте – «зачёт», «незачет». При этом «зачёт» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.