

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 20.11.2023 17:43:45
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
« 24 » января 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ АНАЛИТИЧЕСКИХ
ИЗМЕРЕНИЙ

Направление подготовки
12.03.01 Приборостроение
Направленность программы бакалавриата
**Инновационные методы и системы преобразования информации
в цифровой индустрии**

Квалификация
Бакалавр

Форма обучения
очная

Факультет **информационных технологий и управления**
Кафедра **автоматизации процессов химической промышленности**

Санкт-Петербург
2021

Б1.В.07

СОДЕРЖАНИЕ

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

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)
<p>ПК-4 Способен осуществлять сбор и анализ данных для расчета и проектирования компонентов, узлов измерительных систем, участвовать в разработке (на основе действующих стандартов и других сопроводительных материалов) проектной и рабочей документации в области автоматизации</p>	<p>ПК-4.3 Предлагает инновационные и использует современные подходы к решению задач разработки измерительных систем</p>	<p>Знает методы обработки аналитической информации (ЗН-1) Знает методики построения градуировочных зависимостей для сложных анализаторов качества (ЗН-2) Умеет подбирать методики обработки экспериментальных данных (У-1) Умеет строить МГК- и ПЛС- модели исходных данных (У-2). Умеет применять МГК и ПЛС в системах мониторинга и диагностики технологических процессов (У-3) Владеет навыками анализа внутренней структуры данных (В-1).</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.07) и изучается на 4 курсе в 8 семестре. В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Математика», «Физика», «Метрология, стандартизация и сертификация», «Основы научных исследований».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Хемометрические методы обработки аналитических измерений» 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, академических часов Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	44
занятия лекционного типа	14
занятия семинарского типа, в т.ч.	28
семинары, практические занятия (в том числе на практическую подготовку)	28 (2)
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	2
в том числе на КП	-
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	37
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	экзамен (27)

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Семинары и/или практические занятия	Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
1.	Введение Предмет и задачи хе-мометрики	2		2	ПК-4	ПК-4.3
2.	Линейный метод главных компонент (МГК), проекция на латентные структуры (ПЛС)	4	8	8		
3.	Регрессия на латентные структуры	2	6	8		
4.	Многомерная градуировка	2	6	6		
5.	Нелинейные методы главных компонент	2	4	10		
6.	Применение МГК и ПЛС	2	4	3		
	Итого	14	28	37		

4.2 Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ПК-4.3	Введение Предмет и задачи хемометрики Линейный метод главных компонент (МГК), проекция на латентные структуры (ПЛС) Регрессия на латентные структуры Многомерная градуировка Нелинейные методы главных компонент Применение МГК и ПЛС Конфигурирование контроллеров

4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Введение. Предмет и задачи хемометрики</u> Многомерность данных. Скрытые структуры данных. Основные статистические характеристики данных. Проекционный подход к многомерному анализу	2	ЛВ
2	<u>Линейный метод главных компонент (МГК), проекция на латентные структуры (ПЛС)</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.	4	ЛВ
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.	2	ЛВ
4	<u>Многомерная градуировка</u> Цели и виды градуировок (на примере градуировки спектрофотометров). Формирование исходных данных (обучающих массивов). Градуировка в пространстве главных компонент.	2	ЛВ
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Нелинейные МГК, характеристики. Виды kern-функций. Kern-МГК. Алгоритмы вычисления.	2	ЛВ
6	<u>Применение МГК</u> МГК в анализе данных. МГК в системах мониторинга состояния технологических процессов. МГК и ПЛС в системах диагностики нарушений в ходе технологических процессов.	2	ЛВ

4.4. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<u>Линейный метод главных компонент (МГК), проекция на латентные структуры (ПЛС)</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. Виды кодов, используемых для кодирования операндов в процессоре, и выполнение арифметических операций в этих кодах.	8	ЛВ, Д
3	<u>Регрессия на латентные структуры</u> ПЛС-модели. Алгоритмы вычисления. Процедуры для улучшения модели. Множественная регрессия и регрессия на главные компоненты	6	ЛВ, Д
4	<u>Многомерная градуировка</u> Формирование исходных данных (обучающих массивов). Классическая калибровка. Обратная калибровка. Калибровка на латентных переменных Сравнение различных методов	6	ЛВ, Д
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Керн-МГК. Виды керн-функций. Алгоритмы вычисления.	4	ЛВ, Д
6	<u>Применение МГК и ПЛС</u> МГК в анализе данных. МГК в системах мониторинга и диагностики состояния технологических процессов.	4	ЛВ, Д

4.5. 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	2	-

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля*)
2	<u>Линейный метод главных компонент (МГК), проекция на латентные структуры (ПЛС)</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.	8	
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	
4	<u>Многомерная градуировка</u> Цели и виды градуировок (на примере градуировки спектрофотометров). Формирование исходных данных (обучающих массивов). Градуировка в пространстве главных компонент	6	
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Нелинейные МГК, характеристики. Виды керн-функций. Керн-МГК. Алгоритмы вычисления.	10	
6	<u>Применение МГК и ПЛС</u> МГК в анализе данных. МГК и ПЛС в системах мониторинга состояния технологических процессов. Мониторинг технологического процесса с использованием линейного и нелинейного МГК с различными керн-	3	

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 проводится по вопросам в форме экзамена на 8-м семестре. К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуется теоретическими вопросами (заданиями).

При сдаче экзамена, студент получает три вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример вопросов экзаменационного билета:

Вариант №

1. Хемометрика. Области исследования. Основные задачи.
2. Матрицы счетов. Графическое представление счетов. Интерпретация графиков
3. Регрессия на главные компоненты.

7. Перечень учебных изданий, необходимых 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(ГУ), 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

б) электронные учебные издания:

3. Шачнева, Е. Ю. Хемометрика. Базовые понятия : учебное пособие / Е. Ю. Шачнева. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 160 с. — ISBN 978-5-8114-2301-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/168997> (дата обращения: 08.06.2021). — Режим доступа: по подписке.

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

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы:
<http://media.technolog.edu.ru>

Электронная библиотека СПбГТИ(ГУ) (на базе ЭБС «БиблиоТех»)

Принадлежность – собственная СПбГТИ(ГУ).

Договор на передачу права (простой неисключительной лицензии) на использования результата интеллектуальной деятельности ООО «БиблиоТех»

ГК№0372100046511000114_135922 от 30.08.2011

Адрес сайта – <http://bibl.lti-gti.ru/>

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как www.yandex.ru, www.google.ru, www.rambler.ru, www.yahoo.ru и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:

www.elibrary.ru - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий.

«Лань (Профессия)» <https://e.lanbook.com/books/>.

На кафедре разработано программное обеспечение для выполнения лабораторных работ.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Хемометрические методы обработки аналитических измерений» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКВД. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

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

СТО СПбГТИ 016-2015. КС УКВД. 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 приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

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;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

- Microsoft Office Std, Академическая лицензия, сублицензионный договор №02(03)15 от 20.01.2015, с 20.01.2015 бессрочно;
- Среда программирования Keil, Консерт

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления Для проведения занятий в интерактивной форме:

Учебная аудитория для проведения лекционных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран, проектор, компьютер.

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа.

Основное оборудование: столы; стулья; компьютеры; доска; демонстрационный экран, проектор.

Помещение для самостоятельной работы,

Основное оборудование: столы; стулья; проектор, экран; компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

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

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный 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.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Хеометрические методы обработки аналитических измерений»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап форми- рования
ПК-4	Способен осуществлять сбор и анализ данных для расчета и проектирования компонентов, узлов измерительных систем, участвовать в разработке (на основе действующих стандартов и других сопроводительных материалов) проектной и рабочей документации в области автоматизации	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций при проведении экзамена

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК4-3	Знает методы обработки аналитической информации (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы №1-8	Перечисляет основные методы первичной обработки аналитической информации, но имеет слабое представление о их работе	Знает основные методы первичной обработки аналитической информации, но допускает небольшие ошибки при объяснении их работы и свойств	Хорошо представляет типовые методы первичной обработки аналитической информации
	Знает методики построения градуировочных зависимостей для сложных анализаторов качества (ЗН-2)	Правильные ответы на вопросы №19,20	Путается в объяснении методик построения градуированных зависимостей	Практически верно объясняет методики построения градуированных зависимостей, но допускает небольшие неточности при оценке их характеристик.	Хорошо представляет методик построения градуированных зависимостей и их реальные характеристики.
	Умеет подбирать методики обработки экспериментальных данных (У-1)	Правильные ответы на вопросы №9-12	Путается в объяснении регрессии на главные компоненты и латентные структуры, плохо представляет их возможности и области применения	Объясняет построение регрессии на главные компоненты и латентные структуры, но недостаточно ориентируется в области их применения.	Хорошо разбирается в особенностях построения и применения регрессии на главные компоненты и латентные структуры.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Умеет строить МГК- и ПЛС- модели исходных данных (У-2).	Правильные ответы на вопросы № 5-6, 13-14	Некорректно решает предложенное задание по синтезу МГК- и ПЛС-моделей	Решает предложенное задание по синтезу МГК- и ПЛС-моделей с небольшими ошибками	Успешно выполняет решение предложенного задания по синтезу МГК- и ПЛС-моделей
	Умеет применять МГК и ПЛС в системах мониторинга и диагностики технологических процессов (У-3)	Правильные ответы на вопросы № 15-20	Плохо ориентируется в работе систем мониторинга и диагностики	Недостаточно корректно использует МГК-и ПЛС модели для мониторинга и диагностики.	Уверенно ориентируется в применении методов МГК и ПЛС для мониторинга и диагностики
	Владеет навыками анализа внутренней структуры данных (В-1).	Правильные ответы на вопросы 7-8	Путается при интерпретация графиков счетов и нагрузок.	Достаточно уверенно интерпретирует графики счетов и нагрузок, допуская небольшие неточности	Уверенно интерпретирует графики счетов и нагрузок

2. Типовые контрольные вопросы для проведения промежуточной аттестации.

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4:

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 T^2 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

5. 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 экзамена на 8 семестре. Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).