

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 20.10.2023 13:32:39
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
« 28 » июня 2021г.

Рабочая программа дисциплины
ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

Направление подготовки

15.04.04 Автоматизация технологических процессов и производств

Направленность программы магистратуры

Управление потенциально-опасными процессами химической технологии

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Заочная

Факультет **информационных технологий и управления**

Кафедра **автоматизации процессов химической промышленности**

Санкт-Петербург

2021

Б1.В.04

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 «15» июня 2021 № 8
Заведующий кафедрой

Л.А. Русинов

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления протокол от «23» июня 2021 № 9
Председатель

В.В. Куркина

СОГЛАСОВАНО

Ответственный за направление подготовки «Автоматизация технологических процессов и производств»		О.А. Ремизова
Руководитель направления подготовки		Л.А. Русинов
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник учебно-методического управления		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. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины	6
4.3. Занятия лекционного типа	7
4.4. Занятия семинарского типа	8
4.5. Самостоятельная работа обучающихся.....	9
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	10
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	10
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	11
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	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	12
Приложение № 1.....	13

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-1 Способен разрабатывать производственную документацию, сопровождающую гибкие производственные системы, и включающую организационные мероприятия в том числе по повышению достоверности информации</p>	<p>ПК-1.3 Выполняет операции проектирования, ремонта и эксплуатации контрольно-измерительных систем в системах управления потенциально-опасными объектами</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - принципы работы основных методов многомерного анализа, их предпочтительные области применения (ЗН-1); - методы обработки аналитической информации (ЗН-2); <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - использовать математический аппарат статистики в организации эксперимента (У-1); <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - навыками анализа внутренней структуры данных (В-1).
<p>ПК-3 Способен осуществлять выбор и совмещение технических модулей гибких производственных систем, поиск материалов с учетом специфики технологического объекта, формировать их комплектацию, разрабатывать методы оценки качества и эффективности от внедрения и эксплуатации гибкой производственной системы</p>	<p>ПК-3.3 Разрабатывает и включает аналитические измерительные системы в структуру проектируемых гибких производственных систем</p>	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - требования к формированию и предобработке исходных данных для их анализа (ЗН-3); <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - строить МГК- и ПЛС- модели исходных данных (У-2).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.04) и изучается на 1 курсе.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Высшая математика», «Теория вероятностей и математическая статистика», «Вычислительная математика», «Основы научных исследований», в ООП бакалавриата, а также на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «АСУТП на базе цифровых технологий» и «Цифровые методы контроля структуры и свойств продукции химических производств» на 1 курсе магистратуры. Полученные в процессе изучения дисциплины «Хемометрические методы» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Методы и средства автоматического аналитического контроля», «Автоматизированные системы научных исследований», при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	4/ 144
Контактная работа с преподавателем:	16
занятия лекционного типа	4
занятия семинарского типа, в т.ч.	12
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	6
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	6 (4)
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	2
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	119
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Кр1, Кр2
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Экзамен (9)

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/ п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинар- ского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практи- ческие занятия	Лабораторные работы			
1.	Введение Предмет и задачи хеометрики	0,5			15	ПК-1	ПК-1.3
2.	Линейный метод главных компонент (МГК)	1	1,5	2	25	ПК-1	ПК-1.3
3.	Регрессия на латентные структуры	0,5	1,5		20	ПК-3	ПК-3.3
4.	Многомерная градуировка	0,5	0,5	2	20	ПК-1	ПК-1.3
5.	Нелинейный метод главных компонент	1	1	2	24	ПК-1	ПК-1.3
6.	Применение МГК	0,5	1,5		15	ПК-3	ПК-3.3
	Итого	4	6	6	119		

4.2 Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов до- стижения компетен- ции	Наименование раздела дисциплины
1.	ПК-1.3.	Введение Предмет и задачи хеометрики Линейный метод главных компонент (МГК) Многомерная градуировка Нелинейный метод главных компонент
2.	ПК-3.3.	Регрессия на латентные структуры Применение МГК

4.3. Занятия лекционного типа

№ 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.	0,5	лекция-визуализация (ЛВ)
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.	1	
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	0,5	
4	<u>Многомерная градуировка</u> Цели и виды градуировок (на примере градуировки спектрофотометров). Формирование исходных данных (обучающих массивов). Градуировка в пространстве главных компонент.	0,5	
5	<u>Нелинейный метод главных компонент</u> Нелинейный МГК, характеристики. Виды ядер-функций. Кэрн-МГК. Алгоритмы вычисления.	1	
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.	0,5	

4.4. Занятия семинарского типа
4.4.1. Семинары, практические занятия.

№ 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.	1,5	ЛВ, дебаты (Д)
3	<u>Регрессия на латентные структуры</u> ПЛС-модели. Алгоритмы вычисления. Процедуры для улучшения модели. Множественная регрессия и регрессия на главные компоненты	1,5	лекция – пресс-конференция (ЛПК)
4	<u>Многомерная градуировка</u> Формирование исходных данных (обучающих массивов). Классическая калибровка. Обратная калибровка. Калибровка на латентных переменных Сравнение различных методов	0,5	ЛВ, Д
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Керн-МГК. Виды керн-функций. Алгоритмы вычисления.	1	ЛВ, Д
6	<u>Применение МГК</u> МГК в анализе данных. МГК в системах мониторинга состояния технологических процессов.	1,5	ЛПК

4.4.2. Лабораторные работы

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Примечания
		всего	в том числе на практическую подготовку	
2	<u>Линейный метод главных компонент (МГК)</u> . Изучение структуры данных по матрицам счетов и нагрузок. Изучение изменения остаточной дисперсии при увеличении числа учитываемых главных компонент.	2	2	
4	<u>Многомерная градуировка</u> . Изучение процесса градуировки в пространстве главных компонент	2		

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Примечания
		всего	в том числе на практическую подготовку	
5	<u>Нелинейный метод главных компонент.</u> Построение модели нелинейного керн-МГК с различными керн-функциями.	2	2	

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.	15	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..	25	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	20	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.	20	Устный опрос
5	<u>Нелинейные методы главных компонент</u> Нелинейные МГК, характеристики. Виды керн-функций. Керн-МГК. Алгоритмы вычисления.	24	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.	15	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 проводится в форме экзамена.

Экзамен предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются двумя вопросами (заданиями). Время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов на экзамене:

<p>Вариант № 1</p> <ol style="list-style-type: none">1. Хемометрика. Области исследования .Основные задачи.2. Матрицы счетов. Графическое представление счетов. Интерпретация графиков

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

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>;
- - Электронная библиотека СПбГТИ(ТУ) (на базе ЭБС «БиблиоТех»)
- Принадлежность – собственная СПбГТИ(ТУ).
- 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.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине «Хемометрические методы» 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.

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. 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.

СТП 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 приходить, имея знания по уже изученному материалу. 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;
- 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;
- РТС Mathcad (ГК №19 от 13.10.08 г. на предоставление академической лицензии на MathCAD University Department Perpetual-200 Floating);
- Matlab

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

1. Для проведения занятий в интерактивной форме:
 - кафедра автоматизации процессов химической промышленности, аудитория №8. 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Е. Оснащение: специализированная мебель (18 посадочных мест), доска, демонстрационный экран, проектор, компьютер.
2. Для проведения лабораторных и практических занятий:
 - кафедра автоматизации процессов химической промышленности, лаборатория аудитория №7 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Е. Оснащение: специализированная мебель (16 посадочных мест), доска, 8 компьютеров, сетевое оборудование.

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.

Приложение № 1
к рабочей программе дисциплины

Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации
по дисциплине «Хемометрические методы»

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-1	Способен разрабатывать производственную документацию, сопровождающую гибкие производственные системы, и включающую организационные мероприятия в том числе по повышению достоверности информации	промежуточный
ПК-3	Способен осуществлять выбор и совмещение технических модулей гибких производственных систем, поиск материалов с учетом специфики технологического объекта, формировать их комплектацию, разрабатывать методы оценки качества и эффективности от внедрения и эксплуатации гибкой производственной системы	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)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-1.3. Выполняет операции проектирования, ремонта и эксплуатации контрольно-измерительных систем в системах управления потенциально-опасными объектами	Знает принципы работы основных методов многомерного анализа, их предпочтительные области применения (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы № 1-7 к экзамену	Имеет представление о методе главных компонент, но слабо ориентируется в методах их вычисления и интерпретации графиков счетов и нагрузок.	Имеет представление о методе главных компонент и методах их вычисления, но затрудняется с интерпретацией графиков счетов и нагрузок.	Имеет четкое представление о методе главных компонент, хорошо ориентируется в методах их вычисления и интерпретации графиков счетов и нагрузок.
	Знает методы обработки аналитической информации (ЗН-2).	Правильные ответы на вопросы № 14 к экзамену	Недостаточно уверенно ориентируется в методах предобработки данных для построения МГК- и ПЛС-моделей и их использования для построения градуировочных зависимостей	Ориентируется в методах предобработки данных для построения МГК- и ПЛС-моделей, но допускает неточности при их использовании для построения градуировочных зависимостей	Хорошо ориентируется в методах предобработки данных для построения МГК- и ПЛС-моделей и их использования для построения градуировочных зависимостей
	Умеет использовать математический аппарат статистики в организации эксперимента (У-1);	Правильные ответы на вопросы № 8-13 к экзамену	Имеет недостаточно четкое представление о возможностях и способах применения хемометрических методов для анализа и обработки данных	Имеет представление о возможностях и способах применения хемометрических методов для анализа и обработки данных, но допускает при этом некоторые неточности	Хорошо представляет возможности и способы применения хемометрических методов для анализа и обработки данных и грамотно их применяет
	Владеет навыками анализа внутренней структуры данных (Н-2).	Правильные ответы на вопросы №2,5,6,	Представляет хемометрические методы анализа внутренней	Представляет хемометрические методы ана-	Представляет хемометрические методы анализа внутренней

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
		9,12 к экзамену	структуры данных, но не уверенно их реализует	лиза внутренней структуры данных, но реализует их с небольшими ошибками	структуры данных и уверенно их реализует
ПК-3.3. Разрабатывает и включает аналитические измерительные системы в структуру проектируемых гибких производственных систем	Знает требования к формированию и предобработке исходных данных для их анализа (ЗН-3).	Правильные ответы на вопросы № 15 и 16 к экзамену	Имеет представление о формировании и предобработке исходных данных, но плохо знает особенности работы нелинейного МНК	Имеет представление о формировании и предобработке исходных данных, но допускает небольшие ошибки при работе нелинейного МНК	Имеет представление о формировании и предобработке исходных данных, хорошо представляет особенности работы нелинейного МНК
	Умеет строить МГК- и ПЛС-модели исходных данных (У-2).	Правильные ответы на вопросы № 3, 6, 17-21 к экзамену	Строит МГК и ПЛС модели, но допускает существенные неточности	Строит МГК и ПЛС модели, но допускает небольшие неточности	Уверенно строит МГК и ПЛС модели.

3. Типовые контрольные вопросы для проведения промежуточной аттестации.

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

1. Основные статистические характеристики данных
2. Многомерность данных. Скрытые структуры данных.
3. Алгоритм NIPALS вычисления матриц счетов и нагрузок.
4. Вычисление главных компонент с помощью сингулярного разложения матрицы данных.
5. Внутренняя структура данных. Интерпретация графиков счетов.
6. Внутренняя структура данных. Интерпретация графиков нагрузок.
7. РГК - регрессия на главные компоненты.
8. Множественная регрессия и РГК - регрессия на главные компоненты.
9. Определение выбросов в зашумленных данных с помощью МГК и ПЛС.
10. Статистики Q и T^2 и их использование для обнаружения нарушений в ходе технологического процесса.
11. Мониторинг состояния технологического процесса с помощью методов хемометрики.
12. Диагностика причин нарушений по вкладам главных компонент.
13. Методы градуировки многомерных анализаторов. Классическая калибровка. Обратная калибровка.
14. Градуировка многомерных анализаторов с использованием МГК

Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенциям ПК-3:

15. Нелинейный МГК. Построение керн-МГК. Примеры керн-функций.
16. Мониторинг состояния нестационарных технологических процессов с помощью хемометрических методов.
17. Методы предварительной обработки данных для построения МГК-моделей.
18. Построение МГК-моделей данных. Определение числа главных компонент, учитываемых в модели.
19. ПЛС - регрессия на латентные структуры.
20. Методы проверки адекватности МГК- и ПЛС-моделей.
21. Нелинейные МГК. Построение керн-МГК. Примеры керн-функций.

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

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

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена. Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).