

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт геологии и нефтегазовых технологий



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.



_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Хеометрика Б1.В.ДВ.5

Направление подготовки: 21.04.01 - Нефтегазовое дело

Профиль подготовки: Освоение высоковязкой нефти и природных битумов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Абдрафикова И.М.

Рецензент(ы):

Кемалов А.Ф.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Кемалов А. Ф.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Института геологии и нефтегазовых технологий:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 325516

Казань
2016

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) ассистент, б/с Абдрафикова И.М. Кафедра высоковязких нефтей и природных битумов Институт геологии и нефтегазовых технологий, IMAbdrafikova@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения является ознакомление студентов с базовыми моделями, используемыми в химическом анализе, процедурами подготовки данных и обработки сигналов, а также обучить их методам качественного и количественного анализов для решения профессиональных задач.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.5 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 21.04.01 Нефтегазовое дело и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Для изучения дисциплины "Основы хеометрии" необходимо знакомство студентов с курсами химии и математики.

Согласно ФГОС и ООП "Химическая технология" дисциплина "Сбор, транспорт и переработка углеводородного сырья " является вариативной дисциплиной и относится к профессиональному циклу.

Дисциплина "Основы хеометрии " относится к дисциплинам направления подготовки магистров, обучающихся по направлению 131000.68 "Нефтегазовое дело" на кафедре высоковязких нефтей и природных битумов (ВВН и ПБ) Института геологии и нефтегазовых технологий КФУ.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	формулировать и решать задачи, возникающие в ходе научно-исследовательской и практической деятельности
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	использовать на практике знания, умения и навыки в организации исследовательских, проектных и конструкторских работ, в управлении коллективом
ОПК-4 (профессиональные компетенции)	разрабатывать научно-техническую, проектную и служебную документацию, оформлять научно-технические отчеты, обзоры, публикации по результатам выполненных исследований
ОПК-4 (профессиональные компетенции)	разрабатывать научно-техническую, проектную и служебную документацию, оформлять научно-технические отчеты, обзоры, публикации по результатам выполненных исследований
ОПК-5 (профессиональные компетенции)	к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК-6 (профессиональные компетенции)	руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	оценивать перспективы и возможности использования достижений научно-технического прогресса в инновационном развитии отрасли, предлагать способы их реализации
ПК-2 (профессиональные компетенции)	использовать методологию научных исследований в профессиональной деятельности
ПК-3 (профессиональные компетенции)	планировать и проводить аналитические, имитационные и экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы
ПК-4 (профессиональные компетенции)	использовать профессиональные программные комплексы в области математического моделирования технологических процессов и объектов
ПК-5 (профессиональные компетенции)	проводить анализ и систематизацию научно-технической информации по теме исследования, осуществлять выбор методик и средств решения задачи, проводить патентные исследования с целью обеспечения патентной чистоты новых разработок

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные понятия, модели и методы хемометрии.

2. должен уметь:

применять хемометрические методы для решения задач качественного и количественного анализов, а также для аналитического контроля процессов.

3. должен владеть:

навыками применения соответствующих моделей и методов для обработки, обобщения и анализа экспериментальных данных.

проведению комплексного статистического анализа массивных данных посредством изученных методов, интерпретации полученных результатов в рамках исследовательской работы.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. История хемометрики. Качественный анализ.	2	1-2	1	0	1	контрольная точка
3.	Тема 3. Количественный анализ. Подготовка данных.	2	3-5	1	0	2	устный опрос
5.	Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA. Работа с данными в программе STATISTICA.	2	6-7	0	0	2	устный опрос
6.	Тема 6. Основные статистики. Метод главных компонент.	2	8-10	0	0	3	отчет
9.	Тема 9. Факторный анализ.	2	11-13	1	0	3	отчет
10.	Тема 10. Кластерный анализ.	2	14-16	1	0	3	отчет
11.	Тема 11. Использование качественного анализа в изучении нефтяных дисперсных систем. Хемометрические методы для решения задач качественного и количественного анализов.	2	17-18	0	0	0	презентация
.	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	зачет
	Итого			4	0	14	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. История хемометрики. Качественный анализ.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Введение. История хемометрики.

лабораторная работа (1 часа(ов)):

Применение качественного анализа для обработки данных исследований

Тема 3. Количественный анализ. Подготовка данных.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Количественный анализ.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Применение количественного анализа для обработки данных исследований

Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA. Работа с данными в программе STATISTICA.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Основные возможности и функции программного пакета STATISTICA. Подготовка данных для работы в программе STATISTICA

Тема 6. Основные статистики. Метод главных компонент.

лабораторная работа (3 часа(ов)):

Основные статистики - подбор примеров. Применение метода главных компонент на конкретных примерах

Тема 9. Факторный анализ.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Факторный анализ

лабораторная работа (3 часа(ов)):

Применение факторного анализа на конкретных примерах

Тема 10. Кластерный анализ.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Кластерный анализ

лабораторная работа (3 часа(ов)):

Применение кластерного анализа на конкретных примерах

Тема 11. Использование качественного анализа в изучении нефтяных дисперсных систем. Хемометрические методы для решения задач качественного и количественного анализов.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. История хемометрики. Качественный анализ.	2	1-2	подготовка к контрольной точке	6	контрольная точка
3.	Тема 3. Количественный анализ. Подготовка данных.	2	3-5	подготовка к устному опросу Работа студентов с лекционным материалом, поиск и анализ материалов из	6	устный опрос
5.	Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA. Работа с данными в программе STATISTICA.	2	6-7	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
6.	Тема 6. Основные статистики. Метод главных компонент.	2	8-10	подготовка к отчету	8	отчет
9.	Тема 9. Факторный анализ.	2	11-13	подготовка к отчету	8	отчет
10.	Тема 10. Кластерный анализ.	2	14-16	подготовка к отчету	8	отчет

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
11.	Тема 11. Использование качественного анализа в изучении нефтяных дисперсных систем. Хемометрические методы для решения задач качественного и количественного анализов.	2	17-18	подготовка к презентации	12	презентация
	Итого				54	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

чтение лекций, проведение семинаров, лабораторных работ, практических работ, контрольных работ, подготовка к написанию аналитических отчетов и отчетов по проделанной работе, курсовой работы, самостоятельная работа студентов по темам и разделам дисциплины.

Работа студентов с лекционным материалом, поиске и анализе материалов из литературных и электронных источников информации по заданной теме, перевод материалов из тематических информационных ресурсов с иностранных языков, изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку, изучение методических указаний и подготовке к выполнению лабораторных работ на основе электронных ресурсов БД Scopus, Thomson Reuters, Web of Knowledge 5.6, Web of Science, Web of Science и ResearcherID, EndNote Web, Journal Citation Report 2010, Scifinder, ресурсов ВАК, изданий ВАК.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Введение. История хемометрики. Качественный анализ.

контрольная точка , примерные вопросы:

письменная работа по усвоенному материалу по истории хемометрики. примерные вопросы: смысл, сущность, методика качественного анализа

Тема 3. Количественный анализ. Подготовка данных.

устный опрос , примерные вопросы:

смысл, сущность, методика проведения количественного анализа

Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA. Работа с данными в программе STATISTICA.

устный опрос , примерные вопросы:

Основные возможности и функции программного пакета STATISTICA. Особенности, последовательность действий при работе с данными

Тема 6. Основные статистики. Метод главных компонент.

отчет , примерные вопросы:

Статистики с приведением примеров. Обработка данных с применением метода главных компонент

Тема 9. Факторный анализ.

отчет , примерные вопросы:

Обработка данных с применением факторного анализа

Тема 10. Кластерный анализ.

отчет , примерные вопросы:

Обработка данных с применением кластерного анализа

Тема 11. Использование качественного анализа в изучении нефтяных дисперсных систем. Хемометрические методы для решения задач качественного и количественного анализов.

презентация , примерные вопросы:

Обработка данных исследования реальных нефтяных дисперсных систем, полученных в ходе НИР (могут быть использованы данные как личной экспериментальной работы, так и теоретической работы с литературными источниками) хемометрическими методами

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Темы практических работ

1. Инструменты для работы с данными в программном пакете STATISTICA. Основные операции с таблицами данных, над переменными и наблюдениями
2. Вычисление описательных статистик (на примере Turtles из библиотеки Examples)
3. Построение и анализ корреляционной матрицы на конкретном примере
4. Многомерные исследовательские методы. Обработка данных методом главных компонент. Анализ полученных результатов (на примере Activities из библиотеки Examples)
5. Многомерные исследовательские методы. Обработка данных методом факторного анализа. Интерпретация полученных результатов (на примере Factor из библиотеки Examples)
6. Многомерные исследовательские методы. Обработка данных методом кластерного анализа. Классификация. Интерпретация полученных результатов (на примере Cars из библиотеки Examples)
7. Применение различных хемометрических методов для изучения нефтяных дисперсных систем, выявления значимых зависимостей характеристик состава от свойств исследуемых объектов (индивидуальные задания)

Контрольные вопросы:

Когда и где появилась хемометрика? Основоположники.

Хемометрика и математика. Соотношение.

Расшифровать следующие аббревиатуры: ALS, PLS-DA, PCR.

Хемометрические методы: "черные" и "белые".

Ковариация между случайными величинами.

Что такое хемометрика? Определение Массарта.

Хемометрика и аналитическая химия. Соотношение.

Расшифровать следующие аббревиатуры: EFA, PAT, KNN.

Данные в химическом анализе (разной модальности).

Случайная величина. Ее среднее значение.

Что такое хемометрика? Определение Волда.

Области применения хемометрики.

Расшифровать следующие аббревиатуры: LOO, PARAFAC, PCA.

Источники шума. Верификация и валидация.

Корреляция между случайными величинами.

Перечислить ученых, занимавшихся хемометрикой.

3 принципа хемометрики.

Расшифровать следующие аббревиатуры: ITTFA, PLS, PC.

Хемометрические методы: "серые" и "розовые".

Дисперсия и стандартное отклонение случайной величины

7.1. Основная литература:

1. Аналитическая химия. Химические методы анализа: Учеб. пос. / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек, И.Е. Талуть. - 2 изд., стер. - М.: ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2011. - 542 с.: ил.; 60x90 1/16. - (Высшее образование). (п) ISBN 978-5-16-004685-3, 800 экз.
<http://znanium.com/bookread.php?book=255394>
2. Аналитическая химия. Практикум: Учебное пособие / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек, И.Е. Талуть. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 429 с.: ил.; 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-16-009043-6, 500 экз.
<http://znanium.com/bookread.php?book=419619>
3. Аналитическая химия. Химические методы анализа: Учеб. пос. / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек и др. - 2-е изд., стер. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2014. - 542 с.: ил.; 60x90 1/16. - (Высш. обр.: Бакалавр.). (п) ISBN 978-5-16-004685-3, 400 экз.
<http://znanium.com/bookread.php?book=419626>
4. Прикладные информационные технологии: Учебное пособие / Е.Л. Федотова, Е.М. Портнов. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-8199-0538-8, 500 экз. <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=392462>
5. Основы статистического анализа. Практ. по стат. мет. и исслед. операций с исп. пакетов STATISTICA и EXCEL: Уч.пос./ Э.А.Вуколов - 2 изд., испр. и доп. - М.: Форум:НИЦ Инфра-М, 2013. - 464 с.: 70x100 1/16. - (ВО). (п) ISBN 978-5-91134-231-9, 500 экз.
<http://znanium.com/bookread.php?book=369689>

7.2. Дополнительная литература:

1. Кайзер, Ю. Ф. Мобильные средства заправки воздушных судов авиационными горюче-смазочными материалами [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Ю. Ф. Кайзер [и др.]. - 2-е изд., перераб. и доп. - Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2012. - 346 с. - ISBN 978-5-7638-2517-6. <http://znanium.com/bookread.php?book=442134>
2. Основы эконометрики в пакете STATISTICA.: Учебное пособие / К.Э. Плохотников. - М.: Вузовский учебник, 2010. - 298 с.: 60x90 1/16 + CDROM. (переплет) ISBN 978-5-9558-0114-8, 2000 экз. <http://znanium.com/bookread.php?book=177719>
3. Лукьянов, А. Н. Неоднородные сорбенты [Электронный ресурс] : монография / А. Н. Лукьянов, О. Н. Кононова. - Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2012. - 190 с. - ISBN 978-5-7638-2524-4. <http://znanium.com/bookread.php?book=442464>

7.3. Интернет-ресурсы:

- MatLab. Руководство для начинающих / Е. Михайлов, А. Померанцев - <http://www.chemometrics.ru/materials/textbooks/matlab.htm>
- Метод главных компонент / А. Померанцев - <http://www.chemometrics.ru/materials/textbooks/pca.htm>
- Проекционные методы в системе Excel / О. Родионова, А. Померанцев - <http://www.chemometrics.ru/materials/textbooks/projection.htm>
- Российское Хемометрическое Общество - <http://rcs.chph.ras.ru/>
- Хемометрика в аналитической химии / О.Е. Родионова, А.Л. Померанцев - <http://www.chemometrics.ru/materials/articles/>
- Хемометрика в России. - <http://chemometrics.ru/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Хемометрика" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Проводятся лекции и лабораторные занятия с использованием программных пакетов для анализа данных. Чтение лекций осуществляется с применением интерактивных средств (презентация в Microsoft PowerPoint), проведение лабораторных работ, контрольных работ, подготовка к участию в конференции, самостоятельная работа студентов по темам и разделам дисциплины.

Для обучающихся обеспечена возможность оперативного обмена информацией с отечественными и зарубежными вузами, предприятиями и организациями, обеспечен доступ к требуемым для формирования профессиональных компетенций современным профессиональным базам данных, информационным справочным и поисковым системам. Кафедра ВВН и ПБ, реализующая основные образовательные программы специалистов, бакалавриата и магистратуры, располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов лабораторной, дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы обучающихся, предусмотренных учебным планом вуза. Эта база соответствует действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам, в том числе обеспечены доступ к полиграфическому и упаковочному оборудованию и наличие материалов ведущих мировых производителей.

Минимально необходимый для реализации магистерской программы перечень материально-технического обеспечения включает в себя: учебные лаборатории и аудитории вуза, оснащенные современным оборудованием и стендами, позволяющими выполнять лабораторные практикумы; современные компьютеры, объединенными локальными вычислительными сетями с выходом в Интернет; измерительные средства ведущих фирм. Исходя из ООП вуза, каждая дисциплина поддержана соответствующими лицензионными программными продуктами.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 21.04.01 "Нефтегазовое дело" и магистерской программе Освоение высоковязкой нефти и природных битумов .

Автор(ы):

Абдрафикова И.М. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Кемалов А.Ф. _____

"__" _____ 201__ г.