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. Минзарипов Р.Г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Хемометрика М1.ДВ.1

Направление подготовки: 131000.68 - Нефтегазовое дело
Профиль подготовки: Освоение высоковязкой нефти и природных битумов
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):

Кемалов Р.А. , Тухватуллина А.З. , 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 37713

Казань
2014

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

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 ; доцент, к.н. (доцент) Кемалов Р.А. Кафедра высоковязких нефтей и природных битумов Институт геологии и нефтегазовых технологий , Ruslan.Kemalov@kpfu.ru ; Тухватуллина А.З.

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 " М1.ДВ.1 Общенаучный" основной образовательной программы 131000.68 Нефтегазовое дело и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Для изучения дисциплины "Основы хемометрии" 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 хемометрии " 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
ОК-2 (общекультурные компетенции)	готовность к самостоятельному обучению новым методам исследования и их внедрению в процесс профессиональной деятельности
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способность самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности
ПК-10 (профессиональные компетенции)	применять полученные знания для разработки и реализации проектов, различных процессов производственной деятельности
ПК-11 (профессиональные компетенции)	применять методологию проектирования
ПК-3 (профессиональные компетенции)	применять полученные знания для разработки и реализации проектов, различных процессов производственной деятельности
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способность самостоятельно проводить научные эксперименты и исследования, обобщать и анализировать экспериментальную информацию, делать выводы, формулировать заключения и рекомендации

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-7 (профессиональные компетенции)	планировать и проводить аналитические, имитационные и экспериментальные исследования, критически оценивать данные и делать выводы

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.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

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 1 зачетных(ые) единиц(ы) 36 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 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.	3	1-2	1	0	0	контрольная точка
2.	Тема 2. Качественный анализ.	3	3-4	1	0	0	устный опрос
3.	Тема 3. Количественный анализ.	3	5-6	1	0	0	устный опрос
4.	Тема 4. Подготовка данных.	3	7-8	1	0	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA.	3	1-2	0	0	0	отчет
6.	Тема 6. Работа с данными в программе STATISTICA.	3	3-4	0	0	2	отчет
7.	Тема 7. Основные статистики.	3	5-6	0	0	2	отчет
8.	Тема 8. Метод главных компонент.	3	7-8	0	0	2	отчет
9.	Тема 9. Факторный анализ.	3	9-10	0	0	2	отчет
10.	Тема 10. Кластерный анализ.	3	11-12	0	0	2	отчет
11.	Тема 11. Использование качественного анализа в изучении нефтяных дисперсных систем. Хемометрические методы для решения задач качественного и количественного анализов.	3	13-14	0	0	2	презентация
.	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			4	0	12	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение. История хемометрики.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Введение. История хемометрики.

Тема 2. Качественный анализ.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Качественный анализ.

Тема 3. Количественный анализ.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Количественный анализ.

Тема 4. Подготовка данных.

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Подготовка данных.

Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA.

Тема 6. Работа с данными в программе STATISTICA.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Работа с данными в программе STATISTICA

Тема 7. Основные статистики.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Основные статистики

Тема 8. Метод главных компонент.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Метод главных компонент

Тема 9. Факторный анализ.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Факторный анализ

Тема 10. Кластерный анализ.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Кластерный анализ

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

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Качественный анализ 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.	3	1-2	подготовка к контрольной точке	4	контрольная точка
2.	Тема 2. Качественный анализ.	3	3-4	подготовка к устному опросу Работа студентов с лекционным материалом, поиске и анализе материалов и	4	устный опрос
3.	Тема 3. Количественный анализ.	3	5-6	подготовка к устному опросу Работа студентов с лекционным материалом, поиске и анализе материалов и	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
4.	Тема 4. Подготовка данных.	3	7-8	подготовка к устному опросу Работа студентов с лекционным материалом, поиске и анализе материалов и	4	устный опрос
5.	Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA.	3	1-2	подготовка к отчету Работа студентов с лекционным материалом, поиске и анализе материалов из литера	4	отчет
	Итого				20	

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. Создание интегрированной среды совместной работы, визуализации, интерпретации, анализа, сбора и взаимной синхронизации данных в виде интегрированной информационной среды поддержки принятия решений нефтегазовых предприятий. Электронный образовательный ресурс, монографии, научные статьи, учебные пособия, методические указания.

Интерактивные методы обучения, кейс-технологии, метод проектов, портфолио, дискуссия, тренинг, игра. Проводятся лекции и практические занятия с использованием компьютеров и лабораторных установок. Большая часть материала изучается самостоятельно. Семинары в диалоговом режиме, к работе которых привлекаются ведущие исследователи и специалисты-практики, и являющийся основой корректировки индивидуальных учебных планов магистра, дискуссии, компьютерные симуляции, деловые и ролевые игры, разбор конкретных ситуаций, групповые дискуссии, результаты работы студенческих исследовательских групп, вузовские и межвузовских интерактивные конференции и вебинары, встречи с представителями российских и зарубежных компаний, государственных и общественных организаций, мастер- классы экспертов и специалистов. Электронный образовательный ресурс, монографии, научные статьи, учебные пособия, методические указания.

Проводятся лекции и лабораторные занятия с использованием установок, лабораторных стендов, моделирующих процессы освоения природных битумов и сверхтяжелых нефтей, программ компьютерного моделирования, компьютеров. Большая часть материала изучается самостоятельно.

Коллоквиум, письменная работа, тестирование, презентация, опрос, семинары в диалоговом режиме, к работе которых привлекаются ведущие исследователи и специалисты-практики, и являющийся основой корректировки индивидуальных учебных планов магистра, дискуссии, компьютерные симуляции, деловые и ролевые игры, разбор конкретных ситуаций, групповые дискуссии, результаты работы студенческих исследовательских групп, вузовские и межвузовских интерактивные конференции и вебинары, встречи с представителями российских и зарубежных компаний, государственных и общественных организаций, мастер-классы экспертов и специалистов.

Электронный образовательный ресурс, монографии, научные статьи, учебные пособия, методические указания.

- изучение теоретического лекционного материала
- проработка и усвоение теоретического материала (основная и дополнительная литература)
- работа с рекомендуемыми методическими материалами (методическими указаниями, учебными пособиями, раздаточным материалом)
- выполнение заданий по пройденным темам
- подготовка к зачету

(перечисляются все виды работ, выполняемые студентом самостоятельно в рамках изучения данной дисциплины)

По результатам осуществления СРС применяются следующие виды контроля:

- текущий контроль (в т. ч. опросы во время семинарских, лабораторных за-нятий, коллоквиумов, проведение контрольных работ, прием),
- Включение вопросов, выносимых на СРС в экзаменационные билеты,
- прием зачетов, экзаменов

Чтение лекций, 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.

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.

контрольная точка , примерные вопросы:

Введение. История хемометрики.

Тема 2. Качественный анализ.

устный опрос , примерные вопросы:

Качественный анализ.

Тема 3. Количественный анализ.

устный опрос , примерные вопросы:

Количественный анализ.

Тема 4. Подготовка данных.

устный опрос , примерные вопросы:

Подготовка данных.

Тема 5. Знакомство с программным пакетом STATISTICA.

отчет , примерные вопросы:

Знакомство с программным пакетом STATISTICA.

Тема 6. Работа с данными в программе STATISTICA.

Тема 7. Основные статистики.

Тема 8. Метод главных компонент.

Тема 9. Факторный анализ.

Тема 10. Кластерный анализ.

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

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 библиотекиExamples)

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.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

7.2. Дополнительная литература:

1. Экология:учебник /ред. Тягунов Г. В. - М.:Кнорус, 2012. - 304 с.http://znanium.com

2. 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

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 оборудованием 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.

Проводятся лекции и лабораторные занятия с использованием установок, лабораторных стендов, моделирующих процессы освоения природных битумов и сверхтяжелых нефтей, программ компьютерного моделирования, компьютеров. Большая часть материала изучается самостоятельно. Чтение лекций, 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 131000.68 "Нефтегазовое дело" и магистерской программе Освоение высоковязкой нефти и природных битумов .

Автор(ы):
Кемалов Р.А. _____
Тухватуллина А.З. _____
Абдрафикова И.М. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Кемалов А.Ф. _____
"__" _____ 201 __ г.