

**Современные методы
анализа многомерных
данных**

II-я международная школа-конференция
Барнаул-Белокуриха, 2003



**Modern Methods of
Multivariate Data Analysis**

II-nd International school-conference
Barnaul-Belokurikha, 2003

Цели и задачи школы-конференции

Эта конференция продолжает традицию, заложенную Первой международной школой-конференцией «Современные методы анализа многомерных данных», проходившей в феврале 2001 г в Костроме.

Главная цель этих встреч - дать возможность молодым российским ученым и специалистам познакомиться с многомерным анализом данных. Основу проводимой школы составляют лекции, читаемые известными специалистами, а также семинары, в которых участники получают практические навыки решения задач с использованием новейшего программного обеспечения. Особый аспект конференции состоит в том, чтобы собрать (молодых) ученых из-за рубежа вместе с их русскими коллегами, а также в том, чтобы дать возможность заграничным участникам познакомиться с Россией в атмосфере совместных научных исследований и профессионального взаимопонимания.

Многомерный анализ данных (MDA) и его многочисленные приложения - хемометрика, технометрика, биометрика, эконометрика, энвайрометрика, психометрика - это новейший подход, который широко используется в различных областях человеческой деятельности. Основная идея этого подхода - обнаружение скрытых закономерностей в хаосе экспериментальных данных. Современные математические методы - анализ главных компонент (PCA), регрессия на главные компоненты (PCR), проекция на латентные структуры (PLS) - дают возможность сделать это наиболее эффективно и быстро.

Scope and themes

This conference is the second action of Drushbametrics program. The First Winter School on Chemometrics “Modern Methods of Data Analysis” was held in Kostroma, on February, 2002

The major objective of the winter schools (there will be altogether five winter schools in the period 2002-2006) is to provide young scientists (and specialists) an opportunity to study the background of multivariate data analysis. The basis for the conferences will be lectures given by invited international and Russian scientists. The schedule also includes hands-on PC-training lessons for participants in order to obtain practical problem solving skills with the help of modern software. A special aspect of school-conference is to bring together (young) international scientists and their Russian counterparts, particularly also aimed at giving the international participants an opportunity to experience Russia in an atmosphere of joint scientific collaboration and collegial friendship.

Multivariate data analysis and its many applications - in chemometrics, technometrics, biometrics, econometrics, environmetrics - is a modern approach which today is used in many different fields of human activity. The common background is to find implicit consistent patterns in the chaotic expression of experimental and observed data. Data analytical methods such as Principal Component Analysis (PCA), Principal Component Regression (PCR), Partial Least Squares (PLS) provide the possibility to investigate such data structures in a most effective way.

Организаторы

- Алтайский государственный университет
- Университет Альборга (Дания)
- Российское хемометрическое общество
- Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН
- НИИ Экологического мониторинга при Алтайском госуниверситете
- Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
- Федерации Интернет Образования

Организационный комитет

со-председатели

- член-корр. РАН Грибов Лев Александрович
- проф. Кирюшин Юрий Федорович
- проф. Kim Esbensen

члены оргкомитета

- проф. Лагутин Анатолий Алексеевич
- проф. Старцев Олег Владимирович
- доцент Палюлин Владимир Александрович
- к.ф.-м.н. Померанцев Алексей Леонидович
- к.ф.-м.н. Родионова Оксана Евгеньевна

ответственный секретарь

- к.ф.-м.н. Кучерявский Сергей Владимирович



Organized by

- Altai State University
- Alborg University (Denmark)
- Russian Chemometrics Society
- Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry
- Institute of Ecological Monitoring
- Chemical Physics Institute

Organization committee

Co-Chairmen

- Prof. Kim Esbensen
- Prof. Lev Gribov
- Prof. Yuri Kiryushin

Members

- Prof. Anatoliy Lagutin
- Dr. Vladimir Palyutin
- Dr. Alexei Pomerantsev
- Dr. Oxana Rodionova
- Prof. Oleg Startsev

Secretary

- Dr. Sergei Kucheryavski.

Программа первого этапа - школы

Занятия школы будут проходить в Федерации Интернет Образования, которая расположена в главном корпусе Алтайского государственного университета. Рабочий язык школы - русский. Начало регистрации участников – 8:30.

Расписание занятий

28 февраля

- 9:00–9:15 Открытие
- 9:15–10:45 Лекция «Метод главных компонент»
(О. Родионова)
- 10:45–11:15 Кофе-брейк
- 11:15–13:00 Практические занятия (МГК)
- 13:00–14:30 Обед
- 14:30–16:00 Лекция «Регрессионные методы РГК, ПЛС»
(О. Родионова)
- 16:00–16:30 Кофе-брейк
- 16:30–18:30 Практические занятия (РГК, ПЛС)

1 марта

- 9:00–10:30 Лекция «Нелинейная регрессия»
(А. Померанцев)
- 10:30–11:00 Кофе-брейк
- 11:00–13:00 Упражнения по НЛР
- 13:00–14:30 Обед
- 14:30–15:30 Лекция «Практическое использование методов
многомерного анализа данных. Часть 1»
(К. Эсбенсен)
- 15:30–16:00 Кофе-брейк
- 16:00–17:00 Лекция «Практическое использование методов
многомерного анализа данных. Часть 2»
(К. Эсбенсен)
- 17:00–17:15 Закрытие Школы



School program

The first stage - school - will be held in Altai State University (Barnaul). It consists of lectures and workshops that introduce the basic of multivariate data analysis.

School time-table

28 february

- 9:00–9:15 School opening
- 9:15–10:45 Lecture «Principal Component Analysis»
(O. Rodionova)
- 10:45–11:15 Coffee-break
- 11:15–13:00 Practical training (PCA)
- 13:00–14:30 Lunch
- 14:30–16:00 Lecture «Regression methods - PCR, PLS»
(O. Rodionova)
- 16:00–16:30 Coffee-break
- 16:30–18:30 Practical training (PCR, PLS))

1 march

- 9:00–10:30 Lecture «Nonlinear regression»
(A. Pomerantsev)
- 10:30–11:00 Coffee-break
- 11:00–13:00 Practical training (NR)
- 13:00–14:30 Lunch
- 14:30–15:30 Lecture «Multivariate Data Analysis in Practise.
Part I» (K. Esbensen)
- 15:30–16:00 Coffee-break
- 16:00–17:00 Lecture «Multivariate Data Analysis in Practise.
Part II» (K. Esbensen)
- 17:00–17:15 School closing

Программа второго этапа - конференции

Второй этап пройдет в одном из самых красивых мест на Алтае - курортном городе Белокуриха. Участники будут размещены в комфортабельных номерах в санаторном блоке. Работа конференции будет в филиале Алтайского государственного университета, который расположен в 15 минутах ходьбы.

Недалеко от места проживания (100-200 м.) расположены три горнолыжных трассы, действует прокат горнолыжного оборудования. Все трассы снабжены бугельными подъемниками. Кроме лекций планируется культурно-спортивная программа, в том числе различные экскурсии. Кроме этого желающие (за свои средства) смогут пройти различные лечебные процедуры.

Рабочий язык конференции - английский.

Расписание работы конференции

Sunday 02.03.

8:30 Выезд из Барнаула
12:30 Прибытие в Белокуриху
13:00–14:00 Обед
14:00–16:30 Отдых после дороги
17:00–19:00 Открытие конференции - Ким Эсбенсен
«Relationships between sampling, analysis and chemometrics»
19:30 Ужин

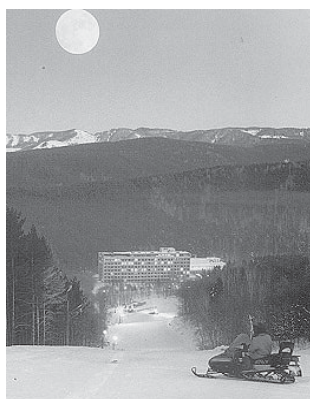
Monday 03.03.

8:30 Завтрак
9:30–12:00 Экскурсия по Белокурихе
12:30–13:30 Обед
14:00–15:20 Пенти Минкинен «Practical applications of sampling theory»
15:20–15:40 Кофе-брейк
15:40–17:00 Алексей Померанцев «Successive Bayesian Estimation»
17:00–17:30 Кофе-брейк
17:30–19:00 Доклады участников
19:30–20:30 Ужин
21:00 Экскурсия в мастерскую художника

Conference program

The conference will be held in Belokurikha. This place is very popular because of its unique nature. The lectures will be held in the branch of the Altai State University.

There are three mountain-ski ways with elevators and rent points not far from the sanatorium (100-200 m). The social program provides excursion over Belokurikha and others. All the participants are invited to repair the health in sanatorium (for additional charge).



Conference time-table

Sunday 02.03.

- 8:30 Departure from Barnaul
- 12:30 Arrival to Belokurikha
- 13:00–14:00 Lunch
- 14:00–16:30 Rest after long way
- 17:00–19:00 Conference opening - Kim Esbensen «Relationships between sampling, analysis and chemometrics»
- 19:30 Dinner

Monday 03.03.

- 8:30 Breakfast
- 9:30–12:00 Excursion round Belokurikha
- 12:30–3:30 Lunch
- 14:00–15:20 Pentti Minkkinen «Practical applications of sampling theory»
- 15:20–15:40 Coffee-break
- 15:40–17:00 Alexei Pomerantsev «Successive Bayesian Estimation»
- 17:00–17:30 Coffee - break
- 17:30–19:00 Chemometric applications -
- 19:30–20:30 Dinner
- 21:00 Excursion to the painter

Расписание работы конференции

Tuesday 04.03.

8:30 Завтрак
9:30–12:00 Лыжи
12:30–13:30 Обед
14:00–15:20 Пол Гелади «Introduction to 3-way methods »
15:20–15:40 Кофе-брейк
15:40–17:00 Ким Эсбенсен «Proper validation - the most important thing in calibration »
17:00–17:30 Кофе-брейк
17:30–19:00 Оксана Родионова «Simple Interval Calculation (SIC) - theory and applications»
19:30–20:30 Ужин

Wednesday 05.03.

8:30 Завтрак
9:30–12:00 Лыжи
12:30–13:30 Обед
14:00–15:20 Владимир Палюлин «QSAR/QSPR methodology: past, present and future»
15:20–15:40 Кофе-брейк
15:40–17:00 Пенти Миккинен «Environmental applications of chemometrics»
17:00–17:30 Кофе-брейк
17:30–19:00 Пол Гелади «NIR in industrial applications»
19:30–20:30 Торжественный ужин

Thursday 06.03

9:00–10:00 Завтрак
10:30–11:45 Выступления участников
11:45–12:15 Результаты конференции WSC-2 - дискуссия
12:15–12:45 Обед
13:00 Выезд из Белокурихи
17:00 Прибытия в Барнаул
18:30 Визит в Ротари-клуб (по желанию)



Conference time-table

Tuesday 04.03.

8:30 Breakfast
9:30–12:00 Skiing
12:30–13:30 Lunch
14:00–15:20 Paul Geladi «Introduction to 3-way methods »
15:20–15:40 Coffee-break
15:40–17:00 Kim Esbensen «Proper validation - the most important thing in calibration »
17:00–17:30 Coffee-break
17:30–19:00 Oxana Rodionova «Simple Interval Calculation (SIC) - theory and applications»
19:30–20:30 Dinner

Wednesday 05.03.

8:30 Breakfast
9:30–12:00 Skiing
12:30–13:30 Lunch
14:00–15:20 Vladimir Palyulin «QSAR/QSPR methodology: past, present and future»
15:20–15:40 Coffee-break
15:40–17:00 Pentti Minkkinen «Environmental applications of chemometrics»
17:00–17:30 Coffee-break
17:30–19:00 Paul Geladi «NIR in industrial applications»
19:30–20:30 Conference Dinner

Thursday 06.03

9:00–10:00 Breakfast
10:30–11:45 Выступления участников
11:45–12:15 WSC-2 results and desires - discussion
12:15–12:45 Lunch
13:00 Departure from Belokurikha
17:00 Arrival to Barnaul
18:30 Visit to Rotary Club (at pleasure)



Барнаул–Белокуриха, 2003

Информация о Белокурихе

Общая информация

Основные адреса и телефоны



Information about Belokurikha

Description

Addresses and phones





Спонсоры и партнеры

- Applied Chemometrics Analytical Chemistry & Sampling Research Group
- Координационный Центр “Полисерт”
- Алтайская торгово-промышленная палата