

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemometria (Wykład), PG_00080780						
Kierunek studiów	Biznes chemiczny (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	5	Liczba punktów ECTS			1.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			egzamin		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska -> Pracownia Chemoinformatyki Środowiska						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr Artur Mirocki				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	0.0	0.0	0.0	15
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	15		2.0		8.0	25
Cel przedmiotu	<p>Cele przedmiotu to:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Zaprezentowanie studentom zakresu możliwości zastosowania metod chemometrycznych i statystycznych w analizie danych chemicznych. • Zdobywanie przez studentów umiejętności posługiwania się najważniejszymi metodami statystycznymi lub/ i chemometrycznymi w celu wykonywania analiz i interpretacji uzyskanych wyników, • Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte do wizualizacji danych, w celu ułatwienia przygotowywania rycin i wykresów w pracy magisterskiej 						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[BCHINŻ_W04] Opisuje rolę eksperymentu i symulacji komputerowych w procesie projektowania zagadnień inżynierskich.	Po ukończeniu kursu każdy student zna zasady prezentacji i przekazywania informacji uzyskanych na podstawie danych.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHINŻ_U04] W toku realizacji zadań inżynierskich stosuje metody statystyczne, techniki informatyczne oraz wykorzystuje pakiety oprogramowania użytkowego do opisu procesów chemicznych i danych eksperymentalnych.	Po ukończeniu kursu każdy student: (1) potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe; (2) wykorzystuje środowisko R/KNIME do obliczeń chemometrycznych; (3) potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych; (4) przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki; (5) zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmiennie niezależne).	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[BCHINŻ_W03] Opisuje w zaawansowanym stopniu techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych.	Po ukończeniu kursu każdy student zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych: HCA, PCA, LR/MLR.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
[BCHINŻ_U08] Właściwie posługuje się nomenklaturą chemiczną i terminologią inżynierską.	Po ukończeniu kursu każdy student: (1) wie, na czym polega wykonywanie pomiarów; (2) rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wyniknąć w związku z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań; (3) wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie standardowe i inne); (4) wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym.	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	<p>Treść kursu:</p> <ul style="list-style-type: none"> Wprowadzenie do metod chemometrycznych: specyfika danych wielowymiarowych; różnice pomiędzy statystyką chemiczną a chemometrią; obszar zainteresowań chemometrii; podział metod chemometrycznych; przegląd oprogramowania komputerowego realizującego metody chemometryczne (m.in. środowisko MATLAB, Statistica, Origin, SPSS, QSARINS, KNIME). Metody analizy struktury wewnętrznej wielowymiarowych danych chemicznych: podobieństwo obiektów w wielowymiarowej przestrzeni cech; hierarchiczna analiza skupień (HCA) jako przykład metody analizy podobieństwa; analiza głównych składowych (PCA) jako przykład metody poszukiwania projekcji. Przykłady wykorzystania tej grupy metod w różnych obszarach chemii. Modelowanie zjawisk i procesów z wykorzystaniem metod regresyjnych i klasyfikacyjnych: regresja liniowa jednej i wielu zmiennych (LR i MLR), regresja głównych składowych (PCR) oraz regresja metodą częściowych najmniejszych kwadratów (PLS); liniowa analiza dyskryminacyjna (LDA), nieliniowy klasyfikator k-najbliższych sąsiadów (kNN); metody wyboru optymalnego zestawu zmiennych w modelu (wybór krokowy, wybór przy użyciu algorytmu genetycznego); walidacja modeli regresyjnych i klasyfikacyjnych. Przykłady wykorzystania tej grupy metod w różnych obszarach chemii. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Znajomość podstaw matematyki i statystyki		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	test	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	J.Mazerski: Podstawy chemometrii. Gdańsk: Wydawnictwo Politechniki Gdańskie, 2000	

	Uzupełniająca lista lektur	<p>S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red.): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009</p> <p>R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005</p> <p>D. Zuba, A Parczewski (red.): Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008</p>
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.