

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Monographic lecture - Machine learning algorithms for small datasets (Wykład), PG_00051253						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027			
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć fakultatywnych			
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji		na uczelni			
Rok studiów	2	Język wykładowy		angielski			
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS		3.0			
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia		zaliczenie			
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska -> Pracownia Chemoinformatyki Środowiska						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	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	30		5.0		40.0	75
Cel przedmiotu	Cele kursu to: • Zapoznanie studentów z rzeczywistymi problemami uczenia maszynowego, w których dostępne zbiory danych charakteryzują się małą liczbą dostępnych danych, szumem informacyjnym, brakującymi wartościami i niezbalansowaniem • Przedstawienie zalet i wad różnego rodzaju algorytmów uczenia maszynowego dedykowanych do pracy z małą liczbą (i niskiej jakości) dostępnych danych						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizację zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Po ukończeniu kursu każdy student rozumie społeczne aspekty praktycznego wykorzystania wiedzy i umiejętności oraz związaną z nimi odpowiedzialność.	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W09] Klasyfikuje specjalistyczne narzędzia informatyczne wykorzystywane w ocenie statystycznej wyników eksperymentu.	Po ukończeniu kursu każdy student zna klasyfikację zaawansowanych algorytmów uczenia maszynowego do radzenia sobie z małymi rozmiarami danych i potrafi podać przykłady ich zastosowań w dziedzinie nauk chemicznych	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Po ukończeniu kursu każdy student zna i rozumie podstawy teoretyczne podejścia przekrojowego, opisuje najważniejsze wyzwania związane z zastosowaniem tego podejścia w przypadku danych o małych rozmiarach i niskiej jakości	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U03] Wyszukuje potrzebne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, wymienia podstawowe czasopisma naukowe z chemii.	Na koniec kursu każdy student rozumie potrzebę głębszego poznania zaawansowanych algorytmów uczenia maszynowego do radzenia sobie z małymi rozmiarami danych	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Po ukończeniu kursu każdy student wie, jak mały rozmiar i niska jakość zbioru danych wpływa na tradycyjne algorytmy uczenia maszynowego i będzie znał kilka sposobów na złagodzenie tych problemów	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Na koniec kursu każdy student rozumie i potrafi wyjaśnić podstawy teoretyczne zaawansowanych algorytmów dedykowanych do pracy mało liczebnymi zbiorami danych	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Po ukończeniu kursu każdy student potrafi krytycznie ocenić uzyskane wyniki i zrozumieć konieczność ich kontroli	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
Treści przedmiotu	Celem tego kursu jest przekazanie studentom podstawowej wiedzy na temat algorytmów uczenia maszynowego radzących sobie z ograniczoną ilością (i jakością) dostępnych danych, w tym: - wpływ jakości danych na algorytmy uczenia maszynowego (ze szczególnym uwzględnieniem mało liczebnymi, niekompletnymi, zaszumionymi i/lub niezbalansowanymi zbiorami danych), - wprowadzenie do zagadnienia kompromisu między obciążeniem a wariancją w uczeniu maszynowym, - przegląd różnych typów algorytmów uczenia maszynowego dedykowanych do pracy z mało liczebnymi zbiorami danych (w tym metody regresji jądra, technika lasso, regresja elastycznej sieci, technika grzbietowa oraz ich rozszerzenia adaptacyjne), - wprowadzenie do podstawowych pojęć i strategii podejścia przekrojowego (w tym podejście uśredniające, metoda k-najbliższych sąsiadów ważona odległością, podejście filtrujące), - praktyczne przykłady ilustrujące zastosowanie omawianych algorytmów uczenia maszynowego w naukach stosowanych (np. w przemyśle chemicznym i farmaceutycznym, środowiskowej ocenie zagrożenia chemicznego, do projektowania nowych materiałów).		
Wymagania wstępne i dodatkowe			
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	test	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (ed): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009	

	Uzupełniająca lista lektur	J. Leszczynski, A. Kaczmarek-Kedziera, T. Puzyn, M. G. Papadopoulos, H. Reis, M. Shukla (ed): Handbook of Computational Chemistry (2nd Edition). Springer 2016. Volume 5: Chemoinformatics, Puzyn T (ed.).
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.