



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Analiza i wizualizacja danych ZAO		13.3.0921	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	niestacjonarne (zaoczne)
		moduł specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Wydział Chemii	Ochrona środowiska	poziom	drugiego stopnia
		forma	niestacjonarne (zaoczne)
		moduł specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Tomasz Puzyn; dr inż. Karolina Jagiełło; dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład, Ćw. audytoryjne		zajęcia - 27 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje - 20 godz.	
zajęcia on-line, zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 28 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Ćw. audytoryjne: 18 godz., Wykład: 9 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2020/2021 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania. - wykład e-learningowy 		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - Wykład: <ul style="list-style-type: none"> • zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi i otwartymi (zadaniami) oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego). Ćwiczenia laboratoryjne: <ul style="list-style-type: none"> • wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania), • pisemne kolokwium wejściowe przed każdym ćwiczeniem, • ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych. - wykonanie pracy zaliczeniowej - przeprowadzenie badań i prezentacja ich wyników 	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:
Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych oraz kilku pytań otwartych (zadań) obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu i ćwiczeń laboratoryjnych.
Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
Studenci, którzy uzyskali w pierwszym terminie zaliczenia pisemnego wynik 51% i więcej, a chcą podwyższyć ocenę, mogą zgłosić się na zaliczenie ustne. Ocena końcowa jest w tym przypadku średnią arytmetyczną z ocen uzyskanych na zaliczeniu pisemnym i ustnym.
Zaliczenie ustne jest obowiązkowe dla studentów, którzy uzyskali z egzaminu pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku na student otrzymuje szanse uzupełnienia punktów brakujących do uzyskania oceny dostatecznej (omawia sposób poprawnego rozwiązania zadań z zaliczenia pisemnego). W tym przypadku nie ma możliwości poprawienia oceny z pierwszego terminu zaliczenia na wyższą.
Negatywna ocena z zaliczenia (pisemnego i ustnego) musi być poprawiona podczas zaliczenia poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.

Ćwiczenia laboratoryjne:
Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.
Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
Zaliczenie wszystkich kolokwium wejściowych obejmujących podstawowe zagadnienia teoretyczne niezbędne do poprawnego wykonania ćwiczenia. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).
Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią ważoną ze średnich arytmetycznych ocen otrzymanych z (i) kolokwium pisemnych (waga 40%), oraz (ii) sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia (waga 60%). Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć. Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Student odpowiada na pytania zakresu podstaw teoretycznych wybranych metod statystycznych i chemometrycznych (K_W08, K_W07); wskazuje zastosowania metod chemometrycznych w analizie danych chemicznych (K_W06)

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

student wykorzystuje środowisko KNIME do obliczeń chemometrycznych; przygotowuje dane do analiz chemometrycznych i przeprowadza wstępną kontrolę danych; przeprowadza analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz interpretuje uzyskane wyniki (K_U05); buduje model regresyjny (metodą LR/MLR) i klasyfikacyjny (metodami LDA i kNN), przeprowadza proces walidacji oraz wykonuje predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmienne niezależne) przy użyciu odpowiedniego oprogramowania stosowanego w chemometrii (K_U06).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Student dostrzega korzyści z wykorzystania metod chemometrycznych (K_K06); rozumie potrzebę dalszego kształcenia się (K_K01); wykazuje kreatywność w pracy w grupie (K_K02).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

chemia ogólna
matematyka
technologia informacyjna

B. Wymagania wstępne

znajomość podstaw matematyki w zakresie przewidzianym programem studiów;
znajomość metod chemii analitycznej w zakresie przewidzianym programem studiów;
wiedza i umiejętności w zakresie chemii fizycznej, prawa ochrony środowiska w zakresie przewidzianym programem studiów I stopnia;

Cele kształcenia

Zaprezentowanie studentom zakresu możliwości zastosowania metod chemometrycznych i statystycznych w analizie danych chemicznych.
 Zdobyć przez studentów umiejętności gromadzenia, archiwizacji i kontroli danych oraz doboru metod statystycznych lub/i chemometrycznych do specyfiki badanego problemu. Umiejętność analizy i interpretacji uzyskanych wyników.
 Zdobyć przez studentów umiejętność posługiwania się najważniejszymi metodami statystycznymi lub/i chemometrycznymi w celu wykonywania analiz i interpretacji uzyskanych wyników,
 Zapoznanie się przez studentów ze sposobem poszukiwania zależności (podobieństw i różnic) pomiędzy zmiennymi zależnymi i zmiennymi objaśniającymi w analizowanym zestawie danych chemicznych,
 Zapoznanie się przez studentów z dostępnym oprogramowaniem realizującym metody statystyczne oraz chemometryczne
 Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte do wizualizacji danych, w celu ułatwienia przygotowywania rycin i wykresów w pracy magisterskiej

Treści programowe

Problematyka wykładu:

1. 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).
2. 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.
3. 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.
4. Zasady towarzyszące prezentacji zebranych danych
 Oprogramowanie służące do wizualizacji danych

B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

1. Wprowadzenie do obliczeń statystycznych i chemometrycznych w środowisku oprogramowania KNIEM. Zasady pracy z komputerem.
2. Hierarchiczna analiza skupień (HCA).
3. Analiza głównych składowych (PCA).
4. Regresja liniowa jednej i wielu zmiennych (LR/MLR).

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane przez prowadzących zajęcia.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

W: Zuba D., Parczewski A. (Eds.): Chemometria w nauce i praktyce. Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, Kraków (2009). ISBN: 978-83-87425-38-8.

B. Literatura uzupełniająca:

J. B. Czermiński, A. Iwasiewicz i in.: „Metody statystyczne w doświadczeniach chemicznych”, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1992 lub wersja starsza tej książki zatytułowana „Metody statystyczne dla chemików”.

Praca zbiorowa pod redakcją H. Kassyk-Rokickiej: „Statystyka. Zbiór zadań”. Polskie Wydawnictwo Ekonomiczne, Warszawa 1997.

S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009

R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005

D. Zuba, A Parczewski (red.): Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008

JM. Dobosz: Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2004

Kierunkowe efekty kształcenia

- K_OŚII_W04 Wybiera metody, techniki i narzędzia badawcze stosowane w ochronie środowiska
- K_OŚII_U02 Stosuje zaawansowane techniki pomiarowe i analityczne wykorzystywane w ochronie środowiska
- K_OŚII_K06 Uznaje znaczenie wiedzy w rozwiązywaniu napotkanych problemów poznawczych i praktycznych oraz zasięga opinii ekspertów w przypadku trudności z samodzielnym rozwiązaniem problemu
- K_OŚII_K10 Ma potrzebę ciągłego rozwoju zawodowego

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:
 wie, na czym polega wykonywanie pomiarów;
 rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań;
 wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie standardowe i inne);
 wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym
 zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w analizie danych środowiskowych;

wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody;
zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych: HCA, PCA
zna zasady prezentacji i przekazywania informacji uzyskanych na podstawie danych

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:
potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe;
wykorzystuje środowisko KNIME do obliczeń chemometrycznych;
potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych;
przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki;
zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmiennie niezależne)

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. w oparciu o posiadaną wiedzę i umiejętności krytycznie ocenia wyniki badań wykorzystujących metody statystyczne (badania naukowe, raporty, sondaże itp.);
2. jest przekonany o korzyści wykorzystania komputera i wprowadzenia metod chemometrycznych do swojej codziennej praktyki badawczej;
3. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się w zakresie metod chemometrycznych;
4. jest świadomy, że każdy wynik liczbowy obarczony jest niepewnością pomiarową.

Kontakt

tomasz.puzyn@ug.edu.pl