



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Statystyka i chemometria w analityce chemicznej		13.3.0861	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
null			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	analityka i diagnostyka chemiczna
		specjalnościowy	
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr Karolina Jagiełło; mgr Maciej Gromelski; dr Agnieszka Gajewicz			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		7	
Wykład, Ćw. audytoryjne, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 60 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 20 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 95 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 175 godz. - 7 ECTS	
Ćw. audytoryjne: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 15 godz., Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2018/2019 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykład z prezentacją multimedialną - rozwiązywanie zadań wymagających zastosowania informacji prezentowanych na wykładzie oraz zdobytych przez studenta w ramach studiów własnych - wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		•zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi i otwartymi (zadaniami) oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego). •dwa kolokwia obejmujące zadania rachunkowe. •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 częściowych.	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:

- Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych oraz kilku pytań otwartych (zadań) obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu, ćwiczeń audytoryjnych i 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 szansę 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 audytoryjne:

- Czynne uczestnictwo w zajęciach audytoryjnych. W przypadku nieobecności lub nieprzygotowania do zajęć student zobowiązany jest do uzupełnienia braków (dodatkowego zaliczenia) na konsultacjach.
- Pozytywne oceny z dwóch kolokwίων obejmujących zadania rachunkowe.
- Każde z dwóch kolokwίων może być poprawione podczas kolokwium poprawkowego (odbędą się dwa kolokwia poprawkowe - odpowiednio dla pierwszego i drugiego kolokwium).
- Ocena końcowa z ćwiczeń następuje na podstawie ocen częściowych otrzymanych ze wszystkich kolokwίων (z uwzględnieniem kolokwίων poprawkowych, jeśli student do nich przystępował).

Niezaliczenie ćwiczeń audytoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

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 kolokwίων 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) kolokwίων 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:

Podczas zaliczenia pisemnego sprawdzana jest wiedza studenta na temat podstawowego podziału metod chemometrycznych (K_W06), wymienia zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmetologii i innych) (K_W07); wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody (K_W09).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Po ukończeniu kursu każdy student: wykorzystuje program KNIME do obliczeń chemometrycznych; potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych i przeprowadzić wstępną kontrolę danych; przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki (K_U05); zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR) i klasyfikacyjny (metodami LDA i KNN), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmienne niezależne) przy użyciu odpowiedniego oprogramowania stosowanego w chemometrii (K_U06).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Po ukończeniu kursu każdy student: jest przekonany o korzyści wykorzystania komputera i wprowadzenia metod chemometrycznych do swojej codziennej praktyki badawczej oraz rozumie potrzebę dalszego kształcenia się w zakresie metod chemometrycznych (K_K01).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

- chemia ogólna
- matematyka (1. semestr)

B. Wymagania wstępne

- znajomość chemii ogólnej

znajomość podstaw matematyki (rachunek prawdopodobieństwa; badanie przebiegu i własności funkcji liniowej; rachunek różniczkowy – pochodna funkcji jednej zmiennej, różniczka zupełna i pochodne cząstkowe; rachunek całkowy – całki oznaczone i nieoznaczone; podstawy algebry liniowej, rachunek macierzowy)

Cele kształcenia

- Zaznajomienie studentów z podstawami metrologii i zasadami dokumentowania wyników.
- Kształcenie umiejętności wykonywania podstawowych obliczeń i testów statystycznych ze szczególnym uwzględnieniem umiejętności doboru odpowiednich metod statystycznych do specyfiki badanego problemu.
- Zaprezentowanie studentom zakresu możliwości zastosowania metod chemometrycznych w chemii.
- Zdobycie przez studentów umiejętności posługiwania się najważniejszymi metodami chemometrycznymi (wykonywanie analiz i interpretacji uzyskanych wyników),
- Zapoznanie się przez studentów z dostępnym oprogramowaniem realizującym metody chemometryczne.
- Kształcenie umiejętności szacowania błędu pomiarowego dla wielkości mierzonych bezpośrednio i pośrednio (z wykorzystaniem prawa propagacji niepewności).

Treści programowe

A. Problematyka wykładu:

1. Podstawy metrologii chemicznej i dokumentowanie wyników: historia i istota pomiarów, wzorce, skale, cyfry znaczące, zasady zaokrąglania liczb, zasady dokumentowania wyników pomiarów.
2. Podstawy opisu statystycznego: populacja generalna a próby statystyczne; charakterystyka pojedynczej serii wyników: miary tendencji centralnej i rozproszenia wyników, rozkłady statystyczne, statystyki opisowe i ich interpretacja, szereg rozdzielczy i histogram, identyfikacja punktów odbiegających; testowanie hipotez statystycznych w oparciu o wybrane testy parametryczne i nieparametryczne; analiza korelacji.
3. 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 R, MATLAB, Statistica, Origin, SPSS, KNIME).
4. 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.
5. 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); wykorzystanie sztucznych sieci neuronowych (ANN) do rozwiązywania problemów regresyjnych i klasyfikacyjnych; 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.
6. Szacowanie błędu oraz niepewności pomiarowej: błąd a niepewność pomiaru, błąd względny i bezwzględny, źródła niepewności pomiaru, standardowa niepewność pomiaru, całkowita standardowa niepewność pomiaru, niepewność rozszerzona, szacowanie niepewności standardowej pomiarów bezpośrednich, prawo propagacji niepewności, procedura szacowania niepewności dla pomiarów pośrednich.

B. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych:

1. Podstawy metrologii chemicznej i dokumentowanie wyników: historia i istota pomiarów, wzorce, skale, cyfry znaczące, zasady zaokrąglania liczb, zasady dokumentowania wyników pomiarów.
2. Podstawy opisu statystycznego: populacja generalna a próby statystyczne; charakterystyka pojedynczej serii wyników: miary tendencji centralnej i

rozproszenia wyników, rozkłady statystyczne, statystyki opisowe i ich interpretacja, szereg rozdzielczy i histogram, identyfikacja punktów odbiegających; testowanie hipotez statystycznych w oparciu o wybrane testy parametryczne i nieparametryczne; analiza korelacji.

3. Szacowanie błędu oraz niepewności pomiarowej: błąd a niepewność pomiaru, błąd względny i bezwzględny, źródła niepewności pomiaru, standardowa niepewność pomiaru, całkowita standardowa niepewność pomiaru, niepewność rozszerzona, szacowanie niepewności standardowej pomiarów bezpośrednich, prawo propagacji niepewności, procedura szacowania niepewności dla pomiarów pośrednich.

C. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

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

Wykaz literatury

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

- A. Łomnicki: Wprowadzenie do statystyki dla przyrodników. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2003.
- J. Mazerski: Podstawy chemometrii. Gdańsk: Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, 2000
- P. Konieczka, J. Namieśnik i in.: Ocena i kontrola jakości wyników analitycznych. Centrum Doskonałości Analityki i Monitoringu Środowiskowego, Gdańsk 2004.

A.1. Literatura wykorzystywana podczas zajęć

- Skrypt do ćwiczeń laboratoryjnych przygotowywany przez pracowników Pracowni Chemometrii Środowiska

B. Literatura uzupełniająca:

- J. B. Czerwiński, 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

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

K_W06: wybiera techniki matematyki wyższej w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii;
K_W07: rozumie oraz opisuje prawidłowości, zjawiska i procesy fizykochemiczne wykorzystując język matematyki;
K_W09: opisuje praktyczne zastosowania narzędzi informatycznych (programów komputerowych) do obliczeń chemicznych i analizy danych;
K_U05: stosuje podstawowe metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych;
K_U06: wykorzystuje podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do rozwiązywania problemów z zakresu nauk ścisłych;
K_K01: identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego doskonalenia się oraz rozwoju osobistego;

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. rozumie, że wykonanie pomiaru polega na porównaniu mierzonej wielkości ze wzorcem;
2. rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań;
3. wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie standardowe i inne);
4. rozumie ideę wnioskowania statystycznego o cechach populacji generalnej na podstawie reprezentatywnie pobranej próby statystycznej;
5. rozumie pojęcie poziomu istotności testu;
6. zna podstawowe rozkłady statystyczne (rozkład normalny, t-Studenta, rozkład F i chi kwadrat) oraz ich parametry;
7. zna założenia i ograniczenia podstawowych testów statystycznych;
8. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmologii i innych);
9. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody;
10. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in.: HCA, PCA oraz LR/MLR.
11. jest świadomy, że pomiary obciążone są niepewnością; wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym; rozumie zjawisko propagacji niepewności przy pomiarach pośrednich.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe;
2. wykorzystuje szereg rozdzielczy i histogram do poprawnego wnioskowania o charakterze rozkładu serii wyników;
3. posługuje się tablicami statystycznymi;
4. potrafi wybrać i zastosować test statystyczny odpowiedni do rozważanego

problemu;

5. wykorzystuje program KNIME lub R do obliczeń chemometrycznych;
6. potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych;
7. przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki;
8. zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmienne niezależne);
9. potrafi oszacować niepewność pomiaru bezpośredniego i pośredniego (w oparciu o prawo propagacji niepewności).

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