



**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez  
Unię Europejską w ramach  
Europejskiego Funduszu  
Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY



<b>Nazwa przedmiotu</b>		<b>Kod ECTS</b>	
Chemometria w analityce chemicznej		13.3.1010	
<b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
<b>Studia</b>			
<b>wydział</b>	<b>kierunek</b>	<b>poziom</b>	<b>pierwszego stopnia</b>
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	analityka i diagnostyka chemiczna, chemia żywności
		specjalnościowy	
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
prof. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr Karolina Jagiełło; dr Agnieszka Gajewicz			
<b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>		<b>Liczba punktów ECTS</b>	
<b>Formy zajęć</b>		5	
Wykład, Ćw. audytoryjne, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 45 godz.	
<b>Sposób realizacji zajęć</b>		konsultacje 25 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 55 godz.	
<b>Liczba godzin</b>		RAZEM: 125 godz. - 5 pkt. ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 15 godz., Ćw. audytoryjne: 15 godz., Wykład: 15 godz.			
<b>Termin realizacji przedmiotu</b>			
2019/2020 letni			
<b>Status przedmiotu</b>		<b>Język wykładowy</b>	
obowiązkowy		polski	
<b>Metody dydaktyczne</b>		<b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Rozwiązywanie zadań wymagających zastosowania informacji prezentowanych na wykładzie oraz zdobytych przez studenta w ramach studiów własnych</li> <li>- Wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania</li> <li>- Wykład z prezentacją multimedialną</li> </ul>		<b>Sposób zaliczenia</b>	
		Zaliczenie na ocenę	
		<b>Formy zaliczenia</b>	
		<ul style="list-style-type: none"> <li>• zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi i otwartymi (zadaniami) oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego).</li> <li>• pisemne kolokwium po każdym bloku tematycznym,</li> <li>• wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników na zakończenie każdego ćwiczenia (sprawozdania),</li> <li>• ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych.</li> </ul>	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	

## 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 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 audytoryjne:

- Czynne uczestnictwo w zajęciach audytoryjnych. W przypadku nieobecności lub nieprzygotowania do zajęć student zobowiązany jest do uzupełnienia braków samodzielnie.
- Pozytywne oceny z kolokwium odbywających się po każdym bloku tematycznym obejmujące zadania zamknięte i rachunkowe. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).
- Ocena końcowa z ćwiczeń następuje na podstawie ocen cząstkowych otrzymanych ze wszystkich kolokwium (z uwzględnieniem kolokwium 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. Sprawozdanie w wersji elektronicznej należy wysłać na adres wskazany przez prowadzącego na koniec zajęć.
- Ocena końcowa z ćwiczeń następuje na podstawie ocen cząstkowych otrzymanych ze wszystkich sprawozdań. Niezaliczenie ćwiczeń audytoryjnych 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), student 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), 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

**Cele kształcenia**

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

**Treści programowe****A. 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 R, MATLAB, Statistica, Ori-gin, SPSS, 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); 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.

**B. Problematyka ćwiczeń audytoryjnych:**

1. Kontrola danych wymiarowych – etapy oraz cele
2. Hierarchiczna analiza skupień (HCA).
3. Analiza głównych składowych (PCA).
4. Regresja liniowa jednej i wielu zmiennych (LR/MLR).

**C. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:**

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

**Wykaz literatury**

Wykaz literatury podstawowej:

1. J. Miller, J. Miller: Statystyka i chemometria. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2016.
2. J. Mazerski: Podstawy chemometrii. Gdańsk. Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, 2004.
3. Skrypt do ćwiczeń laboratoryjnych przygotowywany przez pracowników Pracowni Chemometrii Środowiska

Wykaz literatury uzupełniającej:

1. S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009
2. R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005
3. D. Zuba, A. Parczewski (red.): Chemometria w analityce: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008
4. JM. Dobosz: Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2004

**Kierunkowe efekty kształcenia**

- K\_W05: posiada podstawową wiedzę w zakresie studiowanej specjalności chemicznej
- 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

**Wiedza**

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmetologii i innych);
2. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody;
3. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in: HCA, PCA oraz LR/MLR.

**Umiejętności****Kompetencje społeczne (postawy)**

<p>K_U05: stosuje podstawowe metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych</p> <p>K_U06: wykorzystuje podstawowe pakiety oprogramowania użytkowego do rozwiązywania problemów z zakresu nauk ścisłych</p> <p>K_U07: przygotowuje udokumentowane opracowanie określonego problemu z zakresu wybranych zagadnień chemicznych i fizycznych</p> <p>K_U09: umie uczyć się samodzielnie</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. jest przekonany o korzyści wykorzystania komputera i wprowadzenia metod chemometrycznych do swojej codziennej praktyki badawczej;</li><li>2. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się w zakresie metod chemometrycznych;</li></ol>
<p><b>Kontakt</b></p> <p>tomasz.puzyn@ug.edu.pl</p>	