



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Chemometria		13.3.0755	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	wszystkie
Wydział Chemii	Biznes chemiczny	forma	wszystkie
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Tomasz Puzyn			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta 25 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2022/2023 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Wykład z prezentacją multimedialną - 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	
		<ul style="list-style-type: none"> - Zaliczenie na ocenę - Egzamin 	
		Formy zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> •Zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi i otwartymi (zadaniami) oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego) •Wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz pisemna prezentacja wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania) •Pisemne sprawozdania wejściowe przed każdym ćwiczeniem 	
		Podstawowe kryteria oceny	

Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim Regulaminem Studiów

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 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 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:

Podczas zaliczenia pisemnego sprawdzana jest wiedza studenta na temat algorytmu działania i zastosowania wybranych metod chemometrycznych (K_BCh_W03) oraz pakietu oprogramowania realizującego poszczególne metody (K_BCh_W04).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Ocena wykorzystywania przez studenta adekwatnych metod chemometrycznych do rozwiązania problemu badawczego oraz samodzielności przeprowadzania analizy z wykorzystaniem odpowiedniego oprogramowania (K_BCh_U04) ocena poprawności formułowania wniosków przeprowadzonych analiz (K_BCh_U08).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

Chemia ogólna
matematyka

B. Wymagania wstępne

Znajomość podstaw matematyki i statystyki

Cele kształcenia

- Zaprezentowanie studentom zakresu możliwości zastosowania metod chemometrycznych w analizie danych chemicznych.
- Zdobycie przez studentów umiejętności gromadzenia, archiwizacji i kontroli danych oraz doboru metod chemometrycznych do specyfiki badanego problem. Umiejętność analizy i interpretacji uzyskanych wyników.

- Zdobycie przez studentów umiejętności posługiwania się najważniejszymi metodami 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 chemometryczne.

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.
- B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:
1. Wprowadzenie do obliczeń 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
J. Mazerski: Podstawy chemometrii. Gdańsk: Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, 2000
- B. Literatura uzupełniająca
- 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

Kierunkowe efekty kształcenia

K_BCh_W03 opisuje techniki matematyki wyższej oraz narzędzia informatyczne niezbędne do opisu oraz modelowania zjawisk chemicznych i procesów technologicznych

K_BCh_W04 opisuje rolę eksperymentu i symulacji komputerowych w procesie projektowania zagadnień inżynierskich

K_BCh_U04 w toku realizacji zadań inżynierskich stosuje podstawowe metody statystyczne, techniki informatyczne oraz wykorzystuje pakiety oprogramowania użytkowego do opisu procesów chemicznych i danych eksperymentalnych

K_BCh_U08 właściwie posługuje się nomenklaturą chemiczną i terminologią inżynierską

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

- wie, na czym polega wykonywanie pomiarów;
- rozumie potrzeby 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);
- zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w analizie danych chemicznych;
- wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody;
- zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych: HCA, PCA, LR, MLR, PCR, PLS.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

- potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe;
- wykorzystuje środowisko KNIME lub R 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 (zmienne niezależne).

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

- | | |
|--|--|
| | <ol style="list-style-type: none">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