

KARTA MODUŁU (sylabus)

1. Nazwa modułu: CHEMOMETRIA		2. punkty ECTS
		5
		3. kod ECTS
		S/N2CHEMII-O-CHEM-III
4. Kierunek studiów: CHEMIA	5. Ścieżka kształcenia: -	
6. Semestr studiów: III	7. Stopień: studia II stopnia	
8. Forma studiów: studia stacjonarne/niestacjonarne	9. Język wykładowy: polski	
10. Status modułu: obowiązkowy	11. Sposób zaliczenia: zaliczenie	
12. Grupa: moduł obligatoryjny z zakresu kształcenia kierunkowego		
13. Forma zajęć	14. Metody dydaktyczne	15. Sposób realizacji zajęć
wykład	wykład z prezentacją multimedialną/ wykład konwersatoryjny	zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych
ćwiczenia komputerowe	ćwiczenia komputerowe: rozwiązywanie zadań z wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania [PQStat, GrapMate, Statistica]	zajęcia prowadzone w salach komputerowych
16. Cele i zadania modułu: 1. Nadbudowanie przez studentów wiedzy oraz umiejętności praktycznych z zakresu wykorzystania metod numerycznych, statystycznych oraz symbolicznych do analizy wielowymiarowych zbiorów danych chemicznych, metod modelowania empirycznego, analizy podobieństwa i klasyfikacji produktów chemicznych.		
17. Wymagania formalne: 1. Obecność na zajęciach organizowanych w formie ćwiczeń komputerowych.		
18. Wymagania wstępne: 1. Usystematyzowana wiedza z zakresu metod statystycznych i obliczeniowych mających zastosowanie w chemii.		
19. Treści programowe:		
lp.	W - wykład / K - konwersatorium:	
W1	Wprowadzenie do modułu: chemometria jako nauka zajmująca się wykorzystaniem metod numerycznych, statystycznych oraz symbolicznych do analizy wielowymiarowych zbiorów danych chemicznych, metod modelowania empirycznego, analizy podobieństw oraz klasyfikacji produktów chemicznych.	
W2	Przegląd metod chemometrycznych. Przegląd oprogramowania komputerowego realizującego metody chemometryczne.	
W3	Metody analizy struktury wewnętrznej wielowymiarowych danych chemicznych. Podobieństwo obiektów w wielowymiarowej przestrzeni cech. Hierarchiczna analiza skupień.	
W4	Chemometryczna analiza skupień obiektów. Metody bezpośrednie. Metody strukturalne.	
W5	Modelowanie zjawisk i procesów z wykorzystaniem metod regresyjnych i klasyfikacyjnych. Regresja liniowa jednej i wielu zmiennych. Regresja głównych składowych. Regresja metodą częściowych najmniejszych kwadratów.	
lp.	L - ćwiczenia komputerowe:	
L1	Wprowadzenie do matematycznego modelowania procesów w chemii: wyznaczanie parametrów w modelach liniowych oraz macierzy wariancji-kowariancji tych parametrów.	
L2	Wnioskowanie statystyczne. Planowanie doświadczeń. Kryteria optymalności planu. Metody optymalizacji procesów. Analiza i kontrola danych. Dokumentowanie wyników. Archiwizacja	

	danych.	
L3	Analiza podobieństw pomiędzy obiektami i zmiennymi.	
L4	Podstawowe metody chemometryczne: analiza skupień i analiza głównych składowych. Przygotowanie surowych wyników pomiarów do analizy chemometrycznej.	
L5	Szacowanie błędu oraz niepewności pomiarowej. Błąd, a niepewność pomiaru. Źródła niepewności pomiaru. Standardowa niepewność pomiaru.	
L6	Walidacja modeli regresyjnych i klasyfikacyjnych.	
L7	Wprowadzenie do metod rozpoznawania obiektów oraz sztucznych sieci neuronowych.	
20. Zakładane efekty uczenia się:		
Wiedza: <i>zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej</i>		
Nr efektu	Efekt uczenia się - WIEDZA	
	Student, który zaliczył moduł:	
01	zna i charakteryzuje wybraną metodę chemometryczną oraz metody umożliwiające redukcję wielowymiarowości w analizie danych, w tym zasady wizualizacji struktury tych danych.	
02	zna zaawansowane metody statystyczne i metody wnioskowania statystycznego niezbędne w analizie danych eksperymentalnych.	
Umiejętności: <i>zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej</i>		
Nr efektu	Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI	
	Student, który zaliczył moduł:	
03	potrafi sformułować i zidentyfikować statystycznych model procesu w chemii.	
04	potrafi określić zasadę podstawowych strategii optymalizacyjnych oraz wybrać metodę optymalizacji odpowiednią do postawionego problemu.	
05	potrafi samodzielnie poszukiwać informacji w literaturze fachowej z zakresu chemometrii i wykorzystać je w procesie dalszego uczenia się.	
Kompetencje społeczne: <i>zdolność do kształtowania własnego rozwoju oraz autonomicznego i odpowiedzialnego uczestnictwa w życiu zawodowym i społecznym, z uwzględnieniem etycznego kontekstu własnego postępowania</i>		
Nr efektu	Efekt uczenia się - KOMPETENCJE	
	Student, który zaliczył moduł:	
06	jest gotów do stałego poszerzania wiedzy, w tym wykorzystania w tym procesie technologii informacyjnych i specjalistycznych programów komputerowych.	
20a. Odniesienie modułowych efektów uczenia się do kierunkowych efektów uczenia się:		
Nr efektu modułowego	Symbol EKK	
01	KK2P_W03	
02	KK2P_W06	
03	KK2P_U05	
04	KK2P_U05	
05	KK2P_U12, KK2P_U16	
06	KK2P_K01	
21. Sposoby oceny:		
F – formująca: F6-ocena bieżąca (za wykonanie ćwiczeń)		
P – podsumowująca: P3-średnia ocen zdobytych w czasie semestru P4-zaliczenie na ocenę		
22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:		
Nr efektu	Treści programowe	Sposób oceny
01	W1-W5, L1-L7	F6, P3, P4
02	W1-W5, L1-L7	F6, P3, P4
03	W1-W5, L1-L7	F6, P3, P4
04	W1-W5, L1-L7	F6, P3, P4
05	W1-W5, L1-L7	F6, P3, P4
06	W1-W5, L1-L7	F6, P3, P4
23. Warunek zaliczenia modułu:		
Ocena z zaliczenia stanowi średnią ocen zdobytych w czasie semestru, w tym za wykonane ćwiczenia w czasie zajęć komputerowych oraz z zaliczenia pisemnego.		

Obowiązująca skala ocen z zaliczenia to:				
<i>Dostateczny</i>	<i>Dostateczny plus</i>	<i>Dobry</i>	<i>Dobry plus</i>	<i>Bardzo dobry</i>
50-59%	60-69%	70-79%	80-89%	90-100%

24. Całkowity nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów uczenia się w godzinach oraz punktach ECTS:

Ogółem stacjonarne	Ogółem niestacjonarne	stacjonarne	niestacjonarne
125 h	125 h	5 ECTS	
- w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego		2,4 ECTS	1,44 ECTS
- w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy		2,6 ECTS	3,56 ECTS

25. Wykaz **literatury podstawowej** (wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta)

1. Mazerski J., Podstawy chemometrii, Gdańsk 2000.
2. Mazerski J., Chemometria praktyczna, Warszawa 2009.
3. Miller J., Miller J., Statystyka i chemometria w chemii analitycznej, Warszawa 2016.

26. Wykaz **literatury uzupełniającej**:

1. Otto M., Chemometrics. Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, Weinheim 2007.
2. Bulska E., Metrologia chemiczna, Warszawa 2009.