

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Exploratory analysis of multidimensional chemical space (Wykład), PG_00054859						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			egzamin		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemii -> Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska -> Pracownia Chemoinformatyki Środowiska						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna				
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		5.0		40.0	75
Cel przedmiotu	Cele kursu to: <ul style="list-style-type: none"> <li>Osiągnięcie zaawansowanych umiejętności analizy eksploracyjnej wielowymiarowej przestrzeni chemicznej (wykonywanie analiz i interpretacja wyników)</li> <li>Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem pozwalającym na przeprowadzanie wielowymiarowej analizy danych</li> <li>Zapoznanie studentów ze skryptami Pythona służącymi do analizy danych</li> </ul>						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_U04] Stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych.	Po ukończeniu kursu każdy student jest przekonany, że wykorzystanie komputera i eksploracyjnej analiz danych wzmacnia potencjał analizy danych, ponadto student potrafi krytycznie oceniać wyniki eksperymentów i rozumieć konieczność ich kontroli	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	At the end of the course every student understands the need of deeper learning of multidimensional data analysis methods	[SK4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W11] Wykazuje się pogłębianą wiedzą na temat aktualnych kierunków rozwoju chemii jako nauki oraz najnowszych odkryć w tej dziedzinie.	Na zakończenie zajęć każdy student zna klasyfikację zaawansowanych metod analizy danych i podaje przykłady ich zastosowania w wielowymiarowych problemach chemicznych	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W04] Stosuje nabytą wiedzę do pogłębionego opisu właściwości połączeń chemicznych, metody ich syntezy oraz analizy.	Na koniec kursu każdy student wyjaśnia podstawy teoretyczne (algorytm) zaawansowanych metod, w tym HCA, PCA	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_W07] Dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim stopniu złożoności.	Na zakończenie kursu każdy student wykorzystuje środowisko Python do wielowymiarowych analiz przestrzeni chemicznej	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny
	[CHEMMU2_U06] Prezentuje w sposób przystępny wyniki odkryć naukowych z chemii i dyscyplin pokrewnych.	Na zakończenie kursu każdy student dokonuje wielowymiarowej analizy danych i poprawnie interpretuje wyniki	[SU4] test/egzamin - ustny lub pisemny
[CHEMMU2_W09] Klasyfikuje specjalistyczne narzędzia informatyczne wykorzystywane w ocenie statystycznej wyników eksperymentu.	Na koniec kursu każdy student zna podstawowe pakiety oprogramowania służące do wielowymiarowej analizy danych	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
Treści przedmiotu	<p>Treść kursu:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Wprowadzenie do danych wielowymiarowych, przegląd podstawowego oprogramowania umożliwiającego przeprowadzenie analizy wielowymiarowej.</li> <li>Zaawansowane metody analizy danych: podobieństwo w wielowymiarowej przestrzeni cech, metody analizy podobieństwa, metody redukcji wielowymiarowości danych, hierarchiczna analiza skupień (HCA), analiza głównych składowych (PCA), metoda k-średnich, metoda rozmytej analizy skupień (metoda c-średnich), samoorganizujące się mapy, modele mieszanin Gaussa i inne algorytmy głębokiego uczenia się, przestrzenne klastrowanie na podstawie gęstości z szumem.</li> <li>Przykłady zastosowania tych metod w analizie danych chemicznych.</li> </ul>		
Wymagania wstępne i dodatkowe			
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	test	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005	
	Uzupełniająca lista lektur	S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009	
		scientific publication in the field	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczenie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.