

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Machine learning in chemistry (Wykład), PG_00051251						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			egzamin		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii -> Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska -> Pracownia Chemoinformatyki Środowiska						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr Alicja Mikołajczyk				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr hab. Celina Sikorska				
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	Zapoznanie studentów z teorią uczenia maszynowego i jego zastosowaniami w chemii, przedstawienie zalet i wad różnych typów algorytmów uczenia maszynowego w chemii.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Umiejętność oceny skuteczności opracowanego modelu i krytycznej interpretacji wyników uzyskanych za pomocą specyficznych metod uczenia maszynowego	[SW4] test/exam - oral or written [SW2] presentation/project/paper/report
	[CHEMMU2_W09] Klasyfikuje specjalistyczne narzędzia informatyczne wykorzystywane w ocenie statystycznej wyników eksperymentu.	Umiejętność samodzielnego doboru odpowiednich narzędzi chemii komputerowej do posiadanych danych.	[SW4] test/exam - oral or written [SW2] presentation/project/paper/report
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizację zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Umiejętność wykonywania analiz chemoinformatycznych, które pozwalają obniżyć koszty i czas badań.	[SK2] presentation/project/paper/report [SK4] test/exam - oral or written
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Umiejętność wyboru i zastosowania odpowiedniego algorytmu uczenia maszynowego, aby rozwiązać konkretny problem rozważany w dziedzinie nauk chemicznych.	[SW4] test/exam - oral or written [SW2] presentation/project/paper/report
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Znajomość podstawowych typów deskryptorów struktury chemicznej i metod ich obliczania	[SW4] test/exam - oral or written [SW2] presentation/project/paper/report
	[CHEMMU2_K03] Rozumie konieczność systematycznej pracy nad różnymi projektami o charakterze długofalowym oraz umie określić priorytety służące realizacji podjętych zadań.	Znajomość zasad funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne	[SK2] presentation/project/paper/report [SK4] test/exam - oral or written
	[CHEMMU2_K02] Pracuje w zespole przyjmując w nim różne role.	Umiejętność współpracy w grupie.	[SK2] presentation/project/paper/report [SK4] test/exam - oral or written
[CHEMMU2_U03] Wyszukuje potrzebne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, wymienia podstawowe czasopisma naukowe z chemii.	Umiejętność pracy z tekstem naukowym.	[SU2] presentation/project/paper/report [SU4] test/exam - oral or written	
Treści przedmiotu	Ten kurs jest zaprojektowany, aby dostarczyć studentom podstawowej wiedzy na temat praktycznych aspektów uczenia maszynowego w chemii, w tym: wprowadzenia do teorii uczenia maszynowego i jego zastosowań, przeglądu różnych typów algorytmów uczenia maszynowego (metody nadzorowanego i półnadzorowanego uczenia maszynowego; metody klasyfikacji i regresji; algorytmy uczenia przez wzmocnienie; modele generatywne kontra dyskryminacyjne), wyzwań w zastosowaniu uczenia maszynowego w chemii (metody radzenia sobie z niepewnymi, ograniczonymi, niezrównoważonymi i szumiącymi danymi; selekcja cech; wybór i ocena modeli), otwartego oprogramowania chemoinformatycznego.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Repetitorium z matematyki· Repetitorium z chemii ogólnej i nieorganicznej· Wprowadzenie do programowania w Pythonie· Wprowadzenie do programowania w REksploracyjna analiza wielowymiarowej przestrzeni chemicznej		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	egzamin	51.0%	100.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (ed): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009 R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005
	Uzupełniająca lista lektur	J. Leszczynski, A. Kaczmarek-Kedziera, T. Puzyn, M. G. Papadopoulos, H. Reis, M. Shukla (ed): Handbook of Computational Chemistry (2nd Edition). Springer 2016. Volume 5: Chemoinformatics, Puzyn T (ed.).
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.