

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Statystyka i chemometria w analityce chemicznej (Ćw. laboratoryjne), PG_00082095						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2024/2025				
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów				
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni				
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski polski				
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS	2.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	zaliczenie				
Jednostka prowadząca							
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr inż. Karolina Jagiełło					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr Artur Mirocki					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	15.0	0.0	0.0	15
	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	15		2.0		33.0	50
Cel przedmiotu	Kształcenie umiejętności wykonywania podstawowych obliczeń i testów statystycznych ze szczególnym uwzględnieniem umiejętności doboru odpowiednich metod statystycznych do specyfiki badanego problemu. Zaprezentowanie studentom zakresu możliwości zastosowania metod chemometrycznych w chemii. Zdobywanie przez studentów umiejętności posługiwania się najważniejszymi metodami chemometrycznymi. Zapoznanie się przez studentów z dostępnym oprogramowaniem realizującym metody chemometryczne.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[CHEML3_W09] Opisuje w zaawansowanym stopniu praktyczne zastosowania narzędzi informatycznych (programów komputerowych) do obliczeń chemicznych i analizy danych.</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. rozumie, że wykonanie pomiaru polega na porównaniu mierzonej wielkości ze wzorcem; 2. rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać w związku z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań; 3. wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie standardowe i inne); 4. rozumie ideę wnioskowania statystycznego o cechach populacji generalnej na podstawie reprezentatywnie pobranej próby statystycznej; 5. rozumie pojęcie poziomu istotności testu; 6. zna podstawowe rozkłady statystyczne (rozkład normalny, t-Studenta, rozkład F i chi kwadrat) oraz ich parametry; 7. zna założenia i ograniczenia podstawowych testów statystycznych; 8. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmetykologii i innych); 9. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody; 10. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in.: HCA, PCA oraz LR/MLR. 11. jest świadomy, że pomiary obarczone są niepewnością; wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym; rozumie zjawisko propagacji niepewności przy pomiarach pośrednich. 	<p>[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny</p>
	<p>[CHEML3_K01] Identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego dokształcania się oraz rozwoju osobistego.</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <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 obciążony jest niepewnością pomiarową. 	<p>[SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta</p>

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[CHEML3_U05] Stosuje metody statystyczne i techniki informatyczne do opisu procesów chemicznych i analizy danych eksperymentalnych.</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe; 2. wykorzystuje szereg rozdzielczy i histogram do poprawnego wnioskowania o charakterze rozkładu serii wyników; 3. posługuje się tablicami statystycznymi; 4. potrafi wybrać i zastosować test statystyczny odpowiedni do rozważanego problemu; 5. wykorzystuje program KNIME lub R do obliczeń chemometrycznych; 6. potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych; 7. przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki; 8. zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmiennie niezależne); 9. potrafi oszacować niepewność pomiaru bezpośredniego i pośredniego (w oparciu o pra-wo propagacji niepewności) 	<p>[SU2] prezentacja/projekt/referat/raport</p>

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[CHEML3_W07] Rozumie oraz opisuje w zaawansowanym stopniu prawidłowości, zjawiska i procesy fizykochemiczne wykorzystując język matematyki.</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. rozumie, że wykonanie pomiaru polega na porównaniu mierzonej wielkości ze wzorcem; 2. rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać w związku z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań; 3. wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie stan-dardowe i inne); 4. rozumie ideę wnioskowania statystycznego o cechach populacji generalnej na podstawie reprezentatywnie pobranej próby statystycznej; 5. rozumie pojęcie poziomu istotności testu; 6. zna podstawowe rozkłady statystyczne (rozkład normalny, t-Studenta, rozkład F i chi kwadrat) oraz ich parametry; 7. zna założenia i ograniczenia podstawowych testów statystycznych; 8. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmetyce i innych); 9. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody; 10. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in: HCA, PCA oraz LR/MLR. 11. jest świadomy, że pomiary obarczone są niepewnością; wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym; rozumie zjawisko propagacji niepewności przy pomiarach pośrednich. 	<p>[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny</p>

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	<p>[CHEML3_U06] Wykorzystuje pakiety oprogramowania użytkowego do rozwiązywania problemów z zakresu nauk ścisłych.</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe; 2. wykorzystuje szereg rozdzielczy i histogram do poprawnego wnioskowania o charakterze rozkładu serii wyników; 3. posługuje się tablicami statystycznymi; 4. potrafi wybrać i zastosować test statystyczny odpowiedni do rozważanego problemu; 5. wykorzystuje program KNIME lub R do obliczeń chemometrycznych; 6. potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych; 7. przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki; 8. zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmiennie niezależne); 9. potrafi oszacować niepewność pomiaru bezpośredniego i pośredniego (w oparciu o pra-wo propagacji niepewności) 	<p>[SU3] opracowanie tekstowe/praca pisemna</p>

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEML3_W06] Wybiera techniki matematyki wyższej w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii.	Po ukończeniu kursu każdy student: 1. rozumie, że wykonanie pomiaru polega na porównaniu mierzonej wielkości ze wzorcem; 2. rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać w związku z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań; 3. wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie stan-dardowe i inne); 4. rozumie ideę wnioskowania statystycznego o cechach populacji generalnej na podstawie reprezentatywnie pobranej próby statystycznej; 5. rozumie pojęcie poziomu istotności testu; 6. zna podstawowe rozkłady statystyczne (rozkład normalny, t-Studenta, rozkład F i chi kwadrat) oraz ich parametry; 7. zna założenia i ograniczenia podstawowych testów statystycznych; 8. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmetykologii i innych); 9. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody; 10. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in: HCA, PCA oraz LR/MLR. 11. jest świadomy, że pomiary obarczone są niepewnością; wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym; rozumie zjawisko propagacji niepewności przy pomiarach pośrednich.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
Treści przedmiotu	1. Wprowadzenie do obliczeń statystycznych i chemometrycznych w programie KNIME. Zasady pracy z komputerem. Hierarchiczna analiza skupień (HCA). 2. Analiza głównych składowych (PCA). 3. Regresja liniowa jednej i wielu zmiennych (LR/MLR).		
Wymagania wstępne i dodatkowe	chemia ogólna matematyka (1. semestr)		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	sprawozdania z ćwiczeń	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu): A. Łomnicki: Wprowadzenie do statystyki dla przyrodników. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2003. J. Mazerski: Podstawy chemometrii. Gdańsk: Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, 2000 P. Konieczka, J. Namieśnik i in.: Ocena i kontrola jakości wyników analitycznych. Centrum Doskonałości Analityki i Monitoringu Środowiskowego, Gdańsk 2004	
	Uzupełniająca lista lektur	Skrypt do ćwiczeń laboratoryjnych przygotowywany przez pracowników Pracowni Chemometrii Środowiska	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.