

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Statystyka i chemometria w analityce chemicznej (Wykład), PG_00082093						
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			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr inż. Karolina Jagiełło					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr inż. Karolina Jagiełło dr hab. Łukasz Haliński					
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	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
	[CHEML3_W09] Opisuje w zaawansowanym stopniu praktyczne zastosowania narzędzi informatycznych (programów komputerowych) do obliczeń chemicznych i analizy danych.	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. rozumie, że wykonanie pomiaru polega na porównaniu mierzonej wielkości ze wzorcem;</li> <li>2. rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać w związku z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań;</li> <li>3. wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie standardowe i inne);</li> <li>4. rozumie ideę wnioskowania statystycznego o cechach populacji generalnej na podstawie reprezentatywnie pobranej próby statystycznej;</li> <li>5. rozumie pojęcie poziomu istotności testu;</li> <li>6. zna podstawowe rozkłady statystyczne (rozkład normalny, t-Studenta, rozkład F i chi kwadrat) oraz ich parametry;</li> <li>7. zna założenia i ograniczenia podstawowych testów statystycznych;</li> <li>8. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach ścisłych, kosmologii i innych);</li> <li>9. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody;</li> <li>10. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in.: HCA, PCA oraz LR/MLR.</li> <li>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.</li> </ol>	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny

	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"> <li>1. potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe;</li> <li>2. wykorzystuje szereg rozdzielczy i histogram do poprawnego wnioskowania o charakterze rozkładu serii wyników;</li> <li>3. posługuje się tablicami statystycznymi;</li> <li>4. potrafi wybrać i zastosować test statystyczny odpowiedni do rozważanego problemu;</li> <li>5. wykorzystuje program KNIME lub R do obliczeń chemometrycznych;</li> <li>6. potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych;</li> <li>7. przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki;</li> <li>8. zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmiennie niezależne);</li> <li>9. potrafi oszacować niepewność pomiaru bezpośredniego i pośredniego (w oparciu o pra-wo propagacji niepewności).</li> </ol>	<p>[SU8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta</p>
	<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"> <li>1. potrafi obliczyć podstawowe statystyki opisowe;</li> <li>2. wykorzystuje szereg rozdzielczy i histogram do poprawnego wnioskowania o charakterze rozkładu serii wyników;</li> <li>3. posługuje się tablicami statystycznymi;</li> <li>4. potrafi wybrać i zastosować test statystyczny odpowiedni do rozważanego problemu;</li> <li>5. wykorzystuje program KNIME lub R do obliczeń chemometrycznych;</li> <li>6. potrafi odpowiednio przygotować dane do analiz chemometrycznych;</li> <li>7. przeprowadzi analizy struktury wewnętrznej zbioru danych metodami HCA i PCA oraz poprawnie zinterpretuje uzyskane wyniki;</li> <li>8. zbuduje model regresyjny (metodą LR/MLR), poprawnie przeprowadzi proces walidacji oraz wykona predykcję zmiennej zależnej w oparciu o zmienną niezależną (zmiennie niezależne);</li> <li>9. potrafi oszacować niepewność pomiaru bezpośredniego i pośredniego (w oparciu o pra-wo propagacji niepewności).</li> </ol>	<p>[SU8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta</p>

Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
<p>[CHEML3_W06] Wybiera techniki matematyki wyższej w zakresie niezbędnym dla zrozumienia i opisu procesów chemicznych oraz procesów fizycznych ważnych dla zrozumienia chemii.</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. rozumie, że wykonanie pomiaru polega na porównaniu mierzonej wielkości ze wzorcem;</li> <li>2. rozumie potrzebę rzetelnego dokumentowania wyników, wskaże potencjalne problemy, które mogą wynikać w związku z niewłaściwym prowadzeniem dokumentacji badań;</li> <li>3. wie, w jakim celu oblicza się poszczególne statystyki opisowe (średnia, odchylenie stan-dardowe i inne);</li> <li>4. rozumie ideę wnioskowania statystycznego o cechach populacji generalnej na podstawie reprezentatywnie pobranej próby statystycznej;</li> <li>5. rozumie pojęcie poziomu istotności testu;</li> <li>6. zna podstawowe rozkłady statystyczne (rozkład normalny, t-Studenta, rozkład F i chi kwadrat) oraz ich parametry;</li> <li>7. zna założenia i ograniczenia podstawowych testów statystycznych;</li> <li>8. zna podstawowy podział metod chemometrycznych, wymieni zastosowania poszczególnych grup tych metod w chemii (analityce chemicznej, naukach sądowych, kosmetyce i innych);</li> <li>9. wie, jakie oprogramowanie komputerowe realizuje poszczególne metody;</li> <li>10. zna podstawy teoretyczne (algorytm działania) najważniejszych metod chemometrycznych, m.in: HCA, PCA oraz LR/MLR.</li> <li>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.</li> </ol>	<p>[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny</p>

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
[CHEML3_W07] Rozumie oraz opisuje w zaawansowanym stopniu prawidłowości, zjawiska i procesy fizykochemiczne wykorzystując język matematyki.	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 obciążone są niepewnością; wskaże potencjalne źródła błędów pomiarowych i niepewności w procesie badawczym; rozumie zjawisko propagacji niepewności przy pomiarach pośrednich.	[SW4] test/egzamin - ustny lub pisemny	
[CHEML3_K01] Identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, potrzebę ciągłego dokształcania się oraz rozwoju osobistego.	Po ukończeniu kursu każdy student: 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.	[SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta	

Treści przedmiotu	<p>1. Podstawy metrologii chemicznej i dokumentowanie wyników: historia i istota pomiarów, wzorce, skale, cyfry znaczące, zasady zaokrąglania liczb, zasady dokumentowania wyników pomiarów. 2. Podstawy opisu statystycznego: populacja generalna a próby statystyczne; charakterystyka pojedynczej serii wyników: miary tendencji centralnej i rozproszenia wyników, rozkłady statystyczne, statystyki opisowe i ich interpretacja, szereg rozdzielczy i histogram, identyfikacja punktów odbiegających; testowanie hipotez statystycznych w oparciu o wybrane testy parametryczne i nieparametryczne; analiza korelacji. 3. 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 R, MATLAB, Statistica, Origin, SPSS, KNIME). 4. 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. 5. 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); wykorzystanie sztucznych sieci neuronowych (ANN) do rozwiązywania problemów regresyjnych i klasyfikacyjnych; 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. 6. Szacowanie błędu oraz niepewności pomiarowej: błąd a niepewność pomiaru, błąd względny i bezwzględny, źródła niepewności pomiaru, standardowa niepewność pomiaru, całkowita standardowa niepewność pomiaru, niepewność rozszerzona, szacowanie niepewności standardowej pomiarów bezpośrednich, prawo propagacji niepewności, procedura szacowania niepewności dla pomiarów pośrednich</p>		
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
	egzamin	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	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	publikacje naukowe	
	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.