

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Chemometria i sztuczna inteligencja w analizie danych spektroskopowych , PG_00069261						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć				
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. inż. Piotr Bruździak				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	8.0	16.0	0.0	21.0	0.0	45
	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	45		5.0		25.0	75
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z charakterystyką danych spektroskopowych oraz współczesnymi metodami ich analizy z wykorzystaniem chemometrii i sztucznej inteligencji. Studenci nauczą się przetwarzać, interpretować i modelować dane widmowe, korzystając z języka Python oraz modeli AI wspomagających proces programowania. Kurs rozwija praktyczne umiejętności analizy danych, krytycznego myślenia oraz pracy zespołowej poprzez realizację projektów programistycznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_U101] formułuje złożone problemy badawcze i dobiera właściwe metody uzyskując innowacyjne rozwiązania, współpracując z innymi osobami, zarówno w roli lidera jak i członka zespołu	Studenci w zespole potrafią zidentyfikować problem badawczy oraz dobrać do niego najlepszą metodę analizy danych spektroskopowych.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K7_U04] opracowuje i przekazuje informacje techniczne w postaci dokumentów tekstowych, arkuszy kalkulacyjnych, wykresów, schematów technologicznych oraz prezentacji multimedialnych, oraz przygotowuje wystąpienie wraz z prezentacją multimedialną	Studenci potrafią przygotować prezentację oraz raport podsumowujący ich pracę, w tym w szczególności jej cel, proponowane rozwiązania oraz napotkane problemy techniczne.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
	[K7_U01] integruje i interpretuje informacje z literatury, baz danych i innych źródeł	Studenci potrafią znaleźć najlepsze rozwiązania do pre-processingu, analizy danych spektroskopowych oraz rozwiązań programistycznych w dostępnych im źródłach wiedzy oraz potrafią korzystać z możliwości rozwiązań AI w projektowaniu rozwiązań badanych problemów.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K7_W101] identyfikuje w pogłębionym stopniu kluczowe obiekty i zjawiska związane ze studiowanym kierunkiem oraz opisujące je teorie i możliwe do zastosowania metody analityczne i projektowe	Studenci potrafią ocenić jakość danych spektroskopowych oraz dobrać odpowiednie metody ich przygotowania i obróbki.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_K101] uznaje znaczenie wiedzy związanej ze studiowanym kierunkiem w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych, krytycznie oceniając pozyskiwane informacje	Studenci potrafią ekstrapolować uzyskaną wiedzę i umiejętności na innego rodzaju problemy natury chemicznej i technicznej, w tym w szczególności na analizę sygnałów i danych pozornie nie związanych ze spektroskopią.	[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce
Treści przedmiotu	1. Część wprowadzająca (8 tygodni: 1h wykładu i 2h laboratorium): a) Rodzaje i cechy danych spektroskopowych: typy widm, kształty sygnałów, źródła szumów i artefaktów, formaty danych. b) Podstawy programowania w Pythonie dla chemików: środowisko pracy, biblioteki NumPy, Pandas, Matplotlib, SciPy. c) Wprowadzenie do interaktywnych aplikacji webowych w Streamlit. d) Wykorzystanie modeli językowych AI (np. Google AI Studio) do wspomaganie tworzenia i debugowania kodu. e) Chemometria i eksploracyjna analiza danych (EDA): statystyczna charakterystyka danych widmowych, f) wymagania dotyczące danych wejściowych. g) Metody przygotowania danych spektroskopowych: korekcja linii bazowej, odsumowanie (filtr Savitzky-Golaya, analiza falkowa), obliczanie pochodnych, normalizacja. h) Redukcja wymiarowości: PCA, t-SNE, UMAP. i) Metody dekompozycji danych: EFA, MCR-ALS. j) Regresja i klasyfikacja: PLS, LDA, SVM; metody walidacji modeli. 2. Część projektowa (7 tygodni: 3h tygodniowo): a) Zespołowe projektowanie i implementacja dwóch narzędzi: - Generatorsyntezy danych widmowych o zadanych parametrach. - Analizatora danych spektroskopowych (preprocessing, dekompozycja, analiza). b) Wzajemne testowanie i walidacja programów. c) Możliwość realizacji własnego projektu tematycznego po zatwierdzeniu przez prowadzącego. d) Prezentacja wyników, omówienie realizacji założeń, identyfikacja problemów i ich rozwiązań.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Wymagania wstępne: Wiedza z zakresu chemii ogólnej i podstaw spektroskopii. Wymagania dodatkowe (mile widziane): Podstawy programowania w Pythonie.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Prezentacja wyników projektu	60.0%	50.0%
	Realizacja zadania projektowego	60.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Chu X., Huang Y., Yun Y.-H., Bian X., Chemometric Methods in Analytical Spectroscopy Technology, Springer, 2022. 2. Mark H., Workman Jr J., Chemometrics in Spectroscopy, Wiley, 2018.	
	Uzupełniająca lista lektur	Inne dowolne publikacje i podręczniki akademickie dotyczące tematu.	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Implementacja aplikacji w Streamlit umożliwiającej: - Wczytywanie i zapisywanie danych spektroskopowych. - Zastosowanie preprocessingu (normalizacja, wygładzanie, pochodne, odsumowanie). - Przeprowadzanie analizy PCA i MCR-ALS z wizualizacją odzyskanych profili. - Generowanie syntetycznych widm zadanymi parametrami (typy pików, szumy, stężenia).		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.