
ZAŁĄCZNIK NR 1 do Ogłoszenia o zamówieniu nr:
IORPIB/Gospostrateg1/Ogł.Zam/Szkol./2020 z dn. 24.03.2020 r.

Program szkolenia: Analizy chemometryczne

1. Wprowadzenie teoretyczne do technik chemometrycznych (minimum 8 h dydaktycznych) w zakresie nie mniejszym niż:
 - Klasyfikacja technik chemometrycznych.
 - Planowanie i wykonanie eksperymentu.

2. Przygotowanie danych (minimum 20 h) w zakresie nie mniejszym niż:
 - braki danych
 - zastępowanie braków w danych w przypadku gdy wartość oznaczenia była niższa niż granica wykrywalności metody analitycznej,
 - zastępowanie braków w sytuacji gdy nie wykonano pomiaru.
 - kontrola danych
 - wyeliminowanie pomyłek powstałych w trakcie przygotowania danych, czyli tzw. „błędów grubych”,
 - wykrycie w zbiorze danych obiektów różniących się istotnie od innych, czyli tzw. punktów odbiegających,
 - uzyskanie przesłanek do ewentualnej transformacji niektórych zmiennych,
 - określenie jednorodności zbioru danych, czyli potwierdzenie pochodzenia wszystkich danych z tej samej populacji.
 - transformacja zmiennych
 - normalizacja,
 - autoskalowanie,
 - centrowanie,
 - inne.
 - transformacja obiektów macierzy
 - eliminacji szumu,
 - korekta linii podstawowej,
 - metoda nakładania sygnałów instrumentalnych.

Omówienie podpunktów na dostarczonym (na min 2 tyg. przed szkoleniem) przykładzie.

3. Klasyfikacja i omówienie metod chemometrycznych (minimum 20 h) w zakresie nie mniejszym niż:
 - Metody uczenia z nadzorem (kalibracji, dyskryminacji):
 - metoda regresji wielorakiej (MLR),
 - regresja czynników głównych (PCR),

-
- regresja częściowych najmniejszych kwadratów (PLS),
 - liniowa analiza dyskryminacji (LDA),
 - dyskryminacja metodą częściowych najmniejszych kwadratów (D-PLS),
 - modelowanie indywidualnych grup (SIMCA).
 - Metody uczenia bez nadzoru:
 - analiza czynników głównych (PCA),
 - analiza skupień (CA),
 - dobór odpowiedniej liczby skupień,
 - jednoczesna analiza obiektów i cech, technika „cluster imaging”,

Dla każdego wymienionego podpunktu należy zrealizować minimum następujące zagadnienia:

- idea analizy, opis, zastosowanie,
- postępowanie
- wizualizacja wyników
- interpretacja wyników

Omówienie podpunktów na dostarczonym (na min 2 tyg. przed szkoleniem) przykładzie.