
**ZAŁĄCZNIK NR 1 do Ogłoszenia o zamówieniu nr:
IORPIB/Gospostrateg1/U/Eksp./2020 z dn. 15.07.2020 r.**

Przedmiot i zakres opracowania eksperckiego

Przedmiot ekspertyzy

Ekspert będzie pracował z danymi uzyskanymi podczas analizy dwóch komercyjnie dostępnych środków ochrony roślin. W skład próbek wchodzi preparaty oryginalne, nieoryginalne oraz o nieznanym pochodzeniu. Łącznie pozyskano 180 próbek pierwszego preparatu oraz 115 drugiego. Wszystkie pozyskane próbki zostały zbadane w trzech powtórzeniach oraz scharakteryzowane za pomocą:

- 5 (pierwszy preparat) lub 6 (drugi preparat) właściwości fizykochemicznych zebranych w tabeli danych;
- sygnałów chromatograficznych uzyskanych z zastosowaniem analizy fazy nadpowierzchniowej połączonej z techniką chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią mas oraz techniką chromatografii cieczowej z detektorem z matrycą diodową.

Zadania eksperta

Każdy etap pracy eksperta powinien uwzględniać zasadności i przesłanki, które wskazują na podjęte przez eksperta kroki analizy danych dla każdego z badanych środków ochrony roślin oddzielnie.

1. Przygotowanie danych do analizy
 - a. Dla sygnałów chromatograficznych ocena występowania i eliminacja niepożądanych składowych sygnałów jak szum, linia podstawowa i przesunięcia pików chromatograficznych, dokonanie niezbędnych transformacji danych.
 - b. Dla tabeli danych zawierających parametry fizykochemiczne ocena konieczności transformacji danych przed analizą.
2. Analiza eksploracyjna danych
 - a. Wykonanie wizualizacji danych wieloparametrowych.
 - b. Przeprowadzenie oceny tendencji do grupowania danych ze względu na pochodzenie próbek, które reprezentują i ewentualne wskazanie parametrów wpływających na zaobserwowaną tendencję i opis uzyskanych wyników.
 - c. Przeprowadzenie oceny występowania obiektów odległych i opis uzyskanych wyników.
 - d. Przeprowadzenie oceny zasadności stosowania techniki dwukierunkowego grupowania hierarchicznego ewentualne zastosowanie i opis uzyskanych wyników.
3. Analiza dyskryminacyjna danych (analizę należy wykonać zgodnie z zasadami statystycznymi uwzględniającymi liczebność próbek oryginalnych i zafałszowanych użytych do konstrukcji modelu)
 - a. Skonstruowanie modeli dyskryminacyjnych umożliwiających odróżnienie próbek nieoryginalnych oraz oryginalnych na podstawie sygnałów chromatograficznych oraz tabeli danych zawierających parametry fizykochemiczne oraz podanie

charakterystyki jakościowej uzyskanych modeli (czułość, specyficzność, poprawny stopień dyskryminacji).

- b. Przeprowadzenie oceny zasadności stosowania podejścia wykorzystującego analizę zanieczyszczeń próbek (dla sygnałów chromatograficznych) i ewentualne skonstruowanie modeli dyskryminacyjnych z uwzględnieniem charakterystyki jakościowej uzyskanych modeli (czułość, specyficzność, poprawny stopień dyskryminacji).
4. Wskazanie zmiennych istotnych - w przypadku uzyskania modeli dyskryminacyjnych o satysfakcjonujących właściwościach predykcyjnych takich jak: czułość, specyficzność, poprawny stopień dyskryminacji na poziomie nie mniejszym niż 70%, podjęcie próby wskazania parametrów (lub pików chromatograficznych), które w największym stopniu wpływają na odróżnienie próbek oryginalnych od nieoryginalnych i opis uzyskanych wyników.
5. Przeprowadzenie oceny uzyskanych wyników pod kątem użyteczność w rutynowych analizach oraz wskazanie postępowania w przyszłych działaniach związanych z pozyskiwaniem i analizą próbek oraz analizami chemometrycznymi.

Sporządzenie i dostarczenie szczegółowego raportu z przeprowadzonych działań. Raport należy dostarczyć w dwóch podpisanych wersjach papierowych oraz w elektronicznej edytowalnej wersji.