

ΠΕΡΙΓΡΑΦΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	Θετικών Επιστημών		
ΤΜΗΜΑ	Χημείας		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	Προπτυχιακό		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Ε05	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	7/8
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ ΣΤΗ ΧΗΜΕΙΟΜΕΤΡΙΑ		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>		ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ
Διαλέξεις		2	3
Φροντιστήριο		1	1
Σύνολο		3	4
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης, γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Ειδικού υποβάθρου		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:			
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνική (Διδασκαλία, Εξέταση)		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Όχι		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)			

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση

του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

Σκοπός του μαθήματος είναι η απόκτηση αναλυτικής χημικής σκέψης για την εξαγωγή πληροφορίας από πολύπλοκα χημικά συστήματα και επίλυση προβλημάτων της Χημειομετρίας (διεπιστημονικός κλάδος της Στατιστικής και της Χημείας) με χρήση μεθόδων που καθοδηγούνται από τα δεδομένα (data-driven methods) και τεχνικών Μηχανικής Μάθησης (Machine Learning). Ο φοιτητής με την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος θα είναι σε θέση να αναγνωρίζει, να επιλέγει και να εφαρμόζει κατάλληλες μεθόδους από την πολυμεταβλητή στατιστική ανάλυση δεδομένων και την Μηχανική Μάθηση σε προβλήματα που απαιτείται μάθηση με επίβλεψη (supervised learning) και μάθηση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning). Όσον αφορά την πρώτη κατηγορία (μάθηση με επίβλεψη), ο φοιτητής θα είναι σε θέση να εφαρμόζει μεθόδους σε προβλήματα (i) παλινδρόμησης (regression) κάνοντας χρήση αλγορίθμων όπως της Least Squares Regression, Partial Least Squares Regression και (ii) κατηγοριοποίησης (classification) κάνοντας χρήση αλγορίθμων όπως της Logistic Regression, Multinomial Logistic Regression, k-Nearest Neighbors, Decision Trees. Όσον αφορά τη μάθηση χωρίς επίβλεψη, ο φοιτητής θα είναι σε θέση να εφαρμόζει μεθόδους σε προβλήματα (i) μείωσης διαστάσεων (data reduction techniques) και (ii) ομαδοποίησης (clustering) με γνωστούς αλγορίθμους της βιβλιογραφίας. Ο φοιτητής αναμένεται να αποκτήσει δεξιότητες στην εφαρμογή των παραπάνω μεθοδολογιών και τεχνικών στην γλώσσα προγραμματισμού ανοικτού κώδικα της R αναπτύσσοντας κώδικα στο Ολοκληρωμένο Περιβάλλον Ανάπτυξης (Integrated Development Environment) του RStudio με στόχο την εξαγωγή χρήσιμης πληροφορίας που είναι κρυμμένη στα ακατέργαστα δεδομένα και την αποτίμηση των μοντέλων που προσάρμοσαν συμβάλλοντας στην αξιολόγηση των ισχυρισμών και συμπερασμάτων σε λύσεις που καθοδηγούνται από τα δεδομένα.

Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα:

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Λήψη αποφάσεων

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας και ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

.....

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

Άλλες...

.....

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών.
- Λήψη αποφάσεων.

- Εφαρμογή της γνώσης στην πράξη.
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης.

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

- Εισαγωγή στη Ανάλυση Δεδομένων και την Χημειομετρία, Κατηγοριοποίηση Μεθόδων Ανάλυσης Δεδομένων, Προβλήματα, Ροή Εργασιών για την Ανακάλυψη Γνώσης.
- Προ-επεξεργασία Δεδομένων (Καθαρισμός, Μετασχηματισμός, Κανονικοποίηση), Οπτικοποίηση Δεδομένων (Μονοδιάστατα/Πολυδιάστατα), Περιγραφική & Διερευνητική Ανάλυση.
- Διαμόρφωση Ερευνητικής Υπόθεσης, Στατιστικός Έλεγχος Υπόθεσης, Εξαγωγή Συμπερασμάτων από Εμπειρικά Δεδομένα, Παραμετρικοί Έλεγχοι Υποθέσεων για Μέσες Τιμές
- Συσχέτιση, Τεχνικές Μείωσης Διαστάσεων, Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών (Principal Component Analysis-PCA)
- Μέθοδοι Πρόβλεψης στη Χημειομετρία, Μοντέλα Παλινδρόμησης (Regression), Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση (Υποθέσεις, Προσαρμογή, Ερμηνεία, Έλεγχος Μοντέλου, Προβλεπτική Ικανότητα)
- Μοντέλο Παλινδρόμησης Κυρίων Συνιστωσών (Principal Component Regression-PCR), Παλινδρόμηση Μερικών Ελαχίστων Τετραγώνων (Partial Least Squares Regression)
- Μέθοδοι Κατηγοριοποίησης (Classification), Λογιστική Παλινδρόμηση (Logistic Regression), Πολυωνυμική Λογιστική Παλινδρόμηση (Multinomial Logistic Regression)
- Μέθοδοι Κατηγοριοποίησης (Classification), Αλγόριθμος k-Κοντινότερων Γειτόνων (k-Nearest Neighbors), Δένδρα Κατηγοριοποίησης και Παλινδρόμησης (Classification and Regression Trees)
- Συσταδοποίηση (Clustering), Διαχωριστική Συσταδοποίηση (Partitioning Clustering), Αλγόριθμος k-means
- Αποτίμηση Ακρίβειας, Μέθοδοι Επικύρωσης (hold-out, k-fold, leave-p-out, leave-one-out cross-validation techniques, bootstrapping), Μέτρα Ακρίβειας για Μοντέλα Παλινδρόμησης (Σφάλμα, Απόλυτο Σφάλμα, Σχετικό Μέγεθος Σφάλματος, Μεροληψία κτλ.), Μέτρα Ακρίβειας για Μεθόδους Κατηγοριοποίησης (Ποσοστό Επιτυχίας, Ανάκληση, F-measure)
- Μέθοδοι Προσομοίωσης Monte Carlo και Bootstrap.

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ <i>Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</i>	Πρόσωπο με πρόσωπο	
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ <i>Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</i>	Χρήση Τ.Π.Ε στη Διδασκαλία (και ηλεκτρονικό εκπαιδευτικό υλικό) και ηλεκτρονικά quiz για αυτοαξιολόγηση. Χρήση Γλώσσας Προγραμματισμού Ανοικτού Κώδικα (R) και του Ολοκληρωμένου Περιβάλλοντος Ανάπτυξης του RStudio για διεξαγωγή ποσοτικής ανάλυσης δεδομένων Χρήση Τ.Π.Ε στην Επικοινωνία με τους φοιτητές.	
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ <i>Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.</i> <i>Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία,</i>	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου
	Διαλέξεις (2 ώρες επαφής εβδομαδιαίως × 13 εβδομάδες)	26
	Φροντιστήριο (1 ώρες επαφής εβδομαδιαίως × 13 εβδομάδες)	13
	Τελική Εξέταση	3
	Ώρες προετοιμασίας γραπτής εργασίας με τη βοήθεια της γλώσσας	28

Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.	προγραμματισμού R και παρουσίασης αναφοράς αποτελεσμάτων	
	Ώρες μελέτης και προετοιμασίας για την τελική γραπτή εξέταση	30
	Σύνολο Μαθήματος	100
	Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS	
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.	Η διαδικασία αξιολόγησης των φοιτητών περιλαμβάνει μία την προετοιμασία και παρουσίαση μίας ατομικής εργασίας και τελική γραπτή εξέταση. Η τελική γραπτή εξέταση πραγματοποιείται με επίλυση προβλημάτων (διαμορφωτική, συμπερασματική) στην ελληνική γλώσσα. Η ατομική εργασία βαθμολογείται με το 40% του τελικού βαθμού και η τελική γραπτή εξέταση με το υπόλοιπο 60%	

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- Wehrens, R. (2011). Chemometrics with R: Multivariate Data Analysis in the Natural Sciences and Life Sciences. Springer Science & Business Media.
- Brereton, R. G. (2018). Chemometrics: Data Driven Extraction for Science. John Wiley & Sons.
- Varmuza, K., & Filzmoser, P. (2016). Introduction to Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics. CRC press.