

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE  
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu zajęć:	Analiza danych wielowymiarowych				
Rok akademicki:	2019/2020	Kod:	ZSDA-3-0049-s	Punkty ECTS:	3
Wydział:	Szkola Doktorska AGH				
Kierunek:	Szkola Doktorska AGH	Specjalność:	—		
Poziom studiów:	Studia III stopnia	Forma studiów:	Stacjonarne		
Język wykładowy:	Polski	Profil:	Ogólnoakademicki (A)	Semestr:	0
Strona www:	—				
Prowadzący moduł:	prof. nadzw. dr hab. Jakubowska Małgorzata (jakubows@agh.edu.pl)				

### Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

Przedmiot obejmuje teoretyczne podstawy dziedziny i przedstawia wyczerpujące informacje o działaniu algorytmów uczenia maszynowego oraz sposobach ich wykorzystania w rozwiązywaniu problemów, które działają na danych wielowymiarowych pozyskanych w eksperymentach chemicznych oraz inżynierskich.

Zakres przedmiotu: metody wizualizacji danych wielowymiarowych, analiza głównych składowych, wybrane algorytmy klasyfikacji, zagadnienia regresji wielowymiarowej, algorytmy genetyczne, DOE.

### Opis efektów uczenia się dla modułu zajęć

Kod MEU	Student, który zaliczył moduł zajęć zna i rozumie/potrafi/jest gotów do	Powiązania z KEU	Sposób weryfikacji i oceny efektów uczenia się osiągniętych przez studenta w ramach poszczególnych form zajęć i dla całego modułu zajęć
Wiedza: zna i rozumie			
M_W001	Zna potrzebę gromadzenia i analizy złożonych zbiorów danych, także w przypadku, gdy informacja nie jest dostępna bezpośrednio ale ukryta w relacji pomiędzy zmiennymi lub zniekształcona poprzez składowe zaburzenia	SDA3A_W01	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Odpowiedź ustna, Aktywność na zajęciach
M_W002	Zna aktualne tendencje w zakresie algorytmów uczenia maszynowego oraz możliwości ich zastosowania w zakresie rozwiązywania problemów, w których istotnym etapem jest gromadzenie oraz analiza wielowymiarowych zbiorów danych	SDA3A_W02	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach

M_W003	Posiada wiedzę z zakresu algebry liniowej, analizy matematycznej oraz numerycznej w stopniu umożliwiającym rozwiązywanie problemów z zastosowaniem algorytmów uczenia maszynowego	SDA3A_W03	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wynik testu zaliczeniowego, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach
M_W004	Zna podstawy gromadzenia wielowymiarowych danych do analizy, wstępnego ich przygotowania do obliczeń, rozumie problem danych brakujących oraz odbiegających, zna podstawy przetwarzania sygnałów	SDA3A_W03	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wynik testu zaliczeniowego, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach
M_W005	Zna podstawowe zasady statystycznego planowania eksperymentów, metod uczenia bez nadzoru oraz z nadzorem, walidacji modeli oraz zasad wyboru algorytmów do obliczeń	SDA3A_W03	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wynik testu zaliczeniowego, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Kolokwium
Umiejętności: potrafi			
M_U001	Potrafi przygotować dane do analizy, rozwiązać problem punktów odbiegających i nadmiernych, dokonać selekcji zmiennych oraz utworzyć model z wykorzystaniem metod uczenia z nadzorem lub bez nadzoru w typowych środowiskach obliczeniowych. Rozumie problem wpływu niepewności pomiarowej na strategię prowadzenia obliczeń z wykorzystaniem metod uczenia maszynowego i interpretacji uzyskiwanych wyników.	SDA3A_U03, SDA3A_U02, SDA3A_U01	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wynik testu zaliczeniowego, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych
M_U002	Potrafi wykonać walidację modelu, ocenić trafność jego działania a także wykorzystać w praktyce uzyskane wyniki w odniesieniu do rozwiązywanego zadania z zakresu nauk inżynierskich oraz chemicznych	SDA3A_U03, SDA3A_U02, SDA3A_U01	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wynik testu zaliczeniowego, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach
M_U003	Potrafi analizować oraz wykorzystywać w praktyce, opisane w literaturze, wyniki stosowania metod analizy wielowymiarowej w rozwiązywaniu problemów z zakresu inżynierii oraz chemii, a także opracować uzyskane wyniki eksperymentów z zostawieniem metod uczenia maszynowego, na poziomie umożliwiającym ich publikację	SDA3A_U03, SDA3A_U02, SDA3A_U01	Zaliczenie laboratorium, Zaangażowanie w pracę zespołu, Wynik testu zaliczeniowego, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach
Kompetencje społeczne: jest gotów do			
M_K001	Rozumie potrzebę stosowania algorytmów modelowania wielowymiarowego w rozwiązywaniu problemów inżynierskich i naukowych.	SDA3A_K01	Odpowiedź ustna

**Liczba godzin zajęć w ramach poszczególnych form zajęć**

Suma	Forma zajęć dydaktycznych										
	Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Prace kontrolne i przejściowe	Lektorat
30	10	0	20	0	0	0	0	0	0	0	0

**Matryca kierunkowych efektów uczenia się w odniesieniu do form zajęć i sposobu zaliczenia, które pozwalają na ich uzyskanie**

Kod MEU	Student, który zaliczył moduł zajęć zna i rozumie/potrafi/jest gotów do	Forma zajęć dydaktycznych										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Prace kontrolne i przejściowe	Lektorat
Wiedza: zna i rozumie												
M_W001	Zna potrzebę gromadzenia i analizy złożonych zbiorów danych, także w przypadku, gdy informacja nie jest dostępna bezpośrednio ale ukryta w relacji pomiędzy zmiennymi lub zniekształcona poprzez składowe zaburzenia	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W002	Zna aktualne tendencje w zakresie algorytmów uczenia maszynowego oraz możliwości ich zastosowania w zakresie rozwiązywania problemów, w których istotnym etapem jest gromadzenie oraz analiza wielowymiarowych zbiorów danych	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W003	Posiada wiedzę z zakresu algebry liniowej, analizy matematycznej oraz numerycznej w stopniu umożliwiającym rozwiązywanie problemów z zastosowaniem algorytmów uczenia maszynowego	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W004	Zna podstawy gromadzenia wielowymiarowych danych do analizy, wstępnego ich przygotowania do obliczeń, rozumie problem danych brakujących oraz odbiegających, zna podstawy przetwarzania sygnałów	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Karta modułu - Analiza danych wielowymiarowych

M_W005	Zna podstawowe zasady statystycznego planowania eksperymentów, metod uczenia bez nadzoru oraz z nadzorem, walidacji modeli oraz zasad wyboru algorytmów do obliczeń	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Umiejętności: potrafi												
M_U001	Potrafi przygotować dane do analizy, rozwiązać problem punktów odbiegających i nadmiernych, dokonać selekcji zmiennych oraz utworzyć model z wykorzystaniem metod uczenia z nadzorem lub bez nadzoru w typowych środowiskach obliczeniowych. Rozumie problem wpływu niepewności pomiarowej na strategię prowadzenia obliczeń z wykorzystaniem metod uczenia maszynowego i interpretacji uzyskiwanych wyników.	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
M_U002	Potrafi wykonać walidację modelu, ocenić trafność jego działania a także wykorzystać w praktyce uzyskane wyniki w odniesieniu do rozwiązywanego zadania z zakresu nauk inżynierskich oraz chemicznych	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
M_U003	Potrafi analizować oraz wykorzystywać w praktyce, opisane w literaturze, wyniki stosowania metod analizy wielowymiarowej w rozwiązywaniu problemów z zakresu inżynierii oraz chemii, a także opracować uzyskane wyniki eksperymentów z zestawianiem metod uczenia maszynowego, na poziomie umożliwiającym ich publikację	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
Kompetencje społeczne: jest gotów do												
M_K001	Rozumie potrzebę stosowania algorytmów modelowania wielowymiarowego w rozwiązywaniu problemów inżynierskich i naukowych.	+	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-

**Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)**

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Udział w zajęciach dydaktycznych/praktyka	30 godz
Przygotowanie do zajęć	10 godz
przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania	10 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	10 godz
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	62 godz
Punkty ECTS za moduł	3 ECTS

**Pozostałe informacje****Szczegółowe treści kształcenia w ramach poszczególnych form zajęć (szczegółowy program wykładów i pozostałych zajęć)****Wykład**

Uczenie maszynowe to dziedzina wiedzy zajmująca się wydobywaniem użytecznej informacji z wielowymiarowych danych pomiarowych za pomocą metod numerycznych i statystycznych. Algorytmy znajdują przede wszystkim zastosowanie, gdy dane charakteryzują się dużą złożonością, zmiennością oraz niepewnością a także znacznym stopniem wewnętrznego powiązania, czyli informacja zawarta jest nie w pojedynczych zmiennych ale w relacji pomiędzy nimi. Uczenie maszynowe umożliwia wykorzystanie dużej liczby zmiennych do kompleksowego opisu zjawiska, na podstawie minimalnej liczby przebadanych obiektów, daje możliwość uzyskania wysokiej jakości informacji na podstawie danych o dużym poziomie niepewności, pozwala na podejmowanie zagadnień trudnych, leżących na granicy stosowalności metod statystycznych. Efektem stosowania algorytmów uczenia maszynowego jest możliwość rozwiązania lub objaśnienia rzeczywistych problemów przy pomocy narzędzi obliczeniowych.

Przedmiot obejmuje teoretyczne podstawy dziedziny i przedstawia wyczerpujące informacje o działaniu algorytmów uczenia maszynowego oraz sposobach ich wykorzystania w rozwiązywaniu problemów, które działają na danych wielowymiarowych pozyskanych w eksperymentach inżynierskich i chemicznych.

**<strong>Program wykładu</strong>****1.Wprowadzenie do algorytmów uczenia maszynowego**

Problem wielowymiarowości. Ogólna charakterystyka algorytmów uczenia maszynowego. Modelowanie wielowymiarowe – metody bez nadzoru i z nadzorem, uczenie przez wzmacnianie. Zastosowania uczenia maszynowego w nauce i technice, w tym w chemii i kryminalistyce. Oprogramowanie wspierające uczenie maszynowe (Matlab, R, Python).

**2.Gromadzenie, kontrola i wstępne przetwarzanie danych**

Gromadzenie i porządkowanie danych. Organizacja zbiorów danych. Macierz danych

wejściowych. Kompletowanie danych. Techniki pracy z danymi brakującymi. Problem danych odbiegających. Właściwy dobór i skalowanie zmiennych. Transformacja zmiennych. Mapowanie cech porządkowych. Kodowanie etykiet klas.

3. Metody wizualizacji danych wielowymiarowych.

Wykres radarowy. Wykres macierzowy.

4. Analiza skupień - modelowanie danych nieoznakowanych.

Geneza metody, założenia i cel stosowania. Hierarchiczna analiza skupień z wykorzystaniem macierzy odległości. Optymalizacja parametrów operacyjnych - metryki i metody aglomeracji. Dendrogram, tworzenie i interpretacja. Zasady optymalnego podziału na skupienia. Metoda k-średnich.

5. Analiza głównych składowych - nienadzorowana redukcja wymiarowości przestrzeni danych

Geneza problemu. Ogólna zasada metody. Matematyczny opis algorytmu PCA. Strategie wyznaczania liczby istotnych głównych składowych, m.in. zasada wyjaśnianej wariancji. Interpretacja głównych składowych i ładunków składowych. Wykres biplot.

6. Techniki uczenia z nadzorem - wprowadzenie do algorytmów klasyfikacyjnych

Charakterystyka danych do obliczeń. Założenia algorytmów klasyfikacyjnych. Etapy procesu klasyfikacji. Macierz pomyłek. Kryteria oceny klasyfikatora - czułość, specyficzność, precyzja, dokładność modelu. Strategie walidacji modeli klasyfikacyjnych. Walidacja prosta i krzyżowa. Optymalny wybór zbioru uczącego i testowego. Klasyfikacja a predykcja. Problem liczby obiektów/cech. Problem cech nieistotnych. Problem przeuczenia. Algorytmy klasyfikacyjne.

7. Wybrane algorytmy klasyfikacji

Klasyfikator liniowy. Zasada liniowej metody klasyfikacji i reguły stosowania. Drzewa decyzyjne (Classification and regression trees, CART). Zastosowanie CART jako algorytmu klasyfikacji. Budowa, walidacja, ocena i interpretacja drzewa decyzyjnego. Maszyna wektorów wspierających (Support Vector Machine, SVM). Zasada metody. Wektory wspierające. Wybór optymalnego marginesu. Rozwiązywanie przypadków nieseparowalnych liniowo. Problem i funkcja jądra (przejście do przestrzeni o większej liczbie wymiarów). Sztuczne sieci neuronowe.

8. Wprowadzenie do regresyjnych algorytmów uczenia maszynowego - modelowanie zmiennych ciągłych

Planowanie eksperymentu. Przetwarzanie sygnałów jako istotny etap przygotowania danych do definiowania modelu regresyjnego. Selekcja zmiennych. Definiowanie i walidacja modelu regresyjnego. Metody oceny modelu - błąd średniokwadratowy kalibracji, walidacji krzyżowej i predykcji. Charakterystyka i działanie algorytmów: PCR i PLS. Optymalizacja kompleksowości modelu.

9. Statystyczne planowanie eksperymentów

Geneza i cel planowania doświadczeń. Ogólne zasady DOE. Pojęcia podstawowe. Definiowanie zmiennych planu. Przegląd planów. Modele liniowe - plan czynnikowy kompletny i frakcyjny, dwu- i wielopoziomowy. Modele liniowo-kwadratowe - plany kompozycyjne. Plan frakcyjny Placketta - Burmana. Ogólne podejścia optymalizacyjne

- metoda zmiany pojedynczego czynnika, algorytm gradientowy, metoda simpleksów, algorytmy genetyczne.

10. Wybrane przykłady zastosowań uczenia maszynowego w naukach inżynierskich oraz chemii.

### **Ćwiczenia laboratoryjne**

Podstawy teorii macierzy

Definicja macierzy. Macierz transponowana, diagonalna, identycznościowa, symetryczna, trójkątna. Operacje na macierzach i warunki ich wykonalności. Własności operacji na macierzach. Wyznacznik macierzy. Własności wyznaczników. Macierz osobliwa i nieosobliwa. Macierz odwrotna. Odwracalność macierzy. Macierz charakterystyczna, wielomian charakterystyczny. Wektory i wartości własne. Własności wektorów i wartości własnych. Iloczyn skalarny wektorów. Wektory ortogonalne, ortonormalne, współliniowe. Problem stabilności obliczeń. Macierz źle uwarunkowana.

2. Przestrzeń metryczna

Definicja metryki. Przestrzeń metryczna. Przykładowe metryki.

3. Wizualizacja danych wielowymiarowych

Wykres radarowy. Wykres macierzowy. Twarze Chernoffa. Tworzenie i interpretacja wykresów.

4. Analiza skupień

Problem wstępnego przetwarzania danych. Optymalizacja parametrów metody. Dendrogram liniowy i kołowy. Interpretacja dendrogramów i optymalny podział na skupienia. Metoda k-średnich.

5. Analiza głównych składowych

Wykres osypiska. Wyznaczanie liczby istotnych głównych składowych. Interpretacja danych w przestrzeni głównych składowych. Interpretacja nowych zmiennych. Interpretacja wag składowych. Wykres biplot – tworzenie i interpretacja.

6. Algorytmy klasyfikacyjne

Definiowanie modeli klasyfikacyjnych z wykorzystaniem m.in. funkcji liniowych, algorytmu CART, SVM oraz ANN. CART – problem wyboru optymalnej wysokości drzewa. SVM – symulacja danych do obliczeń, problem wyboru optymalnego jądra. ANN – problem wyboru topologii sieci oraz funkcji aktywacji. Walidacja prosta, wybór zbioru uczącego i walidacyjnego. Walidacja krzyżowa – różne warianty. Ocena klasyfikatora, badanie czułości, specyficzności, precyzji, dokładności modelu. Detekcja problemu przeuczenia modelu.

7. Regresja wielowymiarowa

Definiowanie i walidacja modeli metodą PCR i PLS. Ocena jakości modelu. Problem przeuczenia.

8. Realizacja projektów obliczeniowych demonstrujących praktyczne wykorzystanie wybranych metod uczenia maszynowego w interpretacji wielowymiarowych danych pomiarowych. Modelowanie w systemach biologicznych i chemicznych.

### **Metody i techniki kształcenia:**

Wykład: Treści prezentowane na wykładzie są przekazywane w formie prezentacji multimedialnej w połączeniu z klasycznym wykładem tablicowym wzbogaconymi o pokazy odnoszące się do prezentowanych zagadnień.

Ćwiczenia laboratoryjne: W trakcie zajęć laboratoryjnych studenci samodzielnie rozwiązują zadany problem praktyczny, dobierając odpowiednie narzędzia. Prowadzący stymuluje grupę do refleksji nad problemem, tak by otrzymane wyniki miały wysoką wartość merytoryczną.

### **Warunki i sposób zaliczenia poszczególnych form zajęć, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu:**

Zaliczenie wykładu: obecność na zajęciach, dyskusja w czasie zajęć laboratoryjnych, umiejętność praktycznego wykorzystania algorytmów prezentowanych na wykładzie.

Ćwiczenia laboratoryjne w pracowni komputerowej: obecność na zajęciach, aktywność poprzez wykonywanie obliczeń w środowisku Matlab, opracowanie wyników eksperymentów własnych, opisanych w literaturze lub pochodzących z ogólnodostępnych repozytoriów internetowych i ich prezentacja na zajęciach, sprawdzian praktyczny.

Zaliczenie poprawkowe: ponowny sprawdzian praktyczny w terminie uzgodnionym z prowadzącym, przygotowanie opracowania danych z własnych eksperymentów lub pochodzących literatury.

### **Zasady udziału w poszczególnych zajęciach, ze wskazaniem, czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa:**

Wykład:

- Obecność obowiązkowa: Tak

- Zasady udziału w zajęciach: Studenci uczestniczą w zajęciach poznając kolejne treści nauczania zgodnie z sylabusem przedmiotu. Studenci winni na bieżąco zadawać pytania i wyjaśniać wątpliwości. Rejestracja audiowizualna wykładu wymaga zgody prowadzącego.

Ćwiczenia laboratoryjne:

- Obecność obowiązkowa: Tak

- Zasady udziału w zajęciach: Studenci wykonują ćwiczenia laboratoryjne zgodnie z materiałami udostępnionymi przez prowadzącego. Student jest zobowiązany do przygotowania się w przedmiocie wykonywanego ćwiczenia, co może zostać zweryfikowane kolokwium w formie ustnej lub pisemnej. Zaliczenie zajęć odbywa się na podstawie zaprezentowania rozwiązania postawionego problemu. Zaliczenie modułu jest możliwe po zaliczeniu wszystkich zajęć laboratoryjnych.

### **Sposób obliczania oceny końcowej**

Na ocenę końcową składa się: ocena ze sprawdzianu praktycznej umiejętności stosowania metod analizy wielowymiarowej (60%) , prezentacji na zajęciach wyników interpretacji danych własnych lub literaturowych (30%) oraz aktywności (10%). Uzyskane punkty przeliczane są na ocenę zgodnie z Regulaminem Studiów AGH.

### **Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach:**

Zaliczenie zaległości podczas konsultacji lub w innym terminie ustalonym z prowadzącym.

### **Wymagania wstępne i dodatkowe, z uwzględnieniem sekwencyjności modułów**

Znajomość podstaw statystyki oraz środowiska obliczeniowego Matlab.

### **Zalecana literatura i pomoce naukowe**

Jan Mazerski, Chemometria praktyczna, Wyd. Malamut, 2009.

Richard G. Brereton, Chemometrics: data analysis for the laboratory and chemical plant, Wiley, 2003.

Practical guide to chemometrics, ed. Paul Gemperline, Taylor&Francis, 2006.

Chemometria w analityce - wybrane zagadnienia, praca pod red. D. Zuby i A. Parczewskiego, Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008.

Marcin Szeliga, Data Science i uczenie maszynowe, PWN, 2019.



Sebastian Raschka, Python Uczenie maszynowe, PWN, 2017.

### **Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu**

Publikacje w czasopismach z listy filadelfijskiej

- 1.M. Jakubowska, R. Piech, T. Dzierwa, J. Wcisło, W.W. Kubiak, The Evaluation Method of Smoothing Algorithms in Voltammetry, *Electroanalysis* 15 (2003) 1729-1736.
- 2.M. Jakubowska, W.W. Kubiak, Optimization of smoothing process – the method to improve calibration in voltammetry, *Talanta*, 62 (2004) 583-594.
- 3.M. Jakubowska, W.W. Kubiak, Adaptive – degree polynomial filter for voltammetric signals, *Analytica Chimica Acta* 512 (2004) 241-250.
- 4.J. Gołaś, B. Kubica, W. Reczyński, W.M. Kwiatek, M. Jakubowska, M. Skiba, M. Stobiński, E. M. Dutkiewicz, G. Posmyk, K.W. Jones, M. Olko, J. Górecki, Preliminary Studies of Sediments from the Dobczyce Drinking Water Reservoir, *Polish Journal of Environmental Studies* 14 (2005) 37-44.
- 5.M. Jakubowska, W.W. Kubiak, Removing spikes from voltammetric curves in the presence of random noise, *Electroanalysis* 17 (2005) 1687-1694.
- 6.M. Jakubowska, Dedicated wavelet for voltammetric signals analysis, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 603 (2007) 113-123.
- 7.M. Jakubowska, E. Hull, R. Piech, W.W. Kubiak, Selection of the optimal smoothing algorithm for the voltammetric curves, *Chemia Analityczna – Chemical Analysis* 53 (2008) 215-226.
- 8.M. Jakubowska, W. W. Kubiak, Signal processing in normal pulse voltammetry by means of dedicated mother wavelet, *Electroanalysis* 20 (2008) 185-193.
- 9.M. Jakubowska, R. Piech, Dedicated mother wavelet in the determination of antimony in the presence of copper, *Talanta* 77 (2008) 118-125.
10. M. Jakubowska, Inverse continuous wavelet transform in voltammetry, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 94 (2008) 131-139.
- 11.M. Jakubowska, B. Baś, W.W. Kubiak, End-point detection in potentiometric titration by continuous wavelet transform, *Talanta* 79 (2009) 1398-1405.
- 12.B. Baś, M. Jakubowska, W.W. Kubiak, New multipurpose electrochemical analyzer for scientific and routine tasks, *Chemické Listy* 103 (2009) s262 – Proceedings of the Modern electroanalytical methods 2009, Prague, Czech Republic, 9-13 December 2009.
- 13.M. Jakubowska, Hybrid signal processing in voltammetric determination of chromium(VI), *Journal of Hazardous Materials* 176 (2010) 540-548.
- 14.M. Jakubowska, Orthogonal Signal Correction for Voltammetry, *Electroanalysis* 22 (2010) 564 - 574.
- 15.M. Jakubowska, B. Baś, F. Ciepela, W. W. Kubiak, A calibration strategy for stripping voltammetry of lead on silver electrodes, *Electroanalysis* 22 (2010) 1757-1764.
- 16.B. Baś, M. Jakubowska, F. Ciepela, W. W. Kubiak, New multipurpose electrochemical analyzer for scientific and routine tasks, *Instrumentation Science and Technology* 38 (2010) 421-435.
17. M. Jakubowska, Signal processing in electrochemistry, *Electroanalysis* 23 (2011) 553-572.
18. Ł. Górski, F. Ciepela, M. Jakubowska, W.W. Kubiak, Baseline correction in standard addition voltammetry by discrete wavelet transform and splines, *Electroanalysis* 23 (2011) 2658-2667.
19. Ł. Górski, F. Ciepela, M. Jakubowska, Automatic baseline correction in voltammetry, *Electrochimica Acta* 136 (2014) 195-203.
20. Ł. Górski, M. Jakubowska, B. Baś, W.W. Kubiak, Application of genetic algorithm for baseline optimization in standard addition voltammetry, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 684 (2012) 38-46.
21. F. Ciepela, W. Sordoń, M. Jakubowska, Principal components – based techniques in voltammetric determination of caffeic, syringic and vanillic acids, *Electroanalysis* 28 (2015) 546-554.
22. M. Jakubowska, W. Sordoń, F. Ciepela, Unsupervised pattern recognition methods in ciders profiling based on GCE voltammetric signals, *Food Chemistry* 203 (2016) 476-482.
23. Ł. Górski, W. Sordoń, F. Ciepela, W.W. Kubiak, M. Jakubowska, Voltammetric classification of ciders with PLS-DA, *Talanta* 146 (2016) 231-236.
24. W. Sordoń, A. Salachna, M. Jakubowska, Voltammetric determination of caffeic, syringic and vanillic acids taking into account uncertainties in both axes, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 764 (2016) 23-30.
25. M. Kowalcze, M. Jakubowska, Voltammetric profiling of absinthes, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 776 (2016) 114-119.
26. Ł. Górski, W.W. Kubiak, M. Jakubowska, Independent components analysis of the overlapping voltammetric signals, *Electroanalysis* 28 (2016) 1470-1477.
27. M. Jakubowska, R. Piech, Ł. Górski, Application of a partial least squares regression for the determination of nanomolar concentrations of scandium in the presence of nickel by adsorptive stripping 28. M. Jakubowska, Ł. Górski, R. Piech, Deviations from bilinearity in multivariate voltammetric calibration models, *Analyst* 138 (2013) 6817-6825.

29. F. Ciepiela, G. Lisak, M. Jakubowska, Self-referencing background correction method for voltammetric investigation of reversible redox reaction, *Electroanalysis* 25 (2013) 2054-2059.
30. F. Ciepiela, M. Jakubowska, Faradaic and Capacitive Current Estimation by DPV-ATLD, *Journal of The Electrochemical Society*, 164 (12) H760-H769 (2017)

Rozdziały w monografiach książkowych:

- 1.M. Jakubowska, W. Reczyński, A. Donabidowicz, J.Gołaś, W.W. Kubiak, Chemometric analysis of sediments from Dobczyce water reservoir w: *Chemometrics: methods and applications* / eds. Dariusz Zuba, Andrzej Parczewski, Kraków : Institute of Forensic Research Publishers, 2006, s.131-139.
- 2.M. Jakubowska, W.W. Kubiak, Separation of overlapped voltammetric peaks with dedicated wavelet w: *Chemometrics: methods and applications* / eds. Dariusz Zuba, Andrzej Parczewski, Kraków : Institute of Forensic Research Publishers, 2006, s.401-406.
- 3.M. Jakubowska, B. Baś, W.W. Kubiak, Nowy algorytm wyznaczania punktu końcowego w miareczkowaniu potencjometrycznym [New algorithm for end-point detection in potentiometric titration], *Chemometria w nauce i praktyce*, pod red. Dariusza Zuby, Andrzeja Parczewskiego, Kraków, Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2009.

Publikacje recenzowane w czasopismach o zasięgu międzynarodowym:

- 1.S. Białas, M. Jakubowska, Necessary and Sufficient Conditions for the Stability of Interval Matrices, *Bulletin of the Polish Academy of Sciences* 49 (2001) 467-478.
- 2.M. Jakubowska, D. Kalarus, A. Kot, W. W. Kubiak, Metody chemometryczne w identyfikacji źródeł pochodzenia klinkieru oraz cementu, *Materiały Ceramiczne = Ceramic Materials* 61 (2009) 12-15.

## **Informacje dodatkowe**

Brak