

| | | | | | | | | | | |
|--|-----------|--|---|--------------------------|---|---------|---|-------------------|---------------------------|----------------|
| A tantárgy neve: | magyarul: | Kemometria I. | | | | | | Kódja: | TTKME0511 TTKME0511_L | |
| | angolul: | Chemometrics I. | | | | | | | | |
| A képzés 2. féléve (tavaszi félév) | | | | | | | | | | |
| Felelős oktatási egység: | | DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék | | | | | | | | |
| Kötelező előtanulmány neve: | | | | | | | | Kódja: | | |
| Típus | | Heti óraszámok | | | | | | Követelmény | Kredit | Oktatás nyelve |
| | | Előadás | | Gyakorlat | | Labor | | | | |
| Nappali | X | Heti | 2 | Heti | 0 | Heti | 0 | kollokvium | 3 | magyar |
| Levelező | X | Féléves | 8 | Féléves | 0 | Féléves | 0 | | | |
| Tantárgyfelelős oktató | | neve: | | Dr. Kalmár József | | | | beosztása: | egyetemi adjunktus | |
| A kurzus célja, hogy a hallgatók | | | | | | | | | | |
| alapvető ismereteket szerezzen a kémiai és analitikai kémiai információ minél teljesebb kinyeréséhez szükséges matematikai statisztikai, lineáris algebrai, konvex geometriai, számítástechnikai és formál logikai módszerek és eljárások elméleti alapjaiban. | | | | | | | | | | |
| Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató | | | | | | | | | | |
| <i>Tudás:</i> | | | | | | | | | | |
| Ismerje a leíró statisztika alapvető módszereit. | | | | | | | | | | |
| Ismerje a legelterjedtebb statisztikai hipotézisvizsgálatok elvi alapjait. | | | | | | | | | | |
| Ismerje a legelterjedtebb regressziós módszerek elvi alapjait. | | | | | | | | | | |
| Ismerje a kémiai adatsorok feldolgozására használt alapvető alakzatkeresési és osztályozási módszereket. | | | | | | | | | | |
| Ismerje a legalapvetőbb statisztikai kísérlettervezési és optimalási módszereket. | | | | | | | | | | |
| Ismerje az analitikai kémiában általánosan használt kalibrációs módszereket. | | | | | | | | | | |
| <i>Képesség:</i> | | | | | | | | | | |
| Képes adott gyakorlati probléma esetén a kémiai információ minél teljesebb kinyerését lehetővé tevő kemometria eljárással kiválasztására. | | | | | | | | | | |
| Képes szakirodalmi leírás alapján kemometria eljárással megtervezésére és a kapott eredmények kritikai értékelésére. | | | | | | | | | | |
| Képes kemometria alapismereteinek továbbfejlesztésére. | | | | | | | | | | |
| <i>Attitűd:</i> | | | | | | | | | | |
| Nyitott arra, hogy kémiai témakörben kemometria eljárással alkalmazzon adatok értékelésére, és arra, hogy kemometria módszerek eredményét kritikailag értékelve felhasználja munkájához. | | | | | | | | | | |
| <i>Autonómia és felelősség:</i> | | | | | | | | | | |
| Szakmai irányítás mellett kemometria témájú részfeladatokat önállóan képes a kurzusban szereplő témakörök kapcsán elvégezni, a kapott eredményeket értelmezni, valamint reálisan, kritikailag értékelni. | | | | | | | | | | |
| A kurzus tartalma, témakörei | | | | | | | | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> - Leíró statisztika. - Statisztikai hipotézisvizsgálatok. - Variancia-analízis. Egyutas-, többutas módszerek. - Regresszió számítás. Legkisebb négyzetek módszere. - Minták osztályozása. Főkomponens analízis. - Lineáris diszkriminancia-analízis. - Klaszteranalízis. - Kísérlettervezés. Teljes- és részfaktoros kísérlettervek. - Optimalási módszerek. Szimplex optimalás. - Kalibráció. Mérőgörbék készítése. Külső és belső standard módszer, addíciós módszer. | | | | | | | | | | |
| Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek | | | | | | | | | | |
| Előadás, szükség szerint konzultáció. | | | | | | | | | | |

| |
|---|
| Értékelés |
| Kollokvium (szóbeli és írásbeli). |
| Kötelező olvasmány: |
| Ajánlott szakirodalom: Matthias Otto, Chemometrics: statistics and computer application in analytical chemistry, WILEY-VCH, 1999, New York |

| Heti bontott tematika | |
|-----------------------|---|
| 1. hét | Leíró statisztika. Eloszlás matematikai jellemzése. Sűrűségfüggvény, eloszlásfüggvény, várható érték, szórás, variancia. Centrális határeloszlás tétel. <hr/> TE: Felismeri és alkalmazza a különböző statisztikai modelleket. |
| 2. hét | Statisztikai hipotézisvizsgálatok I.: t-próba. Fajtái, alkalmazása, gyakorlati példák. <hr/> TE: Ismereteket szerez a t-próba elvi alapjairól és alkalmazásáról. |
| 3. hét | Statisztikai hipotézisvizsgálatok II.: ANOVA. Fajtái, alkalmazása, gyakorlati példák. <hr/> TE: Ismereteket szerez az ANOVA elvi alapjairól és alkalmazásáról. |
| 4. hét | Főkomponens-analízis (principal component analysis) I. Elméleti háttér. Főkomponensek által kódolt információ. Variancia, sajátérték, loading, score. A transzformáció menete. <hr/> TE: Ismereteket szerez a PCA elvi alapjairól és alkalmazásáról. |
| 5. hét | Főkomponens-analízis (principal component analysis) II. Gyakorlati alkalmazások. A transzformációval nyerhető információk. Buktatók. <hr/> TE: Megismeri a PCA-val nyerhető információk rendszerét, a módszer helyes alkalmazását. |
| 6. hét | Klaszteranalízis és lineáris diszkriminancia-analízis. Módszerek általános jellemzése, fajtái. Gyakorlati alkalmazások. <hr/> TE: Ismereteket szerez a klaszteranalízis és az LDA elvi alapjairól és alkalmazásáról. |
| 7. hét | Matematikai modellezés I. Lineáris legkisebb-négyzetes illesztés. Felhasználás, gyakorlati példák. <hr/> TE: Ismeri a lineáris legkisebb-négyzetes illesztés elvi alapjait és felhasználását. |
| 8. hét | Matematikai modellezés II. Nemlineáris legkisebb-négyzetes illesztés. A numerikus matematika néhány módszere. <hr/> TE: Ismeri a nemlineáris legkisebb-négyzetes illesztés elvi alapjait és felhasználását. |
| 9. hét | Kísérlettervezés (design of experiment) I. Érzékenységvizsgálat (screening). <hr/> TE: Ismeri az érzékenységvizsgálat elvi alapjait. Képes teljes- illetve részfaktorális kísérlettervet készíteni. |
| 10. hét | Kísérlettervezés (design of experiment) II. Optimalás. <hr/> TE: Ismeri a legelterjedtebb optimumkeresési módszerek elvi alapjait. |
| 11. hét | Kalibráció az analitikai kémiában. Külső standard, belső standard, standard addíció, kísérő standard módszerek. <hr/> TE: Ismeri és alkalmazni tudja a kémiai analitikában használt kalibrációs módszereket. |
| 12. hét | Többváltozós kalibráció (multivariate calibration) A PCR és a PLS elvi alapjai és alkalmazása. <hr/> TE: Ismeri a PCR és a PLS elvi alapjait és alkalmazását. |