

A tantárgy neve:	magyarul:	Kemometria II.						Kódja:	TTKMG0512	
	angolul:	Chemometrics II.								
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	0	Heti	1	Heti	2	gyakorlati jegy	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Kalmár József				beosztása:	egyetemi adjunktus	
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
<p>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 gyakorlati megvalósításáról.</p>										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
Ismerje és alkalmazni tudja a leíró statisztika alapvető módszereit.										
Ismerje és alkalmazni tudja a legelterjedtebb statisztikai hipotézisvizsgálatokat.										
Ismerje és alkalmazni tudja a legelterjedtebb regressziós módszereket.										
Ismerje és alkalmazni tudja a kémiai adatsorok feldolgozására használt alapvető alakzatkeresési és osztályozási módszereket.										
Ismerje és alkalmazni tudja 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 és végrehajtására szakértői felügyelet mellett.										
Képes szakirodalmi leírás alapján kemometria eljárással megtervezésére, kivitelezésére és a kapott eredmények kritikai értékelésére.										
Képes kemometria alapismereteinek továbbfejlesztésére.										
<i>Attitűd:</i>										
Nytított 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 statisztikai számítások. - Statisztikai hipotézisvizsgálatok gyakorlata. - Variancia-analízis gyakorlata. Egyutas-, többutas módszerek. - Regresszió számítás. Legkisebb négyzetek módszere. - Minták osztályozása. Főkomponens analízis szoftveres alapjai. - Lineáris diszkriminancia-analízis szoftveres alapjai. - Klaszteranalízis szoftveres alapjai. - Kalibráció. Mérőgörbék készítése. Külső és belső standard módszer, addíciós módszer. 										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek										
Szeminárium: válós mérési adatsorok szoftveres értékelése.										
Laboratórium: IR, XRF, UV-vis mérések, mérési adatok szoftveres értékelése.										
Értékelés										
Gyakorlati munka, jegyzőkönyv (50%).										
Gyakorlathoz kapcsolódó írásbeli számonkérés (50%).										

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. Statisztikai hipotézisvizsgálatok Eloszlásokhoz kapcsolódó egyszerű számítások. Statisztikai próbák (t-próba, ANOVA) végrehajtása valós adatsorokon szoftveresen. <hr/> TE: Felismeri és alkalmazza a különböző statisztikai modelleket, és statisztikai próbákat.
2. hét	Matematikai modellezés. Lineáris és nemlineáris függvényillesztések (legkisebb-négyzetek módszere) szoftveres számítása valós adatsorokon. Az eredmények kritikai értékelése. <hr/> TE: Megismeri a legkisebb négyzetes illesztés szoftveres végrehajtásának néhány módját kémiai problémák kapcsán.
3. hét	Főkomponens-analízis, klaszteranalízis. IR és UV-vis spektrumsorok felvétele és értékelése. Egyéb valós adatsorok szoftveres értékelése. Adatsorok előkészítésének jelentőségei. <hr/> TE: Ismereteket szerez a PCA és a klaszteranalízis alkalmazásáról kémiai rendszerekben előforduló alakzat-felismerési problémákban.
4. hét	Főkomponens-analízis, lineáris diszkriminancia analízis. IR spektrumok felvétele és értékelése. Tanítókészlet, ismeretlenek elemzése. A matematikai módszer validálása. <hr/> TE: A PCA és az LDA alkalmazása a kémiában felmerülő osztályozási problémák kapcsán.
5. hét	Kalibráció I. Többváltozós kalibrációs eljárások (PCR, PLS) gyakorlati alkalmazásának alapjai. Szoftveres eljárások megismerése. Valós adatsorok értékelése. <hr/> TE: A PCR és a PLS alkalmazása a kémiában felmerülő kalibrálási problémák kapcsán.
6. hét	Kalibráció II. IR és XRF módszerek kalibrációja. Spektrumok felvétele és az eredmények szoftveres értékelése. <hr/> TE: A PCR és a PLS alkalmazása a kémiában felmerülő kalibrálási problémák kapcsán.