



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Kemometria		VEMKKAB212K	
Chemometrics			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
Pap Tamás dr.		Analitikai Kémia	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Gyakorlati jegy

A tárgy oktatója:				
név	kurzus:	min. limit (fő)	max. limit (fő)	nyelv
Pap Tamás dr.	Elmélet	0	20	

A tantárgy célkitűzése

Tantárgy képzési célja:

A kémiai információ-szerzés matematikai módszereinek elsajátítása.

Tantárgy tematikája:

- Méréseredmények statisztikus értékelése. A statisztikus feldolgozás elméleti alapjai. Eloszlásfüggvények.
- Véletlen és rendszeres hiba. Hibaterjedés véletlen és rendszeres hibák esetén. Hibaterjedési függvények.
- Kiugró érték vizsgálata. Eloszlás vizsgálata. Két mérésorozat eredményének összehasonlítása t-próbával. Két mérésorozat szórásának összehasonlítása F-próbával.
- Variancia analízis (ANOVA), egyutas és kétutas varianciaanalízis. Változók közötti interakciók meghatározása. Szórásanalízis táblázat készítése.
- Korrelációs analízis. Regressziós analízis. Lineáris regresszió egy független változóval. Lineáris regresszió két független változóval. Nemlineáris összefüggések regressziója.
- Kalibráció elve és módszerei: Közvetlen összehasonlításos módszer, addíciós módszer, belső standard módszer. Laboratóriumok közötti körelemzés. Referencia anyagok.
- Kísérlettervezés. 2n típusú faktoros kísérlettervek. Rövidített kísérlettervek. Szimplex optimalás. Latin négyzet, Görög-latin négyzet használata.
- Minták osztálybasorolásának statisztikai módszerei. Alakfelismerés. Klaszteranalízis. Legközelebbi szomszéd módszer.
- Analóg és digitális jelek definíciója. Az analóg jelek osztályozása és leírása. A jel minősége. A jel-zaj viszony.
- Determinisztikus jelek, periodikus jelek. Stacionárius, véletlenszerű jelek. Zaj-típusok és zajforrások. Az analóg jel minőségének javítása: szűrés, moduláció.
- Jelalakváltozás az analitikai rendszerek működése során. A jelalak javítása.
- Az analóg jelfüggvények mintavételezése és kvantálása. Shannon mintavételi tétele. Kvantálási zaj. Analóg-digitális átalakítás. Az analóg-digitális átalakítók működése.
- A jel-idő függvények vizsgálata frekvenciatartományban. A Fourier-transzformáció. Fontosabb jelfüggvények Fourier transzformáltjai.
- Fourier-transzformáció. Véges, diszkrét értékekből álló jel-idő függvény Fourier transzformáltja.
- A digitális jel javítása. Zajsűrés mozgó átlagolással. Savitzky-Golay módszere. Spektrumaddíció. Zajsűrés Fourier transzformációval.

Tantárgy követelménye:

A félév során 2 zárthelyi dolgozatot írnak a hallgatók. Igazolt hiányzás és elégtelen dolgozat esetén szóbeli beszámolóval pótolható a hiányzó érdemjegy. A gyakorlati jegy a két dolgozat (vagy azt pótló beszámoló) eredményének átlagolásával kerül megállapításra.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Dr. Inczédy János: Folyamatos és automatikus analízis. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1984.