



Tárgytematika

Félév:	2016/17/1
Tárgynév:	Kemometria
Tárgykód:	VEMKKAB212K
Felelős szervezet neve:	Analitikai Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKKA
Tárgyfelelős neve:	Dr. Pap Tamás

Oktatás célja:

A kémiai információ-szerzés matematikai módszereinek elsajátítása.

Tantárgy tartalma:

1. Méréseredmények statisztikus értékelése. A statisztikus feldolgozás elméleti alapjai. Eloszlásfüggvények. 2. Véletlen és rendszeres hiba. Hibaterjedés véletlen és rendszeres hibák esetén. Hibaterjedési függvények. 3. Kiugró érték vizsgálata. Eloszlás vizsgálata. Két mérésorozat eredményének összehasonlítása t-próbával. Két mérésorozat szórásának összehasonlítása F-próbával. 4. Variancia analízis (ANOVA), egyutas és kétutas varianciaanalízis. Változók közötti interakciók meghatározása. Szórásanalízis táblázat készítése. 5. Korrelációs analízis. Regressziós analízis. Lineáris regresszió egy független változóval. Lineáris regresszió két független változóval. Nemlineáris összefüggések regressziója. 6. Kalibráció elve és módszerei: Közvetlen összehasonlításos módszer, addíciós módszer, belső standard módszer. Laboratóriumok közötti körelemzés. Referencia anyagok. 7. Kísérlettervezés. 2n típusú faktoros kísérlettervek. Rövidített kísérlettervek. Szimplex optimalás. Latin négyzet, Görög-latin négyzet használata. 8. Minták osztálybasorolásának statisztikai módszerei. Alakfelismerés. Klaszteranalízis. Legközelebbi szomszéd módszer. 9. Analóg és digitális jelek definíciója. Az analóg jelek osztályozása és leírása. A jel minősége. A jel-zaj viszony. 10. Determinisztikus jelek, periodikus jelek. Stacionárius, véletlenszerű jelek. Zaj-típusok és zajforrások. Az analóg jel minőségének javítása: szűrés, moduláció. 11. Jelalakváltozás az analitikai rendszerek működése során. A jelalak javítása. 12. Az analóg jelfüggvények mintavételezése és kvantálása. Shannon mintavételi tétele. Kvantálási zaj. Analóg-digitális átalakítás. Az analóg-digitális átalakítók működése. 13. A jel-idő függvények vizsgálata frekvenciatartományban. A Fourier-transzformáció. Fontosabb jelfüggvények Fourier transzformáltjai. 14. Fourier-transzformáció. Véges, diszkrét értékekből álló jel-idő függvény Fourier transzformáltja. 15. A digitális jel javítása. Zajsűrés mozgó átlagolással. Savitzky-Golay módszere. Spektrumaddíció. Zajsűrés Fourier transzformációval.

Számonkérési és értékelési rendszere:

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.

Kötelező és ajánlott irodalom:



Tárgytematika

Félév:	2016/17/1
Tárgynév:	Kemometria
Tárgykód:	VEMKKAB212K
Felelős szervezet neve:	Analitikai Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKKA
Tárgyfelelős neve:	Dr. Pap Tamás

Kötelező és ajánlott irodalom:

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