

Haladó Kemometria

A kurzus részletes tematikája:

- 1. hét:** Leíró statisztika. Eloszlás matematikai jellemzése. Sűrűségfüggvény, eloszlásfüggvény, várható érték, szórás, variancia. Centrális határeloszlás tétel.
- 2. hét:** Statisztikai hipotézisvizsgálat I. t-próba fajtái, alkalmazása, gyakorlati példák.
- 3. hét:** Statisztikai hipotézisvizsgálat II. ANOVA alkalmazása, gyakorlati példák.
- 4. hét:** Főkomponens-analízis (principal component analysis – PCA) I. Elméleti háttér. Főkomponensek által kódolt információ. Variancia, sajátérték, loading, score. A transzformáció menete.
- 5. hét:** Főkomponens-analízis (principal component analysis – PCA) II. Gyakorlati alkalmazások. A transzformációval nyerhető információ. Buktatók.
- 6. hét:** Klaszteranalízis és lineáris diszkriminancia-analízis (linear discriminant analysis).
- 7. hét:** Modellezés I. Lineáris legkisebb négyzetes illesztés. Regresszió analízis.
- 8. hét:** Modellezés II. Nem lineáris legkisebb négyzetes illesztés. A numerikus matematika néhány módszere.
- 9. hét:** Kísérlettervezés (design of experiment – DoE) I. Érzékenységvizsgálat (screening).
- 10. hét:** Kísérlettervezés (design of experiment– DoE) II. Optimumkeresés.
- 11. hét:** Kalibráció az analitikai kémiában. Külső standard, belső standard, standard addíció, kísérő standard módszerek.
- 12. hét:** Többváltozós kalibráció (multivariate calibration). Principal component regression (PCR).