

<b>A tantárgy meghirdetésének féléve:</b>	<i>(Neptun automatikusan hozzárendeli)</i>
<b>A tantárgy kódja:</b>	<i>EG539-0A000</i>
<b>A tantárgy megnevezése:</b>	<i>Kemometria</i>
<b>A tantárgy felelőse:</b>	<i>Dr. Németh Zsolt István</i>
<b>A tantárgy felelős szervezet neve (kódja):</b>	<i>E250</i>

<b>A tantárgy előadója:</b>	Dr. Németh Zsolt István	
<b>A tantárgy előkövetelménye:</b>		
<b>A tantárgy követelménye:</b>	vizsga	
<b>A tantárgy kreditértéke:</b>	4	
<b>A tantárgy tanóra száma (ea/gyak/lab):</b>	heti:2/1/0	féléves: 9/6/0
<b>A tantárgy típusa:</b>	kötelező	
<b>A tantárgy ajánlott tanterv szerinti félévszáma:</b>	2	
<b>A tantárgy meghirdetési gyakorisága:</b>	mintatanterv szerint	
<b>Az oktatás nyelve (ha az nem a magyar):</b>		
<b>Az oktatás helyszíne (ha nem Sopron):</b>		
<b>A tantárgy órarendi beosztása:</b>		

*A Tantárgyi program és követelmények tartalmi kidolgozása a 87/2015 (IV.9.) Korm. rendelet előírásai alapján, az alábbi pontok szöveges kidolgozásával*

#### **Tárgytematika további adatainak feltöltése:**

*Neptun: Tárgyak kezelése/ Tárgyak/Meghirdetett félévei menüresz*

#### **I: Tárgytematika kiegészítő adatok / Oktatás célja**

##### **I/1. A tantárgy oktatásának célja:**

A modern kémiai analitika módszereinek alkalmazása során nyert nagyszámú adathalmaz rutinszerű számítógépes értékelése kemometriás módszerekkel. A bioszféra rendszerek és a környezeti tényezők közötti kapcsolatok értelmezéséhez és vizsgálatához adatértékelési stratégiák alkalmazása.

#### **II: Tárgytematika kiegészítő adatok / Tantárgy tartalma**

##### **II.1. A tantárgy szakmai tartalma és ütemezése:**

###### **Előadás**

<b>Tananyagrész / témakör</b>	<b>Óraszám</b>
Mátrixszámítási alapismeretek: Kemometriás mátrixtípusok. Mátrixműveletek és -felbontások (sajátérték-sajátvektor, ill. szinguláris érték felbontás).	<b>4</b>
Adatok típusai, elrendezése és tulajdonságaik. Eloszlások. Illeszkedés és homogenitás vizsgálat. N-dimenziós távolságok. Variancia, kovariancia és korrelációs tényezők. Centrálás, léptékváltás és skálázás.	<b>4</b>
Csoportosítási (alakfelismerési) eljárások. kNN és K-közép csoportosítások. Diszkriminancia elemzés. SIMCA alakfelismerés, stb.	<b>5</b>
Faktoranalízis és főkomponens (PCA) elemzés.	<b>5</b>
Összefüggés vizsgálat. Lineáris regresszió és kovariancia analízis. Többváltozós görbeillesztés (MLR) és modellvizsgálat	<b>4</b>
Részleges legkisebb négyzetek (PLS) módszere	<b>4</b>

Összesen:	<b>26</b>
-----------	-----------

## Gyakorlat

Tananyagrész / témakör	Óraszám
Microsoft Excel többváltozós adatértékelési függvényei: TRANSZPONÁLÁS, MDETERM, INVERZ.MÁTRIX, MSZORZAT, LIN.ILL. Adatelőkészítési eljárások.	<b>2</b>
Mátrix centrálás és standardizálás. Rangszám mátrix. Kocariancia és korrelációs mátrixok előállítása	<b>3</b>
Távolság és hasonlósági mátrixok előállítása. Klaszteranalízis és K-közép csoportelemzés	<b>3</b>
PCA felbontás végrehajtása SCILAB-ben. SVD utasítás és NIPALS algoritmus alkalmazása	<b>3</b>
Diszkriminancia analízis (LDA) végrehajtása Excelben (PCA-LDA)	
Többváltozós nemlineáris összefüggések lineárizálása. MLR regresszió alkalmazása Excelben	<b>2</b>
PCR regresszió: PCA-MLR	
PLS regresszió alkalmazása	
Összesen:	<b>13</b>

### II/2. A tantárgy alkalmazott oktatási módszerei és a hallgatók tevékenységformái:

Előadás: video-projektoros prezentáció, kemometria adatértékelések video animációi Gyakorlat: Adatértékelési feladatok végrehajtása szoftveralkalmazásokkal (Microsoft Excel, Scilab)
--

### II/3. Megszerzendő ismeretek, elsajátítandó alkalmazási (rész)kézségek és (rész)kompetenciák:

Sokváltozós vizsgálati (analitikai kémiai) adathalmazok csoportelemzése, rejtett információk feltárása. Főkomponens-elemzés (PCA). PCR és PLS kalibrációk. Microsoft Excel sokváltozós adatelemzési függvényei. Kompetenciák: Korrelációs analízis és többváltozós modellillesztések végrehajtása (kézség). Adatelemzési stratégia kialakítása. Csoport elemzési eljárások alkalmazása (jártasság). Mátrixfelbontások. Sokváltozós adatelemzési módszeralkalmazások (ismereti).
---

### III: Tárgytematika kiegészítő adatok / Számonkérési és értékelési rendszere

#### III/1. A tantárgy aláírásának feltételei:

Gyakorlatok végrehajtása.
---------------------------

#### III/2. A tantárgy értékelési módja és ütemezése:

Írásbeli dolgozat dolgozat teljesítése. Osztályozás: 50%-tól elégséges (2), 66%-tól közepes (3), 75%-tól jó (4), 90%-tól jeles (5).
---

### IV: Tárgytematika kiegészítő adatok / Irodalom

#### IV/1. Kötelező irodalom:

Horvai György: Sokváltozós adatelemzés (Kemometria). Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
---

#### IV/2. Ajánlott irodalom:

S.J.Haswell: Practical guide to chemometrics. Marcell Dekker Inc., New York, 1992.
--

