



## 1. PREDMET: KEMOMETRIJA V ANALIZNI KEMIJI

---

Šifra: 30-0645

Število kreditnih točk (ECTS): 8,5

Obseg ur: 30; predavanja 15, seminar 0, vaje 15

Program: univerzitetni študijski program Kemija

---

## 2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

---

- a) seznaniti kemike (bodoče analitike) s teorijo in uporabo sodobnih numeričnih metod za:
    - pripravo eksperimentov (eksperimentalni načrti),
    - predobdelavo merskih podatkov (različne transformacije) in
    - vrednotenje podatkov in rezultatov dobljenih pri eksperimentih z večjim številom spremenljivk (statistični testi),
  - b) podati osnovne teorije in razlago uporabe metod za izdelavo neposrednih in inverznih modelov za napovedovanje kompleksnih lastnosti in jih seznaniti s statističnimi metodami za ovrednotenje modelov.
  - c) dati študentom kemije možnost neposrednega dela z osebnimi računalniki in jih seznaniti z možnostmi uporabe računalniških programov, ki jih pri obdelavi podatkov lahko s pridom uporabljajo.
- 

## 3. VSEBINA

---

- Opis (predstavitev) eksperimentov z več spremenljivkami (npr. več-elementne analize, različni spektri, recepture izdelkov, sintetske poti itd.) v obliki, ki je primerna za računalniško obdelavo.
  - Metrika več-dimenzionalnega merskega prostora (definicije in lastnosti razdalj, matrika razdalj, podobnost).
  - Osnove načrtovanja eksperimentov z več spremenljivkami (eksperimentalni načrti za določitev vplivov posameznih spremenljivk in načrti za izdelavo modelov).
  - Grupiranje podatkov (standardne metode statistične metode, projekcije več-dimenzionalnih podatkov v 2-dimenzionalni prostor, Kohonenove nevronske mreže).
  - Izdelava modelov: izbor učnega in testnega niza, nadzorovano in nenadzorovano učenje, testiranjem odelov (polinomski modeli, modeli z nevronskimi mrežami: učenje z vzvratnim širjenjem napake in protitočnimi mrežami, navzkrižna validacija modelov, interval zaupanja pri oceni modela).
  - Optimizacijske metode sistemov z več spremenljivkami (SIMPLEX, genetski algoritem).
-

---

#### **4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI**

---

Predmet terja znanje osnovnih pojmov Matematike I.

Znanje, ki ga pri predmetu "Kemometrija v analizni kemiji" pridobijo študentje, pomaga na eni strani pri pravilni pripravi in izbiri eksperimentov za reševanje kompleksnih problemov in je torej vezan na vse eksperimentalne predmete. Istočasno podaja predmet znanje o osnovnih in nekoliko bolj kompleksnih statističnih metodah, o modelih in modeliranju (parametrično/neparametrično, nadzorovano/nenadzorovano učenje) in o preverjanju kvalitete in primernosti modelov (validaciji). Vsa dobljena znanja so osnova za nadaljnje obdelave tako eksperimentalnih kot tudi modeliranih podatkov. Po svoji vsebini bi predmet sodil v prvi ali drugi letnik na smeri kemija.

---

#### **5. ŠTUDIJSKA LITERATURA**

---

OSNOVNI UČBENIK:

1. J. Zupan, Računalniške metode v kemiji, DZS, Ljubljana 1992
2. D.L. Massart, B.G.M. Vandengiste, L.M.C. Buydens, S. DeJong, P.J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke, Handbook of Chemometrics and Qaimetrics , Elsevier, Amsterdam, Part A (1997), Part B (1998),

DODATNA LITERATURA:

1. Zapiske s predavanj in nekatere tabele, ki jih študentje dobijo na predavanjih.  
S. N. Demming; Experimental Design: A Chemometric Approach, Elsevier, Amsterdam,

---

#### **6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA**

---

Pisni in ustni izpit, potem, ko je uspešno opravil vaje na osebнем računalniku. Vaje potekajo hkrati s predavanji.

**PRIPRAVIL:** prof. dr. Jure Zupan

**DATUM:** 22. julij 2002