Informačný list predmetu

Akademický rok 2026/2027

Vysoká škola	Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Fakulta	FPV UCM
Kód predmetu	KCH/dx205/21
Názov predmetu	chemometria a metodológia experimentu
Rozsah	2P + 2S
Počet kreditov	10

Podmienky na absolvovanie predmetu

Počas semestra každý študent vypracuje a odprezentuje 1 projekt z odborného časopisu na vybranú tému z aplikácie moderných štatistických a chemometrickcýh metód na aktuálne analytické a bioanalytické problémy. Na konci semestra študent navrhne formou projektu postup chemometrického spracovania pripravovaných výsledkov svojej témy dizertačnej práce, výskumné otázky, dizajn experimentov a ich vyhodnotenie. Jednotlivé projekty sa hodnotia 40 bodmi, pričom na získanie hodnotenia „prospel" je potrebné získať 60 bodov.

Výsledky vzdelávania

• Študent ovláda základné princípy chemometrických metód, integruje poznatky chémie, biochémie, matematiky a informatiky s cieľom vytvárať alebo zvoliť optimálne metódy a spôsoby realizácie experimentov, ako aj poskytovať maximálny obsah informácie v skúmanom systéme analýzou a spracovaním získaných experimentálnych údajov z analytických meraní.
• Aplikuje princípy chemometrie v koncepte inteligentného analytického resp. bioanalytického laboratória na zíkanie užívateľsky orientovanej finálnej informácie, ktorá v rozhodovacom procese umožní jednoznačne a objektívne odpovedať.

Stručná osnova predmetu

1. Súčasný stav v chemometrii. Analýza jednorozmerných dát, využitie deskriptívnej štatistiky.
2. Robustná štatistika, prieskumová analýza dát, testy štatistických hypotźe, analýza rozptylu (ANOVA).
3. Lineárna, nelineárna a mnohonásobná regresia. Lineárna a nelineárna kalibrácia. Pokročilé techniky regresnej analýzy. Porovnávanie laboratórnych metód s využitím regresie.
4. Optimalizačné techniky, gradientové metódy a metódy priameho hľadania.
5. Chemometrické metódy spracovania inštrumentálneho signálu a jeho transformácie.
6. Základné predpoklady, rozdelenie a techniky mnohorozmernej analýzy dát.
7. Prehľad zobrazovacích a klasifikačných techník. Umelé neurónové siete.
8. Prípadové štúdie: analýza potravín, znečisťovanie ovzdušia, klinické laboratórne testy.
9. Kvantitatívne vzťahy štruktúra - vlastnosti (QSAR). Molekulové deskriptory a biologická aktivita.
10. Kontingenčné tabuľky. Miera citlivosti, miera špecifickosti, kritická hodnota. ROC krivky. Zostavenie modelu merania.
11. Prezentácie projektov spracovaných z vedeckých článkov.

12. Prezentácie projektov navrhujúcim postupom chemometrického spracovania v rámci témy dizertačnej práce.
13. Záverečné hodnotenie.

Odporúčaná literatúra

Kružlicová, D. (2015). Chemometria. Fakluta prírodných vied, UCM.
Brown, S. D.; Tauler, R.; Walczak, B., eds. (2009). Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis. 4 volume set. Elsevier
Brereton, R. G. (2007). Applied Chemometrics for Scientists. Wiley
Otto, M. (2007). Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry (2nd ed.). Wiley-VCH
Miller, J.; Miller, J. C. (2005). Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry.(5th ed.) Pearson Education Canada.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu

slovenský jazyk, anglický jazyk