

Chemometrics (C004153)

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 3.0

Studietijd 85 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2025-2026

A (semester 1)

Engels

Gent

werkcollege

hoorcollege

Lesgevers in academiejaar 2025-2026

Vincze, Laszlo

WE06

Verantwoordelijk lesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2025-2026

stptn

aanbodssessie

Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting chemie)

3

A

Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Analytical and Environmental Chemistry)

3

A

Uitwisselingsprogramma chemie (niveau master)

3

A

Onderwijstalen

Engels

Trefwoorden

Proefopzet, experimentele design, gegevensanalyse, signaalverwerking, univariabele kalibratie, patroonherkenning, kwaliteitscontrole van analytische metingen.

Situering

De cursus geeft een theoretische en praktische inleiding tot de principes van chemometrie en de toepassingen ervan in de domeinen van analytische chemie, chemische micro- en nano-beeldvorming en materiaalchemie. De cursus beoogt het aanreiken van relevante vaardigheden voor het behandelen van analytische problemen, te beginnen bij het ontwerpen van experimenten, tot de evaluatie van grote datasets en de behandeling van fouten. Naast de behandeling van geselecteerde onderwerpen in de chemometrie, zal er een inleiding worden gegeven op relevante ISO- en Europese normen, validatie van methoden, kwaliteitsborging en vereisten voor accreditatie van analytische protocollen en methoden.

Inhoud

1. Algemene inleiding

- Analytische problemen
- Fouten in kwantitatieve analyse
- Soorten fouten
- Planning en ontwerp van experimenten

2. Significantie en testen van hypotheses

- (gepaarde) *t*-test
- *F*-test voor het vergelijken van standaardafwijkingen
- Variantieanalyse
- Testen op normaalverdeling

3. De kwaliteit van analytische metingen, validatie van methoden en kwaliteitscontrolemethoden, relevante ISO- en Europese normen

4. Univariante analytische kalibratiemethoden: regressie en correlatie

5. Experimenteel ontwerp en optimalisatie

- Factorieel versus een-factor-per-keer ontwerp

- Factorieel ontwerp en optimalisatie
- Volledig en fractioneel factorieel ontwerp
- Centraal composiet ontwerp
- Optimalisatie: basisprincipes en univariate methoden, alternerende zoekmethoden voor variabelen, methode van steilste stijging
- 6. *Multivariate analyse, datamodeleringstools, kwantitatieve big data*
- Hoofcomponentenanalyse
- Partiële kleinste kwadraten (PLS) regressie
- Clusteranalyse
- "K-nearest neighbor" en "K-means" methodes
- Discriminant analyse

Begincompetenties

De student heeft credits verworven voor de opleidingsonderdelen "Wiskunde: gevorderde technieken", "Statistiek", "Inleiding tot de analytische chemie", "Spectroscopische analysemethoden" of de erin beoogde competenties via equivalente opleidingsonderdelen te hebben verworven – te staven aan de hand van credit(s).

Eindcompetenties

- 1 Het principe kennen van veel gebruikte chemometrische methoden.
- 2 Problemen herkennen waarvoor chemometrie kan/moet toegepast worden.
- 3 Chemometrie kunnen toepassen op concrete problemen.
- 4 Gespecialiseerde statistische software kunnen gebruiken.
- 5 De resultaten kunnen interpreteren en relevante conclusies trekken (d.i. data reductie).
- 6 Geen drempelvrees meer hebben om meer geavanceerde chemometrische methoden aan te leren en te gebruiken.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege

Studiemateriaal

Type: Syllabus

Naam: Syllabus'

Richtprijs: € 10

Optioneel: nee

Type: Software

Naam: Software'

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Bijkomende info: Software (geen licentiekosten voor gebruik in de PC klas en op Citrix server via athena.ugent.be of athenax.ugent.be)

Referenties

Richard G. Brereton

Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant

J. Wiley, Chichester, 2003, ISBN: 978-0-471-48978-8 or 0-471-48978-6, € 103,90 in

2016 (+ 12%/jaar)

<http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0471489786.html>

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Ufora: oefeningen: vraag + antwoord

Persoonlijk op afspraak.

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Schriftelijke evaluatie met open vragen

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Schriftelijke evaluatie met open vragen

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Vaardigheidstest

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is niet mogelijk

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Periodegebonden evaluatie:

- open boek: PC oefeningen, toepassingen
- gesloten boek vragen: theorie
- schriftelijke ondervraging

Niet-periodegebonden evaluatie:

- tijdens de werkcolleges: PC oefeningen, toepassingen

Eindscoreberekening

- Periodegebonden evaluatie (80%)
- Niet-periodegebonden evaluatie (20%) tijdens de werkcolleges: PC oefeningen

Een student die ongegrond afwezig is of die niet deelneemt aan alle evaluatievormen van de niet-periodegebonden evaluatie (werkcolleges), zal een niet deliberaar examencijfer krijgen.

De punten voor de niet-periodegebonden evaluatie blijven behouden voor de tweede examenperiode, die enkel een periodegebonden examen omvat.