

Vak: Chemometrie

credits: 5

Vakcode	CHVH24CHEMOMETR1
Naam	Chemometrie
Studiejaar	2026-2027
ECTS credits	5
Taal	Nederlands
Coördinator	-

Werkvormen	Hoorcollege Practicum / Training Werkcollege
Toetsen	Chemometrie 1 Practicum - Overige toetsing Chemometrie 1 Theorie - Computer, organisatie ToetsCentrum

Leeruitkomsten

- Je past univariate en multivariate sequentiële optimalisering toe en interpreteert de resultaten, waarbij je de volgende zoekmethoden gebruikt: Binair, Fibonacci en (gemodificeerde) Simplex.
- Je kan matrixrekenen (scalair product, matrix product, determinant, inverse, getransponeerde).
- Je bepaalt numeriek maxima en minima van functies binnen de optimalisering en bediscussieert de gevonden resultaten in relatie tot de chemische en experimentele betekenis.
- Je voert univariate en multivariate simultane optimalisering uit en interpreteert de resultaten, o.a. door toepassing van Response Surface Methodologie (met screening en detail designs, zoals factorial en Central Composite designs)
- Je kan op basis van de experimentele opzet de juiste variantieanalyse (ANOVA) uitvoeren en interpreteren
- Je past de opgedane theoretische kennis over spectrometrie, potentiometrie en optimalisatie op een zelfstandige, veilige en verantwoorde wijze toe tijdens het uitvoeren van een experiment, en communiceert hierover met een logboek en/of resultatenformulier volgens de geldende richtlijnen.

Inhoud

Chemometrie is de toepassing van statistische en wiskundige methoden en technieken in de chemie. Het wordt gebruikt voor het verkrijgen en verwerken van meetgegevens voor optimalisatie, kalibratie, interpretatie van data, etc. De focus van deze module ligt op optimalisering. Je leert op gestructureerde wijze chemische informatie, meetgegevens, te verzamelen en zodoende efficiënt achter de invloed van variabelen en een optimum van een chemisch experiment te komen. Zo kun je bijvoorbeeld de opbrengst van een reactie verhogen. Je leert vanaf het begin de werkwijze van een factorial design, je leert matrixrekenen toepassen zodat je regressievraagstukken kunt oplossen en de invloed van variabelen kunt uitrekenen.

In de praktijk gebruik je de opgedane kennis van spectrometrie, potentiometrie en experimenteel design in experimenten waarin je deze technieken toepast. De verwerking van het experiment vraagt een uitwerking m.b.v. een ANOVA en een interpretatie van de resultaten.

DAS competenties

Competentie	Niveau (I-IV)
Onderzoeken	II
Experimenteren	II
Ontwikkelen	
Beheren	I
Adviseren	
Instrueren Begeleiden Doceren Coachen	I
Leidinggeven Managen	I
Zelfsturing	I

Opgenomen in opleiding(en)

Chemie

School(s)

Engineering, Life Sciences & ICT