

Instrukcja do ćwiczenia nr 3

- [1] Zapoznaj się z podstawowymi informacjami dotyczącymi opracowywania danych z wykorzystaniem metody chemometrycznych:
- a) dane chemiczne, tabele danych
 - b) rząd matematyczny a rząd chemiczny
 - c) wstępne przygotowanie danych
 - d) model PCA, analiza czynników głównych, wybór istotnej liczby czynników
 - e) klasyfikacja obiektów
 - f) wizualizacja struktury danych
- [2] Wykorzystując spektrometr Ramana oraz program LabSpec zarejestruj widmo wycinków piersi.
- [3] Opracuj otrzymane widmo z wykorzystaniem programu Origin.
- [4] Dokonaj interpretacji widm tkanki zdrowej i zmienionej nowotworowo.
- [5] Zapoznaj się z procedurą opracowywania danych z wykorzystaniem programów: Origin, Excel, MATLAB z PLS-Toolbox stosowaną w LLSM.

Sprawozdanie z ćwiczenia nr 3 powinno zawierać:

- [1] Wstęp teoretyczny dotyczący chemometrii.
- [2] Opis procedury stosowanej do opracowywania widm : Origin, Excel, Matlab, PLS-Toolbox.
- [3] Opis metod: Mean center, SNV, Derivative.
- [4] Wydruk widma zarejestrowanego w czasie wykonywania ćwiczenia.
- [5] Interpretację widm tkanki zdrowej i zmienionej nowotworowo.
- [6] Wnioski wpływające z wykonanego ćwiczenia.
- [7] Wykaz literatury.

Materiały pomocnicze do ćwiczenia nr 3 umieszczono na stronie:

<http://mitr.p.lodz.pl/raman/jsurmacki/pliki/zajecia/LMDiT/LMDiT.html>