

## Kemometria'02

(Tata, 2002. szeptember 30 – október 1.)

Az MKE Analitikai Szakosztály Kemometria Szakcsoportja immár 23. alkalommal találkozott egyetlen éves kihagyás nélkül. A színhely ezúttal Tata volt, a híres edzõtábor, ami természetvédelmi terület, kellemes, virágos tóparti parkkal, tágas hotellel, pihenésre és munkára egyaránt alkalmas.

Zsúfolt programot szerveztünk. Hála a sok benyújtott előadásnak, ill. poszternek a „bőség zavarával” kellett megküzdeni. Bizony ez kellemes gond, sokan irigyelnének érte. Nemzetközi szakértőket, egy-egy részterület kiválóságát is meghívtuk, ami segít abban, hogy kitekintésünk legyen a világra, hol is tart a kemometria tudománya manapság, milyenek az új módszerek, mely problémákat lehet megoldani ezekkel az eszközökkel? Szerencsére a néhány évvel ezelőtti megtorpanás után évről évre nő a résztvevők száma, és a tudományos színvonal is.

A konferencia vasárnap délután kezdődött, az elhelyezkedés, regisztráció gyorsan és problémamentesen lebonyolódott, és a posztereket is szinte kivétel nélkül még vasárnap kifüggesztették. Az előadások hétfőn 9 órakor kezdődtek. Az első előadást *Mia Hubert* (Belgium) nagy matematikai apparátust felvonultatva a robusztus módszerekről tartotta, bemutatva a kemometriában döntő fontosságú PCR és PLS technikák gyors algoritmusával számítható robusztus változatait. Ezután *Riccardo Leardi* (Olaszország) beszélt a genetikai algoritmusok speciális alkalmazásáról, a spektrumok kalibrációra szolgáló hullámhossz tartományainak kiválasztásáról. Azt állította, hogy módszere általában jobb, de legalábbis olyan jó, mint a szakértőké, de neki semmiféle előzetes információra nincs szüksége, milyen anyagot, milyen adalékot keresünk, ill. minek is szeretnénk a koncentrációját meghatározni. *David Livingstone* (Anglia) mesterséges ideghálózatok (ANN) gyógyszertervezésben való felhasználásáról beszélt didaktikailag is jól szervezett előadásában. *Alekszej Pomerancev*, az Orosz Kemometria Társaság elnöke sebességi állandók spektrumokból történő becslésének új módszerét, a szukcesszív Bayes-becslést ismertette a bayesi becslélmélet alapján, támaszkodva a saját fejlesztésű FITTER nevű programjára, ami MS Excel környezetben futtatható. *Oxana Rogyionova* (Oroszország) az Orosz Kemometria Társaság titkára, az ún. Egyszerű Intervallum Számolás módszerének elméletét és gyakorlati alkalmazását mutatta be. Sajnos *Roberto Todescini* (Olaszország) megbetegedett, és így nem tudta előadását megtarta-

ni. Helyére *Kolossvay István* előadása került a keddi napról. Ő nagy (és ritka) mátrixok sajátérték problémájáról adott elő, szintén angolul. *Igor Zenkevics* (Oroszország) az enantiomerek és diasztereomerek gázkromatográfiás elúciós sorrendjének molekula dinamikai módszerekkel történő előrejelzéséről beszélt. Ezzel véget ért az angol nyelvű program és megkezdjük a magyar nyelvű előadásokat.

*Szepesváry Pál* a korrelációs együttható felfedezésének történetét ismertette, és nem feledkezett meg a kapcsolódó problémákról sem. *Rajkó Róbert* rövid korreferátumában további érdekességeket közölt, pl. a korrelációs együttható kiszámítására vonatkozó képletekről és „felfedezőikről”, ill. a korrelációs együttható robusztusságáról. Élénk vita zárta az előadások sorát.

A poszterszekcióban 19 posztert mutatnak be, nagyon magas színvonalon. Mivel mindenkit nem lehet kiemelni, így csak a *Rajkó Róbert* által gondozott honlapunkhoz irányíthatjuk az érdeklődőket, ahol minden előadás és poszter kivonata is rendelkezésre áll: <http://www.jate.u-szeged.hu/~rajko/Kemometria02/>

A legjobb posztert szavazással választottuk ki úgy, hogy minden résztvevőnk 1 szavazatot adhatott le. A mezőny kiegyensúlyozottságára jellemző, hogy 11 poszter kapott legalább 1 szavazatot, 4 pedig jelentős számút. Mivel a legjobb posztert holtverseny miatt nem lehetett megállapítani, az egyik külföldi szakértőt vontuk be a döntésbe és így *Szentmiklósi László*, *Kemény Sándor*: „Kísérleti tervek eredményeinek számítógépes szimulációja” című posztere nyerte az MKE által felajánlott pezsgőt. Dícséretben részesültek *Vanyúr Rozália*, *Jakab Annamária* és *Zádor Judit*. A poszter szekció során kaphattunk információt a szponzoroktól: Servitec Kft. (Foss Tecator; Foss NIRSystems).

Kedden több, időben egymást követő szekcióban hangzottak el magyar nyelvű előadások a többváltozós módszerek, jelfeldolgozás, környezetvédelmi alkalmazások és egy ipari alkalmazásokat tömörítő szekcióban, melyben kísérlettervezési, minőségellenőrzési, minőségbiztosítási (validálással foglalkozó) munkák kaptak helyet. Az előadások hosszát 20 percen kellett korlátoznunk, s ez bizony azt eredményezte, hogy még szigorú elnökök esetében is kicsúszunk az időből. *Horvai György* molekulák orientációiról, mint többváltozós statisztikai problémáról, *Lengyel Attila* a timföldek minősítése során az értékelő tulajdonságok csökkentéséről, *Rajkó Róbert*

a kalibrációs egyenes konfidenciasáv meghatározásának problémáiról, *Jámbor Avenarius László* az emberi szem érzékenységi görbéinek zajanalíziséről, *Pap Tamás* digitális analitikai jelek dekonvolúciós feldolgozásáról beszélt. *Révy Zsolt* a nagyságára és elhelyezkedésére is diszkrét jelsorozatok kiértékelésére kidolgozott Teljes Valószínűségi (valószerűségi) Módszerről és alkalmazhatóságáról, *Paksy László* a Sajó folyó szezonális változásának vizsgálatáról, *Raisz Iván* a vízszennyezés kockázati elemzéséről, *Raisz Péter* a felszíni vizek szennyezettségének nitrogénformáiról, *Kemény Sándor* a hat szigma módszerről és ipari alkalmazásáról, *Komka Kinga* a bioanalitikai módszerek kalibrációs problémáiról, *Rabi Erzsébet* a beszállítók értékelésénél alkalmazott statisztikai módszerekről, *Seregély Zsolt* a Polár Minősítő Rendszerrel (PQR) kapcsolatos legújabb eredményeikről, és *Darvas Ferenc* a posztgenomikus gyógyszerkutatóval kapcsolatos automatikus elemzés és kemometria szerepéről tartott előadást.

A konferenciát a Kemometria Szakcsoport elnökének és az elnökség tagjainak megválasztásával zártuk. A választás eredménye a következő:

elnök:

*Héberger Károly*

elnökségi tagok:

*Rajkó Róbert,*

*Pap Tamás,*

*Szepesváry Pál,*

*Kemény Sándor,*

*Lengyel Attila*

lettek.

A következő konferenciánk nemzetközi lesz. Öt éve szerveztünk Conferentia Chemometrica CC'97 címmel egy nagy sikerű nemzetközi konferenciát. Jövőre a kromatográfiás szakosztállyal (részükről *Kalász Huba* koordinálásával) együtt szervezzük 2003. október 27–29. között az Agrohotelben (Budapest). Természetesen külön szekciót szervezünk a kromatográfiás adatok elemzésének, de ez nem jelent semmiféle tematikai jellegű korlátozást. Bármilyen kísérlettervezési, spektrális, vagy más adatfeldolgozási, osztályozási, minőségbiztosítási stb. előadást, ill. posztert szívesen fogadunk. Kérjük, hogy erről magyar és külföldi kollégákat is informálják.

*Héberger Károly – Rajkó Róbert*