

Válasz Dr. Elek János opponensi bírálatára

Elsősorban szeretném megköszönni átfogó és alapos bírálatát. A válaszaimat dőlt betűvel jelölöm.

- Végezett más típusú kísérleti tervekkel is vizsgálatokat, csak azok nem kerültek bemutatásra vagy eleve elvetette a többi kísérlettervezési módszert? Ha ez utóbbi igaz, miből gondolta, hogy ezek a tervek annyival kevesebb információt szolgáltatnának, hogy nem éri meg csökkenteni a futtatások számát?
- *Mivel a munkám elsődleges célja a DryLab szoftver fejlesztésének támogatása volt, ezért nem végeztem más kísérlettervezési módszerrel vizsgálatokat. Mind az irodalmi eredmények, mind a saját tapasztalataim azt igazolták, hogy a DryLab szoftver által implementált teljes faktoriális tervvel nagy pontosan lehet a komponensek retenciós tényezőjét becsülni a kijelölt kísérleti térben [1-3]. A dolgozatban nem került bemutatásra, de egy másik kísérlettervezésre alkalmas szoftverrel, a STATISTICA-val – mely képes más típusú kísérleti tervek feldolgozására – is végeztem vizsgálatokat [4], de sajnos ezzel a szoftverrel kevésbé pontos retenciós idő becslést kaptam, mint a DryLab szoftverrel. Amennyiben az analízis idő egy-egy kísérlet esetén nagy, úgy megfontolandó lehet más kísérlettervezési módszer alkalmazása, mellyel a kísérletek száma csökkenthető, azonban az általam vizsgált esetekben az elemzési idő kicsi, ezért nem volt jelentős indok a kísérletek számának csökkentésére. A gyors kromatográfiás módszerek elterjedésével ez a feltétel egyre inkább általános a kromatográfiás gyakorlatban.*
- Az ANOVA elvégzése előtt voltak-e az adatokra vonatkozó előfeltétel vizsgálatok, és ha igen milyenek? Ha nem, miért gondolják, hogy ezek az ANOVA eredmények valós képet mutatnak?
- *Az egy-faktoros ANOVA eredményekről a következők alapján feltételeztem (STATISTICA® szoftver), hogy megbízhatóak.*
 - *A modellvegyületek retenciós ideje mérésről-mérésre független, mivel mérési körülményenként függetlenek az injektálások.*
 - *A varianciájuk állandó, melyről Levene teszttel győződtem meg. A varianciák homogének a legtöbb vegyület esetében ($p > 0,05$). Munkám során ugyanazon a készüléken (az ebből adódó t_G , T , pH hibája közel állandó) és ugyanazokkal az eluensekkel (a pumpák keverték az előre elkészített 2 literes üvegekből, az ebből adódó pH hiba közel állandó) végeztem a méréseket.*

- A normális eloszlás igazolását a Shapiro-Wilk teszttel végeztem el. A vizsgálat során azt kaptam, hogy egyes adatok normális eloszlása megkérdőjelezhető ($p < 0,05$), ezért nem normális, viszont folytonos eloszlást feltételezve elvégeztem ezen pontokra a nem-paraméteres Kruskal-Wallis ANOVA-t is. A Kruskal-Wallis ANOVA nem feltételez normális eloszlást, viszont az adatok függetlensége és a varianciák homogenitásának ugyanúgy teljesülnie kell. A Kruskal-Wallis ANOVA során ugyanazt az eredményt kaptam (a hipotézis elfogadható, miszerint az egyes faktor kiterjesztésének nincs hatása az adott vegyület retenciós idejének becslési pontosságára), mint az egy-faktoros ANOVA-nál. Egyedül a trimethoprim komponens hőmérséklet kiterjesztés vizsgálatánál (a hőmérséklet kiterjesztése hatással van-e retenciós idők becslésére) nem teljesült a nullhipotézis, miszerint a varianciák homogének. Ezt az esetet megvizsgáltam a Friedman ANOVA-val, aminél nem előfeltétel a varianciák homogenitása sem.

A kapott eredményekből, ahol megkérdőjelezhető az egy-faktoros ANOVA alkalmazhatósága, ott más típusú varianciaanalízissel is ugyanazt a végeredményt kaptam. Tehát a dolgozatban bemutatott ANOVA eredmények nagy valószínűséggel valós képet mutatnak, a kezdeti feltételezésem helyes volt.

Gödöllő, 2023.01.27.



Rác Norbert

Jelölt

- [1] R. Kormány, I. Molnár, H.-J. Rieger, J. Pharm. Biomed. Anal., 2013, 80, 79–88.
- [2] R. Kormány et al., J. Pharm. Biomed. Anal., 2014, 89, 67–75.
- [3] N. Rác, R. Kormány, Chromatographia, 2018, 81, 585–594.
- [4] N. Rác, J. Nagy, W. Jiang, T. Veress, J. Chromatogr. Sci., 2018, 57, 230–237.