

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Gegenstand der Chemometrik</b>	<b>1</b>
1.1	Entwicklung der Chemometrik	1
1.2	Gegenstand und Aufgabenbereiche der Chemometrik	2
1.3	Prinzipien und Teilgebiete der Chemometrik	5
1.4	Chemometrik im Internet	8
	Literatur	9
<b>2</b>	<b>Chemische Messungen</b>	<b>12</b>
2.1	Allgemeine Grundlagen	12
2.2	Dimensionalität chemischer Messungen	16
2.3	Wahrscheinlichkeitstheoretische und statistische Grundlagen	20
2.3.1	Messwerthäufigkeiten und -verteilungen	20
2.3.2	Höherdimensionale Verteilungen von Zufallsgrößen	26
2.3.3	Bedingte Wahrscheinlichkeiten und Verteilungen	27
2.3.4	Statistische Parameter: Mittelwerte und Streuungsmaße	29
2.3.5	Vertrauensbereiche	32
2.4	Abhängigkeitsuntersuchungen: Korrelation und Regression	33
2.4.1	Korrelationsanalyse	35
2.4.2	Regressionsanalyse	37
2.4.3	Fehlergrößen der linearen Regression	40
2.4.4	Robuste Regression	44
2.5	Informationstheoretische Grundlagen	45
2.5.1	Informationsgehalt von Messergebnissen	47
2.5.2	Quantitative Messergebnisse unter dem Aspekt der Präzision	52
2.5.3	Quantitative Messergebnisse unter dem Aspekt der Richtigkeit	56
2.5.4	Signal-Rausch-Verhältnis und Informationsgehalt	59
2.5.5	Die Informationsmenge von Mehrkomponentenanalysen	61
2.5.6	Redundanz von Analyseergebnissen	64
2.5.7	Informationsmenge und Informationsleistung von zeit- und orts aufgelösten chemischen Informationen	68
2.6	Systemtheoretische Aspekte chemischer Messungen	70

2.6.1	Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses	72
2.6.2	Verbesserung der Signalauflösung	74
2.7	Von der univariaten zur multivariaten Statistik	77
	Literatur	78
<b>3</b>	<b>Multivariate Datenanalyse</b>	<b>81</b>
3.1	Daten und Datenräume	83
3.1.1	Variablentypen	83
3.1.2	Datenmatrix	84
3.1.3	Lineare Modelle	89
3.1.4	Varianz-Kovarianz- und Korrelationsmatrix	89
3.1.5	Multivariate Distanzmaße	92
3.1.6	Vorgehensweise bei der Datenanalyse	96
3.2	Datenerkundung und -aufbereitung	98
3.2.1	Explorative Datenanalyse und Datenvisualisierung	98
3.2.2	Datenaufbereitung	103
3.3	Faktoren- und Hauptkomponentenanalyse	105
3.4	Clusteranalyse	111
3.4.1	Hierarchische Clusteranalyse	112
3.4.2	Nichthierarchische Verfahren	116
3.5	Klassifikationsverfahren	117
3.5.1	Lineare Diskriminanzanalyse	121
3.5.2	Methode der $k$ -nächsten Nachbarn	123
3.5.3	Weitere Methoden	124
3.6	Regression und Modellierung	125
3.6.1	Multiple lineare Regression	126
3.6.2	Hauptkomponentenregression	127
3.7	Softwareaspekte	128
3.7.1	Datenformate	128
3.7.2	Datenanalysesoftware	128
	Literatur	131
<b>4</b>	<b>Probennahme</b>	<b>133</b>
4.1	Repräsentanz von Proben	133
4.2	Inhomogene Untersuchungsobjekte	136
4.3	Repräsentative Probenanzahl	138
4.4	Experimentelle Ermittlung des Probennahmefehlers	140
4.5	Zeitabhängige Probennahme	146
4.6	Geostatistische Probennahmemodelle	151
	Literatur	153

<b>5</b>	<b>Planung und Optimierung chemischer Experimente und Messungen</b>	<b>156</b>
5.1	Statistische Versuchsplanung	156
5.1.1	Vollständige Versuchspläne	157
5.1.2	Unvollständige Versuchspläne	159
5.1.3	Auswertung von Faktorplänen	162
5.1.4	Anwendungen der SVP	163
5.2	Optimierungsverfahren	166
5.2.1	Response-Surface-Methode	168
5.2.2	Box-Wilson-Optimierung	168
5.2.3	Sequentielle Simplex-Optimierung	169
5.2.4	Globale Optimierungsverfahren	171
	Literatur	175
<b>6</b>	<b>Signal- und Bildverarbeitung</b>	<b>176</b>
6.1	Charakteristik von Signalen	176
6.1.1	Signalentstehung	176
6.1.2	Signaltypen	177
6.1.3	Prinzipien der Signalverarbeitung	179
6.2	Fourier-Transformation	180
6.2.1	Fourier-Integral	180
6.2.2	Eigenschaften von FT-Paaren	183
6.2.3	Diskrete Fourier-Transformation	185
6.2.4	Zweidimensionale Fourier-Transformation	187
6.2.5	Wichtige Fourier-Korrespondenzen	188
6.2.6	Faltung und Faltungstheorem	191
6.3	Elemente der Systemtheorie	195
6.3.1	Wechselwirkung von Signalen mit Systemen	195
6.3.2	Systemanalyse	198
6.3.3	Signalbegrenzung und Frequenzauflösung	199
6.3.4	Diskretisierung und Frequenzbereich	201
6.4	Digitales Filtern/Konvolution	204
6.4.1	Signalglättung	205
6.4.2	Signalkorrekturen	209
6.4.3	Gradientenverstärkung	210
6.4.4	Dekonvolution	213
6.5	Korrelation und Leistungsspektren	216
6.5.1	Autokorrelation und spektrale Leistungsdichte	216
6.5.2	Kreuzkorrelation und spektrale Kreuzleistungsdichte	218
6.5.3	Systemcharakterisierung durch Rauschen	219
6.6	Wavelets: ein neues Werkzeug für die Signalanalyse	220
6.6.1	Charakterisierung instationärer Signale	220
6.6.2	Was ist Wavelet-Analyse?	224

6.6.3	Diskrete Wavelet-Transformation (DWT) . . . . .	227
6.6.4	Anwendungen . . . . .	229
6.7	Datenreduktion und Interpolation . . . . .	230
6.7.1	Datenreduktion . . . . .	230
6.7.2	Bildsegmentierung . . . . .	233
6.7.3	Interpolation . . . . .	234
6.7.4	Interpolation mit Splinefunktionen . . . . .	236
6.8	Bilddarstellung . . . . .	238
6.8.1	Bilder als Datensätze . . . . .	238
6.8.2	Histogramme . . . . .	239
6.8.3	Profile und Konturen . . . . .	241
	Literatur . . . . .	241
<b>7</b>	<b>Kalibration</b> . . . . .	<b>243</b>
7.1	Analytische Informationen und Messergebnisse . . . . .	243
7.2	Kalibration quantitativer Analysenverfahren . . . . .	247
7.3	Experimentelle Kalibration . . . . .	249
7.3.1	Verfahren der linearen Kalibration . . . . .	251
7.3.2	Fehlergrößen der linearen Kalibration und der Auswertung . . . . .	253
7.3.3	Validierung empirischer Kalibrationen . . . . .	255
7.4	Kalibration durch Standardaddition . . . . .	259
7.5	Dreidimensionale Kalibration . . . . .	260
7.6	Nichtlineare Kalibration . . . . .	263
7.7	Mehrkomponenten-Kalibration . . . . .	266
7.8	Multivariate Kalibration . . . . .	268
7.8.1	Klassische Kalibration . . . . .	270
7.8.2	Inverse Kalibration . . . . .	273
7.9	Kalibration mit Künstlichen Neuronalen Netzen . . . . .	279
7.9.1	Künstliche Neuronale Netze . . . . .	280
7.9.2	Mehrschichtige Perceptrons (MLP) . . . . .	281
7.9.3	Radial Basis Function (RBF)-Netze . . . . .	284
	Literatur . . . . .	286
<b>8</b>	<b>Auswertung analytischer Messungen</b> . . . . .	<b>289</b>
8.1	Auswertung qualitativer Analysen und Identifikationen . . . . .	289
8.2	Auswertung quantitativer Zusammenhänge mit absoluten und definitiven Analysenverfahren . . . . .	292
8.3	Auswertung relativer Analysenverfahren nach experimenteller Kalibration . . . . .	294
8.4	Statistische Bewertung von Analyseergebnissen . . . . .	295

---

8.4.1	Signifikanzprüfungen . . . . .	295
8.4.2	Tests für Messreihen . . . . .	297
8.4.3	Vergleich von Messreihen . . . . .	298
8.4.4	Vergleich mehrerer Mittelwerte: Einfache Varianzanalyse . . .	300
8.4.5	Mehrfache Varianzanalyse . . . . .	304
8.4.6	Vertrauensbereiche . . . . .	307
8.4.7	Mess- und Ergebnisunsicherheit . . . . .	311
8.5	Selektivität und Spezifität . . . . .	313
8.6	Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenze . . . . .	318
	Literatur . . . . .	323
<b>9</b>	<b>Klassifikation und Interpretation von Mess- und Analysendaten . . . . .</b>	<b>324</b>
9.1	Anwendungsgebiete . . . . .	324
9.1.1	Anwendungen nichtüberwachter Methoden . . . . .	326
9.1.2	Anwendung überwachter Methoden . . . . .	326
9.2	Anwendungsbeispiele der multivariaten Datenanalyse . . . . .	327
9.2.1	Lebensmittelanalytik . . . . .	327
9.2.2	Weinanalytik . . . . .	329
9.2.3	Chemische Industrie . . . . .	332
9.2.4	Klinische und forensische Analytik . . . . .	334
	Literatur . . . . .	335
<b>10</b>	<b>Spektrenauswertung . . . . .</b>	<b>337</b>
10.1	Bibliothekssuche und Spektrenbibliotheken . . . . .	338
10.1.1	Prinzipien . . . . .	338
10.1.2	Realisierung der Bibliothekssuche . . . . .	339
10.1.3	Methodische Aspekte der Bibliothekssuche . . . . .	341
10.2	Spektreninterpretation und Strukturermittlung . . . . .	344
10.2.1	Spektren-Struktur-Relationen . . . . .	344
10.2.2	Expertensysteme zur Strukturermittlung . . . . .	346
10.2.3	Lineare Lernmaschine (Entwicklung von Diskriminanzfiltern) .	348
10.2.4	Spektreninterpretation mit Neuronalen Netzen . . . . .	350
10.3	Spektrenresolution . . . . .	352
10.3.1	Spektrale Resolution einfacher Gemische . . . . .	353
10.3.2	Bandentrennung und Spektrensimulation . . . . .	356
10.4	Spektren-Eigenschafts-Korrelationen . . . . .	360
	Literatur . . . . .	362

**11 Qualitätssicherung** . . . . . 365

    11.1 Grundlagen und Prinzipien . . . . . 365

    11.2 Validierung von Analysenverfahren . . . . . 368

    11.3 Statistische Qualitätskontrolle . . . . . 369

        11.3.1 Statistische Qualitätskriterien . . . . . 370

        11.3.2 Attributprüfung . . . . . 372

        11.3.3 Sequenzanalyse . . . . . 372

        11.3.4 Qualitätsregelkarten . . . . . 374

        11.3.5 Ringversuche . . . . . 379

    11.4 Labor-Informationsmanagement-Systeme (LIMS) . . . . . 383

    11.5 Qualitätssicherung von Software . . . . . 385

        11.5.1 Definition und Aufgabenstellung von Software . . . . . 385

        11.5.2 Qualitätsmerkmale von Software . . . . . 386

        11.5.3 Qualitätssicherung bei der Softwareentwicklung . . . . . 387

        11.5.4 Softwarevalidierung . . . . . 388

    Literatur . . . . . 389

Sachverzeichnis . . . . . 393

Chemometrik

Grundlagen und Anwendungen

Danzer, K.; Hobert, H.; Fischbacher, C.; Jagemann, K.-U.

2001, XIV, 408 S., Hardcover

ISBN: 978-3-540-41291-5