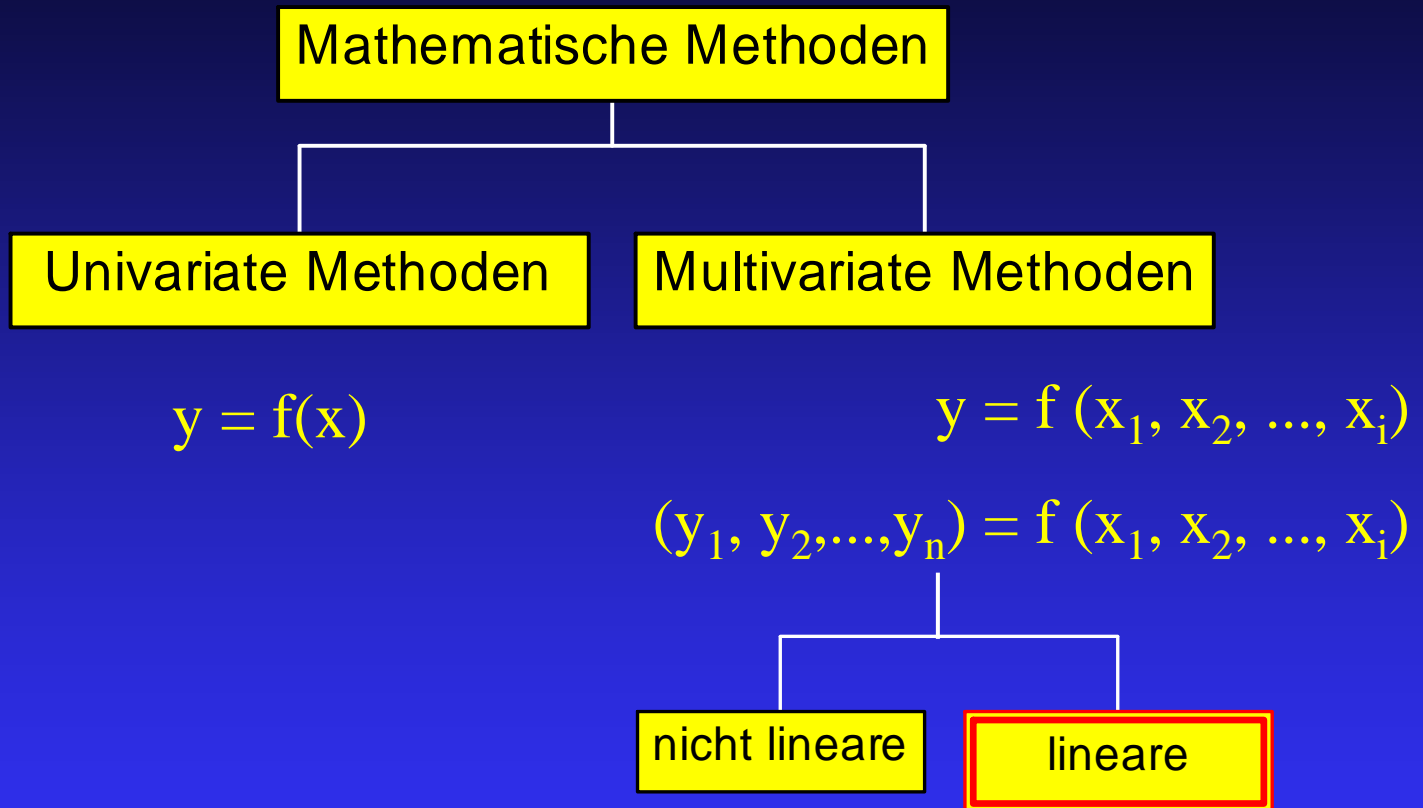


Chemometrie II

Multivariate Datenanalyse in der Chemie



Anwendungsfelder:

- z. B. in der Analytischen Chemie
- Auswertung von chemischen Messungen
(Chromatogramme, Spektren ...)

→ Qualitätskontrolle bei Lebensmitteln und
Futtermitteln

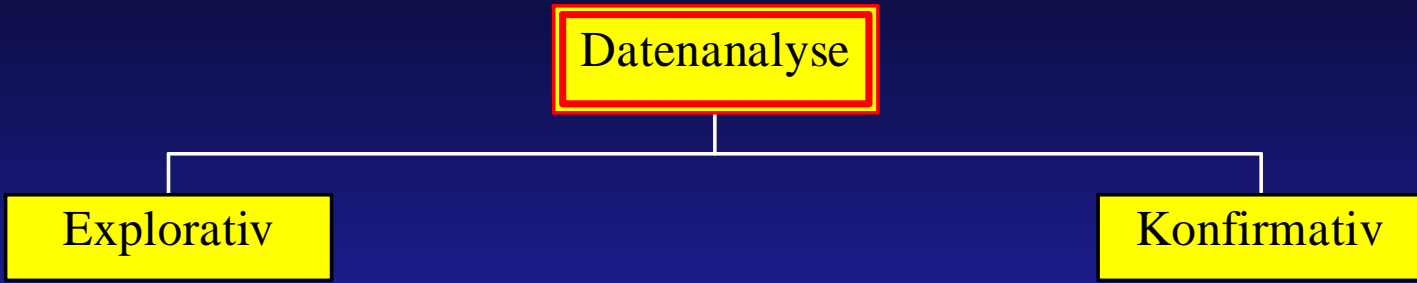
Protein-, Stärke-, Fett-, Kohlenhydrat-
gehalt

→ Qualitätskontrolle von Treibstoffen
Benzin, Diesel

→ Umweltanalytik


→ Analytik in der Pharmazie

→ Sensoren mit chemometrischer Auswertung
der Meßdaten
(Biosensoren, Array-Detektoren)



- **Strukturierung**
(Wertebereich, Verteilung und Kenngrößen von Merkmalen)

- **Möglichkeit der Datenreduktion**

Modell

(Methode)

- **Mathemat. Statistik**
(Irrtumswahrscheinlichkeit, Konfidenz)

- **Modellbildung**
(Modellparameter schätzen, Modellbestätigung)

Multivariate Methoden

Qualitative Methoden

Unüberwachtes Lernen
(unsupervised learning)

- Graphische Verfahren
- Clusteranalyse
- Hauptkomponentenanalyse (PCA Principal Component Analysis)

Überwachtes Lernen
(supervised learning)

- Diskriminanzanalyse
- SIMCA
- Methode der k-nächsten Nachbarn
- Neuronale Netze

Quantitative Methoden

- CLS (K-Matrix)
(Classical Least Squares)
- ILS o. MLR (P-Matrix)
(Inverse Least Squares,
Multiple Linear
Regression)
- PCR (Principal
Component Regression)
- PLS (Partial
Least Squares)