

Inhalt

Vorwort — VII

1	Grundlagen der Chemometrie — 1
1.1	Prinzipien und Disziplinen — 1
1.2	Anwendungsbereiche — 1
1.3	Realisierung — 2
1.4	Zielsetzung des Buchs — 4
2	Statistische Parameter und Prüfverfahren — 7
2.1	Einführung — 7
2.2	Deskriptive Statistik — 7
2.2.1	Erstes statistisches Moment — 8
2.2.2	Zweites statistisches Moment — 10
2.2.3	Drittes statistisches Moment — 13
2.2.4	Viertes statistisches Moment — 13
2.3	Prüfmethoden — 15
2.3.1	Prüfung der Homogenität — 15
2.3.2	Prüfung der Verteilung der Stichprobe — 16
2.3.3	Trendtest — 18
2.3.4	Zusammenfassung — 19
2.4	Vergleich statistischer Parameter — 19
2.4.1	Vergleich von Mittelwerten — 19
2.4.2	Vergleich von Varianzen — 21
2.5	Literatur — 22
2.6	Übungen — 22
2.7	Softwareanwendung — 22
2.7.1	Einsatz MiniStat — 23
2.7.2	Umsetzung in RStudio/R — 25
3	Versuchsplanung, Prozessoptimierung — 29
3.1	Einführung — 29
3.2	Statistische Versuchsplanung — 30
3.2.1	Grundlagen — 30
3.2.2	Aufstellung des Versuchsplans — 32
3.2.3	Auswertung des Versuchsplans — 34
3.2.4	Spezielle Aspekte — 36
3.2.5	Einsatzbereich und Grenzen — 41
3.3	Simplex-Optimierung — 42
3.3.1	Prinzip des Standard-Simplex — 42

3.3.2	Modifizierter Simplex — 43
3.3.3	Simplex-Limitierungen — 46
3.3.4	Vor- und Nachteile — 47
3.4	Response-Surface-Modelling (RSM) — 47
3.4.1	Prinzip — 47
3.4.2	Untersuchungsdesign — 48
3.4.3	Modellberechnung — 52
3.4.4	Modellinterpretation — 54
3.4.5	Varianzanalyse (ANOVA) — 56
3.4.6	Vor- und Nachteile — 57
3.5	Literatur — 58
3.6	Übungen — 58
3.7	Softwareanwendung — 59
3.7.1	Einsatz VPlan, SimSoft, RSMSOft — 60
3.7.2	Umsetzung in RStudio/R — 66
4	Univariate Regression, Kalibration — 71
4.1	Einleitung — 71
4.2	Regression — 72
4.2.1	Modelldesign — 72
4.2.2	Lineare Regression — 73
4.2.3	Nichtlineare Regression — 79
4.2.4	Robuste Regression — 81
4.2.5	Prüfung der Adäquatheit des Regressionsmodells — 83
4.2.6	Prüfung des Achsenabschnitts — 87
4.2.7	Nachweis-, Bestimmungsgrenze — 87
4.2.8	Behandlung von Ausnahmen — 88
4.3	Kalibrationsmethoden — 89
4.3.1	ϑ -Kalibration — 89
4.3.2	σ -Kalibration — 90
4.3.3	δ -Kalibration (Standard-Addition) — 91
4.4	Literatur — 92
4.5	Übungen — 92
4.6	Softwareanwendung — 94
4.6.1	Einsatz Calib, SimFit — 95
4.6.2	Umsetzung in RStudio/R — 99
5	Analyse von Messreihen — 103
5.1	Digitales Filtern, Glätten — 103
5.1.1	Grundlagen — 103
5.1.2	Savitzky-Golay-Glättung — 103
5.1.3	Kalman-Filter — 106

5.2	Ableitung — 108
5.3	Autokorrelation — 109
5.3.1	Grundlagen — 109
5.3.2	Unkorreliertheit — 112
5.3.3	Periodizität — 112
5.3.4	Abfall — 113
5.3.5	Drift — 114
5.4	Fourier-Transformation — 114
5.4.1	Aufgabenstellung — 114
5.4.2	Numerische Grundlagen — 116
5.4.3	Signal-Filterung — 120
5.4.4	Faltung — 121
5.5	Literatur — 123
5.6	Übungen — 123
5.7	Softwareanwendung — 124
5.7.1	Einsatz DTrans — 124
5.7.2	Umsetzung in RStudio/R — 126
6	Signaldekonvolution — 129
6.1	Einführung — 129
6.2	Peakform-Analyse — 130
6.2.1	Wahl des Modells — 130
6.2.2	Wahl des Algorithmus — 131
6.2.3	Evaluierung — 132
6.3	Fourier-Dekonvolution — 135
6.3.1	Grundlagen — 135
6.3.2	Anwendung in der IR-Spektroskopie — 137
6.4	Maximum-Entropie-Dekonvolution — 138
6.4.1	Grundlagen — 138
6.4.2	Anwendung in der Spektroskopie — 142
6.5	Literatur — 142
6.6	Übungen — 143
6.7	Softwareanwendung — 143
6.7.1	Einsatz PeakCalc — 143
7	Mustererkennung, Clusteranalyse — 145
7.1	Einführung — 145
7.2	Grundlagen — 146
7.2.1	Graphische Repräsentation — 147
7.2.2	Konsistenzprüfung — 148
7.2.3	Zentrierung, Skalierung, Normierung — 148
7.2.4	Varianz-Kovarianz-Matrix — 150

7.3	Hauptkomponenten — 152
7.3.1	Hauptkomponentenanalyse (<i>principal component analysis</i>) — 153
7.3.2	Zahl signifikanter Hauptkomponenten — 159
7.3.3	Graphische Interpretation — 162
7.4	Mustererkennung — 164
7.4.1	Hierarchische Clusteranalyse — 165
7.4.2	Nicht-hierarchische Clusteranalyse — 171
7.5	Klassifizierung — 176
7.5.1	Methode der k nächsten Nachbarn — 178
7.5.2	SIMCA-Methode — 179
7.6	Literatur — 183
7.7	Übungen — 184
7.8	Softwareanwendung — 184
7.8.1	Einsatz Cluster — 185
7.8.2	Umsetzung in RStudio/R — 187
8	Multivariate Kalibration — 189
8.1	Einführung — 189
8.2	Klassische Kalibration — 191
8.2.1	Direkte Kalibration — 191
8.2.2	Indirekte Kalibration — 193
8.3	Inverse Kalibration — 196
8.3.1	P-Matrix-Verfahren — 197
8.3.2	PCR-Verfahren — 198
8.3.3	PLS-Verfahren — 200
8.4	Validierung der Kalibration — 200
8.4.1	Residuen und RSS-Wert — 201
8.4.2	Kreuzvalidierung und PRESS-Wert — 203
8.4.3	hat-Matrix — 204
8.4.4	Ausreißer — 205
8.5	Literatur — 208
8.6	Übungen — 208
8.7	Softwareanwendung — 209
8.7.1	Einsatz Unscambler® — 209
8.7.2	Umsetzung in RStudio/R — 209
9	Softwareanwendung — 211
9.1	Kommerzielle Statistikpakete — 211
9.2	Spezielle Softwarepakete — 211
9.3	RStudio/R — 212
9.4	Literatur — 213

A Anhang — 215

Abkürzungen — 225

Stichwortverzeichnis — 227