

# Chemometrische Strategien in der Analytik

Mit 89 Bildern und 18 Tabellen



VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie · Leipzig

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>Verzeichnis durchgängig verwendeter Symbole und Formelzeichen</b> . . . . .	10
<b>1. Aufgabenstellungen analytischen Arbeitens</b> . . . . .	11
1.1. Das Untersuchungsobjekt . . . . .	11
1.2. Die Analyse . . . . .	13
<i>Literatur</i> . . . . .	18
<b>2. Bewertungsmethoden</b> . . . . .	19
2.1. Grundlagen der mathematischen Statistik . . . . .	19
2.1.1. Zufallsstreuung . . . . .	19
2.1.2. Statistische Prüfverfahren . . . . .	25
2.2. Grundlagen der Informationstheorie [2.8] . . . . .	27
2.2.1. Informationsmaße . . . . .	27
2.2.2. Informationsgewinn bei analytischem Arbeiten . . . . .	29
2.2.3. Leistungs- und Rentabilitätsgrößen . . . . .	35
2.3. Möglichkeiten und Grenzen . . . . .	39
<i>Literatur</i> . . . . .	40
<b>3. Auswertung von Analysensignalen</b> . . . . .	42
3.1. Intensitätsmessung am Analysensignal . . . . .	42
3.2. Intensitätsmessung im Signalensemble . . . . .	49
3.3. Meßstrategien . . . . .	55
3.4. Störeinflüsse . . . . .	59
<i>Literatur</i> . . . . .	61
<b>4. Experimentelle Kalibrierung</b> . . . . .	62
4.1. Lineare Kalibrierfunktionen . . . . .	62
4.1.1. Verfahren mit $s_y = \text{const.}$ . . . . .	62
4.1.2. Verfahren mit $s_y/y = \text{const.}$ . . . . .	72

4.2.	Nichtlineare Kalibrierfunktionen [4.5], [4.6]	74
4.2.1.	Polynomgleichung	74
4.2.2.	Lineare Näherungen	78
4.2.3.	Methodendiskussion	79
4.3.	Strategien	81
	<i>Literatur</i>	84
<b>5.</b>	<b>Verbesserung der Meßparameter</b>	<b>85</b>
5.1.	Präzisierung der Intensitätsmessung	85
5.1.1.	Abänderung des Meßvorganges [5.1]	86
5.1.2.	Verringerung der Meßwertstandardabweichung	90
5.1.3.	Einsatz von Hilfsreaktionen	93
5.2.	Verbesserung der Auflösung	95
5.2.1.	Rechnerische Signalumformung	96
5.2.2.	Einsatz von Hilfsreaktionen [5.11]	99
5.3.	Arbeitsstrategien	100
	<i>Literatur</i>	102
<b>6.</b>	<b>Die Optimierung der Meßparameter</b>	<b>103</b>
6.1.	Faktorenauswahl	103
6.2.	Statistische Optimierung	105
6.3.	Optimierungsstrategien	112
	<i>Literatur</i>	113
<b>7.</b>	<b>Kombination von Bestimmungs- und Trennverfahren</b>	<b>114</b>
7.1.	Spezifität und Selektivität	114
7.2.	Analysenzeit	117
7.3.	Präzision und Gehaltsbereiche	121
7.4.	Strategien für spezielle Problemlösungen	126
7.4.1.	Verfahrensauswahl durch Diskussion von Leistungskriterien	127
7.4.2.	Verfahrensdiskussion mit Hilfe der Zielbaumethode	130
	<i>Literatur</i>	135
<b>8.</b>	<b>Die Analysenprobe</b>	<b>136</b>
8.1.	Probenahme	136
8.2.	Probenahmefrequenz [8.2], [8.3]	139
	<i>Literatur</i>	144

<b>9. Methoden der multivariaten Datenauswertung</b> . . . . .	145
9.1. Überblick . . . . .	145
9.2. Display-Methoden . . . . .	155
9.2.1. Hauptkomponentendarstellung . . . . .	156
9.2.2. Nonlinear Mapping . . . . .	162
9.3. Clusteranalyse . . . . .	164
9.3.1. Hierarchische Clusterverfahren . . . . .	165
9.3.1.1. Agglomerative Algorithmen . . . . .	165
9.3.1.2. Divisive Algorithmen . . . . .	174
9.3.2. Nichthierarchische Verfahren . . . . .	178
9.3.2.1. Optimierende Clusterung . . . . .	179
9.3.2.2. Potentialclusterung . . . . .	184
9.3.3. Clusteranalyse und Display-Verfahren . . . . .	185
9.4. Multiple lineare Regression . . . . .	186
<i>Literatur</i> . . . . .	192
<b>10. Organisationsprobleme</b> . . . . .	194
10.1. Das Laboratorium als Bedienungssystem . . . . .	194
10.2. Kontrolle von Analyseergebnissen . . . . .	203
10.3. Qualitätskontrolle . . . . .	206
10.4. Zum Einsatz von Analysengeräten . . . . .	208
<i>Literatur</i> . . . . .	211
<b>Anhang 1: Statistische Tabellen</b> . . . . .	213
<b>Anhang 2: Datensätze</b> . . . . .	217
<b>Anhang 3: Programmlisten</b> . . . . .	227
<b>Sachwörterverzeichnis</b> . . . . .	238