

Inhaltsverzeichnis

1 Was ist Chemometrie? 1

- 1.1 Das computerunterstützte Labor 3
- 1.2 Statistik und Dateninterpretation 11
- 1.3 Computerunterstützte Informationssysteme/
Künstliche Intelligenz 12
- 1.4 Literatur 13

2 Statistische Grundlagen 15

- 2.1 Beschreibende Statistik 15
- 2.2 Statistische Prüfverfahren 29
- 2.3 Varianzanalyse 48
- 2.4 Literatur 55

3 Signalverarbeitung und Zeitreihenanalyse 57

- 3.1 Signalverarbeitung 57
- 3.2 Analyse von Zeitreihen 80
- 3.3 Literatur 87

4 Versuchsplanung und Optimierung 89

- 4.1 Zielgrößen und Einflußgrößen 92
- 4.2 Versuchspläne und deren quantitative Auswertung 100
 - 4.2.1 Grundsätze 100
 - 4.2.2 Zweistufige Pläne: Screening Designs 103
 - 4.2.3 Dreistufige Pläne: Response Surface Designs 113
- 4.3 Sequentielle Optimierung: Simplexverfahren 127
- 4.4 Literatur 134

5 Mustererkennung und Klassifizierung 135

- 5.1 Datenvorverarbeitung 137
- 5.2 Unüberwachtes Lernen 141
 - 5.2.1 Faktorielle Methoden 141
 - 5.2.2 Clusteranalyse 169
 - 5.2.3 Graphische Verfahren 180
- 5.3 Überwachtes Lernen 183
 - 5.3.1 Lineare Lernmaschine 183
 - 5.3.2 Diskriminanzanalyse 185
 - 5.3.3 Methode der k -nächsten Nachbarn 191
 - 5.3.4 SIMCA 192
- 5.4 Literatur 195

6 Modellierung 197

- 6.1 Einfache lineare Regression 198
- 6.2 Multiple lineare Regression 217
 - 6.2.1 Kleinste-Quadrate-Regression 217
 - 6.2.2 Verzerrte Parameterschätzungen: PCR und PLS 222
 - 6.2.3 Anwendungen zur Mehrkomponentenanalyse 226
 - 6.2.4 Regressionsdiagnostik 235
- 6.3 Nichtlineare Methoden 245
 - 6.3.1 Nichtlineare Regression 245
 - 6.3.2 Nichtparametrische Methoden 250
- 6.4 Literatur 256

7 Analytische Datenbanken 257

- 7.1 Repräsentation analytischer Informationen 258
- 7.2 Bibliothekssuchverfahren 268
- 7.3 Simulation von Spektren 275
- 7.4 Literatur 276

8 Wissensverarbeitung und Soft-Computing 277

- 8.1 Künstliche Intelligenz und Expertensysteme 277
- 8.2 Neuronale Netze 287
- 8.3 Fuzzy Theorie 304
- 8.4 Genetische Algorithmen 314
- 8.5 Literatur 319

9 Qualitätssicherung und Gute Laborpraxis 321

- 9.1 Validierung und Qualitätskontrolle 322
- 9.2 Akkreditierung und Gute Laborpraxis 327
- 9.3 Literatur 328

Anhang 329

- Statistische Verteilungen 329
- Digitale Filter 335
- Versuchspläne 337
- Lineare Algebra 342
- Software 346
- Englische Fachausdrücke 347

Sachregister 351