

1. Record Nr.	UNINA9910830277203321
Autore	Kessler Waltraud
Titolo	Multivariate Datenanalyse : fur die Pharma-, Bio- und Prozessanalytik : ein lehrbuch / / Waltraud Kessler
Pubbl/distr/stampa	Weinheim : , : Wiley-VSH Verlag, , 2007
ISBN	1-280-85447-2 9786610854479 3-527-61003-0 3-527-60966-0
Descrizione fisica	1 online resource (343 p.)
Disciplina	519.535 519.5352
Soggetti	Multivariate analysis
Lingua di pubblicazione	Tedesco
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	Description based upon print version of record.
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references and index.
Nota di contenuto	Multivariate Datenanalyse; Inhaltsverzeichnis; Vorwort; 1 Einfuhrung in die multivariate Datenanalyse; 1.1 Was ist multivariate Datenanalyse?; 1.2 Datensatze in der multivariaten Datenanalyse; 1.3 Ziele der multivariaten Datenanalyse; 1.3.1 Einordnen, Klassifizierung der Daten; 1.3.2 Multivariate Regressionsverfahren; 1.3.3 Moglichkeiten der multivariaten Verfahren; 1.4 Prüfen auf Normalverteilung; 1.4.1 Wahrscheinlichkeitsplots; 1.4.2 Box-Plots; 1.5 Finden von Zusammenhangen; 1.5.1 Korrelationsanalyse; 1.5.2 Bivariate Datendarstellung - Streudiagramme; Literatur; 2 Hauptkomponentenanalyse 2.1 Geschichte der Hauptkomponentenanalyse 2.2 Bestimmen der Hauptkomponenten; 2.2.1 Prinzip der Hauptkomponentenanalyse; 2.2.2 Was macht die Hauptkomponentenanalyse?; 2.2.3 Grafische Erklärung der Hauptkomponenten; 2.2.4 Bedeutung der Faktorenwerte und Faktorenladungen (Scores und Loadings); 2.2.5 Erklärte Varianz pro Hauptkomponente; 2.3 Mathematisches Modell der Hauptkomponentenanalyse; 2.3.1 Mittenzentrierung; 2.3.2 PCA-Gleichung; 2.3.3 Eigenwert- und Eigenvektorenberechnung; 2.3.4 Berechnung der Hauptkomponenten mit dem NIPALS-Algorithmus;

2.3.5 Rechnen mit Scores und Loadings
2.4 PCA für drei Dimensionen 2.4.1 Bedeutung von Bi-Plots; 2.4.2 Grafische Darstellung der Variablenkorrelationen zu den Hauptkomponenten (Korrelation-Loadings-Plots); 2.5 PCA für viele Dimensionen: Gaschromatographische Daten; 2.6 Standardisierung der Messdaten; 2.7 PCA für viele Dimensionen: Spektren; 2.7.1 Auswertung des VIS-Bereichs (500-800 nm); 2.7.2 Auswertung des NIR-Bereichs (1100-2100 nm); 2.8 Wegweiser zur PCA bei der explorativen Datenanalyse; Literatur; 3 Multivariate Regressionsmethoden; 3.1 Klassische und inverse Kalibrierung; 3.2 Univariate lineare Regression 3.3 Maßzahlen zur Überprüfung des Kalibriermodells (Fehlergrößen bei der Kalibrierung) 3.3.1 Standardfehler der Kalibrierung; 3.3.2 Mittlerer Fehler - RMSE; 3.3.3 Standardabweichung der Residuen - SE; 3.3.4 Korrelation und Bestimmtheitsmaß; 3.4 Signifikanz und Interpretation der Regressionskoeffizienten; 3.5 Grafische Überprüfung des Kalibriermodells; 3.6 Multiple lineare Regression (MLR); 3.7 Beispiel für MLR - Auswertung eines Versuchsplans; 3.8 Hauptkomponentenregression (Principal Component Regression - PCR); 3.8.1 Beispiel zur PCR - Kalibrierung mit NIR-Spektren 3.8.2 Bestimmen des optimalen PCR-Modells 3.8.3 Validierung mit unabhängigem Testset; 3.9 Partial Least Square Regression (PLS-Regression); 3.9.1 Geschichte der PLS; 3.10 PLS-Regression für eine Y-Variable (PLS1); 3.10.1 Berechnung der PLS1-Komponenten; 3.10.2 Interpretation der P-Loadings und W-Loadings bei der PLS-Regression; 3.10.3 Beispiel zur PLS1 - Kalibrierung von NIR-Spektren; 3.10.4 Finden des optimalen PLS-Modells; 3.10.5 Validierung des PLS-Modells mit unabhängigem Testset; 3.10.6 Variablenselektion - Finden der optimalen X-Variablen 3.11 PLS-Regression für mehrere Y-Variablen (PLS2)

Sommario/riassunto

In vielen Fachgebieten, wie z. B. der Lebensmittelchemie, der pharmazeutischen oder biotechnologischen Industrie fallen immer mehr Daten an, die ausgewertet werden müssen. Klassische Verfahren gelangen hierbei schnell an ihre Grenzen. Die multivariate Datenanalyse beschäftigt sich mit Verfahren, mit denen man aus einer Fülle von Daten - wie z. B. Prozessdaten, Messdaten, Mikroarraydaten, Spektren - die wesentlichen, unabhängigen Informationen herausarbeiten kann. Es eröffnen sich somit ganz neue Möglichkeiten für eine effiziente und gleichzeitig umfangreiche Auswertung. Alle Methoden
