

**Kurztitel**

Multivariate Datenanalyse

**Thema bzw. Fragestellung:**

Einsatz der Multivariaten Datenanalyse bei der Auswertung analytisch oder spektroskopisch gewonnener Daten

**Zuordnung zu einem Forschungsschwerpunkt/Modul:**

Methodenforschung – Neue Prüfmethode

**Verantwortlicher Wissenschaftler/in:**

Dr. J. Norwig

**Abstract:**

In der klassischen Analytik ist es der Wunsch, ein Verfahren richtig, präzise, selektiv und robust für einen Vorhersagebereich zu entwickeln. Dazu werden in den meisten Fällen hochauflösende Methoden der Spektroskopie oder Chromatographie sowie eine Kopplung von beiden eingesetzt. Trotzdem gelingt es nicht immer, eine selektive Bande oder einen selektiven Peak zu ermitteln, anhand dessen sich eine bestimmte Eigenschaft vorhersagen lässt. In diesem Zusammenhang kann eine Multivariate Datenanalyse wertvolle Dienste leisten, z.B. um einen Fingerprint-Bereich auszuwerten. Dabei werden die zur Verfügung stehenden Daten, z.B. in Form von gesamten Spektren, ggf. nur dem Fingerprintbereich oder größeren Chromatogrammausschnitten, in ein mathematisches Modell überführt. Mit Hilfe der dabei angewandten Datenanalyse wird das Ziel verfolgt, bestimmte Zusammenhänge zu erkennen, diese zusammenzufassen und somit eine Reduktion der Daten zu generieren. Trotzdem sollte das Modell in der Lage sein, die Ausgangsdaten mit ausreichender Genauigkeit zu beschreiben. Darüber hinaus wird mit Hilfe von separaten Validierungsmustern versucht, ein Maß für die Vorhersagekraft des Modells zu finden.

Folgende Methoden stehen innerhalb der Software „The Unscrambler“ (Firma Camo, Norwegen) zur Verfügung:

Klassifizierung von Proben

PCA (Principal Component Analyses)

SIMCA (Soft Independent Modelling of Class Analogy)

Diskriminierende PLS (Partial Least Squares Regression)

Quantitative Bestimmung von Proben

MLR – Multilineare Regression

PCR – Principal Component Regression

PLS 1 und PLS 2 (Partial Least Squares Regression)

Die Methoden wurden eingesetzt bei der Klassifizierung bestimmter Substanzmuster, der Unterscheidung von pasteurisiertem und unbehandeltem Eiklar und der Ermittlung der Nachweisgrenze in einem Analysenverfahren.

**Vorgesehene Laufzeit:**

fortwährend bei Bedarf

**Kooperationen:**

PAT (Process Analytical Technologies)-Arbeitsgruppe des BfArMs, Universität Bonn (2004)