



---

## KEMOMETRI

KAK 060

### Chemometrics

**Antal poäng:** 5.0. **Valfri för:** K4Bi, K4Lä. **Kursansvarig:** Karl-Gustav Wahlund. Karl-Gustav.Wahlund@teknik.lth.se **Rekommenderade förkunskaper:** Linjär algebra och Matematisk statistik **Prestationsbedömning:** tentamen med datorstöd. **Övrigt:** Antalet kursdeltagare är begränsat.

### Målbeskrivning

Kursen avser att ge färdigheter i multivariata metoder, hur de fungerar och hur de används.

### Innehåll

Kursen är mera praktiskt inriktad än teoretiskt. Detta märks på datorövningarna, där tyngdpunkten läggs på praktisk problemlösning med hjälp av kommersiella datorprogram: Modde och Unscrambler.

Försöksplanering. I försöksplaneringsdelen behandlas regressionsmetoder som kan användas vid till exempel processmodellering, utbytesoptimering av synteser och optimering av analytiska separationer. Denna typ av empirisk modellering baseras på experiment planerade i faktorförsök.

Multivariat analys och kalibrering. I den multivariata delen diskuteras bl a flerkanaliga givare, t ex spektrofotometrar, där många våglängder mäts. För att maximera informationsuttaget ur mångkanaliga givare, introduceras några regressionsverktyg: PCA-Principal Component Analysis, PLS - Partial Least Squares.

Laborationer och övningar är av blandad karaktär och fokuserar på såväl småskalig som storskalig kemi. I en av laborationerna väljs bland projekt som är något större i omfattning. Dessa projekt är oftast tillämpningar, men de kan också vara teoretiskt orienterade och med Matlab kan de bakomliggande algoritmerna detaljstuderas. Kalibrering av spektroskopiska on-line-givare för processanalys, där givaren placeras direkt i reaktionskärlet för mätning under processens gång, studeras också, även laborativt.

Dator-instrumentkopplingar diskuteras liksom kvalitetsaspekter. Principer och teori för mätmetoder baserade på provtagning följt av provbearbetning och separation/reaktion (t ex kromatografi) tas upp i andra kurser, men multivariat kalibrering kan tillämpas med framgång även för dessa typer av analys och exempel på detta studeras.

## Litteratur

Esbensen K., Schönkopf, S. och Midtgaard, T., Multivariate Analysis in Practice, Camo A/S 1996. Kompendium. Laborationskompendier. Martens, H. och Næs, T.: Multivariate Calibration, Wiley 1989. Överkursbok för den intresserade. Täcker mycket stora delar av kalibreringsdelen och har hög teoretisk nivå. Bra som uppslagsbok.

---