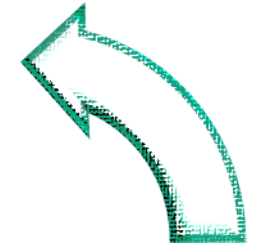
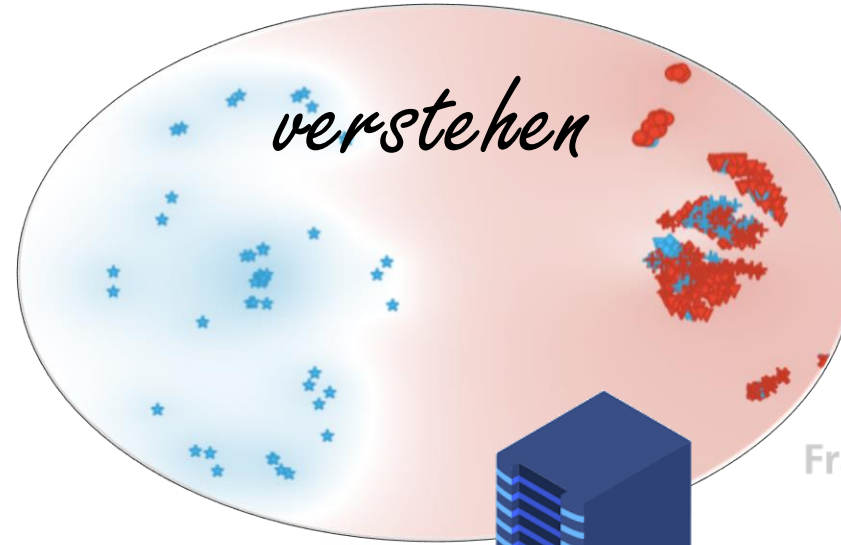
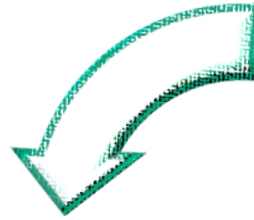
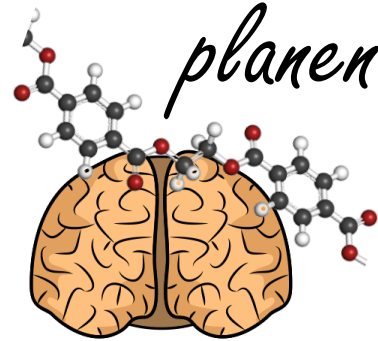
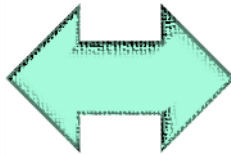


Manche Probleme sind „kompliziert“: Mehrwert der Analytik durch Chemometrie



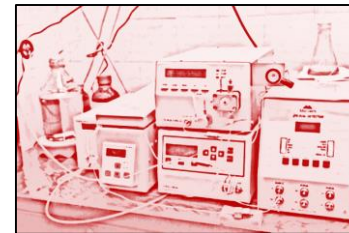
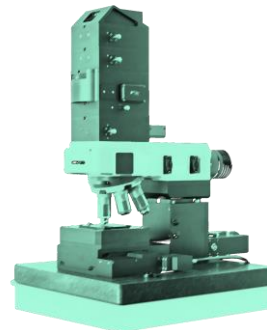
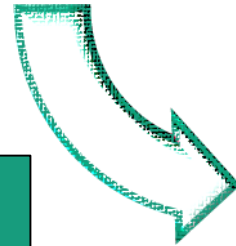
Fraunhofer
analytics
understand materials



Partner

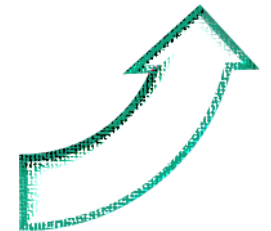
Fraunhofer *analytics*:

*Planen – Analysieren –
Zusammenführen - Verstehen*

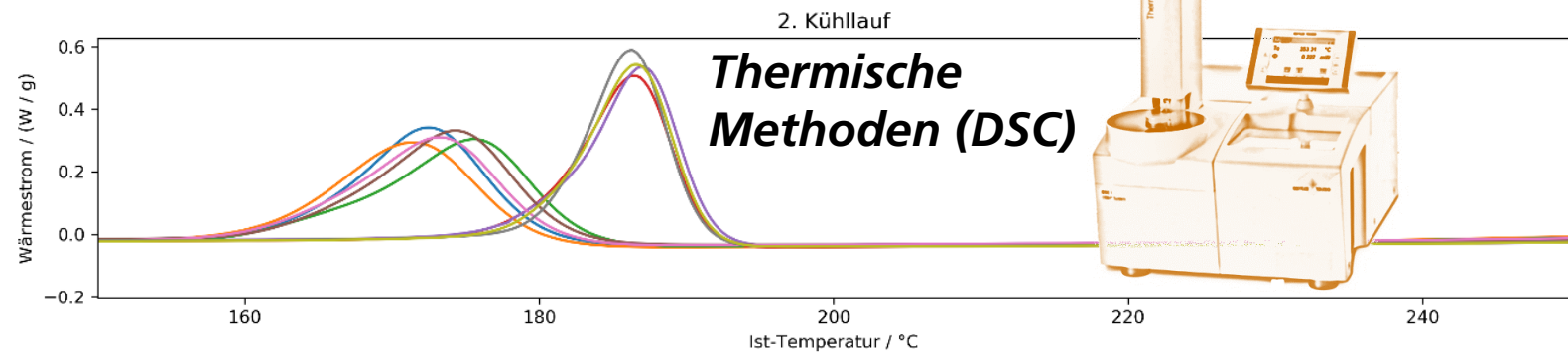
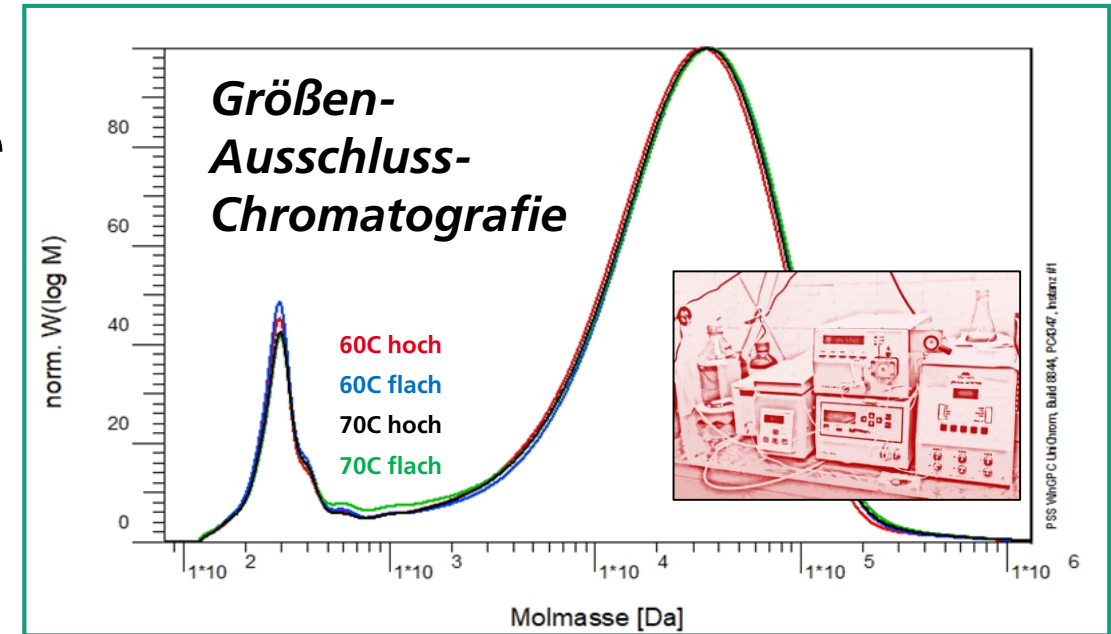
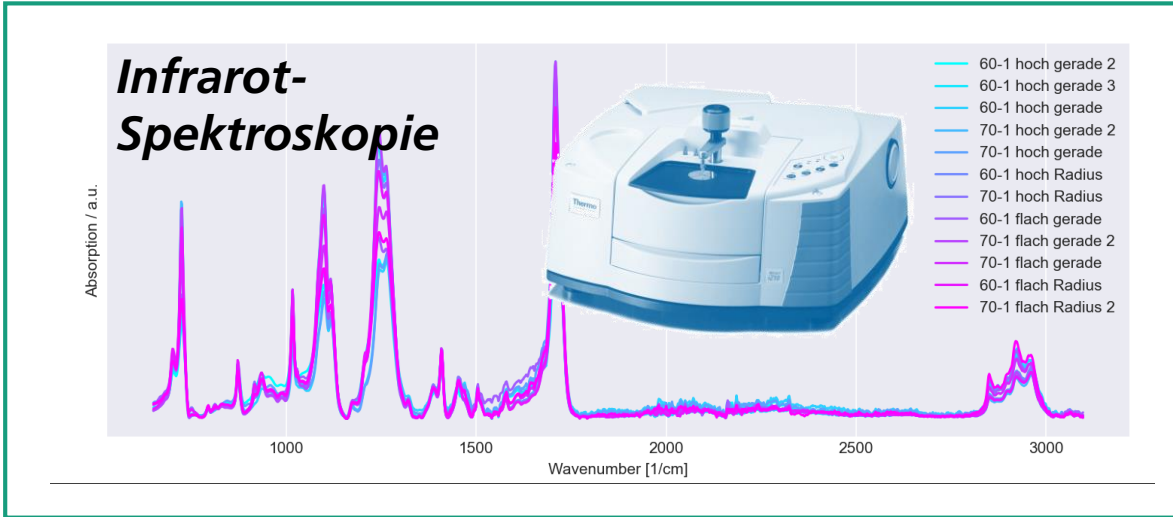


analysieren

zusammenführen



Manche Probleme sind „kompliziert“: Mehrwert der Analytik durch Chemometrie

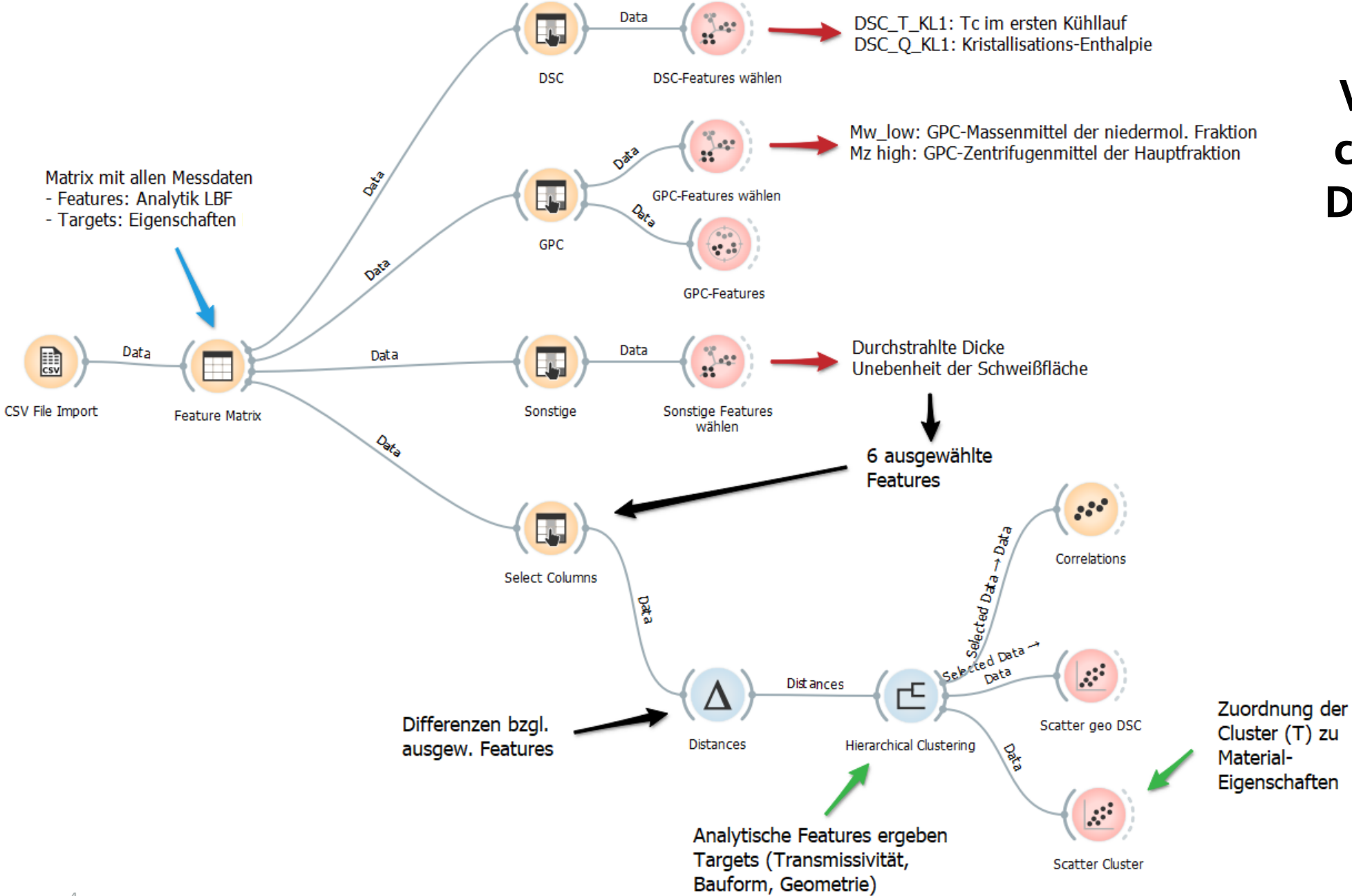


Grundlage für multivariate Analyse & Machine Learning: Die Feature-Matrix

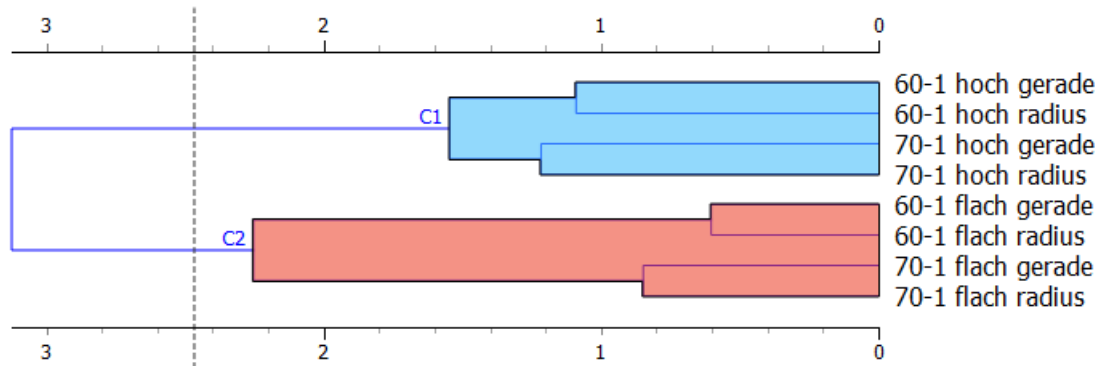
„Targets“: Nicht f.d. Auswertung verwendet

	typ	temp	T_mean	T_max	geo	Muster_name	DSC_T_KL_1	DSC_Q_KL_1	Mw_low	Mz_high	Dicke	Rauh
1	h	60	13.5	15	g	60-1 hoch gerade	189.5	21.6191	29.8473	117788	0.8084	43.65
2	h	60	13.5	12	r	60-1 hoch radius	189.833	22.4231	29.8473	117788	0.8084	43.65
3	f	60	32.2	37.5	g	60-1 flach gerade	179.5	21.1781	32.171	119634	0.7765	110.847
4	f	60	32.2	25	r	60-1 flach radius	180.833	20.757	32.171	119634	0.7765	110.847
5	f	70	25.2	30	g	70-1 flach gerade	180.167	21.6115	29.1784	122566	0.7698	126.85
6	f	70	25.2	20	r	70-1 flach radius	179.667	20.9976	29.1784	122566	0.773333	126.85
7	h	70	9.3	10	g	70-1 hoch gerade	189.667	21.9941	29.2566	120566	0.805944	42.45
8	h	70	9.3	8	r	70-1 hoch radius	189.667	21.096	29.2566	120566	0.805944	42.45

Exploratives Vorgehen bei der chemometrischen Datenauswertung in Python

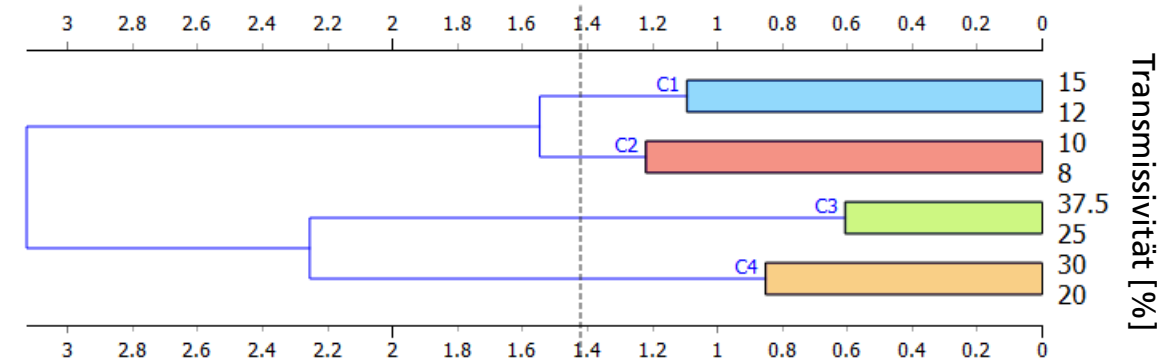
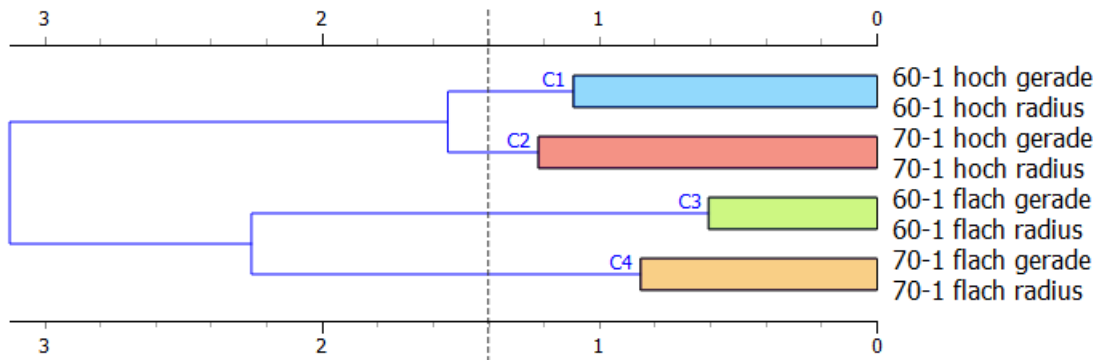


Beispiel für Machine-Learning-Methoden: Hierarchical Clustering-Modell



Cluster entspr. der Bauformen werden in den Analytik-Messwerten gefunden:

- **Bauformen haben unterschiedliche Materialeigenschaften !**



Tieferes Clustering ergibt die Gruppen mit unterschiedlichen Transmissionen:

- **Auch hier ist die Transmissivität mit Materialeigenschaften korreliert.**

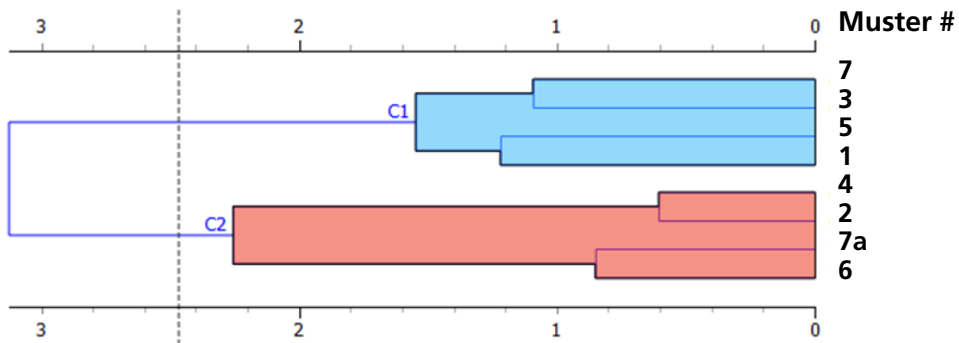
Chemometrie ermöglicht das Verstehen und Optimieren von Materialeigenschaften

Beispiel:

Finden der kritischen Materialeigenschaften durch multivariate Analyse

Beispiel:

Klassifikation durch Hierarchical Clustering



Chemometrische Zusammenführung von Analysedaten

- deutlichen Mehrwert durch systematisches Verständnis der Materialien.
- Hochkomplexe Fragestellungen können gelöst werden.

