

# Neuronale Netze - Messung

(Analytisch-chemisches Praktikum)

## Einsatz zur Peaktrennung von überlappten UV/VIS Spektren

### Ziel des Beispiels:

Computergestützte Auswertung von Spektrendaten mit Hilfe eines Neuronalen Netzwerkes anhand eines extremen Fallbeispiels - Mischung von **Ponceau 4R** und **Amaranth**.

### Aufgabenstellung:

- Spektrenaufnahme der Einzelfarbstoffe (**Ponceau 4R** und **Amaranth**)
- Einzelwellenlängenaufnahmen von Farbstoffmischungen und der Probe.
- Generierung von Kalibrierungs- und Validierungsdatensatz.
- Trainieren des Neuronalen Netzwerkes + Validierung des Neuronalen Netzwerkes.
- Probenbestimmung.
- Optimierung und Kennenlernen der Netzwerkcharakteristika.

### Spektrenaufnahme

Zur Charakterisierung von Ponceau 4R, Amaranth und einer Farbstoffmischung wird jeweils ein Spektrum im relevanten Absorptionsbereich um 500 nm aufgenommen. Aus den Absorptionskurven soll eine Interpretation vorgenommen werden bei welchen Wellenlängen der Informationsgehalt für die Peaktrennung ausreichend sein kann. Die Einzel- und Mischspektren werden aus der Standardlösung von Ponceau 4R bzw Amaranth (jeweils 20 mg/L) Mischungen durchgeführt. **ACHTEN SIE AUF ABSORPTIONEN <1.5!**

## Bedienung des Spektrometers

Das Spektrometer ist ein Zweistrahlphotometer. Die Bedienung sollte im fortgeschrittenen Studium weitgehend intuitiv erfolgen. Die Theorie wird vorausgesetzt und geprüft. Als Hilfestellung zum Beispiel dient folgende Anleitung.

### A. Für die Aufnahme der Einzelfarbstoffe:

Zur Aufnahme der Farbstoffspektren (einmal Ponceau und einmal Amaranth, je 20 mg/mL) wird im Programm "UV WinLab", falls vorhanden, die Methode "**Neuronal Network Scan**" geladen und folgende Parameter überprüft:

(Falls die Methode fehlt muss bei "Base Method" - "Scan - Lambda 35" gewählt und alles manuell eingegeben werden)

Messbereich von 350-700 nm. UV Lampe IMMER deaktivieren. Spaltbreite 2 nm. Scan Speed ~480 nm/min. 2 Proben (eventuell benennen).

Die Messung erfolgt mittels "Start", wobei zu Beginn automatisch ein „Autozero“ durchgeführt wird (2 Küvetten mit Wasser in das Gerät stellen). Anschließend die vordere Küvette gegen einen der Farbstoffe tauschen.

Zum Vergleich beider Farbstoffspektren auf einem Diagramm "Add Reference" und zur Auswahl der 5 Wellenlängen das Symbol "Vertikale Cursorlinie" aktivieren. 5 Wellenlängen mit Bedacht wählen, an denen sich die Farbstoffe unterscheiden lassen.

Bitte sprechen Sie die endgültig verwendeten Wellenlängen mit den Assistenten ab.

**Nun dem Assistenten erklären, wie die 25 Standardlösungen optimal herzustellen sind!**

**(notfalls erklären lassen)**

### B. Einzelwellenlängenscans für Mischungen und Probe

Zum Bestimmen der Standardlösungen+Proben: Programm "**Wavelength program - lambda 35**" wählen.

Falls vorhanden, kann auch die Methode "**Neuronal Network Standardreihe**" geladen werden-jedenfalls sollten folgende Parameter überprüft werden: Unter "Sample Info" **28** Proben einstellen(25 Standard + 3mal die Probe). Unter "Data Collection" die zuvor ermittelten **5** Wellenlängen eingeben.

Beim Klick auf "Start" erscheint die Aufforderung zur Autozerobestimmung(Wasser in beide Küvetten und bestätigen). Nach dieser fragt das Programm jede einzelne Probe der Reihe nach ab (erst Küvette wechseln, dann bestätigen).

Die Reihenfolge ist belanglos, jedoch muss bekannt sein welcher Standard bzw. welche Probe welcher Nummer entspricht (Laborjournal!).

Die Ergebnistabelle kann am Ende per Rechtsklick(Copy to Clipboard) in z.B. WordPad eingefügt werden. Ein separates Speichern der Originalmessdaten im UV WinLab ist nicht nötig, es empfiehlt sich jedoch eindringlich dies mit dem Textfile zu tun.

Nun müssen die Werte manuell in die Form gebracht werden, wie sie von Matlab eingelesen werden können. Hierzu siehe Script "**2\_Neuronale\_Netze\_-\_Auswertung**".

### **Fragenkatalog und Anregungen:**

- Was ist Chemometrie, wo wird sie gebraucht?
- Wie ist ein neuronales Netz aufgebaut?
- Wie können nicht-lineare Zusammenhänge mit NN simuliert werden?
- Wie „lernt“ ein Netz?
- Was macht eine Transferfunktion?
- Wie kommt ein UV/VIS Spektrum zustande?
- Weshalb werden Einzelwellenlängenscans durchgeführt?
- Welchen Wellenlängenbereich überdecken UV/VIS Spektren?
- Unterschied Ein- und Zweistrahlphotometer?