

Melléklet: A kemometriai modell, fogalmak, tulajdonságok tisztázása

Az első fogalom a háromutas adathalmaz jelen esetben egy háromdimenziós abszorbancia–mátrixot jelent. Általános eleme A_{ijk} , ahol a három dimenzió jelentése: $i = 1, 2, 3 \dots$ a vizsgált minták sorszáma, $j = 1, 2, 3 \dots$ a kromatogramm készítése során felvett színeképek sorszámát (t -tengely) jelöli, míg a harmadik k , a vizsgált tartományban ($4000\text{--}650\text{ cm}^{-1}$) mért és a számításokor fel is használt színeképi pontokat jelöli. Ugyanakkor van egy további index $f = 1, 2, 3, 4, \dots$, amely első közelítésben a komponenseket jelöli. A háromdimenziós mátrixot a komponensek hasonló méretű mátrixaiból és az alapvonalat leíró mátrixból rakjuk össze: $A_{ijk} = \sum (c_{ijf} \epsilon_{kf} d) + a_{ijk}$, ahol d a rétegvastagság, ϵ_{kf} az f -edik komponens moláris abszorbancia színeképe, amely d -vel szorozva a hullámszámprofil adja. A c_{ijf} felbontható két mennyiség szorzatára, c_{if} -re, amely az f -edik komponens koncentrációja az i -edik mintában, és R_{jf} -re, amely azt mondja meg, hogy a kromatografálás alatt a j -edik színekép felvételekor az f -edik komponens teljes mennyiségének hányad része tartózkodott a cellában. Ez utóbbi R_{jf} -vektor az elúciós profil, míg c_{if} -vektor a koncentrációprofil. A mátrixegyenlet alakja: $A = A_1 + A_2 + \dots + a$, ahol az egyes mátrixok a három vektorból állnak elő: $A_{ijkf} = c_{if} R_{jf} (\epsilon_{kf} d)$ szerint.