

Anwendung der Informationstheorie in der Atom-Spektrochemie

I.* Allgemeine und spezifische theoretische Darlegungen

^aM. MATHERNY und ^bK. ECKSCHLAGER

^a*Lehrstuhl für Chemie der Hüttenmännischen Fakultät
der Technischen Hochschule, CS-043 85 Košice*

^b*Institut für Anorganische Chemie der Tschechoslowakischen
Akademie der Wissenschaften, CS-250 68 Řež u Prahy*

Eingegangen am 8. August 1983

Die Anwendung der Informationstheorie für die Bewertung der Leistungsfähigkeit von atom-spektrochemischen analytischen Methoden stützt sich auf allgemeingültige Beziehungen. Die partiellen Koeffizienten und Glieder der allgemeingültigen Beziehungen müssen aber einen spektrochemischen Charakter bekommen. Im Prinzip handelt es sich um das Maß der Gewinnung neuer Erkenntnisse über die Matrizen vermittelt spektrochemischer analytischer Prozeduren. Diese Prozeduren werden vor allem anhand der dynamischen Konzentrationsspannweite sowie der relativen Präzision der Konzentrationsbestimmung determiniert.

Theory of information applied for evaluation of efficiency of the atomic spectrochemical methods is based on general relations. The partial coefficients and terms of such general relations, however, have their specific spectrochemical meaning. In fact, the evaluation is concerned with the amount of new information on the analyzed matrices gained by spectrochemical analytical procedures. Such procedures are determined first of all by the dynamic concentration range and relative precision of concentration determination.

Применение теории информации для оценки атомных спектральных методов опирается о общие уравнения. Частичные коэффициенты и члены уравнений, имеющие общие применение должны получить спектрохимический характер. В принципе идет о то, что оценивается мера получения новых данных о матрицах путем спектрохимических аналитических методов. Эти методы ограничены прежде всего динамическим концентрационным интервалом и относительной точностью определения концентраций.

*Vorgetragen an der XXV. Ungarischen Tagung für Spektralanalyse und 7. CANAS in Sopron, 1982.

Die Anwendung der Informationstheorie [1] für die Bewertung und Optimierung der spektrochemischen analytischen Prozeduren stützt sich, ebenso wie bei anderen analytischen Methoden, auf zwei kombinierte Wertungsgrößen. Erstens ist es das dynamische Konzentrationsintervall der Methode $\langle c_{X, \min}, c_{X, \max} \rangle$, zweitens die dabei erreichte relative Präzision der Konzentrationsbestimmung $s(c_{X,r})$ (%). Diese Werte erlauben am Anfang die Ermittlung der Werte des Informationsgehaltes $I(p, p_o)$, und im weiteren auch die Berechnung der Werte der Informationseffektivität $E(p, p_o)$ und Informationsrentabilität $R(p, p_o)$. Die erwähnten Wertungsgrößen der Informationstheorie setzen voraus, daß sich die Konzentrationswerte $c_{X,i}$ in dem Intervall der zwei definierten Konzentrationswerte befinden

$$c_{X,i} \in \langle c_{X, \min}, c_{X, \max} \rangle \quad (1a)$$

und eine Normalverteilung aufweisen. Bei der Multikomponenten-Spurenbestimmung kann aber für einige Elemente auch der unerwünschte Fall (1b) auftreten

$$c_{X,i} < c_{X, \min} \quad (1b)$$

der die Modifizierung des Rechengangs der Parameterwerte der Informationstheorie hervorruft.

Leider, bei konkreten analytischen Methoden handelt es sich meist nur um einen vermuteten oder annähernd dargelegten Verteilungscharakter. Deshalb ist der Festlegung des Verteilungscharakters der $c_{X,i}$ -Werte eine angemessene Aufmerksamkeit zu widmen. Die exakten, aufgrund statistischer Tests begründeten Aussagen scheitern an der Tatsache, daß die nötige Zahl der Einzelmessungen für eine Testprüfung zu gering ist [2].

Theoretischer Teil*

Unter der Voraussetzung, daß die Konzentrationswerte bei einer spektrochemischen Methode mindestens annähernd normal verteilt sind, ist der Wert des Informationsgehaltes $I(p, p_o)$ folgend definiert

$$I(p, p_o) = \ln \frac{c_{X, \max} - c_{X, \min}}{\sigma \cdot (2\pi e)^{1/2}} \quad (2a)$$

Da aber das Konzentrationsintervall sowie die Standardabweichung durch die analytische Eichprozedur gegeben ist [3], muß man mit der Endzahl der experimentellen Werte rechnen. Deshalb ist es notwendig anstatt des theoretischen σ -Wertes mit den realen s -Standardabweichungswerten zu rechnen. Diese Umstel-

* Die im Text benutzten Symbole sind auf Seite 488 definiert.

lung verlangt aber die Multiplizierung der experimentell ermittelten s -Werte mit dem kombinierten Faktor $(2 \cdot t_{st}(\alpha, F)/(N)^{1/2}$. Den $t_{st}(\alpha, F)$ -Wert entnimmt man aus den Tabellen der Studentschen t_{st} -Verteilung [1] für den Freiheitsgrad $F = N - 1$ und das Signifikanzniveau $\alpha = 0,038794$. Dieses ungewöhnliche Signifikanzniveau wurde darum gewählt, da der t_{st} -Wert für $N = \infty$ gerade für diesen α -Wert den Wert $(1/2)(2\pi e)^{1/2} = 2,06637$ erreicht. Die Werte von $t_{st}(0,038794, F)$ befinden sich tabelliert in der Arbeit [1]. Die endgültige Form lautet

$$I(p, p_0) = \ln \frac{N^{1/2} \cdot (c_{X, \max} - c_{X, \min})}{2 \cdot s(c_X) \cdot t_{st}(\alpha, F)} \quad (2b)$$

wobei N die Zahl der angewendeten experimentellen Messungen darstellt. Falls aber die Bedingung (1b) zur Geltung kommt [4], wird der Wert $I(p, p_0)$ schon folgend berechnet

$$I(p, p_0) = \ln (c_{X, T}/c_{X, L}) \quad (3)$$

Für die Werte $c_{X, i}$, die kleiner als die Nachweisgrenze $c_{X, L}$ sind, ist es sinnlos über den Informationsgehalt zu sprechen [5]. Für die logarithmisch-normale Verteilung [6] muß aber die Grundgleichung (2b) etwas abgeändert werden

$$I(p, p_0) = \ln \frac{N^{1/2} \cdot (c_{X, \max} - c_{X, \min})}{\bar{c}_X \cdot s(\log \{c_X\}) \cdot 2t_{st}(\alpha, F)} \quad (4)$$

Der Wert der Informationseffektivität $E(p, p_0)$ stellt den weiteren Wertungsparameter der Informationstheorie [7] dar, und ist bevorzugt durch den erreichten Wert des Informationsgehaltes gegeben

$$E(p, p_0) = E \cdot I(p, p_0) \quad (5a)$$

wo E den Informationseffektivitäts-Koeffizienten darstellt. Für die Werte E und $E(p, p_0)$ gelten aber gewisse allgemeingültige Einschränkungen. Nämlich muß gelten daß $0 \leq E \leq 1$, so daß aus logischen Erwägungen gleichzeitig gilt $E(p, p_0) \leq I(p, p_0)$. Den Informationseffektivitäts-Koeffizienten ermittelt man als Multiplikation von mehreren definierten partiellen Effektivitäts-Koeffizienten

$$E = \prod_{f=1}^P e_f \quad (5b)$$

wo $f = 1, \dots, P$ und $P \geq 2$. Der Zahlenwert P stellt die maximale Zahl der partiellen Effektivitäts-Koeffizienten dar. Für die Atom-Spektrochemie werden meist 2 bis 4 Koeffizienten angewendet.

Die Ermittlung der Werte der partiellen Effektivitäts-Koeffizienten verlangt aber zuerst die eindeutige Darlegung der Toleranzwerte, die anhand der Angaben

und Förderungen des Gesellschaftsantrags formuliert werden müssen. Erstens handelt es sich um das verlangte Konzentrationsintervall, das durch die Konzentrationswerte $c_{X,T,\min}$ und $c_{X,T,\max}$ gegeben ist. Zweitens muß die maximale zulässige relative Präzision der Konzentrationsbestimmung $s(c_{X,T,i})$ (%) dargelegt werden, und drittens müssen die zulässigen Analysedauer-Grenzen $t_{X,T(1)}$ und $t_{X,T(2)}$ definiert werden.

Berechnung der partiellen Effektivitäts-Koeffizienten

Der Koeffizient e_1 ist durch den Anteil der Standardabweichungen $s(c_{X,T})$ und $s(c_X)$ gegeben

$$e_1 = s(c_{X,T})/s(c_X) \quad (6)$$

Da die Analysebenützer in der überwiegenden Mehrheit der Fälle nur die relative Präzision der Konzentrationsbestimmung $s(c_{X,T,i})$ in % angeben, muß der $s(c_{X,T})$ -Wert nachträglich berechnet werden

$$s(c_{X,T}) = s(c_{X,T,i}) \cdot (c_{X,T,\min} + (1/2) \cdot (c_{X,T,\max} - c_{X,T,\min})) \quad (7a)$$

Falls aber die $c_{X,i}$ -Werte logarithmisch-normal verteilt sind, muß der Standardabweichungswert $s(\log(c_{X,T}))$ folgend berechnet werden

$$s(\log(c_{X,T})) = 0,434 \cdot s(c_{X,T}) \quad (7b)$$

Falls aber die Ungleichheit $s(c_X) \leq s(c_{X,T})$ ihre Gültigkeit erreicht, wird der partielle Koeffizient e_1 konventionell gleich Eins betrachtet.

Die Ermittlung der Werte des partiellen Koeffizienten e_2 kann auf die folgenden Teiloperationen aufgeteilt werden. Falls die Ungleichheit $t_X < t_{X,T(1)}$ ihre Bestätigung findet, bedeutet dies, daß die Analyse in einer kürzeren als vorausgesehenen Zeit beendet wird. Der Wert t_X stellt dabei die reelle Analysedauer dar, und muß durch eine Zeitanalyse der komplexen analytischen Prozedur ermittelt werden. Dieser Fall muß aber nicht unbedingt eine günstige Situation darstellen. Er kann z. B. infolge einer Unterschätzung der Leistungsfähigkeit des Analyseapparats und der Analyseprozedur, oder auch durch eine falsche Darlegung der $t_{X,T(1)}$ -Zeitwerte eintreten. In solchen Fällen ist es zunächst notwendig die Festlegung der $t_{X,T(1)}$ -Werte zu überprüfen. Doch kann man in diesem Fall sowie im Fall der Gleichheit der Werte $t_X = t_{X,T(1)}$ den Koeffizienten e_2 gleich Eins betrachten. Falls aber der Wert t_X sich in dem Intervall der Werte $\langle t_{X,T(1)}, t_{X,T(2)} \rangle$ befindet, wird aufgrund trigonometrischer Erwägungen (Abb. 1) der Wert des Koeffizienten e_2 anhand der Gleichung (8) berechnet

$$e_2 = \frac{t_{X, T(2)} - t_X}{t_{X, T(2)} - t_{X, T(1)}} \quad (8)$$

In der Gleichung (8) stellt der Wert $t_{X, T(1)}$ die erste Zeitgrenze, wo die Analyse schon notwendig ist. Dieser Zweitwert wird bevorzugt anhand der instrumentellen Leistungsfähigkeit des Analysegeräts sowie der angewendeten Methodik gegeben. Dagegen der Wert $t_{X, T(2)}$ stellt diejenigen Zeitwerte dar deren Überschreitung ($t_X > t_{X, T(2)}$) die ganze Analyse schon überflüssig macht. Meistens gilt aber $t_X \leq t_{X, T(1)}$.

Der partielle Koeffizient e_3 ist durch einen einfachen Bruch (9) der Verhältnisse der $c_{X, T}$ - und $c_{X, \min}$ -Werte gegeben, wobei für den Wert $c_{X, \min}$ der Wert der Garantiegrenze der Reinheit $c_{X, G}$ anzuwenden ist

$$e_3 = c_{X, T} / c_{X, G} \quad (9)$$

Falls die Ungleichheit $c_{X, T} \geq c_{X, G}$ ihre Bestätigung findet, wird der Wert der Koeffizienten e_3 konventionell gleich Eins betrachtet. Im Falle, daß die umgekehrte Ungleichheit $c_{X, T, \min} \leq c_{X, G}$ bestätigt wird, aber gleichzeitig noch gilt daß $c_{X, T, \min} > c_{X, L}$, muß der Wert e_3 in Abhängigkeit von der Position des $c_{X, T, \min}$ -Wertes auf der Konzentrationsachse (Abb. 2) laut Gleichung (9) berechnet werden. Gleichzeitig muß aber der Wert des Informationsgehaltes $I(p, p_0)$ schon anhand der Gleichung (3) von neuem berechnet werden. Wenn aber $c_{X, L} > c_{X, T, \min}$ wird der Koeffizient e_3 gleich Null betrachtet werden.

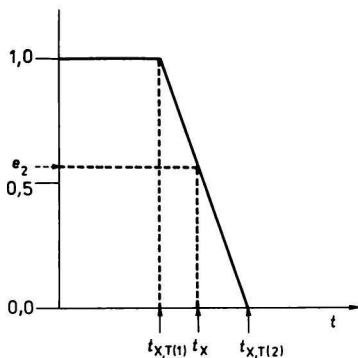


Abb. 1. Graphische Darstellung der Abänderung der partiellen Effektivitätskoeffizienten e_2 in Abhängigkeit von der Analysedauer t .

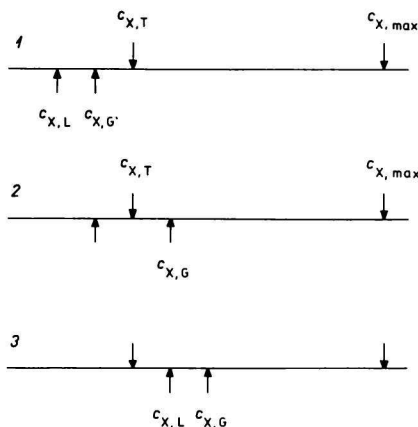


Abb. 2. Graphische Darstellung der Position der $c_{X, T, \min}$ -, $c_{X, L}$ - und $c_{X, G}$ -Grenzwerte auf der Konzentrationsachse.
1. Optimalfall; 2. zulässiger Fall; 3. unerwünschter Fall.

Außer den soeben definierten drei partiellen Koeffizienten der Informationseffektivität ist es gerade für die Multikomponentenanalysen manchmal empfehlenswert einen weiteren Koeffizienten zu definieren. Der Koeffizient e_4 stellt dabei den Anteil der Q_x - und $Q_{x,\tau}$ -Werte dar

$$e_4 = Q_x / Q_{x,\tau} \quad (10)$$

Der Wert e_4 ändert sich wiederum in den Grenzen des Intervalls $\langle 0; 1 \rangle$, wobei Q_x die Zahl der reell bestimmbaren Elemente ausdrückt.

Berechnung der Werte der Informationsrentabilität

Die errechneten Werte der Informationseffektivität $E(p, p_o)$ ermöglichen es im weiteren auch die Informationsrentabilität $R(p, p_o)$ numerisch in Kennzahlen auszudrücken

$$R(p, p_o) = (1/\tau) \cdot E(p, p_o) = (1/\tau) \cdot E I(p, p_o) \quad (11)$$

Der Wert τ stellt dabei die Gesamtkosten der Analyse eines Elements in einer gewissen definierten Matrix dar. Die Gesamtkosten ergeben sich aus dem Amortisationsanteil und aus den Lohn-, Material- und Energiekosten.

Erweiterung der Informationstheorie auf die Multikomponenten-Elementanalysen

Die angegebenen Definitionen der Größen der Informationstheorie gelten aber ausschließlich für die individuellen Elementbestimmungen. Bei Multikomponentenanalysen müssen die Gleichungen erweitert werden. Die Werte der Informationsgehalte $I(p, p_o)$ sind prinzipiell additive Werte und deswegen werden die neuen Multikomponentenwerte unter Berücksichtigung dieses Prinzips ermittelt (12). Es handelt sich um die Werte der Informationsmaße $M(p, p_o)$

$$M(p, p_o) = \sum_{g=1}^Q (I(p, p_o))_g \quad (12)$$

wo $g = 1, \dots, Q$ und Q stellt die Zahl der reell zur Bestimmung gelangenen Elemente oder Komponenten dar. Die Ermittlung des Maßes der Informationseffektivität $E^*(p, p_o)$ wird wiederum vermittels der Addition der Werte der Informationseffektivität verlaufen

$$E^*(p, p_o) = \sum_{g=1}^Q (E \cdot I(p, p_o))_g \quad (13)$$

So eine Lösung macht aber den Koeffizienten e_4 überflüssig. Der Wert des Maßes der Informationseffektivität kann aber auch anders ermittelt werden

$$E^{**}(p, p_o) = \left(\prod_{g=1}^O \left(\prod_{f=1}^P e_f \right)_g \right) \cdot e_4 \cdot M(p, p_o) = \\ = \left(\prod_{g=1}^O \left(\prod_{f=1}^P e_f \right)_g \right) \cdot e_4 \cdot \sum_{g=1}^O (I(p, p_o))_g \quad (14)$$

Bei dieser Berechnungsweise kommt auch der Koeffizient e_4 zur Geltung. Der Nachteil dieser Gleichung ist die Tatsache, daß ein einziger mit Null gleicher partieller Effektivitätskoeffizient die ganze Informationseffektivität annulliert.

Die Werte der Maße der Informationsrentabilitäten können wiederum auf zwei Wegen, u. zw. in Abhängigkeit vom Maße der erreichten Informationseffektivitäten ermittelt werden

$$R^*(p, p_o) = (1/\tau^*) \cdot E^*(p, p_o) \quad (15a)$$

oder

$$R^{**}(p, p_o) = (1/\tau^*) \cdot E^{**}(p, p_o) \quad (15b)$$

Der Wert $R^{**}(p, p_o)$ ist wiederum mit derselben Schwierigkeit belastet wie der Wert $E^{**}(p, p_o)$. Der Wert τ^* stellt dagegen die Gesamtkosten für die komplette Analyse einer gewissen definierten Matrix dar.

Für die Beurteilung der Leistungsfähigkeit der gegebenen Methode ist es aber sehr wichtig nicht nur das Maß der Informationsrentabilität der komplexen analytischen Bestimmung, sondern auch die gesamte Jahresrentabilität festzulegen. Diese bekommt man durch Multiplizierung der Werte $R^*(p, p_o)$ resp. $R^{**}(p, p_o)$ mit dem Multiplikationsfaktor J

$$R\ddagger = R^*(p, p_o) \cdot J \quad (16)$$

Der Multiplikationsfaktor J ist durch die Probenzahl pro Arbeitsschicht A , die Zahl der Arbeitsschichten pro Tag B sowie durch die Zahl der Arbeitstage pro Jahr C bestimmt

$$J = A \cdot B \cdot C \quad (17)$$

Spezifische emissionsspektrochemische Bedingungen

Für den minimal zulässigen Konzentrationswert $c_{X, \min}$ für die Berechnung der Werte der Informationsgehalte, soll allgemein der Wert der Garantiegrenze der Reinheit [8, 9] angewendet werden. So eine Wahl ist dadurch berechtigt daß das diesem Konzentrationswert entsprechende analytische Signal $I_{X, G}$ mit 99,67 %-ger statistischer Sicherheit sich von der Untergrundintensität abhebt. Die Festlegung

des maximal zulässigen Konzentrationswertes $c_{X, \max}$ ist im Prinzip durch die Art der Registrierung der Spektren bedingt. Für die photographische Registrierung ist der Wert S_{LL} maßgebend, denn bei diesem Schwärzungswert wird wiederum die Linearität der Eichkurven der photographischen Emulsion gestört [10]. Es ist die sog. zweite — höhere — Krümmung dieser Abhängigkeit. Durch eine Transformation des S_{LL} -Wertes in einen Y_{LL} -Wert [11], sowie durch die Bildung der zuständigen ΔY_{LL} -Werte

$$\Delta Y_{LL} = Y_{LL} - \bar{Y}_R \quad (18a)$$

kann man anhand der modifizierten Lomakin—Scheibe-Gleichung die gesuchten $c_{X, \max}$ -Werte erhalten

$$c_{X, \max} = 10^{(\Delta Y_{LL} - A_{X,R}) \cdot (1/B_X)} \quad (18b)$$

Der \bar{Y}_R -Wert muß getrennt, aufgrund der angewendeten Eich-Schwärzungswerte der analytischen Geraden ermittelt werden. Der zuständige Rechengang erfordert zuerst die Berechnung der $\overline{\Delta Y}_j$ -Mittelwerte (19) für $j = \text{Konst.}$

$$\overline{\Delta Y}_j = (1/K) \cdot \sum_1^K (\Delta Y_i)_j \quad (19)$$

Den gesuchten \bar{Y}_R -Wert erhält man schließlich anhand der folgenden Gleichung

$$\bar{Y}_R = (1/M) \cdot \sum_1^M (1/K) \cdot \sum_1^K (Y_{X, i, j} - \overline{\Delta Y}_j) \quad (20)$$

wobei $i = 1, \dots, K$, $K \in \langle 3; 10 \rangle$ und stellt die Zahl der wiederholten Messungen der $Y_{X, i, j}$ -Werte für einen gewissen analytischen Eichkonzentrationswert $c_{X, j}$ dar, und $j = 1, \dots, M$, $M \in \langle 4; 16 \rangle$ stellt die Gesamtzahl der zur Eichprozedur verwendeten Eichproben dar.

Die Standardabweichung $s(c_X)$ muß für die experimentelle Bewertung gleichzeitig die Präzision des Meßverfahrens sowie die Präzision der analytischen Eichprozedur ausdrücken. Deswegen ist es berechtigt von der Fortpflanzung der Standardabweichungen auszugehen [12], und diese auf die Eichprozedur der spektrochemischen Bestimmung zu beziehen. Als Ausgangspunkt muß aber die Standardabweichung $s(\Delta Y)$, die die Meßgenauigkeit ausdrückt (21) angewendet werden

$$s(\Delta Y) = \left[\frac{1}{K-1} \cdot \left(\sum_1^K \frac{1}{m-1} \right) \cdot \sum_1^M (\Delta Y_{i, j} - \overline{\Delta Y}_j)^2 \right]^{1/2} \quad (21)$$

Die relative Präzision [13] der Eichprozedur ist im konkreten Fall durch die Gleichung (22) gegeben

$$s(c_{X,r}) = 2,303 \cdot (\bar{c}_X / B_X) \cdot \left[(s(A_{X,R}))^2 + (s(\Delta Y))^2 + (\log\{c_X\})^2 \cdot (s(B_X))^2 \right]^{1/2} \quad (22)$$

Der \bar{c}_X -Wert wird aber laut Gleichung (23) berechnet

$$\bar{c}_X = c_{X,\min} + (1/2) \cdot (c_{X,\max} - c_{X,\min}) \quad (23)$$

Die Gleichung (22) berücksichtigt nicht nur die Standardabweichung $s(\Delta Y)$ aber auch die Standardabweichungen der Grundparameter $A_{X,R}$ und B_X der Lomakin—Scheibe-Gleichung sowie die Zahl der wiederholten Messungen K und auch die Zahl der Eichproben M . Der numerische Faktor 2,303 ergibt sich aus der Transformierung der dekadischen Logarithmen in die normale Konzentrationskala, da die Lomakin—Scheibe-Gleichung die Funktionsabhängigkeit $\Delta Y = f(\log\{c_X\})$ veranschaulicht.

Die durch die Gleichung (2a) und (2b) definierten Werte der Informationsgehalte, sowie die durch die Gleichung (5a) definierten Werte der Informationseffektivität und die durch die Gleichungen (15a) und (15b) definierten Werte der Informationsrentabilität drücken aber einen „totalen“ Informationsgehalt, Informationseffektivität oder Informationsrentabilität aus. Diese Werte beziehen sich auf das breiteste Konzentrationsintervall, und dadurch finden sie ihre Gültigkeit fast ausschließlich bei der Spurenanalyse. Bei den Bestimmungen von Nebenkomponenten, in dem Konzentrationsintervall von 10 % bis 0,01 %, arbeitet man in einem engeren Konzentrationsbereich und in solchen Fällen ist es berechtigt über einen „reduzierten“ Informationsgehalt, Effektivität und Rentabilität zu sprechen. Für die Ermittlung des „totalen“ Informationsgehaltes wird für den $c_{X,\min}$ -Wert der $c_{X,G}$ -Grenzwert, und für den „reduzierten“ Informationsgehalt der niedrigste Eichkonzentrationswert angewendet. Da aber manchmal dasselbe analytische Verfahren für unterschiedliche Konzentrationsbereiche anwendbar ist, ist es notwendig die gegebene Klassifikation ausdrücklich zu betonen.

Schlußfolgerung

Die Größen der Informationstheorie müssen anhand des Maßes und der Art der Gewinnung der Wertungsparameter der spektrochemischen Eichung und Festlegung der Leistungsparameter ermittelt werden. Die Ermittlung dieser Parameter ist aber von der Zahl der zu bestimmenden Elemente und der Art der Darlegung des Konzentrationsintervalls abhängig. Deswegen ist es notwendig zwischen „totalen“ und „reduzierten“ Größen der Informationstheorie zu unterscheiden. Da die Werte der Informationseffektivität durch das Verhältnis zwischen den im

voraus definierten und experimentell erhaltenen Leistungsparametern gegeben sind, ist es notwendig dem gesellschaftlichen Auftrag eine angemessene Aufmerksamkeit zu widmen.

Symbole

Erläuterung der benützten Subskripten und Symbole, die im Text nicht ausführlich definiert sind.

Subskripte

X	bezieht das Symbol auf ein analytisches Element
R	bezieht das Symbol auf ein Bezugselement
i, j, f, g	bedeuten immer eine Reihenfolge von 1 bis zu einer definierten Maximumzahl
r	bedeutet, daß es sich um einen relativen Zahlenwert handelt
T	bezieht das Symbol auf einen im voraus definierten Toleranzwert

Symbole

K	Zahl der an einem Konzentrationswert wiederholten Messungen
M	Zahl der angewendeten Eichkonzentrationswerte
$N = K M$	
c	Konzentrationswert
s	Standardabweichungswert
t	Zeitwert
$A_{X,R}, B_X$	Parameterwerte der modifizierten Lomakin—Scheibe-Gleichung
$Y = \log I$	
I	Intensitätswerte einer Spektrallinie
$\Delta Y = Y_X - Y_R$	
P	Maximalzahl der angewendeten partiellen Effektivitätskoeffizienten
Q	Maximalzahl der bewerteten analytischen Elemente
$c_{X,L}$	Nachweisgrenze
$c_{X,G}$	Garantiegrenze
$c_{X,T, \min}$	Minimal-Konzentrationstoleranzwert

Literatur

1. Eckschlager, K. und Štěpánek, V., *Information Theory as Applied to Chemical Analysis*. J. Wiley, New York 1979.
2. Burington, R. S. und May, D. C., *Handbook of Probability Statistics with Tables*. McGraw-Hill, New York 1970.
3. Flórián, K., Lavrin, A. und Matherny, M., *Chem. Zvesti* 27, 623 (1973).
4. Eckschlager, K. und Štěpánek, V., *Mikrochim. Acta* 1978, I, 107.
5. Eckschlager, K. und Štěpánek, V., *Mikrochim. Acta* 1981, II, 143.

6. Eckschlager, K., *Reinstoffprobleme*, Band V, S. 473; 4. *Int. Symposium "Reinstoffe in Wissenschaft und Technik"*, Dresden, Oktober 1975. Akademie-Verlag, Berlin 1977.
7. Danzer, K. und Eckschlager, K., *Talanta* 25, 725 (1978).
8. Kaiser, H., *Fresenius' Z. Anal. Chem.* 209, 1 (1965).
9. Matherny, M., *Fresenius' Z. Anal. Chem.* 271, 101 (1974).
10. Heltai, Gy., Zimmer, K., Matherny, M. und Flórián, K., *Acta Chim. Hung. (Budapest)* 103, 161 (1980).
11. Török, T. und Zimmer, K., *Quantitative Evaluation of Spectrograms by Means of I-Transformation*. Akadémiai Kiadó, Budapest 1972.
12. Matherny, M. und Ondáš, J., *Anal. Chim. Acta* 133, 137 (1981).
13. Matherny, M., *Spectrosc. Lett.* 5, 227 (1977).

Übersetzt von M. Matherny