

Inhaltsverzeichnis

1	Theoretischer Hintergrund.....	1
1.1	Nahinfrarotspektroskopie	2
1.1.1	NIR-Spektrometer	2
1.1.2	Molekülschwingungen im NIR-Bereich.....	3
1.1.3	Klassifizierung der Normalschwingungen.....	5
1.1.4	NIR-Aktivität bei funktionalen Gruppen.....	7
1.1.5	Einfluss von Wasser und Messtemperatur auf das NIR-Spektrum.....	11
1.2	NIR-Online-Tracking-Messsysteme in unterschiedlichen Anwendungsbereichen ..	12
1.3	Chemometrie.....	14
1.3.1	Mathematische Datenvorbehandlung der NIR-Spektren.....	15
1.3.2	Erstellung multivariater Kalibrationsmodelle	17
1.3.3	Kennzahlen zur Validierung der multivariaten Kalibrationsmodelle	22
1.4	Mechatronik eines Online-Tracking-Messsystems.....	26
1.4.1	Die Geschirrspülmaschine als mechatronisches System.....	26
1.4.2	Messwertaufnahme.....	27
1.4.3	Modellierung von Abtragungskurven	30
2	Ziele der Arbeit.....	33
3	Material und Methoden.....	35
3.1	Material	35
3.2	Methode	38
3.2.1	Spezifikation, Konstruktion und Funktionsprüfung des OTM.....	38
3.2.2	Methode zur Entwicklung eines multivariaten Kalibrationsmodells	48
3.2.3	Anwendungstests des OTM	56
4	Ergebnisse	59
4.1	Spezifikation, Konstruktion und Funktionsprüfung des OTM.....	59
4.2	Methode zur Entwicklung eines multivariaten Kalibrationsmodells	64
4.3	Anwendungstests des OTM	70

4.3.1	<i>Variation der c_i</i>	70
4.3.2	<i>Variation der Spültemperatur und Amylase-Konzentration</i>	74
5	Diskussion.....	91
5.1	Spezifikation, Konstruktion und Funktionsprüfung des OTM.....	91
5.1.1	<i>Zeitverzögerung und Zeitauflösung des OTM</i>	91
5.1.2	<i>NIR-Messzellentemperatur</i>	94
5.1.3	<i>FT-NIR-Spektrometer</i>	95
5.2	Entwicklung des multivariaten Kalibrationsmodells.....	96
5.3	Anwendungstests des OTM	100
5.3.1	<i>Variation der c_i</i>	101
5.3.2	<i>Variation der Spültemperatur und Amylase-Konzentration</i>	109
6	Metaperspektive und Fazit	119
7	Literaturverzeichnis	122
	Anhang.....	1
A1.	Aufbau und Funktion einer Geschirrspülmaschine	1
A2.	Gravimetrisch bestimmte Konzentrationsverläufe	2
A3.	Konzentrationsdatensatz der multivariaten Kalibrationsmodelle	3
A4.	Konzentrationsvorhersagen der Kalibration	10