

## Stichwortverzeichnis

### **a**

Abgasstrom 130  
 Ableitungen 193, 253 ff., 261  
 – Differenzenquotienten-Methode 193 ff.  
 – erste 196, 206, 209  
 – höhere 193, 197  
 – Polynomfit 195  
 – zweite 195, 209  
 Absorption 81 ff., 91, 105  
 Absorptionsbande 194  
 Absorptionsspektren 73, 118, 141 f., 147 f., 184, 204  
 Abweichungsquadrate 92  
 Active Pharmaceutical Ingredient  
     *siehe API*  
 Agrarindustrie 72  
 Alkoholgehalt 162  
 Alkoholgehaltsbestimmung 177  
 Analyt 132, 135  
 Analysentechnik 72  
 Analyt 91  
 Analytbestimmung, photometrische 95 f.  
 Analytgehalt 91  
 analytische Messmethode 72  
 API 105 f.  
 API-Gehalt 113  
 API-Kalibrierung 107  
 API-Konzentration 106 f., 110, 117 ff., 121  
 Aromate 123  
 ASCII Model 285  
 ASCII-Format 233  
 Attribute 7  
 Ausbeute 100 f.  
 Ausreißer 13, 63, 86, 168, 214, 230, 242,  
     251  
 – erkennen 7 f.  
 – finden 169 ff.  
 – unechte 168  
 Ausreißerbestimmung 180  
 Ausreißereleminierung, automatische 168

Autoskalierung *siehe Standardisierung*  
 Axialversuch 100

### **b**

Banden 189  
 – überlagernde 193  
 Bandenbreite 189  
 Bandenposition 189  
 Basislinie 85, 191, 196, 212, 214, 253  
 – wellenlängenabhängige 193  
 Basislinieneffekt 209  
 Basislinienkorrektur 190  
 Basislinienmodell 191  
 Basislinienoffset 199  
 Basislinienverschiebung 193  
 Behandlung 72  
 Behandlungsfaktor 73  
 Benzin 122  
 Benzinzusammensetzung 122  
 Benzinspektren 124  
 Bestimmtheitsmaß 54, 96  
 Betrag 1 normiert 115, 128  
 Betrag-1-Norm 186  
 Bias 95 f., 220, 223 f., 227, 277  
 Bier  
     – alkoholfreies 162, 170 f.  
     – alkoholreduziertes 162  
 Biersorte 162 f.  
 Bio- und Prozessanalytik 4  
 Bi-Plots 48, 51  
 bivariate Datendarstellung 18  
 Book of Standards 176  
 Box-Plots 12 f., 162, 168  
 Brechungsindex 198

### **c**

Category Variable 235  
 Celactose 105 f., 118, 229, 237, 243, 246  
 Cellulose 201

- Center-Data 238
  - Central Composite Design *siehe* zentraler zusammengesetzter Plan
  - Checkliste, spektroskopische Kalibrierung mit Unscrambler 287
  - chemische Anwendung 112
  - Chromatogramm
    - Banden 9
    - Paekflächen 9
    - Retentionszeiten 9
  - Classical Least Square Regression
    - siehe* MLR
  - CLS *siehe* MLR
  - Clusteranalyse 160
  - Correlation 272
  - Correlation Loading Plot *siehe* Korrelation-Loadings-Plots
  - Cross Validation *siehe* Kreuzvalidierung
  - Cross Validierung *siehe* Kreuzvalidierung
  - curve resolution *siehe* Entmischen von Information
  - CV *siehe* Kreuzvalidierung
- d**
- Daten
    - dreidimensionale 56
    - fehlerhafte 90
    - grafische Darstellung 3
    - Gruppen 235
    - Happenstance Data 159
    - historische 159
    - Kalibrier-X- 89
    - Kalibrier-Y- 89
    - Korrelation 16
    - laufende Produktion 159
    - Lücken 130
    - Mittelpunkt 27, 33, 35
    - Mittelwert 37
    - mittenzentrierte 76, 87, 92, 103, 114, 183, 238
    - Muster 235
    - Naturprodukte 159
    - normalverteilte 10, 86
    - Objekte 37
    - ökonomische 112
    - originalskalierte 58
    - Plausibilitätsprüfung 86
    - Rauschen 7
    - reproduzieren 37
    - spektroskopische 4, 39, 229
    - skalieren 86
    - standardisieren 86
    - unterdurchschnittliche 33
- Variable 37
  - Variation 25ff.
  - Zusammenhang 3
  - Datenanalyse, explorative 40, 85f., 229
  - Datenbereich 231
  - Datendatei einlesen 230
  - Datenmatrix 7, 36
  - Eigenschaften 7
  - mittenzentrierte 41
  - Objekte 7
  - Datenmittelpunkt 27, 33
  - Datenmodellierung 7f.
  - Datenpunkte
    - Einfluss 157ff.
    - Projektion 27
  - Datenraum 27, 227
  - Datenreduktion 5, 7f., 23f., 27, 36, 49
  - Datenschwerpunkt 27, 50
  - Datentabelle speichern 233
  - Datenvorverarbeitung 73, 86f., 124, 183ff., 253, 261
  - Defibrator 72f.
  - Demo-CD 229
  - Design of Experiments *siehe* Versuchsplanung
  - Detrending 203
  - Deviation 276
  - Differenzenquotienten-Verfahren 196
  - diffuse Reflexion 105, 118, 198, 211
  - Diodenarray-Spektrometer 105, 200
  - Diskriminanzanalyse 5
  - Dispersion 198
  - DOE *siehe* Versuchspraktikum
  - Druck 100f.
- e**
- Edit
    - Convert to Category Variable 237
    - Copy 283
    - Insert 235
    - Options 233, 241, 243f.
    - Sample Grouping 262, 266
    - Zwischenablage 283
  - Eigenschaften 6f., 36, 112f., 231
  - Eigenvektor 39
  - Eigenvektorenberechnung 38
  - Eigenwert 39, 41
  - Eigenwertberechnung 22, 38
  - Eigenwertprobleme 21, 36, 38
  - Einfluss 173, 217
    - linearer 262
  - Einflüsse auf die Kalibrierung
    - grafische Darstellung 172

- Einflussfaktor 133  
 Einfluss-Grafik *siehe* Einfluss-Plot  
 Einflussgröße 168  
 Einfluss-Korrektur 155, 158  
 Einfluss-korrigierte Validierungsrestvarianz 158  
 Einfluss-Plot 172 ff., 214, 250 ff.  
 Einflusswert 172  
 Einfügen, kategoriale Variable 288  
 Eingabedaten, spektrale 228  
 Eingabedatenraum 155  
 Eingangsdaten 90  
 – Änderung 223  
 Eingangsdatenraum 159  
 – Änderung 177  
 Einheitskreis 28  
 Einheitsmatrix 29  
 Einlesen der Daten 287  
 Einordnung der Daten 5  
 Einstellgröße 97, 100 f., 133  
 Einzelvarianz 44  
 EMSC 199, 209, 255, 257 ff.  
 EMSC-Korrektur 281  
 EMSC-Parameter 200  
 Emulsion 198  
 Entmischen von Information 7 f.  
 Erdölprodukte 123  
 Erklärungsanteil 77, 85, 119, 242  
 Erprobungsphase 220  
 Erstellen von Datensets 287  
 Euklidischer Abstand 228, 287  
 Excel 283  
 Excel-Tabellenblatt 277  
 Explained Variance 241  
 Explorative Datenanalyse 86  
 Export, Unscrambler Modelle 278, 289  
 Extended Multiplicative Signal Correction  
*siehe* EMSC  
 Extinktion 91  
 Extinktionswerte 96  
 Extrapolation 93, 177  
 Extremwerte 64
- f**  
 Faktoren 22, 24, 36  
 Faktorenanalyse *siehe* Hauptkomponentenanalyse  
 Faktorenoordinatensystem 23  
 Faktorenladungen 23, 25, 28  
 – Bedeutung 29 ff.  
 Faktorenmatrix 23  
 Faktorenraum, Koordinaten 23  
 Faktorenwerte 23, 25, 27, 37
- Bedeutung 29 ff.  
 Farbkonzentration 144, 146  
 Farbmischung 141  
 Farbsättigung 143  
 Farbstoffe 141  
 Faserfeinheit 85  
 Fasergroße 85  
 Faserhanf 203 f.  
 Fasern 73, 81, 85  
 Faserproduktionsanlage 72  
 Faserqualität 72 f.  
 Fehler 93, 99  
 – experimenteller 100  
 – mittlerer 94, 145  
 – mittlerer quadratischer 94 ff., 176  
 – systematischer 98, 169  
 – zufälliger 130  
 Fehlerabschätzung 157 ff.  
 Fehlerangabe 94 f.  
 Fehlergröße 93, 101 f.  
 Fehlerminimierung 91  
 Fehlerquadrate 94  
 – Minimierung 92  
 Fehlerquadratsumme 94 f.  
 – Minimierung 100  
 Fehlermessung 224  
 Feinheiten 203  
 Fett 219  
 Fettbestimmung 217  
 Fettgehalt 89, 211, 217  
 Fettwerte, vorhergesagte 221  
 Feuchte, Berechnung in Excel 286  
 Feuchtegehalt 281  
 Feuchtemessung 279  
 Feuchtigkeitsbereich 279  
 Fichte ohne Rinde 81  
 File  
 – ASCII Files 286  
 – ASCII Model 285  
 – Export 233, 286  
 – Export Model 285  
 – Save 233, 282, 287  
 Fluoreszenzspektroskopie 4  
 Fluoreszenzspektrum 184  
 Flüssigkeiten 184  
 Freiheitsgrad 93 f., 176  
 Füllstoff 229, 237
- g**  
 Gasanalysator 131, 133 f., 137 ff.,  
 Gaschromatographie 5, 56  
 – Kapillar-Gaschromatograph 9  
 gaschromatographische Daten 56

- Gaskonzentration 130f.
- Verfahrenstechnik 130
- GC-Analyse *siehe* Gaschromatographie
- Genanalyse 113
- Genaugkeit 93
- Genselektion 113
- Geradengleichung 90, 93
- Gesamtabsorption 76
- Gesamtmittelwert 186
- Gesamtstreuung 96
- Gesamtvarianz 27, 35, 44, 54, 61, 70, 120, 135, 217
- Gewichtsmatrix 37
- Gewichtung 183, 185
- Glättung 187, 209
  - gleitender Mittelwert 187
  - Grad 187
  - Spektrum 256ff.
- Glättungseffekt 189
- Glättungspunkte 189
- Gleichung, linear unabhängige 99
- Gleichungssystem
  - lineares 99
  - Regressionsparameter 99
  - überbestimmtes 100
- grafische Darstellung
  - Einfluss 174
  - Korrelation-Loadings-Plot 52ff.
  - Linienplot 48
  - skalenunabhängige 53
  - umwandeln in numerische Daten 283ff.
- Granulat 198
- Gruppenbildung 70
- Gruppierungen, Ursachen 87
  
- h***
- Häufigkeitsverteilung 12
- Hauptachsen 27, 32
- Hauptachsenkoordinatensystem 29, 51
- Hauptachsensystem 49
- Hauptachsentransformation 22, 32
- Hauptinformation 77
- Hauptkomponenten 7, 27, 36f., 40, 47, 61, 81, 103, 106ff., 132, 207, 215f., 260
  - Anzahl 104, 108, 238
  - berücksichtigen 250
  - Berechnung 40ff.
  - Bestimmung 22
  - grafische Erklärung 24ff.
  - Information 247
  - Interpretation 24
  - Modell 38
- orthogonale 85
- Richtung 56, 243
- Hauptkomponentenanalyse 5, 9, 21ff., 160, 164, 190, 205, 214, 227, 229f., 238, 258, 261
  - Aussage 252
  - Dimensionen 56
  - Durchführung 229ff.
  - für drei Dimensionen 46ff.
  - für zwei Dimensionen 25
  - Interpretation 237, 241
  - mathematisches Modell
  - Modell berechnen 238, 288
  - PCA-Gleichung 38
  - Prinzip 22
  - Spektren 72, 81
  - Überblick 239, 248
  - Wegweiser 86
  - Ziele 24
- Hauptkomponentenmodell, lineares additives 42
- Hauptkomponentenraum 10
- Hauptkomponentenregression 89, 103, 105, 118
  - Beispiel 105
  - Komponenten 120
  - optimales Modell 174, 106ff.
- Hauptvariation 261
- Herstellungsprozess 212, 214, 217
- Heteroskedastizität 98
- High Performance Liquid Chromatography
  - siehe* Gaschromatographie
- Histogramm 66, 168
- Holz 74
- Holzfaser 72
- Holzhackschnitzel 72
- Holzmischung 72
- Holzqualität 73
- Holzsorte 76, 81, 83, 85
- Homoskedastizität 98, 155
- Hotelling-T<sup>2</sup>-Test 21
- HPLC *siehe* High Performance Liquid Chromatography
  
- i***
- Influence Plot 172, 250ff.
- Informationen 24, 27, 34, 36, 40, 46, 77, 80, 120, 146
  - chemische 191, 207
  - entmischen 7f.
  - Gehalt 5, 38
  - Hauptkomponente 62, 79, 87,
  - Hauptvariabilität 185

- lineare 245
- nicht direkt messbare Größen 5
- Nicht-Information 7f.
- Objekte 242
- physikalische 207
- spektrale 145
- relevante 5
- Y-relevante 121
- spektrale 254
- störende 261
- Trennung 7f., 70
- überdurchschnittliche 27, 33
- Y-unrelevante 121
- unterdurchschnittliche 27, 33
- X-Daten 114
- Y-Daten 114
- Informationsaustausch 114
- Informationsgehalt 7
- Informationsverdichtung 5
- Infrarotbereich, mittlerer 123
- Inhaltsstoff 229
- inline 278
- inline-Messung 279
- Interpolation 93
- Interpretation
  - Loadingswerte 87
  - Scores 87
- Interquartile Range *siehe* Quartilsabstand
- Intervallgröße 187
- IR-Bereich 185
- IRQ *siehe* Quartilsabstand
- IR-Spektrum 162
  
- k**
- Kalibration 101, 108, 116, 118, 133, 285
  - abgedeckter Bereich 217
  - Fehler 102, 104
  - inverse 90
  - klassische 90
  - Standardfehler 93
- Kalibrationsgerade 93
- Kalibrationsgüte 97
- Kalibrationsmodell 102, 217
- Kalibrierbereich 93, 124, 177
  - Fettwerte 220
  - optimaler 122
- Kalibrierdaten 90
  - Diagramm 98
  - spektrale 228
- Kalibrierdatenraum 154, 159
- Kalibrierdatenset 89
  - repräsentatives für Y-Datenraum 164
- kalibrieren 153ff.
- Kalibrierfehler 105, 145, 154, 164, 177
- Kalibrierfunktion 6
  - erstellen 91
  - inverse 90
  - klassische 90
- Kalibriergleichung 97f.
- Kalibriermessung 99
- Kalibriermischung 118
- Kalibriermittelpunkt 220
- Kalibriermodell 89, 93, 108, 123, 131, 139, 153, 155, 157, 176, 217ff.
  - Einsatz 220
  - Feuchte 279
  - grafische Überprüfung 97
  - Qualitätskontrolle 160
  - robustes 227
  - Überprüfung 93
  - Vergleich 165f.
- Kalibrierphase 226
- Kalibrierproben 94, 103, 105, 126, 137, 143
  - Anzahl 167, 220
- Kalibrierprozess 6
- Kalibrierraum 179, 217
- Kalibrierschritte 154
- Kalibrierset 131, 261
  - bestimmen 162
- Kalibrierung 89, 94, 105, 112, 143, 159, 251, 272, 275
  - Fehlergrößen 93
  - Güte 98
  - NIR-Spektren 105ff., 117
  - Qualität 93
- Kalibrierungs-Varianz 241
- Kalibriervertrauensbereich 179
- Karhunen-Loeve-Transformation 22
- Käse 211, 214f., 225
- Kategorie 86
- Klassifizierung 2, 7f., 65, 113
  - Daten 5
  - Methode 113
- KLT *siehe* Karhunen-Loeve-Transformation
- Koeffizient 92
- Kollinearität 103, 105
- Kompaktierung 248
- Komponenten, Anzahl 272
- Kontrollprobe 218
- Konvergenz 128
- Konvergenzkriterium 41
- Konvergenztest 128
- Konzentration 142
  - Einzelkomponenten 141
  - Mischkomponenten 141
  - vorhergesagte 140

- Koordinatenachsen 23  
 Koordinatenraum, Objekte 32  
 Koordinatensystem 23, 27, 32, 37, 40f., 120  
 Koordinatenursprung 27, 33, 50  
 Körnigkeit 214  
 Korrelation 6, 18, 54, 87, 92, 96, 127, 218, 272  
 Korrelation-Loadings-Plot 52  
 Korrelationsanalyse 16ff.  
 Korrelationskoeffizient 16, 52, 57, 92, 106  
 Korrelationsmatrix 16, 22  
 Korrelationstabelle 16f.  
 korrelieren 83, 132  
 Kovarianz 16, 39, 114  
 Kovarianzmatrix 22, 38  
 Kreuzvalidierung 94, 108, 123, 134ff., 155ff., 161, 164, 166, 227, 275  
 – vollständige 156  
 – Segment 218  
 – zufällige 218  
 Kubelka-Munk-Gleichung 184
- I**  
 Labormethode 212  
 Lack, wasserlöslicher 279  
 Lambert-Beersches Gesetz 184, 199  
 Lampenalterung 225f.  
 Lampendrift 225  
 Lampenspektrum 225  
 – konstantes 226  
 Langzeitstabilität 227  
 latente Variable 22  
 Least Square-Lösung 115  
 Least Square-Verfahren 92, 100, 104, 128  
 Lebensmittelchemie 112  
 Lebensmittelindustrie 72  
 Lebensmittelüberwachung 162  
 Leichtbier 170f.  
 Leuchtturm-Sonde 279  
 Levelled Variable 245  
 Levels 235  
 Leverage 157, 172, 176, 217, 250  
 Leverage Corrected Residual Validation Variance 158  
 Leverage Correction *siehe* Leverage Korrektur  
 Leverage Korrektur 155, 157ff., 161, 176, 238  
 Licht, reflektiertes 214  
 Lichtstreuung 85  
 Lighthouse-Probe 279
- lineare Effekte 196  
 lineare Regression 90, 92  
 Linearität 160, 275  
 – Abweichung 98  
 Linearkombination 22  
 Liniendiagramm  
 – p-Loading 117  
 – w-Loading 117  
 Linienplots 87, 109, 233, 279  
 Loadings 23, 28, 47, 75, 82f., 103, 128, 130, 132, 215, 248, 260  
 – chemische 115  
 – gewichtete 115, 117, 128, 145  
 – skalieren 52  
 – spektrale 115  
 Loadingsmatrix 29, 40, 43  
 – transponierte 43  
 Loadingsplot 49, 56, 59, 217, 248ff.  
 Loadingsvektor 41, 79, 87, 287  
 Loadingswerte 77, 87
- m**  
 Magnesiumstearat 229, 243, 248  
 Mahalanobis-Abstand 157, 228, 287  
 Mahlgrad 72f., 76, 83, 85  
 Mahlung 79, 203  
 Marketingbereich 113  
 Markieren der Daten 288  
 Massenspektrometrie 5  
 Maßzahl 93  
 Material, inhomogenes 279  
 Matlab-Format 233  
 Matrix 92  
 – Datenmix 4  
 – diagonale 39  
 – Eigenvektoren 22ff.  
 – Eigenschaften 4  
 – Eigenwerte 22ff.  
 – Objekte 4  
 – orthogonale 40  
 – quadratische 39  
 – Spalten 4, 37  
 – transponierte 29, 37  
 – Zeilen 4, 37  
 Measured Y *siehe* Referenzwert  
 Median 12  
 Merkmale 22, 24, 36  
 Messanordnung 185  
 Messfehler 27  
 Messgrößen 6, 91  
 Messsingnal 132  
 Messreihenfolge 98  
 Messung, Ozon 168

- Messwerte 116, 154
    - fehlerbehaftete 91
    - korrelierte 140
  - Microarray-Y-Daten 113
  - Milchprodukte 89
  - Mischung 142, 233, 242
    - homogene 105
  - Mischungsabsorptionsspektrum 148
  - Mischungsraum 141
  - Mischungsspektrum 235, 251
  - Mischungsversuchsplan 141
  - missing 231, 235
  - Mittelpunktsversuch 275
  - Mittelwert 19, 56, 61, 65, 80, 99, 202, 205, 209
  - Mittelwertglättung 209
  - Mittelwertspektrum 76, 83, 87, 198, 248, 287
  - Mittenzentrierung 37f., 50, 108, 183, 185, 238
  - mittlerer Kalibrierfehler 155
  - mittlerer Fehler 94, 167
  - mittlerer Validierfehler 156
  - MLR 99, 140
    - Beispiel 100
    - Ziel 99
  - Modell
    - Einsatz 211ff.
    - erweitertes 273
    - Klassifizierung 8
    - lineares 102
    - lineares additives 38
    - lokales 114
    - optimales 153, 166
    - PLS1 129f.
    - Regressionsmodell 8
    - robustes 126
    - speichern 275
    - Wartung 228
  - Modellanpassung 162
  - Modellfehler 153
  - Modellmittelpunkt 93, 176, 181
  - Modelloffset 104
  - Modellpflege 159
  - Modify
    - Derivates 253
    - Edit Set 231, 248, 257, 263
    - MSC/EMSC 257
    - Sample Set 263
    - Smoothing 257
    - SNV 279
    - Transform 253, 257
    - Transport 286
  - Transpose 286
  - Variable Set 257, 263
  - molarer Extinktionskoeffizient 184
  - Moving Average 257
  - MS *siehe* Massenspektrometrie
  - MSC 198, 209, 261
  - MSC-Korrektur 199, 281
  - Multi Linear Regression *siehe* multiple lineare Regression
  - multiple lineare Regression 89, 99, 103
  - Multiplicative Scatter Correction 198
  - Multiplicative Signal Correction 198
  - multivariate Datenanalyse 1ff., 10, 21, 100
    - Datensatz 4
    - dreidimensionale 5
    - höher dimensionale 5
    - mehrdimensionale 5
    - Ziele 5, 7f.
  - multivariate Regression 89, 94, 96f., 111
  - multivariate Regressionsmethode 89
  - multivariate Regressionsverfahren 6
  - Mustererkennung 2
- n**
- Nachkalibration 177
  - Naturprodukt 211ff., 225
  - Nicht-Information 77
  - Nichtlinearität 99, 102, 155, 174
  - NIPALS 112
    - Algorithmus 40ff.
  - NIR-Absorptionsspektren 82, 201, 203
  - NIR-Bereich 74, 80f., 185, 230
  - NIR-MIR-Spektrometer 123
  - NIR-MIR-Spektrum 122
  - NIR-Spektren 72, 81, 89, 105, 107, 109, 112, 118, 122, 215
  - EMSC-korrigiertes 263
  - mittenzentrierte 84
  - SNV-transformiertes 214
  - NIR-Spektroskopie 6, 72, 81, 112, 211, 261, 279
  - Nonlinear Iterative Partial Least Square *siehe* NIPALS
  - Normalverteilung 13
    - prüfen 8
    - normiert 97
  - Normierung 207, 209
    - Mittelwert 186, 204
- o**
- Oberfläche 279
  - Objekt 36, 231

- Objektbereich definieren 231
- Objektname 231
- Obstbrände 9, 56
- Offset 191, 272
  - konstanter 192
  - linearer 192
  - mittlerer 198
- Oktanzahl ROZ 122
- OLS *siehe* MLR
- Online-Einsatz 220ff., 227
- Online-Kontrolle 122
- Online-Messung 211ff.
- Online-Validierung 159
- Online-Vorhersagemodell 227
- Optimierung, Zielgrößen 130
- Ordinary Least Squares *siehe* MLR
- organoleptisch 63, 65
- Original Property *siehe* Referenzwert
- Originaldaten reproduzieren 80
- orthogonal 29, 32, 117
- Ottokraftstoff 122
- Overfitting 153
- Ozonloch 169
- Ozonmessung 169
  
- p**
- Panel-Studien 6
- Partial Least Squares *siehe* PLS-Regression
- Partial Least Squares Regression *siehe* PLS-Regression
- Partikelgröße 207
- PC *siehe* Hauptkomponenten
- PCA *siehe* Hauptkomponentenanalyse
- PCR *siehe* Hauptkomponentenregression
- Pellets 279
- Pharmaindustrie 72
- pharmazeutische Wirksubstanz *siehe* API
- pharmazeutischer Wirkstoff *siehe* API
- Photometer 91
- pH-Wert 100f.
- Plausibilität 8
- Plausibilitätsprüfung 168
- P-Loadings 115, 285
  - Interpretation 117
- Plot
  - Line 235
  - Loadings 248, 270
  - Loadings Weights 270
  - Predicted and Measured 281
  - Predicted versus Measured 271
  - Prediction 277
  - Raw Coefficient 283
  - Regression Coefficient 270, 283
- Residuals 250, 273
- RMSE 269
- Scores 242
- Variances and RMSEP 241, 269
- PLS *siehe* PLS-Regression
- PLS1 113
  - Beispiel 117
- PLS1-Modell 129f., 132, 218
- PLS-Modell
  - experimentieren 288
  - Vorhersage 289
- PLS2 127, 131, 133
  - Beispiel 130, 141
- PLS2-Komponenten, Berechnung 127
- PLS2-Modell 129f., 132, 145, 218
- PLS2-Regression 142ff.
- PLS-Ergebnisse
  - Interpretation 266
- PLS-Gewichte 117
- PLS-Kalibrierung 117
- PLS-Komponente 114ff., 129, 133, 135, 137, 143, 162, 218, 220, 223
  - Anzahl 116, 139, 176, 223f., 227
  - optimale Anzahl 220
- PLS-Modell 227
  - erstellen 288
  - lokales 128
  - optimales 118
  - validieren 121, 289
- PLS-Regression 6, 109, 111f., 114, 140, 229, 261ff.
  - Ergebnis 275
  - Komponenten 117
  - mehrere Variablen 127
  - Y-Variable 113
  - Ziel 116
- PLS-Scoreplot 266
- P-Matrix 127
- Polynom 253
  - vierten Grades 190
  - zweiten Grades 190
- Polynomableitung 209
- Polynomglättung 187, 209
- Predicted Y *siehe* Referenzwert
- Predicted Residual Sum of Squares *siehe* PRESS und Fehlerquadratsumme
- Predicted versus Measured 271, 273, 277
- Predicted with Deviation 277
- Prediction *siehe* Vorhersage
- PRESS 94f.
- Pressdruck 229, 248, 250
- Principal Component Analysis *siehe* Hauptkomponentenanalyse

Principal Component Regression *siehe*  
 Hauptkomponentenregression  
 Proben  
 – laufende 212  
 – repräsentative 159, 164, 166  
 – unbekannte 175  
 Produktionsüberwachung 211ff.  
 Programme 117  
 – Excel Export 286  
 – SAS 39  
 – SPSS 39  
 – The Unscrambler 37, 40, 42, 112, 175,  
 229ff.  
 Projektion  
 – Hauptachse 32  
 – Objekte 32  
 Prozess, Variabilität 227  
 Prozessanalysentechnik 130  
 Prozessführung, adaptive 211  
 Prozessmittelpunkt 223  
 Prozessparameter 72f.  
 Prozesszustand 214  
 Prüfung auf Normalverteilung, grafische  
 10  
 Pulver 198  
 2-Punkt-Kalibrierung 279  
 Punkt-Punkt-Ableitung 193ff.

**q**

Q-Loadings 128, 138  
 Q-Matrix 114, 127  
 quadratische Terme 102  
 qualitative Analyse 72  
 Qualitätsmerkmale 4, 211  
 Qualitätsparameter 211  
 Qualitätsregelkarte 179, 223  
 Quartile 12f.  
 Quartilsabstand 13

**r**

Rauschanteil 80  
 Rauschen 46, 77, 85, 111, 123ff., 154,  
 177, 183, 187, 217f., 223  
 Referenzanalytik 160  
 Referenzprobe 220, 227  
 Referenzspektrum 199  
 Referenzwerte 89ff., 96f., 108, 126, 154,  
 282  
 Reflexionsspektrum 110  
 Reflexion 183  
 – diffuse 185, 203, 211, 213, 230  
 – gerichtete 185  
 Reflexionssonde 72, 279

Regelkarte 181, 228  
 – Trend 226  
 Regression 7f., 90  
 – Fehler 93  
 – lineare 90, 92  
 – multiple 97  
 – multiple lineare 94, 96157  
 – multivariate 89, 94, 96f., 111  
 – univariate lineare 92  
 Regression Overview 266, 269, 271  
 Regressionsanalyse 89  
 Regressionsgerade 92  
 Regressionsgleichung 89, 100, 104, 106  
 Regressionskoeffizienten 92ff., 99f., 104f.,  
 109f., 116, 120, 124, 126, 129, 134, 147f.,  
 218f., 275  
 – Darstellung 270  
 – Größe 97  
 – Interpretation 97  
 – Maxima 271  
 – Minima 271  
 – Signifikanz 97  
 Regressionskoeffizientenmatrix 129  
 Regressionsmethode, multivariate 89  
 Regressionsmodell 89, 104, 131, 277  
 – Export als Textdatei 285ff.  
 – Hauptkomponenten 89  
 – multivariates 90  
 – multiples lineares 89  
 – Partial Least Square 89  
 – Verwendung 276ff.  
 Regressionsverfahren, multivariates 6  
 Regressionswert  $b_0$  283  
 Reinspektrum 233  
 Reinsubstanz 233, 242  
 Reproduzierbarkeit 42, 230  
 Reproduzierung 43  
 Residual Validation Variance 269  
 Residual Variance 241  
 Residuen 23, 45, 80, 93, 98, 108, 154, 156,  
 158, 172, 275, 285  
 – Mittelwert 95  
 – normalverteilte 98, 155  
 – Quadratsumme 94  
 – zufällig verteilte 101  
 Residuenanalyse 98  
 Residuenmatrix 36, 42, 44  
 Residuenplots 98, 101, 155, 174, 273  
 Response *siehe* Zielgröße  
 Restvarianz 35, 37, 44, 93f., 108f., 116,  
 118f., 123, 125, 129, 137, 139, 143, 155f.,  
 172, 176, 217, 220, 239, 250, 269, 285  
 – Einheit 270

- Rindenanteil 76  
 RMSE 94  
 RMSEC 94, 101f., 118, 145, 155, 272  
 RMSECV 94, 156, 272, 275  
 RMSELIC 158  
 RMSEP 94, 125f., 218, 220, 223f., 227, 272, 277  
 Robustheit 105, 149, 180  
 Rohdaten 8  
 – Plot 233  
 Rohmaterial 225  
 Rohstoffqualität 72  
 Rotationsverfahren *siehe* Entmischen von Information  
 Routinebetrieb 225
- s**  
 Sample Grouping 243, 246  
 Sample Sets 232  
 Samples 231  
 Säulendiagramm 233  
 Savitzky-Golay-Ableitung 195ff.  
 Savitzky-Golay-Glättung 187  
 Savitzky-Golay-Polynom 257  
 Scatterplots *siehe* Streudiagramme  
 Schätzfehler 154  
 Schwankungsbreite 217  
 – erwartete 168  
 Schwerpunkt 93  
 Scorematrix 37, 40  
 Scoreplots 32, 48f., 57, 75, 82, 86, 161, 214, 242  
 Scorer Raum 167, 227  
 Scores 23, 27, 37, 81, 103, 128, 130  
 – skalieren 52  
 Scores und Loadings  
 – Bedeutung 29ff.  
 – rechnen mit 42ff.  
 Scorevector 41  
 Scorewerte 23, 27, 42, 77, 79, 132, 160  
 – Gruppen 86  
 – negative 62, 83, 87  
 – positive 62, 83, 87  
 – überdurchschnittliche 62, 87  
 – unterdurchschnittliche 62, 87  
 Screening-Phase 130  
 SE 95  
 SEC 101f., 105, 118, 121  
 SECV 121, 135  
 Segment 162  
 selbstmodellierende Kurvenauflösungsverfahren *siehe* Entmischen von Information  
 Self-Modelling Curve Resolution *siehe* Entmischen von Information  
 Sensorik 112  
 SEP 121, 137, 220, 223f., 227, 272, 277  
 Severity Factor of Chemical Treatment  
*siehe* Behandlungsfaktor  
 SFC *siehe* Behandlungsfaktor  
 Signal-Korrektur  
 – multiplikative 198  
 Signal-Rauschverhältnis 8, 194  
 Signifikanz 103  
 – Bestimmung 97  
 Signifikanzprüfung 165  
 SIMCA *siehe* Soft Independent Modelling of Class Analogy  
 Simplexraum 141  
 Singular Value Decomposition *siehe* Singulärwertzerlegung  
 Singulärwertzerlegung 22, 39  
 Skalierung 97, 114  
 Slope 272  
 SNV 202ff., 209, 261  
 SNV-Transformation 203, 214  
 SNV-Vorverarbeitung 279  
 Soft Independent Modelling of Class Analogy 5  
 Software *siehe* Programme  
 Sonde 81  
 Speichern, PLS-Modell 289  
 spektrale Auflösung 193  
 Spektren 4, 6, 79, 91, 103, 109, 113, 116, 185  
 – EMSC-korrigierte 200, 207  
 – Gesamtmittelwert 186  
 – ideale 198  
 – mittenzentrierte 76, 83  
 – reproduzieren 77, 85  
 – SNV-korrigierte 207, 209  
 – Standardisierung 86, 202ff.  
 – streukorrigierte 257  
 – strukturierte 189  
 – Variation 235  
 – verrauschte 209  
 Spektrennormierung 185  
 Spektrenvorbehandlung 185  
 Spektrenwerte 105, 113  
 Spektrometer 230  
 Spektrometerrauschen 249  
 Spektroskopie 4, 72, 112  
 spektroskopische Kalibrierung mit Unscrambler, Checkliste 287  
 spektroskopische Methoden 72  
 Spirituosen 9  
 Spray Coater 278

- Sprühbeschichtungsmaschine 278  
 Stabilitätsverletzung 223  
 Standard Error of Performance *siehe* SEP  
 Standard Error of Prediction *siehe* SEP  
 Standard Normal Variate Transformation 202 ff.  
 Standardabweichung 56, 65, 202  
 – Residuen 95 ff., 137  
 Standardfehler 93  
 – Kalibrierung 106 f., 110, 121  
 Standardisierung 10, 39, 65, 84, 97, 183, 273  
 – Messdaten 65 ff.  
 – Spektren 202  
 statistische Versuchsplanung 154, 165  
 Steigung 85, 272  
 – Gerade 90  
 Steinobstbrände 162  
 Sternpunktversuch 100  
 Störfaktor 227  
 Störgas 130  
 Störsignal 187  
 Streudiagramme 16, 18, 25  
 Streueffekt 207, 214, 261  
 – Korrektur 198  
 Streueinfluss 209  
 Streukorrektur 254, 279  
 – berechnen 257 ff.  
 – multiplikative 198  
 Streuleistung 85  
 Streuung  
 – erklärte 96  
 – gesamte 96  
 – mittlere 198  
 – wellenlängenabhängige 198  
 Streuverhalten 204  
 Streuverlust 190  
 Streuzentrum 198  
 Struktur, spektrale 217  
 studentized 273  
 Stützpunkte 93, 197  
 – Zahl 209  
 Stützstellen 253  
 Stützstellenzahl 187  
 SVD *siehe* Singulärwertzerlegung
- t**  
 Tablettenherstellung 229  
 Tablettenmischung 230  
 Tablettenproduktion 261  
 Task  
 – PCA 238  
 – Predict 276  
 – Regression 263, 281
- Temperaturänderung 212  
 Temperaturunterschied 81  
 Temperatur-Zeiteinfluss 73  
 Testdatenset 275  
 – separates 155  
 Testphase 224, 226  
 Testset 137, 261  
 – unabhängiges 120 f., 161  
 Testsetvalidierung 123  
 Theophyllin 229, 243, 247, 251  
 Theophyllingehalt, Vorhersage 276 ff.  
 Theophyllinkonzentration 248, 254, 258,  
 270  
 – gemessene 271  
 – vorhergesagte 271  
 T-Matrix 127  
 Transformation *siehe* Standardisierung  
 Transformation 10, 184  
 – spektroskopische 183  
 Transformationsmatrix 39 f.  
 Transmission 123, 141, 162, 183  
 Trockenmasse 211, 217  
 Trocknung 279  
 Trocknungsvorgang 278  
 Trocknungszeit 286  
 True Value *siehe* Referenzwert  
 T-Scores 134  
 Tutorial 229
- u**  
 Überfitten 153  
 U-Matrix 114, 127  
 Underfitting 105, 153  
 U-Scores 128  
 UV-Bereich 141, 185  
 UV-VIS-Absorptionsspektren 204
- v**  
 Validation 285  
 Validierdatensatz 148  
 – repräsentativer 227  
 – unabhängiger 227  
 Validierdatenset 90  
 Validieren 153 ff.  
 Validierfehler 153  
 Validiermethode 220, 238  
 Validiermodell 218  
 Validierphase 220, 226  
 Validierproben 126, 176  
 Validierset 131, 162, 261  
 Validierspektren 121  
 Validierung 80, 95, 108, 116, 118, 137,  
 180, 266, 272

- externe 155, 159, 161
- interne 155
- separate 159
- Testset 159
- unabhängiges Testset 110
- Validierungsergebnisse 121
- Validierungsmethoden 161
- Validierungsrestvarianz 269
- Validierungssegment 156
- Validierungsvarianz 241
- Validierungsverfahren 154
- variable selection *siehe* Variablenauswahl
- Variable 7, 22, 36, 231
  - abhängige 90, 99
  - Auswahl 7f., 71
  - definieren 231
  - Druck 345
  - kategoriale 235
  - kollineare 103, 111
  - Mittelwert 27
  - Name 231
  - nominale 235
  - originale 103
  - qualitative 235
  - quantitative 235
  - Selektion 122
  - Sets 232, 257
  - Skala 65
  - standardisierte 66, 133
  - Stufen 236
  - Transformation 99
  - unabhängige 89f., 99, 101
  - unkorrelierte 103
  - X 89
  - Y 89
- Varianz 38f., 76, 85, 96, 103, 114
  - erklärte 35ff., 47, 55, 109, 121, 125, 241, 269
  - gesamte 23
  - Hauptkomponente 35ff.
  - maximale 23
  - normalverteilt 19
  - relative erklärte 54
  - Richtung der maximalen 25, 27, 29
- Varianzhomogenität 98
- Varianzinhomogenität 98
- Variation
  - spektrale 242
  - zufällige 47
- Vektor 92
- Vektornormierung 209
  - Betrag 1 186
  - Länge 1 186
- Veränderung, spektrale 225
- Vereinfachung 7f.
- Vermischungsgrad 214
- Versuche, linear unabhängige 100
- Versuchsplan 97, 130, 154, 156
  - Auswertung 100
  - Mittelwert 245
  - statistischer 154
  - zentraler zusammengesetzter 230
- Versuchsplanung 100, 103
  - statistische 165, 227
- Versuchsräum 275
- Verteilung 12f., 16, 66
  - Normalverteilung 10
  - prüfen 8f.
  - schiefe 10
  - Streuung 12
  - symmetrische 12
- Vertrauensbereich, vorhergesagte Y-Daten 175
- 99%-Vertrauensbereich 179
- Vertrauensintervall 175
  - grafische Darstellung 177
- Verunreinigung 190
- View
  - Min/Max 257
  - Numerical 283
  - Plot Statistics 272
  - Regression Line 272
  - Scaling 235, 257
  - Source 241
  - Trend Lines 272
- VIS-Absorptionsspektren 75
- VIS-Bereich 74, 141, 185
- VIS-NIR-Spektrometer 72
- VIS-Spektren 72
- visuelle Prüfung der Daten 287
- Vorbehandlung 123, 214
- Vorbehandlungsmethoden, Vergleich 203ff.
- vorhergesagter Wert 96
- Vorhersagebereich 220, 223, 227
- Vorhersagefehler 135, 153, 158f., 161, 175
- Vorhersagegenauigkeit 91, 98, 110, 124, 126
- Vorhersagegüte 97
- Vorhersageintervall 175, 218, 220, 222, 287
- Vorhersagen 95, 104, 109, 116, 153ff., 180
  - API-Konzentration 121
  - Genauigkeit 90
  - Güte 175
  - ROZ 124

Vorhersagewerte 98, 139, 276

– offset 224

Vorverarbeitung 207, 279

– Spektren 288

Vorverarbeitungsmethoden 185

Vorversuch 211ff., 227

Vorwissen 86

#### **w**

Wahrscheinlichkeitsplots 10f., 16, 168

Wasser 81, 212

– Kombinationsschwingung 281

– Oberschwingung 281

Wasserbande 74, 81, 85, 212, 217

Wechselwirkung 101f., 130, 133, 135, 137

Weglänge 198

Weglängenunterschied 199

Weights 238

Weißspektrum 225

Weißstandard 225

Wellenlänge 83, 85, 105, 109

Wellenlängenbereich 73, 118, 185, 211

Wellenzahl 123f.

Wellenzahlbereich 162

Wendepunkte 194

Werte

– gemessene 218

– vorhergesagte 97, 218

Wertebereich 99

Whisker 12ff.

Wichtungsvektoren 117

Wiederholfehler 266

Wiederholgenauigkeit 102

Wiederholungsmessung 156, 275

Wiederholversuch 100

Wirkstoff 229

W-Loadings 115, 120, 128, 134f., 138, 285

– Interpretation 117

W-Loadingsplot 133

W-Matrix 114

Würfelversuch 100

Wurzel aus mittlerem quadratischen

Fehler 94

#### **x**

X-Daten 154

X-Datenbereich 164

X-Datenraum 159f., 218

X-Datenset 263

X-Loadings 138

– gewichtete 137

X-Matrix, mittenzentrierte 127

X-Validation Variance 239

#### **y**

y-Achsenabschnitt 90

Y-Daten 154

Y-Datenbereich 164

Y-Datenset 263

Ydev 175, 177, 180, 223f., 227, 277

Y-Deviation 175

Y-Loading 138

Y-Matrix, mittenzentrierte 127

Y-Restvarianz 173

Y-Validation Variance 266

Y-Variable 266

#### **z**

zentraler zusammengesetzter Plan 100f., 230

Zentralversuch 100, 230, 262

Zielgrößen 6, 8, 91f., 97, 99, 100f., 104f., 116, 121, 124, 227

– Ausbeute 102

– korrelierte 130

– unkorrelierte 130

z-skaliert 273

z-Transformation *siehe* Standardisierung

Zucker-Stärke-Pellets 279

Zusammenhänge 24, 121

– Beschreibung 97

– finden 16ff.

– funktionale 16, 89f., 99, 103

– nicht lineare 16

– X- und Y-Daten 121

– zwischen X und y 115

Zustandsgröße 99





















