

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
 Analysator 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
 Ausreißerelementierung, automatische 168

Autoskalierung *siehe* Standardisierung
 Axialversuch 100

b

Bande 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
 Benzinmischung 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 25 ff.
 - Zusammenhang 3
- Datenanalyse, explorative 40, 85 f., 229
- Datenbereich 231
- Datendatei einlesen 230
- Datenmatrix 7, 36
 - Eigenschaften 7
 - mittenzentrierte 41
 - Objekte 7
- Datenmittelpunkt 27, 33
- Datenmodellierung 7 f.
- Datenpunkte
 - Einfluss 157 ff.
 - Projektion 27
- Datenraum 27, 227
- Datenreduktion 5, 7 f., 23 f., 27, 36, 49
- Datenschwerpunkt 27, 50
- Datentabelle speichern 233
- Datenvorverarbeitung 73, 86 f., 124, 183 ff., 253, 261
- Defibrator 72 f.
- 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* Versuchsplanung
- Druck 100 f.

- e**
- Edit
 - Convert to Category Variable 237
 - Copy 283
 - Insert 235
 - Options 233, 241, 243 f.
 - Sample Grouping 262, 266
 - Zwischenablage 283
- Eigenschaften 6 f., 36, 112 f., 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 Validierungs-
 restvarianz 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* Hauptkomponenten-
 analyse
 Faktorenkoordinatensystem 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
 Fasergröße 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
 Fehlmessung 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 130 f.
- Verfahrenstechnik 130
- GC-Analyse *siehe* Gaschromatographie
- Genanalyse 113
- Genauigkeit 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 256 ff.
- Glättungseffekt 189
- Glättungspunkte 189
- Gleichung, linear unabhängige 99
- Gleichungssystem
 - lineares 99
 - Regressionsparameter 99
 - überbestimmtes 100
- grafische Darstellung
 - Einfluss 174
 - Korrelation-Loadings-Plot 52 ff.
 - Linienplot 48
 - skalenunabhängige 53
 - umwandeln in numerische Daten 283 ff.
- 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, 36 f., 40, 47, 61, 81, 103, 106 ff., 132, 207, 215 f., 260
 - Anzahl 104, 108, 238
 - berücksichtigen 250
 - Berechnung 40 ff.
 - Bestimmung 22
 - grafische Erklärung 24 ff.
 - Information 247
 - Interpretation 24
 - Modell 38
 - orthogonale 85
 - Richtung 56, 243
 - Hauptkomponentenanalyse 5, 9, 21 ff., 160, 164, 190, 205, 214, 227, 229 f., 238, 258, 261
 - Aussage 252
 - Dimensionen 56
 - Durchführung 229 ff.
 - für drei Dimensionen 46 ff.
 - 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, 106 ff.
 - Hauptvariation 261
 - Herstellungsprozess 212, 214, 217
 - Heteroskedastizität 98
 - High Performance Liquid Chromatography *siehe* Gaschromatographie
 - Histogramm 66, 168
 - Holz 74
 - Holzfasern 72
 - Holz hackschnitzel 72
 - Holzmischung 72
 - Holzqualität 73
 - Holzsorte 76, 81, 83, 85
 - Homoskedastizität 98, 155
 - Hotelling-T²-Test 21
 - HPLC *siehe* High Performance Liquid Chromatography
 - i**
 - Influence Plot 172, 250 ff.
 - Informationen 24, 27, 34, 36, 40, 46, 77, 80, 120, 146
 - chemische 191, 207
 - entmischen 7 f.
 - 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 153 ff.
- 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, 217 ff.
 - 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 105 ff., 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
 Mittelpunktversuch 275
 Mittelwert 19, 56, 61, 65, 80, 99, 202,
 205, 209
 Mittelwertglättung 209
 Mittelwertspektrum 76, 83, 87, 198, 248,
 287
 Mittenzentrierung 37 f., 50, 108, 183,
 185, 238
 mittlerer Kalibrierfehler 155
 mittlerer Fehler 94, 167
 mittlerer Validierfehler 156
 MLR 99, 140
 – Beispiel 100
 – Ziel 99
 Modell
 – Einsatz 211 ff.
 – erweitertes 273
 – Klassifizierung 8
 – lineares 102
 – lineares additives 38
 – lokales 114
 – optimales 153, 166
 – PLS1 129 f.
 – 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 1 ff., 10, 21,
 100
 – Datensatz 4
 – dreidimensionale 5
 – höher dimensionale 5
 – mehrdimensionale 5
 – Ziele 5, 7 f.
 multivariate Regression 89, 94, 96 f., 111
 multivariate Regressionsmethode 89
 multivariate Regressionsverfahren 6
 Mustererkennung 2

n

Nachkalibration 177
 Naturprodukt 211 ff., 225
 Nicht-Information 77
 Nichtlinearität 99, 102, 155, 174
 NIPALS 112
 – Algorithmus 40 ff.
 NIR-Absorptionsspektren 82, 201, 203
 NIR-Bereich 74, 80 f., 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 220 ff., 227
- Online-Kontrolle 122
- Online-Messung 211 ff.
- 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 100 f.
- 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 129 f., 132, 218
- PLS-Modell
 - experimentieren 288
 - Vorhersage 289
- PLS2 127, 131, 133
 - Beispiel 130, 141
- PLS2-Komponenten, Berechnung 127
- PLS2-Modell 129 f., 132, 145, 218
- PLS2-Regression 142 ff.
- PLS-Ergebnisse
 - Interpretation 266
- PLS-Gewichte 117
- PLS-Kalibrierung 117
- PLS-Komponente 114 ff., 129, 133, 135, 137, 143, 162, 218, 220, 223
 - Anzahl 116, 139, 176, 223 f., 227
 - optimale Anzahl 220
- PLS-Modell 227
 - erstellen 288
 - lokales 128
 - optimales 118
 - validieren 121, 289
- PLS-Regression 6, 109, 111 f., 114, 140, 229, 261 ff.
 - 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 94 f.
- Pressdruck 229, 248, 250
- Principal Component Analysis *siehe* Hauptkomponentenanalyse

Principal Component Regression *siehe*
Hauptkomponentenregression

Proben

- laufende 212
- repräsentative 159, 164, 166
- unbekannte 175

Produktionsüberwachung 211 ff.

Programme 117

- Excel Export 286
- SAS 39
- SPSS 39
- The Unscrambler 37, 40, 42, 112, 175, 229 ff.

Projektion

- Hauptachse 32
- Objekte 32

Prozess, Variabilität 227

Prozessanalysetechnik 130

Prozessführung, adaptive 211

Prozessmittelpunkt 223

Prozessparameter 72 f.

Prozesszustand 214

Prüfung auf Normalverteilung, grafische 10

Pulver 198

2-Punkt-Kalibrierung 279

Punkt-Punkt-Ableitung 193 ff.

q

Q-Loadings 128, 138

Q-Matrix 114, 127

quadratische Terme 102

qualitative Analyse 72

Qualitätsmerkmale 4, 211

Qualitätsparameter 211

Qualitätsregelkarte 179, 223

Quartile 12 f.

Quartilsabstand 13

r

Rauschanteil 80

Rauschen 46, 77, 85, 111, 123 ff., 154, 177, 183, 187, 217 f., 223

Referenzanalytik 160

Referenzprobe 220, 227

Referenzspektrum 199

Referenzwerte 89 ff., 96 f., 108, 126, 154, 282

Reflektionsspektrum 110

Reflexion 183

- diffuse 185, 203, 211, 213, 230
- gerichtete 185

Reflexionssonde 72, 279

Regelkarte 181, 228

- Trend 226

Regression 7 f., 90

- Fehler 93
- lineare 90, 92
- multiple 97
- multiple lineare 94, 96 f., 111
- univariate lineare 92

Regression Overview 266, 269, 271

Regressionsanalyse 89

Regressionsgerade 92

Regressionsgleichung 89, 100, 104, 106

Regressionskoeffizienten 92 ff., 99 f., 104 f., 109 f., 116, 120, 124, 126, 129, 134, 147 f., 218 f., 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 285 ff.
- Hauptkomponenten 89
- multivariates 90
- multiples lineares 89
- Partial Least Square 89
- Verwendung 276 ff.

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, 93 f., 108 f., 116, 118 f., 123, 125, 129, 137, 139, 143, 155 f., 172, 176, 217, 220, 239, 250, 269, 285

- Einheit 270

- Rindenanteil 76
- RMSE 94
- RMSEC 94, 101 f., 118, 145, 155, 272
- RMSECV 94, 156, 272, 275
- RMSELC 158
- RMSEP 94, 125 f., 218, 220, 223 f., 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 195 ff.
- Savitzky-Golay-Glättung 187
- Savitzky-Golay-Polynom 257
- Scatterplots *siehe* Streudiagramme
- Schätzfehler 154
- Schwankungsbreite 217
 - erwartete 168
- Schwerpunkt 93
- Scorematrix 37, 40
- Scoreplots 32, 48 f., 57, 75, 82, 86, 161, 214, 242
- Scoreraum 167, 227
- Scores 23, 27, 37, 81, 103, 128, 130
 - skalieren 52
- Scores und Loadings
 - Bedeutung 29 ff.
 - rechnen mit 42 ff.
- 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 101 f., 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, 223 f., 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 202 ff., 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, 202 ff.
 - 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 7 f., 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 89 f., 99, 101
 - unkorrelierte 103
 - X 89
 - Y 89
- Varianz 38 f., 76, 85, 96, 103, 114
 - erklärte 35 ff., 47, 55, 109, 121, 125, 241, 269
 - gesamte 23
 - Hauptkomponente 35 ff.
 - 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 7 f.
- 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
- Versuchsraum 275
- Verteilung 12 f., 16, 66
 - Normalverteilung 10
 - prüfen 8 f.
 - 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 203 ff.
- vorhergesagter Wert 96
- Vorhersagebereich 220, 223, 227
- Vorhersagefehler 135, 153, 158 f., 161, 175
- Vorhersagegenauigkeit 91, 98, 110, 124, 126
- Vorhersagegüte 97
- Vorhersageintervall 175, 218, 220, 222, 287
- Vorhersagen 95, 104, 109, 116, 153 ff., 180
 - API-Konzantration 121
 - Genauigkeit 90
 - Güte 175
 - ROZ 124

Vorhersagewerte 98, 139, 276

– offset 224

Vorverarbeitung 207, 279

– Spektren 288

Vorverarbeitungsmethoden 185

Vorversuch 211 ff., 227

Vorwissen 86

W

Wahrscheinlichkeitsplots 10 f., 16, 168

Wasser 81, 212

– Kombinationsschwingung 281

– Oberschwingung 281

Wasserbande 74, 81, 85, 212, 217

Wechselwirkung 101 f., 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 123 f.

Wellenzahlbereich 162

Wendepunkte 194

Werte

– gemessene 218

– vorhergesagte 97, 218

Wertebereich 99

Whisker 12 ff.

Wichtungsvektoren 117

Wiederholfehler 266

Wiederholgenauigkeit 102

Wiederholungsmessung 156, 275

Wiederholversuch 100

Wirkstoff 229

W-Loadings 115, 120, 128, 134 f., 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 159 f., 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, 223 f., 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 100 f., 230

Zentralversuch 100, 230, 262

Zielgrößen 6, 8, 91 f., 97, 99, 100 f., 104 f., 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 16 ff.

– funktionale 16, 89 f., 99, 103

– nicht lineare 16

– X- und Y-Daten 121

– zwischen X und y 115

Zustandsgröße 99

