

Index

- F*-Test, **39f.**, **157f.**
 - Faktorbestimmung, **39f.**
 - Probenvarianz, **39**
- Abbruchkriterium, *siehe* Stopfunktion
- Achsenabschnitt, **25f.**
- Analysenverfahren
 - multivariate \sim , 11
 - univariate \sim , 11f.
- Auswahlverfahren, *siehe* Selektion
- Automatisierung, 137
- Basislinieneffekte, **68**
- Chromosom, 3, 45, 131
 - Ähnlichkeit von \sim en, 132
- Classical Least Squares, 13
- Coefficient-Weighting-Spektrum, *siehe* Property-Weighting-Spektrum
- Datenreduktion, **26ff.**
- Dichtefunktion, 57
 - Lebesgue-Dichten, 58
- Dominanz, 129
- Durbin-Watson-Test, **105f.**
 - Autoregression, 105
 - Linearität, 105
- Eigenpektrum, *siehe* Faktor
- Eigenvektor, 22, 61
 - matrix, 20
- Eigenwertzerlegung, **18f.**
- Empfindlichkeit, 56, 63, *siehe* Net Analyte Signal
- Faktor, 2, **20**, 61
 - auswahl, **35ff.**
 - gewicht, 20, 26
 - gewicht, 85
 - Informationsgehalt, **105**
 - primärer \sim , 36
 - sekundäre \sim , 36
 - Selektion, 85
- Fitnessfunktion, **48**
- Full-Cross-Validation, 32
- GA, *siehe* Genetischer Algorithmus
- Generalized Cross-Validation, **32**
- Genetischer Algorithmus, 3, 13, **43ff.**
 - Deme, 128
 - Diffusions-Modell, 128
 - Fitnessfunktion, **104ff.**
 - Hybridisierung, 127
 - Initialisierung, 129
 - Konvergenz, **55**, **118ff.**, 133
 - Verhalten, 55, 119
 - Lösungsraum, 5, 38
 - Migrations-Modell, 128, **130ff.**
 - Nebeneffekte, 129
 - Paralleler, **128ff.**
 - Robustheit, **56**, **124ff.**, 133
- Gesamtvarianz, **17**
- Hammingdistanz, **132**
- Hybridisierung, **85**
- Identitätsmatrix, 15
- Indikator-Funktion, 36
- Initialisierung, *siehe* Genetischer Algorithmus
- Interaktion, 129, **132ff.**
 - \sim skriterium, **133**
 - \sim smodul, **133**, 134
 - \sim spartner, 133
- Intercept, *siehe* Achsenabschnitt

- Invader, **54**
- Inverse Least Squares, 13
- K-Matrix Methode, *siehe* Classical Least Squares
- Kalibration
 - Datensatz, 73
 - pseudo-univariate, 61
 - robuste, **28**
- Kalibrationsmethode
 - inverse $\sim n$, 61
- Kodierung, 47
- Konvergenz, 133, *siehe* Genetischer Algorithmus
- Korrelation, 85
 - skoeffizient, 85
 - vektor, 85
- Kovarianzmatrix, 15

- Lambert–Beersches Gesetz, 11
 - inverses \sim , 12
- Last Improved Generation, 134
- Least–Squares–Verfahren, **22ff.**
- Loadings, *siehe* Faktorgewichte
- Lorentzprofil, 67

- Matrix
 - orthogonale \sim , 15
- Mittelwertspektrum, 26
- MLR, *siehe* Multiple lineare Regression
- Modell
 - Invarianz, 13
- Mutation, 45, **53f.**

- NAS, *siehe* Net Analyte Signal
- Net Analyte Signal, **60ff.**

- Operator, 48, **52ff.**
 - Crossover, 133
 - Invader, 48
 - Mutation, 3, 48
 - Rekombination, 3
 - Uniform–Crossover, 48
- Overfitting, **27ff.**

- P-Matrix Methode, *siehe* Inverse Least Squares

- Partial Least Squares, 2, 13
- PCA, *siehe* Principal Component Analysis
- PCR, *siehe* Principal Component Regression
- PLS, *siehe* Partial Least Squares
- Population, 3, 46
 - heterogene, 45
 - konvergente, 46
 - Start-, 129
- Pretreatment
 - Meancentering, 60
 - Offset-Korrektur, 60
- Principal Component Analysis, **22**, 106
- Principal Component Regression, 2, 13, **14ff.**
- Property–Weighting–Spektrum, 61

- Quality-Values, **56ff.**

- Ranking
 - Eigenwert, 80
 - Korrelation, 85
- Real–Error–Funktion, 36
- Regression
 - \sim vektor, 22ff.
- Reproduktion, 45
- Reproduktions–Technik
 - Steady State Without Duplicates, 133
- Restvarianzwert, **30**
- RMSEP, *siehe* Standard Error
- RSS, *siehe* Restvarianzwert

- Scores, *siehe* Eigenvektoren
- SEE, *siehe* Standard Error
- Selektion, 3
 - Roulette Wheel Parent Selection, **48ff.**, 133
- Selektionsfaktor, 45
- Selektionsverfahren
 - deterministische, **37ff.**
 - stochastische, **117**
- SEP(*est*), *siehe* Standard Error
- Signal-Rausch Verhältnis, 39

- Singulärvektor, 15
- Singulärwertzerlegung, **14ff.**
- Spektrenbibliothek, 139
- Spektrenvorbehandlung, *siehe* Pretreatment
- Spektrochemometrie, **11ff.**
- Standardabweichung, 58
 - F*-Test, 56
 - Varianz, **57ff.**
- Standard Error
 - of Estimate and Prediction, 133
 - of Analysis, **33**
 - of Estimate, **31**
 - of Prediction, **32**
 - of Prediction Estimate, **31**
- Stopfunktion, **122ff.**
- Techniken, **48ff.**
 - Generational Replacement, **50**
 - Roulette Wheel Parent Selection, **48ff.**
 - Steady State Reproduction Technique, **50ff.**
- Underfitting, **27ff.**
- Uniform-Crossover, **52f.**
- Validierung
 - Kalibrationsmodelle, **30ff.**
- Varianz, 122
- Varianz-Kriterium, **59**
- Vektor
 - orthogonaler~, 15
 - orthonormaler~, 15
- Vollspektrenmethode, 14
- Wellenlängenselektion, 14
- Wichtungskoeffizienten, *siehe* Faktorgewichte