

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	4
2.1	Spektroskopie	4
2.2	Spektrenbibliotheken	10
2.3	Datenvorbehandlung	17
2.3.1	Derivativspektren	17
2.3.2	Normierung	18
2.3.3	Datenkompression	19
2.3.3.1	Approximation	21
2.3.3.2	Bandentabellen	21
2.3.4	Binärstrings	21
2.4	Datentransformation	25
2.4.1	Hauptkomponentenanalyse	25
2.4.2	Wavelet-Transformation	28
2.5	Distanz und Ähnlichkeit	33
3	Bibliothekserstellung	35
3.1	Aufbau einer Testbibliothek	35
3.2	Thresholdberechnung	37
3.2.1	Konstantes Konfidenzniveau („Constant Confidence Level“)	37
3.2.2	Fixed Algorithm	37
3.3	Vertrauensbereich	39
3.3.1	Einfaches Kugelmodell („Single Sphere Method“)	39
3.3.2	Doppelkugelmodell („Double Sphere Method“)	41
3.4	Validierung	42
3.5	Graphische Darstellung der Validierungsergebnisse	44
3.5.1	Matrixdarstellung	44
3.5.2	Histogramme	46
3.5.3	Güteparameter zur Beurteilung von Bibliotheken	48
4	Diskussion	50
4.1	Optimierung von Bibliotheken	50
4.1.1	NIR-Bibliothek	50
4.1.1.1	Vorbehandlung ohne Faktorzerlegung	51
4.1.1.2	Faktormethode	56
4.1.1.3	Einschränkungen des Spektralbereiches	61
4.1.2	Raman-Bibliothek	62
4.1.2.1	Standardmethode	63

4.1.2.2	Faktormethode	66
4.1.2.3	Einschränkung des Spektralbereiches	69
4.1.3	Binär-Files	70
4.1.3.1	Binäre Raman-Bibliothek	70
4.1.3.2	Binäre NIR-Bibliothek.....	74
4.1.3.3	Binäre kombinierte NIR/Raman-Bibliothek.....	77
4.1.4	Wavelet-Transformation.....	79
4.2	Vergleich von Bibliotheken	82
5	Zusammenfassung.....	96
6	Literatur.....	99
7	Anhang	103
7.1	Software	103
7.2	Substanzliste	104
7.3	Validierungsreports	107
7.4	Matrixdarstellungen	119
7.4.1	NIR, Standardmethode.....	119
7.4.2	NIR, Faktormethode.....	125
7.4.3	NIR, Variation des Spektralbereiches.....	136
7.4.4	NIR, Variation der Thresholdberechnung	142
7.4.5	Raman, Standardmethode	147
7.4.6	Raman, Faktormethode	153
7.4.7	Raman, Variation des Spektralbereiches	167
7.4.8	Raman-Binärstrings	174
7.4.9	NIR-Binärstrings.....	178
7.4.10	Kombinierte NIR/Raman-Binärstrings	181
7.5	Abbildungsverzeichnis.....	184