

|                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. Record Nr.           | UNINA9910144337603321                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Autore                  | Kessler Waltraud                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Titolo                  | Multivariate Datenanalyse : fur die Pharma-, Bio- und Prozessanalytik : ein lehrbuch / / Waltraud Kessler                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| Pubbl/distr/stampa      | Weinheim : , : Wiley-VSH Verlag, , 2007                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| ISBN                    | 1-280-85447-2<br>9786610854479<br>3-527-61003-0<br>3-527-60966-0                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Descrizione fisica      | 1 online resource (343 p.)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Disciplina              | 519.535<br>519.5352                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| Soggetti                | Multivariate analysis<br>Electronic books.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Lingua di pubblicazione | Tedesco                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| Formato                 | Materiale a stampa                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| Livello bibliografico   | Monografia                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Note generali           | Description based upon print version of record.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Nota di bibliografia    | Includes bibliographical references and index.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| Nota di contenuto       | Multivariate Datenanalyse; Inhaltsverzeichnis; Vorwort; 1 Einfuhrung in die multivariate Datenanalyse; 1.1 Was ist multivariate Datenanalyse?; 1.2 Datensatze in der multivariaten Datenanalyse; 1.3 Ziele der multivariaten Datenanalyse; 1.3.1 Einordnen, Klassifizierung der Daten; 1.3.2 Multivariate Regressionsverfahren; 1.3.3 Moglichkeiten der multivariaten Verfahren; 1.4 Prüfen auf Normalverteilung; 1.4.1 Wahrscheinlichkeitsplots; 1.4.2 Box-Plots; 1.5 Finden von Zusammenhangen; 1.5.1 Korrelationsanalyse; 1.5.2 Bivariate Datendarstellung - Streudiagramme; Literatur; 2 Hauptkomponentenanalyse<br>2.1 Geschichte der Hauptkomponentenanalyse<br>2.2 Bestimmen der Hauptkomponenten; 2.2.1 Prinzip der Hauptkomponentenanalyse; 2.2.2 Was macht die Hauptkomponentenanalyse?; 2.2.3 Grafische Erklärung der Hauptkomponenten; 2.2.4 Bedeutung der Faktorenwerte und Faktorenladungen (Scores und Loadings); 2.2.5 Erklärte Varianz pro Hauptkomponente; 2.3 Mathematisches Modell der Hauptkomponentenanalyse; 2.3.1 Mittenzentrierung; 2.3.2 PCA-Gleichung; 2.3.3 Eigenwert- und Eigenvektorenberechnung; 2.3.4 |

Berechnung der Hauptkomponenten mit dem NIPALS-Algorithmus;  
2.3.5 Rechnen mit Scores und Loadings  
2.4 PCA für drei Dimensionen 2.4.1 Bedeutung von Bi-Plots; 2.4.2  
Grafische Darstellung der Variablenkorrelationen zu den  
Hauptkomponenten (Korrelation-Loadings-Plots); 2.5 PCA für viele  
Dimensionen: Gaschromatographische Daten; 2.6 Standardisierung der  
Messdaten; 2.7 PCA für viele Dimensionen: Spektren; 2.7.1 Auswertung  
des VIS-Bereichs (500-800 nm); 2.7.2 Auswertung des NIR-Bereichs  
(1100-2100 nm); 2.8 Wegweiser zur PCA bei der explorativen  
Datenanalyse; Literatur; 3 Multivariate Regressionsmethoden; 3.1  
Klassische und inverse Kalibration; 3.2 Univariate lineare Regression  
3.3 Maßzahlen zur Überprüfung des Kalibriermodells (Fehlergrößen bei  
der Kalibrierung) 3.3.1 Standardfehler der Kalibration; 3.3.2 Mittlerer  
Fehler - RMSE; 3.3.3 Standardabweichung der Residuen - SE; 3.3.4  
Korrelation und Bestimmtheitsmaß; 3.4 Signifikanz und Interpretation  
der Regressionskoeffizienten; 3.5 Grafische Überprüfung des  
Kalibriermodells; 3.6 Multiple lineare Regression (MLR); 3.7 Beispiel für  
MLR - Auswertung eines Versuchsplans; 3.8  
Hauptkomponentenregression (Principal Component Regression - PCR);  
3.8.1 Beispiel zur PCR - Kalibrierung mit NIR-Spektren  
3.8.2 Bestimmen des optimalen PCR-Modells 3.8.3 Validierung mit  
unabhängigem Testset; 3.9 Partial Least Square Regression (PLS-  
Regression); 3.9.1 Geschichte der PLS; 3.10 PLS-Regression für eine Y-  
Variable (PLS1); 3.10.1 Berechnung der PLS1-Komponenten; 3.10.2  
Interpretation der P-Loadings und W-Loadings bei der PLS-Regression;  
3.10.3 Beispiel zur PLS1 - Kalibrierung von NIR-Spektren; 3.10.4  
Finden des optimalen PLS-Modells; 3.10.5 Validierung des PLS-Modells  
mit unabhängigem Testset; 3.10.6 Variablenselektion - Finden der  
optimalen X-Variablen  
3.11 PLS-Regression für mehrere Y-Variablen (PLS2)

---

## Sommario/riassunto

In vielen Fachgebieten, wie z. B. der Lebensmittelchemie, der pharmazeutischen oder biotechnologischen Industrie fallen immer mehr Daten an, die ausgewertet werden müssen. Klassische Verfahren gelangen hierbei schnell an ihre Grenzen. Die multivariate Datenanalyse beschäftigt sich mit Verfahren, mit denen man aus einer Fülle von Daten - wie z. B. Prozessdaten, Messdaten, Mikroarraydaten, Spektren - die wesentlichen, unabhängigen Informationen herausarbeiten kann. Es eröffnen sich somit ganz neue Möglichkeiten für eine effiziente und gleichzeitig umfangreiche Auswertung. Alle Methoden

---