

1 Einleitung

Die Qualität von Aromen, Farbstoffen, Gewürzextrakten und Geschmackstoffen kann durch Kontakt mit Luft, Licht, hoher Temperatur, Feuchtigkeit und Mikroorganismen beeinträchtigt werden. Einen wirkungsvollen Schutz gegen diese Stressfaktoren bildet die Verkapselung der Produkte. Technisch eingeführt sind Methoden zur Makroverkapselung (z. B. Coating, Gelatine-Kapseln, Sachets, Einschweißen in Folien u.v.m.). In den vergangenen Jahren werden zunehmend auch Mikroverkapselungen eingesetzt. Ziel ist dabei nicht nur der Schutz der Produkte – vielmehr eröffnen Mikrokapseln besondere Möglichkeiten zur Steuerung der Freisetzung der Wirkstoffe. Beispielsweise gelingt es, durch geeignete Wahl der Schmelztemperatur des Hüllmaterials, eine temperaturgesteuerte Freisetzung der eingekapselten Kernsubstanz zu erzielen und somit neuartige Anwendungen zu ermöglichen.

Das Hochdrucksprühverfahren **PGSS**[®] (**P**articles from **G**as **S**aturated **S**olutions)¹ bietet in dieser Hinsicht interessante Möglichkeiten. Beim PGSS Verfahren werden ein bei Umgebungsbedingungen festes Hüllmaterial und eine flüssige Kernsubstanz getrennt voneinander vorgelegt, temperiert und gegebenenfalls aufgeschmolzen. Die beiden Stoffströme werden mittels Pumpen verdichtet und in ein Mischorgan, z. B. einem statischen Mischer, gefördert. Hier werden sie mit dem über eine Hochdruckpumpe verdichteten und temperierten Fluid (meist Kohlendioxid) vermischt. Beim Durchströmen der drei Stoffströme durch den statischen Mischer bildet sich eine Dispersion bzw. Emulsion. Im Anschluss wird das homogenisierte Gemisch bei hohem Druck durch eine Verdüsungseinrichtung in einen Sprühturm bei Umgebungsdruck oder leichtem Unterdruck entspannt. Durch die kleine Öffnung der Düse und die rasche Expansion des Gases bilden sich Tröpfchen. Aufgrund der Expansion kommt es zum Joule-Thomson Effekt und damit zu einer starken Abkühlung des Gases und der sich in diesem befindenden Tröpfchen. Wird die Schmelztemperatur des Kapselungsmaterials unterschritten erstarrt dieses und es bilden sich Partikel. BRANDIN konnte zeigen, dass äußerlich trockene Pulver mit einem Flüssigkeitsanteil von bis zu 70 Gew.-% sowie geschlossene Komposite mittels dieses Verfahrens herstellbar sind [1]. Potentielle Anwendungen, z. B. für den Bausektor, sind in der Literatur beschrieben [2-6].

¹ PGSS ist ein geschütztes Warenzeichen. Im Zuge dieser Arbeit wird die Abkürzung PGSS ohne weitere Angabe des geschützten Warenzeichensymbols verwendet.

Das Potential dieser Technologie wird im Rahmen dieser Arbeit untersucht. Endzweck ist die maßgeschneiderte Herstellung flüssigkeitsgefüllter Mikrokapseln für die Lebensmittel- und Konsumgüterindustrie. Mit Hilfe einer statistischen, rechnerunterstützten Versuchsplanung (**Design of Experiments, DOE**) werden im Vorfeld Versuchsfelder zur Erzeugung mehrphasiger Komposite ausgewählt. Ziel ist die Reduzierung des Versuchsumfanges sowie die Ermittlung und Visualisierung der Abhängigkeiten der Pulvereigenschaften von den Betriebsparametern sowie von den eingesetzten Substanzen. Als Modellsysteme werden Wasser in Palm- und Rizinusfett sowie Rapsöl in Polyethylenglykol 6000 eingekapselt. Die Pulver werden im Hinblick auf ihre Eignung für die industrielle Herstellung sowie Abhängigkeiten von den Prozessparametern des PGSS Verfahrens charakterisiert. Bestimmt werden unter anderem die Schüttdichte und die Partikelgrößenverteilung.

Ferner werden die Vorgänge der Kompositherstellung in Abhängigkeit der Prozessparameter theoretisch untersucht. Eine Berechnung zur Stabilität von Emulsionen und dem Erstarrungsverhalten der erzeugten Komposite schließt somit an die Auswertung der Versuche an. Erstmals wird das Erstarrungsverhalten der mittels des PGSS Verfahrens erzeugten Komposite anhand von physikalischen Größen abgeschätzt. Hauptaugenmerk wird dabei auf den Einfluss der Prozessparameter auf den Verkapselungserfolg gelegt. Charakteristische Zeiten der Emulsionsspaltung und der Verkapselung werden berechnet und geben eine Möglichkeit der Abschätzung über die Vorgänge bei der Kompositherstellung.

Aufbauend auf den Ergebnissen der Modellsysteme und der Berechnung der Stabilität werden Applikationsmuster für die Lebensmittel- und Kosmetikindustrie hergestellt. Die Versuche mit Palmfett und flüssiger Fischwürzung stellen dabei eine konkrete Anwendung der Verkapselung von Flüssigkeiten mittels des PGSS Verfahrens dar. Die Aromagebung für Fischpanaden ist ein mögliches Einsatzgebiet. Darüber hinaus finden in Rizinusfett verkapselter Honig und Rum ihre Anwendung im Bereich der Backwaren und zeigen, dass die Herstellung von innovativen und neuartigen Produkten mittels des PGSS Verfahrens möglich ist. Die Motivation zur Herstellung von Kompositen aus Schokolade und Kirschwasser bestand in der Neuartigkeit des Produktes. Die im Rahmen dieser Arbeit hergestellten Mikrokapseln aus Schokolade und einem flüssigen Aroma wurden bisher mit keinem anderen Verfahren industriell hergestellt.

Für den Lebensmittelsektor und die kosmetische Industrie bietet das PGSS Verfahren somit ein breites Anwendungsspektrum. Die Einkapselung von Wirkstoffen und Aromen ist genauso möglich wie die Herstellung von innovativen Produkten mit neuen Anwendungsprofilen für kosmetische Applikationen.

2 Versuchsplanung und Versuchsauswertung

In Wissenschaft und Industrie müssen vielfältige Anforderungen bei der Durchführung von Versuchen erfüllt werden. Die Minimierung der Versuchszahl bei Generierung maximaler Information ist ein Aspekt. Ebenso sind zeitliche oder apparative Beschränkungen sowie gezielte Anforderungen an die Auslastung einer Anlage wichtige Randbedingungen die jede Versuchsplanung erfüllen sollte. Darüber hinaus sollten verlässliche Aussagen über Machbarkeit von Projekten zu einem möglichst frühen Zeitpunkt getroffen werden können. Die moderne Versuchsplanung und Versuchsauswertung kann diese Anforderungen erfüllen. Gleichzeitig können die erzielten Ergebnisse in einfache und praktisch anwendbare Modelle fließen, welche die Realität möglichst genau und in einem großen Anwendungsbereich beschreiben.

Komplexe Zusammenhänge zwischen abhängigen Zielgrößen und einer oder mehreren Einflussgrößen (engl.: factors) können mittels einer Regression dargestellt werden. Nachfolgend wird auf die Grundlagen, die Versuchsvorausplanung und die Versuchsauswertung eingegangen. Für eine umfassende und mehr ins Detail gehende Betrachtung wird auf weiterführende Literatur verwiesen [7-13].

2.1 Grundlagen

Versuchsplanung und Versuchsauswertung sind zwei gleichberechtigte Werkzeuge, welche zur Bewältigung der vielfältigen Anforderungen einer modernen Versuchsdurchführung eingesetzt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die beiden kommerziellen Programme MODDE 6.0 und SIMCA-P 10.0.2.0 der Firma UMETRICS verwendet, um die komplexen Ansprüche möglichst optimal zu erfüllen [7, 8]. Beide Programme sind sowohl für die Planung als auch für die Auswertung geeignet und haben in den jeweiligen Bereichen unterschiedliche Stärken. Daraus folgend wurde MODDE zur Versuchsplanung und SIMCA-P zur Versuchsauswertung ausgewählt.

Die Versuchsplanung (siehe Kapitel 2.2) lässt sich in fünf Teilschritte gliedern:

- Problemformulierung
- Definition der Einflussgrößen
- Definition der Zielgrößen
- Wahl eines Regressionsmodells
- Ermittlung des Versuchsplans

Nach der Durchführung der Experimente folgt die Versuchsauswertung (siehe Kapitel 2.3) mit den Unterpunkten:

- Erstellung des Regressionsmodells
- Beurteilung der Modellgüte
- Auswertung der ermittelten Faktoren
- Interpretation des ermittelten Modells

Mittels der definierten Einfluss- und Zielgrößen wird nach der Versuchsplanung mit MODDE mit Hilfe von SIMCA-P ein Regressionsmodell erstellt. Dieses Regressionsmodell stellt ein Gleichungssystem dar. Jede einzelne Gleichung dieses Systems gibt hierbei eine Zielgröße in Abhängigkeit aller Einflussgrößen wieder. Dementsprechend sind die Einflussgrößen die unabhängigen und die Zielgrößen die abhängigen Variablen des mathematischen Systems. Typischerweise wird in der traditionellen Versuchsplanung pro Versuch nur jeweils eine Einflussgröße variiert, bei Konstanthaltung aller übrigen. Dies führt zum einen dazu, dass bei einer steigenden Anzahl an Einflussgrößen die Zahl der durchzuführenden Experimente für eine Optimierung, aber auch schon für Vorversuche, stark ansteigt. Zum anderen sind eventuell zusammenhängende, kombinierte Einflüsse mehrerer Faktoren nicht zu erkennen und zu beschreiben. Dieses Problem löst die statistische Versuchsplanung mit der Möglichkeit einer multivariaten Datenanalyse.

2.2 Statistische Versuchsplanung

Die statistische Versuchsplanung (engl.: **Design of Experiment = DOE**) ist die zielorientierte und systematische Planung von Versuchen, bei einer vorgegebenen Problemformulierung (Screening, Optimierung, Test auf Robustheit). Über die reine Zusammenstellung von Planungsmethoden hinaus liefert sie auch die Vorgehensweise, um zu einem Problem den geeigneten Versuchsplan zu finden und dies bei einer reduzierten Anzahl an Versuchen [14, 15]. Unter dem Oberbegriff DOE wurden verschiedene Modelle entwickelt, welche für unterschiedliche Versuchsziele aufgrund ihrer Struktur sowie ihrer Vor- und Nachteile besonders geeignet sind. Falls nicht explizit vermerkt, stützen sich die folgenden Ausführungen über DOE auf das Begleitbuch des Programms MODDE [7].

2.2.1 Problemformulierung

In der Praxis existieren die drei primären Versuchsziele Screening, Optimierung und Test auf Robustheit. Neben diesen können andere Gründe für eine statistische Versuchsplanung sprechen, wie z. B. das Erstellen eines semiempirischen Theorie-modells für die Grundlagenforschung.

Screening

Beim Screening trifft das vom italienischen Ökonom Vilfredo Pareto aufgestellte Pareto-Prinzip zu. Es besagt, dass 80 % der Effekte auf die Systemantworten auf 20 % der untersuchten Faktoren zurückzuführen sind [16, 17]. Unter der Berücksichtigung aller Einflussgrößen werden beim Screening die Faktoren (ca. 20 %) ermittelt, welche den Haupteinfluss (ca. 80 %) auf die Zielgrößen haben. Das in der Ökonomie gültige Prinzip wird im Rahmen der Versuchsplanung auch auf technische Prozesse übertragen. Im Rahmen ausgewählter Versuche werden die Auswirkungen einer Vielzahl von Faktoren in ihren Extremwerten untersucht. Die so bestimmten Haupteinflüsse werden bei einer meist im Anschluss folgenden Optimierung näher betrachtet.

Optimierung

Während die Frage beim Screening ist, ob ein Faktor relevant ist oder nicht, lautet die Problemstellung bei der Optimierung, wie bedeutend ein Faktor ist und in welchem Zusammenhang er zu den restlichen Einflussgrößen steht. Ziel der Optimierung ist die Ermittlung der besten Antwort bzw. Antworten (Optimum bzw. Optima) auf die Fragestellung einer Versuchsreihe. Für ein detailliertes Bild werden in Frage kommende Einflussgrößen auf mehreren Ebenen untersucht. Aus diesem Grund ist die Anzahl der Versuche, im Vergleich zum Screening, deutlich höher. Ergebnis einer rechnergestützten Optimierung ist ein komplexes Modell der Zusammenhänge zwischen Einfluss- und Zielgrößen.

Test auf Robustheit

Der Test auf Robustheit ermittelt Faktoren, welche einen Einfluss auf das Versuchsergebnis haben und nicht durch den Experimentator kontrolliert werden können. Diese Einflussgrößen können das gewünschte Optimum so nachteilig beeinflussen, dass das Produkt außerhalb geforderter Spezifikationen liegt. Beispiele für solche Faktoren sind Umgebungstemperatur, Luftfeuchtigkeit sowie unterschiedliche Chargen (z. B. naturproduktbezogene Schwankungen in der Zusammensetzung). Der Test auf Robustheit ist eine wichtige Stufe im experimentellen Prozess und wird meist bei einem fast vollendeten Produkt oder einer nahezu fertig gestellten Untersuchung angewandt.

2.2.2 Einflussgrößen

Unter Einflussgrößen (Faktoren) versteht man die unabhängigen Variablen, welche den Prozess steuern. Die wichtigsten Kriterien zur Unterteilung von Einflussgrößen und die Spezifikation des experimentellen Bereichs sind im Folgenden näher erläutert.

Kontrollierbare und unkontrollierbare Faktoren

Einflussgrößen werden in kontrollierbare und unkontrollierbare Faktoren eingeteilt. Kontrollierbare Faktoren sind Einflussgrößen, die vom Experimentator beherrscht und untersucht werden können. Diese Einflussgrößen können im Rahmen einer statistischen Versuchsplanung aktiv geändert werden. Unkontrollierbare Faktoren sind schwer oder gar nicht steuerbar. Es sind oft Einflüsse, die von Umgebungsbedingungen hervorgerufen werden, sich aber auch aus ihrem Zusammenhang mit anderen Faktoren ergeben können.

Qualitative und quantitative Faktoren

Die Unterscheidung zwischen qualitativen und quantitativen Einflussgrößen ist für die Versuchsvorausplanung ein wichtiger Schritt. Ein quantitativer Faktor kann zwischen seinen beiden Grenzwerten jeden beliebigen Wert auf einer kontinuierlichen Skala annehmen (z. B. Temperatur und Druck). Ein qualitativer Faktor nimmt nur diskrete Werte an (z. B. der Aggregatzustand eines Stoffes oder der Mischertyp).

Experimenteller Bereich

In einigen Fällen erstreckt sich das experimentelle Interesse nicht auf den gesamten Wertebereich der Einflussgrößen. Darüber hinaus kann es in der Praxis vorkommen, dass Experimente in Teilen des Versuchsbereichs aller Variablen nicht erwünscht oder nicht möglich sind. Abbildung 1 erläutert diesen Zusammenhang exemplarisch für zwei Variablen, welche in bestimmten Regionen des Versuchsbereichs nicht unabhängig voneinander variiert werden können.

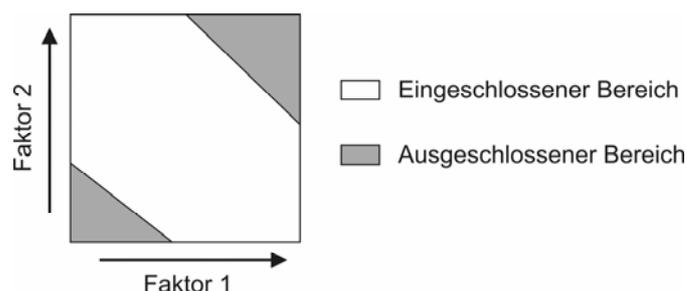


Abbildung 1: Einschränkung des experimentellen Bereichs

In Abbildung 1 wird ein Rechteck durch die eindimensionalen experimentellen Bereiche der Faktoren 1 und 2 aufgespannt. Bei getrennter Betrachtung können die beiden Faktoren jeden beliebigen Wert zwischen dem Minimal- und dem Maximalwert annehmen. Erst bei gleichzeitiger Betrachtung werden die, aufgrund der Abhängigkeit der beiden Einflussgrößen, ausgeschlossenen Bereiche sichtbar. Dieses Beispiel lässt sich von der zweidimensionalen Betrachtung ins Mehrdimensionale übertragen. Der experimentelle Bereich eines qualitativen Faktors kann, im Gegensatz zum quantitativen Faktor, nur diskrete Werte einnehmen, welche für

jeden Faktor definiert werden müssen. Aus der Vielzahl aller im definierten Versuchsraum möglichen Experimente wird, in Abhängigkeit der Problemformulierung und des gewählten Modells, ein so genanntes Kandidatenset ermittelt. Dieses Kandidatenset besteht aus denjenigen Versuchen, welche am besten für die angestrebte Untersuchung geeignet sind. Die übrigen Versuche können nachträglich z. B. für eine Modellerweiterung herangezogen werden.

2.2.3 Zielgrößen

Eine Zielgröße der Versuchsplanung ist die Systemantwort, welche zu einer aussagekräftigen Bewertung eines Versuchs bzw. Produktes herangezogen wird bzw. für diese Bewertung notwendig ist. Bei der Definition der Zielgrößen muss besonderes Augenmerk auf ihre Relevanz in Bezug auf die Problemformulierung gelegt werden.

Qualitative und quantitative Zielgrößen

Zielgrößen können qualitativer oder quantitativer Natur sein. Der Einfluss auf quantitative Zielgrößen lässt sich leicht durch ein rechnergestütztes Modell beschreiben. Aufgrund der Tatsache, dass qualitative Zielgrößen nur separate Punkte in einem genau zu definierenden Bereich der Ergebnisse einnehmen können, wird die Interpretation des Regressionsmodells deutlich erschwert. Die beste Möglichkeit, eine Deutung der Versuchsergebnisse zu erleichtern, ist die Aufteilung der qualitativen Zielgröße in möglichst viele Antwortebenen. Auf diese Art und Weise wird sie einer quantitativen Zielgröße weitgehend angenähert.

2.2.4 Modelle

Ein Modell ist stets eine mathematische Beschreibung der Wirklichkeit und kann diese nur in gewissen Grenzen korrekt erfassen. Aussagen die mit Modellen gemacht werden, beschränken sich meist auf einen eng gefassten Bereich. Sollen Werte über diesen Bereich hinaus berechnet werden, ist dies in den wenigsten Fällen möglich. Ein gutes Modell ist dennoch ein effizientes Werkzeug zur Lösung von Problemen. Dabei ist die Wahl des Modells ein wichtiger Schritt bei der statistischen Versuchsplanung. In diesem Kapitel werden, anhand eines Überblicks, Vor- und Nachteile möglicher Modelle aufgezeigt, um im Anschluss das für die statistische Versuchsvorausplanung des PGSS Verfahrens beste auszuwählen. Für eine ausführliche Betrachtung der Modelle wird auf weiterführende Literatur verwiesen [7-13, 18]. Schematische Darstellungen der Modelle sind im folgende auf drei Dimensionen beschränkt.

Für mögliche Problemformulierungen sind einzelne Modellvarianten unterschiedlich gut verwendbar. Für eine Optimierung, wie sie im Rahmen dieser Arbeit für die Herstellung von Kompositen mittels des PGSS Verfahrens durchgeführt wird, sind das Faktor-Modell, das CCC und das CCF Modell besonders gut geeignet [7-13]. Eine schematische Darstellung dieser Modelle findet sich in Abbildung 2.

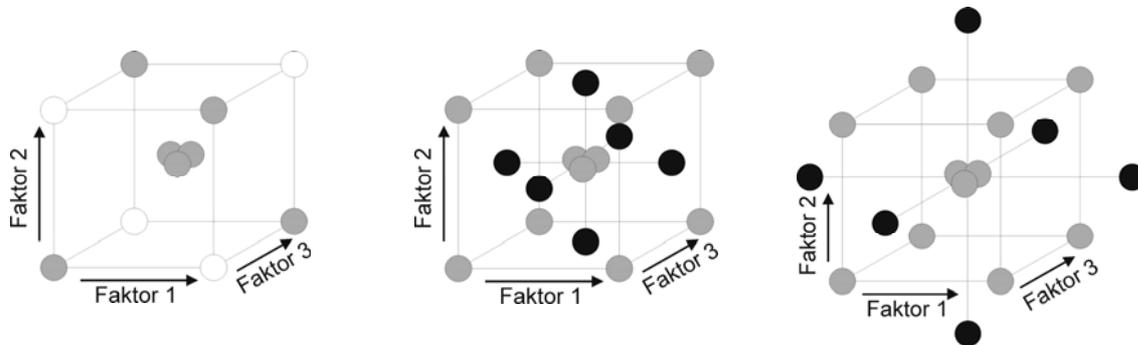


Abbildung 2: gebrochenes Faktor-Modell (links), CCF-Modell (Mitte) und CCC-Modell (rechts) mit je drei Faktoren

Faktor-Modelle und gebrochene Faktor-Modelle

Faktor-Modelle sind die Basis, auf denen alle weiteren Modelle der klassischen Versuchsplanung beruhen und sind für alle Versuchsziele einsetzbar. Die durchzuführenden Versuche liegen sowohl auf den Ecken als auch in der Mitte des aufgespannten Versuchsbereichs. Zusätzlich zu den so durchgeführten Experimenten werden mindestens drei Wiederholungsversuche (Center Points) in der Mitte des aufgespannten Raums zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit durchgeführt.

Der Vorteil des Faktor-Modells liegt in der vollständigen Unabhängigkeit der einzelnen Einflussgrößen voneinander. Nachteil ist die sehr hohe Versuchsanzahl, die sich mit k quantitativen Faktoren zu $N = 2^k$ ergibt. So müssen z. B. bei 10 betrachteten Einflussgrößen und 3 Wiederholungen des Center Points schon 1027 Experimente durchgeführt werden.

Gebrochene Faktor-Modelle besitzen gegenüber einfachen Faktormodellen eine deutlich reduzierte Anzahl an Versuchen. Zur Erstellung gebrochener Faktor-Modelle werden die im Falle eines vollständigen Faktor-Modells durchzuführenden Experimente auf den Ecken des Versuchsraums in zwei Fraktionen aufgeteilt. Zur möglichst effektiven Abdeckung werden hierbei jeweils gegenüberliegende Ecken verwendet. Die so entstandenen gleichwertigen Modelle werden auch hier durch mindestens drei Center Points zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit ergänzt.

CCC und CCF Modelle

Das **Central Composite Circumscribed Modell (CCC)** und das **Central Composite Facecentered Modell (CCF)** sind Zusammensetzungen aus einem Grundmodell und einem ergänzenden Modell. In Abbildung 2 ist ein vollständiges Faktor-Modell (graue Punkte) als Grundgerüst für beide Modelle gewählt worden, welches von zusätzlichen Punkten (schwarze) sternförmig umgeben ist. In der Praxis werden meist gebrochene Faktor-Modelle verwendet, weil für ihre Bestimmung eine erheblich geringere Versuchsanzahl nötig ist.

Im Fall des CCC Modells sind die zusätzlichen Punkte so angeordnet, dass sie mit den Eckpunkten des vollständigen Faktor-Modells auf einer Kugelfläche liegen. Die Punkte befinden sich somit außerhalb des eigentlichen Versuchsraums und können nicht in jedem Fall experimentell untersucht werden. Beim CCF Modell liegen die zusätzlichen Punkte mittig auf den Stirnseiten des Versuchsraums. Dies bedeutet, dass keine Erweiterung über die festgelegten Grenzen der Variablen erfolgt.

2.3 Statistische Versuchsauswertung

Die Auswertung der Versuche wird anhand einzelner Teilschritte durchgeführt. Der erste Schritt ist die Erstellung eines Regressionsmodells anhand der Versuchsergebnisse. Hierbei existieren unterschiedliche Modelle sowie Möglichkeiten der Anpassung, die je nach Gegebenheiten auf die jeweilige Versuchsreihe abgestimmt werden können. Nach der Erstellung des Regressionsmodells muss seine Güte zur Validierung beurteilt werden. Hierfür gibt es verschiedene Kriterien, die SIMCA-P dem Benutzer zur Beurteilung zur Verfügung stellt. Ist die Modellgüte zufrieden stellend, werden die ermittelten Faktoren und ihr Einfluss auf die einzelnen Zielgrößen ausgewertet. Abschließend folgt die Gesamtinterpretation des ermittelten Modells. Die Darstellung der Versuchsauswertung stützt sich, falls nicht anders vermerkt, auf das Begleitbuch des Programms zur multivarianten Datenanalyse [7]. Bereits ausführlich beschrieben ist die Versuchsauswertung im Rahmen der Herstellung von pulverförmigen Kompositen mittels des PGSS Verfahrens von BRANDIN und HÜLSEWIG [1, 18].

2.3.1 Regression

Regression bedeutet, Zusammenhänge zwischen einer abhängigen Variablen (Zielgröße) und einer oder mehrerer erklärender Variablen (Einflussgrößen) mathematisch darzustellen und zu analysieren. Einfache Zusammenhänge zwischen einer erklärenden Variablen X und einer Zielvariablen Y lassen sich z. B. mittels einer Geradengleichung (siehe Gleichung 1) beschreiben.

$$Y = a_0 + a_1 \cdot X$$

Gleichung 1

a_0 = Achsenabschnitt
 a_1 = Steigung

Liegt kein linearer Zusammenhang vor, so erfolgt die Untersuchung der Daten mittels nichtlinearer Regression. Soll der Zusammenhang mehrerer Einfluss- und Zielgrößen untersucht werden, so muss auf eine multiple Regression zurückgegriffen werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden, auf Grund der Komplexität der Zusammenhänge bei der Herstellung von pulverförmigen Kompositen mittels des PGSS Verfahrens, der Einfluss der erklärenden Variablen auf die Zielvariablen mittels einer rechnergestützten multiplen nichtlinearen Regression mit Hilfe des Programms SIMCA-P beschrieben.

Die in SIMCA-P implementierte **PLS (Projection to Latent Structures)** Methode kann Zusammenhänge zwischen Faktoren und Zielgrößen abbilden, indem sie mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate eine Schätzfunktion berechnet. Hierbei können die genannten Regressionen verwendet werden, im einfachsten Fall eine multiple lineare Funktion. Dabei bieten sich vor allem die verschiedenen Programmfunktionen an, um die Mehrdimensionalität untersuchen und grafisch darstellen zu können.

2.3.2 PLS Methode

Die PLS Methode ist die am häufigsten verwendete Regressionsanalyse in der Chemie und Prozessmodellierung. Sie kann gut kolineare, rauschende sowie unkomplette Datensätze verarbeiten [9]. PLS untersucht nicht nur einzelne Variablen unabhängig voneinander, sondern erstellt verbindende Informationen zwischen Variablenblöcken.

Bei N Versuchen, K Einflussgrößen und M Zielgrößen existieren zur Untersuchung ein K- und ein M-dimensionaler Versuchsraum. PLS ist eine Projektionsmethode, die in diesem K- bzw. M-dimensionalen Raum Geraden, Ebenen oder Hyperebenen (je nach Anzahl der Haupteinflusskomponenten) erstellt, welche die Daten nach dem Prinzip der kleinsten Fehlerquadrate am besten beschreiben. Hierdurch werden die multivarianten Datenmatrizen in weniger dimensionale Matrizen überführt und ein Überblick über die Daten bzw. Gruppierungen von Versuchen, Trends und Ausreißern wird möglich.