

# Literaturverzeichnis

- [1] D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, S. N. Deming, Y. Michotte, *u.a.* *Chemometrics: A Textbook*. Elsevier, Amsterdam, 1988.
- [2] D. M. Haaland, E. V. Thomas. Partial least squares methods for spectral analyses. 1. Relation to other quantitative calibration methods and the extraction of qualitative information. *Analytical Chemistry*, **60**, 1193–1202, 1988.
- [3] D. E. Goldberg. *Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning*. Addison-Wesley, New York, 2. Ausg., 1989.
- [4] D. B. Hibbert. Genetic algorithms in chemistry. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **19**, 277–293, 1993.
- [5] L. Davis. *Handbook of genetic algorithms*. Van Nostrand Reinhold, New York, New York 10003, 1. Ausg., 1991.
- [6] S. Krolzik. Künstliches Leben — Genetische Algorithmen. URL [http://www.bitel.net.kehsq180/ga\\_ausarbeitung](http://www.bitel.net.kehsq180/ga_ausarbeitung).
- [7] J. D. Gezelter, R. Freeman. Use of neuronal networks to design and shape radiofrequency pulses. *Journal of Magnetic Resonance*, **75**, 184–189, 1987.
- [8] R. Freeman, X. L. Wu. Design of magnetic resonance experiments by genetic evolution. *Journal of Magnetic Resonance*, **75**, 184–189, 1987.
- [9] R. Freeman, X. L. Wu. Darwin's ideas applied to magnetic resonance. The marriage broker. *Journal of Magnetic Resonance*, **85**, 414–420, 1989.
- [10] R. Freeman, X. L. Wu, P. Xu. Delayed-focus pulses for magnetic resonance imaging: an evolutionary approach. *Magnetic Resonance in Medicine*, **20**, 165–170, 1991.
- [11] C. B. Lucasius, G. Kateman. Genetic algorithms for large-scale optimization in chemometrics: an application. *Trends in Analytical Chemistry*, **10**, 254–261, 1991.

- [12] C. B. Lucasius, G. Kateman. Applications of genetic algorithms in chemometrics. In *Third International Conference on Genetic Algorithms* (J. D. Schaffer, Hrsg.), S. 170–176. Morgan Kaufmann, San Mateo, CA, 1989.
- [13] C. B. Lucasius, M. J. J. Blommers, L. M. C. Buydens, G. Kateman. A genetic algorithm for conformational analysis of dna. In *Handbook of Genetic Algorithms* (L. Davis, Hrsg.), S. 251–281. Van Nostrand–Reinhold, London, 1991.
- [14] H. M. Cartwright, G. F. Mott. Looking around: using clues from the data space guide genetic algorithm searches. In *Fourth International Conference on Genetic Algorithms* (J. D. Schaffer, Hrsg.), S. 108–114. Morgan Kaufmann, San Mateo, CA, 1991.
- [15] B. K. Lavine. Chemometrics. *Analytical Chemistry*, **70**, 209R–228R, 1998.
- [16] P. Geladi, K. Esbensen. The start and early history of chemometrics: Selected interviews. Part 1. *Journal of Chemometrics*, **4**, 337–354, 1990.
- [17] K. Esbensen, P. Geladi. The start and early history of chemometrics: Selected interviews. Part 2. *Journal of Chemometrics*, **4**, 389–412, 1990.
- [18] E. R. Malinowski, D. G. Howery. *Factor analysis in chemistry*. John Wiley & Sons, New York Chichester Brisbane Toronto, 1. Ausg., 1980.
- [19] D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. de Jong, *u.a.* *Handbook of Chemometrics and Qualimerics*, Bd. A. Elsevier, Amsterdam, 1997.
- [20] H. Martens, T. Næs. *Multivariate Calibration*. John Wiley & Sons Ltd., 1989.
- [21] K. Molt. Grundlagen und Anwendungen der modernen NIR-Spektroskopie, Teil 1. *GIT Fachzeitschrift für das Labor*, **36**, 107–113 u. 353–362, 1992.
- [22] M. L. McKelvy, T. R. Britt, B. L. Davis, J. K. Gillie, *u.a.* Infrared spectroscopy. *Analytical Chemistry*, **70**, 119R–177R, 1998.
- [23] D. Skoog, J. J. Leary. *Instrumentelle Analytik: Grundlagen – Geräte – Anwendungen*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [24] U. R. Kunze. *Grundlagen der quantitativen Analyse*. Thieme, Stuttgart; New York, 2. Ausg., 1986.
- [25] W. H. A. M. van den Broek, D. Wienke, W. J. Melssen, L. M. C. Buydens. Optimal wavelength range selection by a genetic algorithm for discrimination purposes in spectroscopic infrared imaging. *Applied Spectroscopy*, **51**(8), 1210–1217, 1997.

- [26] P. J. Brown. Wavelength selection in multicomponent near-infrared calibration. *Journal of Chemometrics*, **6**, 151–161, 1992.
- [27] U. Hörchner, J. B. Kalivas. Simulated-annealing-based optimization algorithms: Fundamentals and wavelength selection applications. *Journal of Chemometrics*, **9**, 283–308, 1995.
- [28] C. B. Lucasius, M. L. M. Beckers, G. Kateman. Genetic algorithms in wavelength selection: a comprehensive study. *Analytica Chimica Acta*, **286**, 135–153, 1994.
- [29] M. Otto. *Chemometrie: Statistik und Computereinsatz in der Analytik*. Verlag Chemie, Weinheim, 1997.
- [30] H. Mark. Multilinear Regression and Principal Component Analysis. In *Handbook of Near-Infrared Analysis* (D. A. Bruns, E. W. Ciurczak, Hrsg.), S. 107–158. Marcel Dekker, Inc., 1992.
- [31] S. Sekulic, M. B. Seasholtz, Z. Wang, B. R. Kowalski. Nonlinear multivariate calibration methods in analytical chemistry. *Analytical Chemistry*, **65**(19), 835A–845A, 1993.
- [32] S. Kohn. *Theorie und Praxis des Einsatzes der NIR-Spektroskopie in der Lebensmittelanalytik am Beispiel von Käseprodukten*. Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1993.
- [33] X. Dai, B. Joseph, R. L. Motard. Introduction to wavelet transformation and time frequency analysis. In *Wavelet Applications in Chemical Engineering* (B. Joseph, R. L. Motard, Hrsg.), S. 1–32. Kluwer Academic Publishers, 1994.
- [34] D.-L. Massart, B. Walczak. Wavelets – something for analytical chemistry? Trends. *Analytical Chemistry*, **16**(8), 451–463, 1997.
- [35] A. Graps. An introduction to wavelets. *IEEE Comput.Sci.Eng.*, **2**(2), 50–61, 1995.
- [36] B. K. Alsberg, D. B. Kell, A. M. Woodward. An introduction to wavelet transforms for chemometricians. A time-frequency approach. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **37**, 215–239, 1997.
- [37] U. Depczynski, K. Jetter, K. Molt, A. Niemöller. Principles and applications of wavelet transformation to chemometrics, 1998. COMPANA-Conference, Duisburg.
- [38] G. H. Golub, C. F. van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 1989.

- [39] E. R. Malinowski. Statistical  $F$ -Test for abstract factor analysis and target testing. *Journal of Chemometrics*, **3**, 49–60, 1988.
- [40] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, J. Demmel, *u.a.* *LAPACK – Users’ Guide*. Society of Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1992.
- [41] A. S. Barros, D. N. Rutledge. Genetic algorithm applied to the selection of principal components. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **40**, 65–81, 1998.
- [42] K. Faber, B. R. Kowalski. Critical evaluation of two  $F$ -tests for selecting the number of factors in abstract factor analysis. *Analytica Chimica Acta*, **337**, 57–71, 1997.
- [43] Y.-L. Xie, J. H. Kalivas. Evaluation of principal component selection methods to form a global prediction model by principal component regression. *Analytica Chimica Acta*, **348**, 19–27, 1997.
- [44] J. M. Sutter, J. H. Kalivas, P. M. Lang. Which principal components to utilize for principal component regression. *Journal of Chemometrics*, **6**, 217–225, 1992.
- [45] J. Sun. A correlation principal component regression analysis of NIR data. *Journal of Chemometrics*, **9**, 21–29, 1995.
- [46] J. M. Sutter, J. H. Kalivas. Comparison of forward selection, backward elimination, and generalized simulated annealing for variable selection. *Microchimica Acta*, **47**, 60–66, 1993.
- [47] E. R. Malinowski. Determination of the Number of Factors and the Experimental Error in a Data Matrix. *Analytical Chemistry*, **49**(4), 612–617, 1977.
- [48] A. Elbergali, J. Nygren, M. Kubista. An automated procedure to predict the number of components in spectroscopic data. *Analytica Chimica Acta*, **379**, 143–158, 1999.
- [49] R. Leardi, A. L. González. Genetic algorithms applied to feature selection in PLS regression: how and when to use them. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **41**, 195–207, 1998.
- [50] C. J. F. Braak, S. de Jong. The objective function of partial least squares regression. *Journal of Chemometrics*, **12**, 41–54, 1998.
- [51] N. J. Messick, J. H. Kalivas, P. M. Lang. Selecting factors for partial least squares. *Microchemical Journal*, **55**, 200–207, 1997.

- [52] A. Höskuldsson. Dimension of linear models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **32**, 37–55, 1996.
- [53] A. Höskuldsson. A combined theory for PCA and PLS. *Journal of Chemometrics*, **9**, 21–123, 1995.
- [54] F. Lindgren, P. Geladi, S. Rännar, S. Wold. Interactive variable selection (IVS) for PLS. Part I: Theory and algorithms. *Journal of Chemometrics*, **8**, 349–363, 1994.
- [55] F. Lindgren, P. Geladi, A. Berglung, M. Sjöström, *u.a.* Interactive variable selection (IVS) for PLS. Part II: Chemical applications. *Journal of Chemometrics*, **9**, 331–342, 1995.
- [56] I. N. Wakeling, J. J. Morris. A test of significance for partial least squares regression. *Journal of Chemometrics*, **7**, 291–304, 1993.
- [57] W. J. Krzanowski. Ranking principal components to reflect group structure. *Journal of Chemometrics*, **6**, 97–102, 1992.
- [58] T. Næs, H. Martens. Principal component regression in NIR analysis: Viewpoints, background details and selection of components. *Journal of Chemometrics*, **2**, 155–167, 1988.
- [59] S. Wold, M. Sjöström. Chemometrics, present and future success. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **44**, 3–14, 1998.
- [60] P. Schröder. *Regularisierungsverfahren für schlecht konditionierte Least-Squares-Probleme*. Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1992.
- [61] V. J. Frost. *NIR-spektroskopische Ein- und Mehrkomponentenanalyse anorganischer wäßriger Systeme unter besonderer Berücksichtigung des Problems der Nachweis- und Bestimmungsgrenze*. Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1995.
- [62] A. Niemöller. *NIR-Spektroskopische Untersuchung wäßriger Lösungen starker Säuren und Basen*. Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1995.
- [63] E. R. Malinowski. Theory of error in factor analysis. *Analytical Chemistry*, **49**(4), 606–612, 1977.
- [64] K. Doerffel. *Statistik in der Analytischen Chemie*, S. 108–110. VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 4. Ausg., 1987.

- [65] W. R. Pestman. *Mathematical statistics – an introduction*. de Gruyter, Berlin, New York, 1998.
- [66] G. M. Clarke, D. Cooke. *A Basic Course in Statistics*. Arnold, London, New York, vierte Ausg., 1998.
- [67] G. G. Roussas. *A course in mathematical statistics*. Academic Press, London, 2. Ausg., 1997.
- [68] P. G. Hoel. *Introduction to Mathematical Statistics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 10te Ausg., 1971.
- [69] G. Clauß, H. Ebner. *Grundlagen der Statistik*. Volk und Wissen, Volkseigener Verlag, Berlin, 1978.
- [70] V. J. Frost, K. Molt. Use of a genetic algorithm for factor selection in principal component regression. *J. Near Infrared Spectrosc.*, **6**, A185–A190, 1998.
- [71] D. Jouan-Rimbaud, D. L. Massart, O. E. de Noord. Random correlation in variable selection for multivariate calibration with a genetic algorithm. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **35**, 213–220, 1996.
- [72] C. B. Lucasius, G. Kateman. Understanding and using genetic algorithms. Part 1. Concepts, properties and context. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **19**, 1–33, 1993.
- [73] M. A. Arnold, Q. Ding, G. W. Small. Genetic algorithm-based wavelength selection for the near-infrared determination of glucose in biological matrixes: initialization strategies and effects of spectral resolution. *Analytical Chemistry*, **70**(21), 4472–4479, 1998.
- [74] W. H. A. M. van den Broek, L. M. C. Buydens, W. J. Melssen, D. Wienke. Optimal wavelength range selection by a genetic algorithm for discrimination purposes in spectroscopic infrared imaging. *Applied Spectroscopy*, **51**(8), 1210–1217, 1997.
- [75] A. L. González, R. Leardi. Genetic algorithms applied to feature selection in PLS regression: how and when to use them. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **41**, 195–207, 1998.
- [76] R. Guchardi, P. A. da Costa Filho, R. J. Poppi, C. Pasquini. Determination of ethanol and methyl tert-butyl ether (MTBE) in gasoline by NIR-AOTF-based spectroscopy and multiple linear regression with variables selected by genetic algorithm. *J. Near Infrared Spectrosc.*, **6**, 333–339, 1998.

- [77] D. Jouan-Rimbaud, R. Leardi, D.-L. Massart, O. E. de Noord. Genetic algorithms as a tool for wavelength selection in multivariate calibration. *Analytical Chemistry*, **67**(23), 4295–4301, 1995.
- [78] U. Depczynski, V. J. Frost, K. Molt. Genetic algorithms applied to the selection of factors in principal component regression, October 1998. COMPANA '98, Duisburg.
- [79] D. Jouan-Rimbaud, D.-L. Massart, O. E. de Noord, L. Pasti. Application of Fourier transform to multivariate calibration of near-infrared data. *Analytica Chimica Acta*, **364**, 253–263, 1998.
- [80] U. Depczynski, K. Jetter, K. Molt, A. Niemöller, *u.a.* Wavelet methods in chemometrics: Quantitative spectrometric multicomponent analysis. In *15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics* (A. Sydow, Hrsg.), Volume 1, S. 87–92. Wissenschaft & Technik Verlag, Berlin, 1997.
- [81] U. Depczynski, K. Jetter, K. Molt, A. Niemöller. Quantitative analysis of near infrared spectra by wavelet coefficient regression using a genetic algorithm, 1997. Conferentia Chemometrica, Budapest, Ungarn, 21.-23. August 1997.
- [82] A. Niemöller. *Die Wavelet-Analyse als Chemometrisches Werkzeug: Analytische Anwendungen in der NIR-Spektrometrie*. Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1999.
- [83] J. H. Holland. *Adaptation in natural and artificial systems. An introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. The University of Michigan Press, Michigan, 1975.
- [84] P. Hoff, W. Miram. *Evolution*. Hermann Schroedel Verlag KG, Hannover, 1. Ausg., 1979.
- [85] K. Faber. Multivariate analytical figures of merit for the interpretation of the effect of spectral pretreatment methods on near infrared calibration model predictions, August 1997. Presented at CC'97 Conferentia Chemometrica, Budapest.
- [86] B. L. van der Waerden. *Mathematical statistics*, Bd. 156. Springer, 1969.
- [87] A. Lorber. Error Propagation and Figures of Merit for Quantification by Solving Matrix Equations. *Analytical Chemistry*, **58**, 1167–1172, 1986.
- [88] K. Faber, B. R. Kowalski. Net analyte signal calculation in multivariate calibration. *Analytical Chemistry*, **69**, 1620–1626, 1997.

- [89] K. Faber, A. Lorber, B. R. Kowalski. Analytical figures of merit for tensorial calibration. *Journal of Chemometrics*, **11**, 419–461, 1997.
- [90] K. Faber. Efficient computation of net analyte signal vector in inverse multivariate calibration models. *Analytical Chemistry*, **70**, 5108–5110, 1998.
- [91] K. Faber. Mean centering and computation of scalar net analyte signal in multivariate calibration. *Journal of Chemometrics*, **12**, 405–409, 1998.
- [92] S.-Q. Liu, W.-W. Wang. A study on applicability on multicomponent calibration methods in chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **45**, 131–145, 1999.
- [93] V. J. Frost, K. Molt. Analysis of aqueous solutions by Near-Infrared Spectrometry (NIRS) III. Binary mixtures of inorganic salts in water. *J.Mol.Struct.*, **410–411**, 573–579, 1997.
- [94] H. T. Tomiczek. *Simulation von Spektren und Auswerteverfahren mit dem Computer*. Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität GH Duisburg, 1988.
- [95] J. H. Kalivas. Two data sets of near infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **37**, 255–259, 1997.
- [96] J. H. Kalivas. Datensätze aus der Praxis der Nah-Infrarot-Spektroskopie. URL <ftp://sun.mcs.clarkson.edu/pub/hopkepk/data>.
- [97] M.-W. Scheiwe, D. Schilling, P. Aebi. NIR analysis of intact pharmaceutical diclofenac coated tablets in transmission, 1998. Submitted to 'Pharmazeutische Industrie'.
- [98] G. R. Choppin, M. R. Volante. Near-Infrared studies of the structure of water. IV. Water in relatively nonpolar solvents. *Journal of chemical physics*, **56**(12), 5899–5904, 1972.
- [99] W. A. P. Luck, H. Y. Zheng. Effect of solvent and temperature on OH stretching bands produced by van der Waals interactions. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2*, **80**, 1253–1268, 1984.
- [100] K. Faber. Estimating the uncertainty in estimates of root mean square error of prediction: Application to determining the size of an adequate test set in multivariate calibration, 1999. Submitted to *Analytical Chemistry*.
- [101] N. R. Draper, H. Smith. *Applied Regression Analysis*, S. 163–169. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1981.



- [102] S. Kotz (Hrsg.). *Encyclopedia of Statistical Sciences*, S. 426–428. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1997.
- [103] T. Bäck. *Evolutionary algorithms in theory and practice: evolution strategies, evolutionary programming, genetic algorithms*. Oxford University Press, Inc., New York, 1. Ausg., 1996.
- [104] E. H. Waldschmidt, H. K. G. Walter. *Grundzüge der Informatik*, Bd. 1, S. 316 ff. Mannheim, 1984.
- [105] I. N. Bronštejn. *Taschenbuch der Mathematik*. Thun, Frankfurt / Main, 1987.
- [106] K. Behnen, G. Neuhaus. *Grundkurs Stochastik*. Teubner, Stuttgart, 1984.

# Tabellenverzeichnis

2.1	Wesentliche Entwicklungen und Anwendungen Genetischer Algorithmen . . . . .	6
4.1	Begriffe der Evolutions-Theorie und ihre Bedeutung im Zusammenhang mit Genetischen Algorithmen . . . . .	47
4.2	Beispiel einer Roulette Wheel Parent Selection . . . . .	51
4.3	Beispiel für Uniform-Crossover . . . . .	52
4.4	Beispiel für den Mutations-Operator . . . . .	53
4.5	Wahrscheinlichkeitswerte der Operatoren . . . . .	54
4.6	Standardabweichungen verschiedener $\text{AlCl}_3$ Kalibrationsmodelle . . . . .	60
4.7	Inverse Empfindlichkeit ( $b$ ) und Empfindlichkeit ( $\gamma$ ) der KCl-Kalibration . . . . .	63
5.1	Banden-Parameter . . . . .	68
5.2	Aufteilung der Spektren wäßriger Lösungen anorganischer Salze. . . . .	74
6.1	Selektierte Faktoren der Protein-Kalibration I . . . . .	84
6.2	Selektierte Faktoren der Protein-Kalibration II . . . . .	86
6.3	Faktor-Selektionen für die Feuchtigkeit in Weizen auf Basis unterschiedlicher Methoden (Korrelations-Ranking). . . . .	91
6.4	Faktor-Selektionen für Protein in Weizen auf Basis unterschiedlicher Methoden (Eigenwert-Sortierung). . . . .	95
6.5	Faktor-Selektion für Protein in Weizen auf Basis unterschiedlicher Methoden (Korrelations-Ranking). . . . .	97
6.6	Vergleich von Faktor-Selektionen für Protein in Weizen . . . . .	97
6.7	Faktor-Selektion für die Kalibration von Olfen-Tabletten auf Basis unterschiedlicher Methoden (Korrelations-Ranking). . . . .	100
6.8	Überblick über die Faktor-Selektionen auf Basis von $\text{SEEP}_a$ . . . . .	114
6.9	Überblick über die Faktor-Selektionen auf Basis von $\text{SEEP}_b$ . . . . .	114
6.10	Verwendete Rauschamplituden. . . . .	116
7.1	Ergebnisse des GA für zehn Wiederholrechnungen I . . . . .	126
7.2	Ergebnisse des GA für zehn Wiederholrechnungen II . . . . .	127

7.3 Übersicht über die Robustheit Genetischer Algorithmen für zehn Wiederholrechnungen . . . . .	134
A.1 Einteilung des Weizen-Datensatzes . . . . .	157
A.2 Selektierte Faktoren der Protein-Kalibration III . . . . .	161
A.3 Rangliste der ersten 25 Faktoren . . . . .	161
A.4 Robustheit Genetischer Algorithmen für zehn Wiederholrechnungen .	162
A.5 Faktor-Selektionen der Kalibration von Protein in Weizen I . . . . .	164
A.6 Korrelations-Ranking der Faktoren für Protein in Weizen. . . . .	164
A.7 Faktor-Selektionen der Kalibration von Protein in Weizen II . . . . .	165
A.8 Faktor-Selektionen der Kalibrationen des Wirkstoffgehaltes in Olfen-Tabletten für verschiedene Freiheitsgrade. . . . .	165
A.9 Korrelations-Ranking der Faktoren für Olfen-Tabletten. . . . .	165
A.10 Mittlere LIG-Werte der Faktorauswahl durch Genetische Algorithmen	166

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Ein „Norn“ . . . . .	7
2.2	Anzahl der Veröffentlichungen zu Genetischen Algorithmen . . . . .	9
3.1	Original-Datensatz . . . . .	15
3.2	Zentrierter Kalibrationsdatensatz . . . . .	16
3.3	Faktoren des Beispiel-Datensatzes . . . . .	21
3.4	Regressionsvektor der Beispieldaten . . . . .	25
3.5	Die Abhängigkeit des Fehlers von der Komplexität des Kalibrationsmodells . . . . .	28
4.1	Lösungen des 123.45-Problems I . . . . .	42
4.2	Lösungen des 123.45-Problems II . . . . .	43
4.3	Ablaufschema eines Genetischen Algorithmus . . . . .	49
4.4	Der Roulette Wheel Parent Selection Algorithmus . . . . .	50
4.5	Beispiel für eine Roulette Wheel Parent Selection . . . . .	51
4.6	Veränderung der Aufrufwahrscheinlichkeiten im GA . . . . .	55
4.7	Plot von $(n - \mu_n^2)$ für $n = 1$ bis 200 . . . . .	59
4.8	Darstellung des Zusammenhangs zwischen NAS und Property . . . . .	62
4.9	Mittelwertspektrum der Kalibrationsspektren . . . . .	63
4.10	Property-Weighting-Spektren der KCl-Kalibrationen . . . . .	64
4.11	Pseudo-univariate Darstellung der PCR Modelle . . . . .	65
5.1	Spektrensatz mit zusätzlicher Störbande bei $1480 \text{ cm}^{-1}$ . . . . .	69
5.2	Basislinieneffekte . . . . .	70
5.3	Spektrensatz von Weizenkörnern . . . . .	71
5.4	Olfen-Spektrensatz (30 Scans pro Spektrum) . . . . .	72
5.5	Struktur des Wirkstoffs in den Olfen-Tabletten: Diclofenac . . . . .	72
5.6	Spektren des Kalium- / Aluminiumchlorid-Datensatzes . . . . .	74
6.1	Optimierung der Protein-Kalibration des Weizen-Datensatzes auf Basis des SEE-Werts . . . . .	79
6.2	Optimierung der Protein-Kalibration des Weizen-Datensatzes auf Basis des $\text{RMSEP}_{V1}$ -Werts . . . . .	80

---

6.3	Optimierung der Protein–Kalibration des Weizen–Datensatzes auf Basis des SEEP-Werts . . . . .	82
6.4	Optimierung der Protein–Kalibration des Weizen–Datensatzes auf Basis des SEE-Werts mit 70 Kalibrationsspektren . . . . .	83
6.5	Vergleich der Anzahl selektierter latenter Variablen . . . . .	83
6.6	Optimierung der Protein–Kalibration des Weizen–Datensatzes auf Basis des SEEP-Werts mit Korrelations–Ranking . . . . .	88
6.7	Validationsergebnisse für den Feuchtigkeitsgehalt von Weizen . . . . .	90
6.8	Property–Weighting–Spektren für den Feuchtigkeitsgehalt von Weizen	91
6.9	Net Analyte Signal für die Kalibration der Feuchtigkeit von Weizen .	92
6.10	Kalibrationsergebnisse der PLS–Berechnung für die Feuchtigkeit in Weizen . . . . .	93
6.11	Validationsergebnisse für den Proteingehalt in Weizen I . . . . .	94
6.12	Validationsergebnisse für den Proteingehalt von Weizen II . . . . .	96
6.13	Property–Weighting–Spektren für den Proteingehalt in Weizen . . . .	98
6.14	Net Analyte Signal für die Kalibration von Protein in Weizen . . . . .	99
6.15	Kalibrationsergebnisse der PLS–Berechnung für den Proteinanteil in Weizen . . . . .	99
6.16	Validationsergebnisse in Abhängigkeit von der Anzahl der Freiheitsgrade für den Wirkstoffgehalt in Olfen–Tabletten. I . . . . .	101
6.17	Property–Weighting–Spektren für den Diclofenac–Gehalt in Olfen–Tabletten . . . . .	102
6.18	Net Analyte Signal für die Kalibration des Diclofenac–Gehalts in Olfen–Tabletten . . . . .	103
6.19	Kalibrationsergebnisse der PLS–Berechnung für den Diclofenac–Gehalt in Olfen–Tabletten . . . . .	103
6.20	Durbin–Watson–Test des Weizen- und Olfen–Datensatzes . . . . .	106
6.21	Optimierung der Kalibration des H <sub>2</sub> O–Gehalts auf Basis der B&R–Fitnessfunktion . . . . .	108
6.22	Optimierung der Kalibration des Proteingehaltes auf Basis der B&R–Fitnessfunktion . . . . .	108
6.23	Ergebnisse der Protein–Kalibration des Weizen–Datensatzes. Fitnessfunktion: SEEP . . . . .	111
6.24	Ergebnisse der Protein–Kalibration des Weizen–Datensatzes. Fitnessfunktion: SEEP <sub>a</sub> . . . . .	111
6.25	Ergebnisse der Protein–Kalibration des Weizen–Datensatzes. Fitnessfunktion: SEEP <sub>b</sub> . . . . .	112
6.26	Kalibrationsergebnisse des Olfen–Datensatzes. Fitnessfunktion: SEEP	112
6.27	Kalibrationsergebnisse des Olfen–Datensatzes. Fitnessfunktion: SEEP <sub>a</sub>	113
6.28	Kalibrationsergebnisse des Olfen–Datensatzes. Fitnessfunktion: SEEP <sub>b</sub>	113
6.29	Selektierte Faktoren für verschiedene Fitnessfunktionen . . . . .	115

7.1	Änderung des LIG-Wertes in Abhängigkeit von Populationsgröße und Anzahl der Generationen . . . . .	119
7.2	GA Parameter Test I . . . . .	121
7.3	Aufbau der Stopfunktion im Genetischen Algorithmus . . . . .	123
7.4	GA Parameter Test II . . . . .	125
7.5	Einfaches Migrations-Modell am Beispiel der KCl-2 Kalibration . . .	130
7.6	Erweitertes Migrations-Modell mit Genaustausch zwischen den Genetischen Algorithmen . . . . .	130
7.7	Konvergenz des GA (KCl Kalibration) . . . . .	135
7.8	Konvergenz des GA (AlCl <sub>3</sub> Kalibration) . . . . .	135

# Abkürzungen

$n_e$	Zahl der Standards im Validationsdatensatz
$n_{ex}$	Zahl der Standards, die weder im Kalibrations- noch im Validationdatensatz sind
$n_f$	Zahl der selektierten Faktoren
$\mathcal{F}$	Zahl der Freiheitsgrade
$n_s$	Zahl der Standards im Kalibrationsdatensatz
$n_w$	Zahl der Datenpunkte im Spektrum
$\mathbf{C}$	Eigenvektormatrix der Kovarianzmatrix $\mathbf{Z}$
$\mathbf{D}_{(red)}$	(reduzierte) Datenmatrix
$\mathbf{F}$	reduzierte Faktormatrix, <i>Loading</i> -Matrix
$\mathbf{L}$	reduzierte Eigenvektormatrix der Kovarianzmatrix $\mathbf{Z}$ , <i>Score</i> -Matrix
$\mathbf{R}$	Faktormatrix
$\mathbf{Z}$	Kovarianzmatrix
$\mathbf{l}$	Faktorgewichte eines unbekanntes Probenspektrums $\mathbf{u}$
$\hat{\mathbf{p}}$	Eigenchaftswert / -vektor einer unbekanntes Probe
$\mathbf{p}_w$	Property oder Coefficient-Weighting-Spektrum
$\mathbf{p}$	Matrix der Eigenchaftswerte der Kalibrationsstandards
$\mathbf{x}$	Spektrum einer unbekanntes Probe
$\bar{c}$	Mittelwert der Konzentration
$\bar{y}$	Näherungswert des Mittelwerts des Meßsignals
$\sigma$	wahre Standardabweichung einer Meßreihe
$\beta$	Regressionskoeffizienten der Faktoren
$[\lambda]$	Eigenwertmatrix der Kovarianzmatrix $\mathbf{Z}$
$\lambda_i$	der Eigenwert des $i$ -ten Eigenvektors $\mathbf{C}(i, :)$ der Kovarianzmatrix $\mathbf{Z}$
LIG	Last Improved Generation
MLR	Multiple Lineare Regression
RE	Real-Error
RSD	Relative Standard Deviation
RSS	Residual Sum of Squares
DOF	Degrees Of Freedom
PCA	Principal Component Analysis
PCR	Principal Component Regression

PLS	Partial Least Squares
RMSEP	Root Mean Square Error of Prediction (Übergeordneter Begriff f. RMSEP, ERMSEP, SEE, SEP)
RMSEP <sub>v1</sub>	Root Mean Square Error of Prediction für (interne) Validation
RMSEP <sub>v2</sub>	Root Mean Square Error of Prediction für (externe) Validation
SEE	Standard Error of Estimate
SEP	Standard Error of Prediction
SEEP	Standard Error of Estimate and Prediction