

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Entwicklung und Anwendung Genetischer Algorithmen	5
3	Datenanalyse und Regression	11
3.1	Lambert–Beersches Gesetz	11
3.2	Multivariate Analysenverfahren	13
3.2.1	Principal Component Regression	14
3.3	Reduktion der Daten	26
3.3.1	Underfitting und Overfitting	27
3.4	Problematische Aspekte von Modellen	29
3.5	Validierung	30
3.5.1	Restvarianzwert	30
3.5.2	Standard Error of Estimate	31
3.5.3	Standard Error of Prediction	31
3.5.4	Standard Error of Analysis	33
4	Faktor–Selektion	35
4.1	Klassische Selektionsverfahren	36
4.1.1	Deterministische Auswahlverfahren	37
4.1.2	F -Tests	39
4.2	Kritische Betrachtung der klassischen Methoden	40
4.3	Genetische Algorithmen in der Faktorauswahl	43
4.3.1	Aufbau und Grundfunktionen Genetischer Algorithmen	44
4.3.2	Validation Genetischer Algorithmen	55
4.4	Bewertung von Kalibrationsmodellen	56
4.4.1	Varianz von Standardabweichungen	57
4.4.2	Net Analyte Signal	60
5	Datensätze und Software	67
5.1	Simulierte Datensätze	67
5.1.1	Spektrenberechnung	67
5.1.2	Basislinienseffekte	68

5.2	Reale Datensätze	69
5.2.1	Weizen-Spektren	69
5.2.2	Olfen-Spektren	71
5.2.3	Wäßrige Systeme	73
5.3	Eingesetzte Software	73
6	Faktor-Selektion — Ergebnisse und Diskussion	77
6.1	Over- und Underfitting	77
6.1.1	Sortierung nach Korrelationskoeffizienten	84
6.2	Gegenüberstellung von GA und klassischen Selektionsverfahren	88
6.2.1	Kalibration des Weizen-Datensatzes	89
6.2.2	Kalibration des Olfen-Datensatzes	100
6.3	Modifizierte Fitnessfunktionen	104
6.3.1	Durbin-Watson-Test	105
6.3.2	Fitnessfunktionen	107
7	Der Genetische Algorithmus	117
7.1	Parameter und Stopfunktion des Genetischen Algorithmus	117
7.1.1	Konvergenz Genetischer Algorithmen	118
7.1.2	Stopfunktion im Genetischen Algorithmus	122
7.1.3	Robustheit Genetischer Algorithmen	124
7.2	Spezielle Module des Genetischen Algorithmus	127
7.2.1	Parallele Genetische Algorithmen	128
7.2.2	Migrations-Modell	130
8	Zusammenfassung	137
	Literaturverzeichnis	141
	Tabellenverzeichnis	150
	Abbildungsverzeichnis	152
	Abkürzungen	155
	Anhang	157
A.1	Einteilung der NIR-Spektren	157
A.2	F -Verteilung und F -Tests	157
A.3	Berechnungen zur Orthogonalität von Scores	159
A.4	Tabellen	161
A.5	VG-Optionsliste	167
	Index	171