Untersuchung von chemometrischen Methoden zur Erstellung und Validierung von QSAR-Modellen

Von der Fakultät für Lebenswissenschaften

der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina

zu Braunschweig

zur Erlangung des Grades einer

Doktorin der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.)

genehmigte

D i s s e r t a t i o n

von Desiree Ingrid Baumann
aus Mainz

1. Referent: Prof. Dr. Knut Baumann
2. Referent: Prof. Dr. Hermann Wätzig
eingereicht am: 15.07.2015
mündliche Prüfung (Disputation) am: 18.12.2015

Druckjahr 2016

Dissertation an der Technischen Universität Braunschweig,
Fakultät für Lebenswissenschaften

Berichte aus der Pharmazie

Desiree Ingrid Baumann

Untersuchung von chemometrischen Methoden zur Erstellung und Validierung von QSAR-Modellen

Shaker Verlag
Aachen 2016

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.d-nb.de abrufbar.

Zugl.: Braunschweig, Techn. Univ., Diss., 2015

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4551-2
ISSN 0945-0939

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorveröffentlichungen der Dissertation

Teilergebnisse aus der vorliegenden Arbeit wurden mit Genehmigung der Fakultät für Lebenswissenschaften, vertreten durch den Mentor dieser Arbeit, in folgenden Beiträgen vorab veröffentlicht:

Publikationen:

Baumann D, Baumann K: **Reliable estimation of prediction errors for QSAR models under model uncertainty using double cross-validation**. *J Cheminform* 2014, **6**.

Tagungsbeiträge:

Baumann D, Baumann K: **Reliable Estimation of externally validated prediction errors for QSAR models**, *Journal of Cheminformatics* 2013, **5** (Suppl 1).

Baumann D, Baumann K**, Beyond Search-Based Variable Selection: Predictivity, Model Selection and Stability***,* Conferentia Chemometrica, Ungarn, Sopron, 2013.

Baumann D, Kreiß J, Baumann K, **Median R^2_{test} for Characterizing the Success of a Regression Model**, Scandinavian Conference, SSC14 Symposium, Sardinien (2015).

Inhaltsverzeichnis

I Einleitung und Zielsetzung der Arbeit

II Grundlagen und Methoden

III Herleitungen und Versuchsaufbau

V Anhang