

Zusammenfassung

Die frühzeitige Erkennung von medikamentös herbeigeführten Nebenwirkungen ist ein wichtiger Schritt im Prozess der pharmazeutischen Wirkstoffentwicklung. In dieser Arbeit werden Klassifikationsverfahren vorgestellt, die eine automatisierte Vorhersage von toxischen Nebenwirkungen für definierte Organe bzw. Organregionen ermöglichen. Datengrundlage sind $^1\text{H-NMR}$ Spektren von Rattenurin gesammelt nach einmaliger Verabreichung eines Medikaments.

Die in dieser Arbeit entwickelten Klassifikationsverfahren basieren auf dem Prinzip der Ensemble Klassifikationssysteme. Hierbei wird eine Gesamtklassifikationsentscheidung auf der Basis vieler einzelner Basisklassifikatoren erreicht. Durch die Verwendung lokaler Regionen für das Training der Basisklassifikatoren wird eine Verbesserung der Gesamtklassifikationsleistung durch Optimierung der Ensemble Zusammensetzung erreicht. Auf diesem Prinzip beruhende Klassifikationssysteme werden in dieser Arbeit entwickelt und miteinander verglichen.

Abstract

The early detection of drug-induced adverse effects is an important step in the industrial drug development process. This work presents pattern recognition systems allowing for the automatic detection of toxic adverse effects with respect to particular organs or organ regions. $^1\text{H NMR}$ spectra from rat urine are used as data source, whereby the urine is collected after single administration of a pharmaceutical.

Classification systems developed in this thesis are based on ensemble systems. Thereby, an aggregated ensemble classification is achieved by combination of several base classifiers. The training of base classifiers with respect to particular spectral regions improves the overall classification performance by optimization of the ensemble composition. Based on this principle, different classification approaches are developed and compared.