

NeuroCarb

Anwendung von künstlichen neuronalen Netzwerken für die NMR Strukturaufklärung von Oligosacchariden

Inauguraldissertation

zur

Erlangung der Würde eines Doktors der Philosophie

vorgelegt der

Philosophisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität Basel

von

Andreas Stöckli

aus

Menzna/LU

Basel, Juni 2006

Genehmigt von der Philosophisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

auf Antrag von:

Prof. Dr. Beat Ernst

Prof. Dr. Angelo Vedani

Basel, den 6. Juni 2006

Prof. Dr. Hans-Jakob Wirz
Dekan

1 Inhaltsverzeichnis

1	Inhaltsverzeichnis	2
2	Abkürzungen	5
3	Zusammenfassung	8
4	Einleitung	10
4.1	Glykoproteine	10
4.1.1	Glykoproteinstrukturen und Biosynthese	11
4.1.2	Rekombinante Proteine	16
4.1.3	Ziele der Strukturaufklärung von Glykoproteinen	18
4.2	Strukturaufklärung von Kohlenhydraten mit NMR	18
4.2.1	Anzahl der Zuckerbausteine	19
4.2.2	Monosaccharid-Identität	19
4.2.3	Konfiguration am anomeren C-Atom	19
4.2.4	Verknüpfung und Sequenz	21
4.2.5	Verknüpfungsmuster der Substituenten	21
4.2.6	Vor- und Nachteile der Kern-Resonanz Spektrometrie (NMR)	21
4.3	Künstliche Neuronale Netzwerke	22
4.3.1	Historischer Überblick	22
4.3.2	Kurze Theorie der künstlichen neuronalen Netzwerke	24
4.3.3	Training von künstlichen neuronalen Netzwerken	30
4.3.4	Lernalgorithmen	31
4.3.5	Vor- und Nachteile von künstlichen neuronalen Netzwerken	33
4.3.6	Praktische Anwendungen von künstlichen neuronalen Netzwerken	34
4.3.7	Anwendungen von künstlichen neuronalen Netzwerken im Bereich Kern-Resonanz Spektrometrie und Kohlenhydrate	34
4.3.8	Andere Computer-unterstützte Strukturaufklärungssysteme	35
4.4	Integration von NeuroCarb in EuroCarbDB	35
4.5	Ziele der Arbeit	36
5	Material und Methoden	37
5.1	Computerhardware	37
5.2	Software	37
5.3	NMR Hardware & Software	38
5.4	Methoden der Gruppeneinteilung	38
5.4.1	Nachbargruppen-Ansatz	38
5.4.2	Monosaccharid-Ansatz	42
5.4.3	Disaccharid-Ansatz	45
5.5	Verwendete Substanzen	51
5.5.1	Experimentelle Daten	51
5.5.2	Literaturdaten	53
5.6	Künstliche neuronale Netzwerke (ANN)	61
5.6.1	Selbst-organisierende Netzwerke	61
5.6.2	Counterpropagation Netzwerke	63
5.6.3	Mehrschichtige Netzwerke mit Backpropagation Lernverfahren	63
5.6.4	Probleme des Backpropagation Lernverfahrens	66
5.7	Datenverarbeitung	69

1. Inhaltsverzeichnis

5.7.1	Standardisierung der Daten	69
5.7.2	Berechnen von Mittelwerten und Standardabweichungen	70
5.8	Programme für die Simulation neuronaler Netzwerke	86
5.8.1	Statsoft Statistica	86
5.8.2	Stuttgarter Neuronale Netzwerke Simulator (SNNS) v4.2	86
5.8.3	Java Neuronale Netzwerke Simulator (JavaNNS) v1.1	88
5.8.4	SONNIA v4.10:	89
5.9	ANN Pattern File Generator (ANN PFG)	90
5.9.1	Übersicht	90
5.9.2	Funktionen	92
5.9.3	Kombinationen	94
6	Praktische Durchführung	97
6.1	Substitutionsanalyse ungeschützter Monosaccharid-Einheiten	98
6.2	Selbst-organisierende Karten (SOM)	98
6.3	Nachbargruppen-Ansatz	100
6.4	Monosaccharid-Ansatz	102
6.4.1	Monosaccharid-Tests	105
6.4.2	Disaccharid-Tests	106
6.4.3	Hindsgaul-Test	106
6.4.4	Stenutz-Test	106
6.4.5	Instituts-Test	106
6.5	Disaccharid-Ansatz	107
7	Resultate und Diskussion	109
7.1	Substitutionsanalyse	109
7.1.1	Glucose	109
7.1.2	Galactose	114
7.1.3	Mannose	118
7.1.4	Substitution am anomeren Zentrum	123
7.2	Selbst organisierende Karten (SOM)	124
7.3	Nachbargruppen-Ansatz	127
7.3.1	Auswertung der trainierten Netzwerke	128
7.3.2	Monosaccharid-Test	132
7.4	Monosaccharid-Ansatz	136
7.4.1	Auswertung der trainierten Netzwerke	136
7.4.2	Monosaccharid-Tests	138
7.4.3	Disaccharid-Tests	154
7.4.4	Hindsgaul-Test	169
7.4.5	Stenutz-Ttest	173
7.4.6	Instituts-Test	174
7.5	Disaccharid-Ansatz	175
7.5.1	Auswertung der trainierten Netzwerke	175
7.5.2	Resultate Disaccharid-Test	179
8	Schlussfolgerungen und Ausblick	181
9	Referenzen	186
10	Abbildungsverzeichnis	197
11	Danksagung	200

12	Anhang	201
12.1	Berechnung Mittelwerte und Standardabweichungen	201
12.1.1	Monosaccharid-Ansatz	201
12.1.2	Disaccharid-Ansatz	236
12.2	Hindsgaul-Datenreihe	253
12.3	Stenutz-Datenreihe	253
12.4	Institutseigene Datenreihe	281
12.5	Mittelwerte Selbst-Organisierende Karten	282
12.6	Parameter Nachbargruppen-Ansatz	286
12.6.1	Parameter Monosaccharid-Test	286
12.7	Parameter Monosaccharid-Ansatz	286
12.7.1	Parameter Monosaccharid-Tests	286
12.7.2	Parameter Disaccharid-Tests	298
12.7.3	Parameter Hindsgaul-Test	310
12.7.4	Parameter Stenutz-Test	318
12.7.5	Parameter Instituts-Test	318
12.8	Parameter Disaccharid-Ansatz	319
12.8.1	Parameter Literatur-Test (online)	319
12.9	Auswertungen Netzwerke Nachbargruppen-Ansatz	320
12.10	Auswertung Netzwerke Monosaccharid-Ansatz	325
12.11	Auswertungen Netzwerke Disaccharid-Ansatz	339
12.12	Progamcode Modification Generator (MG)	340
13	Curriculum vitae	350

2 Abkürzungen

ACT	Aktivierungsfunktion
ANN	<i>Artificial Neural Network</i> , künstliche neuronale Netzwerke
Ara	Arabinose
Asn	Asparagin
ASGPR	Asyloglykoprotein Rezeptor
BP	<i>Backpropagation of Errors</i>
CASPER	<i>Computer assisted spectrum evaluation of regular polysaccharides</i>
CHO	<i>Chinese hamster ovary</i>
COSY	<i>Correlation Spectroscopy</i>
Csv	<i>Comma-separated values</i> , Textdatei zur Speicherung einfach strukturierter Daten; Trennung durch Komma, Semikolon, Doppelpunkt und andere
DQF-COSY	<i>Double quantum filtered-COSY</i>
ER	Endoplasmatisches Retikulum
rER	rauhes Endoplasmatisches Retikulum
sER	glattes (<i>smooth</i>) Endoplasmatisches Retikulum
Fru	Fructose
Fuc	Fucose
Gal	Galactose
Glc	Glucose
GlcA	<i>Glucuronic Acid</i> , Glucuronsäure
GlcNAc	<i>N-Acetyl Glucosamin</i>
GalNAc	<i>N-Acetyl Galactosamin</i>
Ha	Hektare, 1 ha = 0,01 km ² = 100 m × 100 m = 10.000 m ²

2. Abkürzungen

HMBC	<i>Heteronuclear multiple bond correlation</i>
HMQC	<i>Heteronuclear multiple quantum coherence</i>
HPLC	<i>High performance liquid chromatography</i> ; Hochleistungs-Flüssigchromatographie
HSQC	Heteronuclear single quantum coherence
HU	<i>Hidden Units</i> ; Neuronen versteckter Schichten
Hz	Hertz, SI-Einheit der Frequenz, $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1} = 1/\text{s}$
IU	<i>Input Units</i> ; Neuronen der Eingabeschicht
IUPAC	<i>The International Union of Pure and Applied Chemistry</i> (http://www.iupac.org)
JNNS	auch JavaNNS, <i>Java Neural Network Simulator v1.1</i> ^[1]
MG	<i>Modification Generator</i> , VBA-Makro zu Erstellung der Modifikationen (Kapitel 5.7.2.1)
MS	Massenspektrometrie
MSE	<i>Mean Squared Error</i> , mittlere quadratische Abweichung
MYSQL	SQL-Datenbankverwaltungssystem, <i>Open Source</i> Software
Neu5Ac	<i>N-Acetyl Neuraminic Acid</i> , N-Acetyl Neuraminsäure
NMR	<i>Nuclear Magnetic Resonance</i> ; Kernresonanz-Spektrometrie
NOE	<i>Nuclear Overhauser Effect</i>
ODBC	<i>Open DataBase Connectivity</i> , "Offene Datenbank-Verbindungsfähigkeit", eine standardisierte Datenbank-schnittstelle
OU	<i>Output Units</i> ; Neuronen der Ausgabeschicht
PFG	<i>Pattern File Generator</i> (Kapitel 5.9)
ppm	<i>parts per million</i> , $1 \text{ ppm} = 10^{-6} = 1/\text{Millionstel}$
Rha	Rhamnose
Rib	Ribose
ROESY	<i>Rotating frame Overhauser enhancement spectroscopy</i>

2. Abkürzungen

Ser	Serin
Sia	<i>Sialic Acid</i> ; Sialinsäure (= Neu5Ac)
SNNS	Stuttgarter Neuronale Netzwerke Simulator ^[2]
SOM	<i>Self Organizing Maps</i> , selbst organisierende Karten
SONNIA	<i>Self Organizing Neural Network for Information Analysis</i>
SQL	<i>Structured Query Language</i> , Datenbanksprache
SSE	<i>Sum Squared Error</i> , Summe der Fehlerquadrate
Thr	Threonin
TOCSY	<i>Total correlation spectroscopy</i>
TSP	Das Problem des Handlungsreisenden ^[3] (<i>Traveling Salesperson Problem</i> bzw. <i>Traveling Salesman Problem</i>) ist ein kombinatorisches Problem der Mathematik und der theoretischen Informatik. Es behandelt die Aufgabe eines Handlungsreisenden, eine Reihenfolge für den Besuch mehrerer Orte so zu wählen, dass nach der Rückkehr zum Ausgangsort die gesamte Reisedistanz möglichst kurz ist.
VBA	<i>Visual Basic for Applications</i> , Skriptsprache zur Steuerung von Microsoft-Office Programmabläufen
XOR	Eine exklusiv-ODER-Verknüpfung ^[4] (auch XOR, EOR, Modulo-2 Addition, Antivalenz oder Kontravalenz) ist ein Begriff aus der Aussagenlogik. Die Gesamtaussage ist dann wahr, wenn entweder die erste Aussage oder die zweite Aussage wahr ist, aber nicht beide.
Xyl	Xylose

3 Zusammenfassung

Durch die Fortschritte in der biotechnologischen Forschung gewinnen Glykoproteine als Wirkstoffe immer mehr an Bedeutung. Für die Produktion dieser Biopolymere, müssen sie mit einem konstanten Glykosylierungsmuster exprimiert werden, da Veränderungen in der Zusammensetzung der Glykane zu einer Veränderung ihrer pharmakokinetischen und pharmakodynamischen Eigenschaften führen können. Um diese viel versprechenden Wirkstoffe effizient und gewinnbringend herstellen zu können, werden deshalb kostengünstige, schnelle und genaue Methoden zur Analyse der Glykan-Komposition benötigt.

Zurzeit werden für die Strukturaufklärung von Oligosacchariden, nach erfolgter enzymatischer Aufspaltung durch Exoglykosidasen und Aufreinigung mit Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC), hauptsächlich Methoden der Massenspektrometrie (MS) verwendet. Die Massenspektren können mit der Hilfe von Datenbanken interpretiert werden und liefern die Glykosylierungsmuster. Das Ziel der vorliegenden Arbeit war es, mit der Hilfe von künstlichen neuronalen Netzwerken eine neue Methode für die Strukturaufklärung von Oligosacchariden basierend auf ^{13}C -NMR Spektren zu entwickeln.

Oligosaccharide sind aus einfachen Untereinheiten — den Monosacchariden aufgebaut. Es wurde bereits gezeigt, dass neuronale Netzwerke in der Lage sind substituierte und unsubstituierte Monosaccharide (Glucose, Galactose und Mannose) anhand von ^{13}C -NMR Resonanzen nach der Monosaccharid-Identität (Glc, Gal, Man), der Konfiguration am anomeren C-Atom (α/β), und eventuellen Substitutionen aufzuteilen. In der vorliegenden Arbeit wurde dieses Konzept auf mono- und di-substituierte, in Säugetieren vorkommende Monosaccharid-Einheiten (Glc, Gal, Man, Fuc, Xyl, GlcA, GlcNAc, GalNAc und D-Neu5Ac) erweitert.

Ausgehend von einer Datenbank mit 1097 ^{13}C -NMR Spektren ungeschützter Oligosaccharide, wurden sowohl Netzwerke mit unüberwachten als auch überwachten Lernalgorithmen trainiert. Dabei wurden die Oligosaccharide auf drei verschiedene Arten mit ihren chemischen Verschiebungen im ^{13}C -NMR korreliert. (i) Im *Nachbargruppen-Ansatz* wurde eine einzelne chemische Verschiebung mit der Konfiguration eines C-Atom inklusive der Konfiguration seiner beiden benachbarten C-Atome korreliert. Aus Literaturdaten der Monosaccharid-Einheiten Glucose, Galactose und Mannose wurden auf Grund der Konfiguration und Substitution insgesamt 72 verschiedenen Gruppen gebildet. Damit wurden dreischichtige Netzwerke mit dem Backpropagation Algorithmus trainiert. Von einem Literaturtest mit 812 Monosaccharid-Einheiten konnten jedoch nur 7.5% korrekt klassifiziert werden. Deshalb wurde der Ansatz nicht mehr weiter verfolgt. (ii) Für den *Monosaccharid-Ansatz* wurden Monosaccharid-Einheiten mit der Konfiguration am anomeren C-Atom und ihrem Substitutionsmuster mit ihren chemischen Verschiebungen korreliert. Dafür wurden Literaturdaten der in Säugetieren vorkommenden Monosaccharid-Einheiten (Glc, Gal, Man, Fuc, Xyl, GlcA, GlcNAc, GalNAc, und Neu5Ac) in 98 verschiedene Gruppen eingeteilt. In einem ersten Schritt, konnte mit

3. Zusammenfassung

Kohonen-Netzwerken erfolgreich gezeigt werden, dass neuronale Netzwerke in der Lage sind, Monosaccharide den 98 Monosaccharid-Gruppen zuzuordnen. In einem zweiten Schritt, wurden mit den gleichen Gruppen 3- bis 4-schichtige Netzwerke mit dem Backpropagation Algorithmus trainiert. Die Generalisierungsfähigkeit (Fähigkeit zur korrekten Klassifizierung unbekannter Testdatensätze) der trainierten Netzwerke wurde mit Mittelwerten der antrainierten Gruppen (99.2–100%), Literaturdatensätzen (46.9–95.5%) und verschiedenen Datensätzen *in-house* gemessener ^{13}C -NMR Spektren ungeschützter Disaccharide (50–100%) überprüft. (iii) Im *Disaccharid-Ansatz* wurden den Netzwerken Disaccharide als Gruppen antrainiert. Aus den Oligosacchariden der Literaturdatenbank wurden insgesamt 265 verschiedene Disaccharid-Gruppen gebildet und damit dreischichtige Netzwerke mit dem Backpropagation Algorithmus trainiert. Die Erkennung des Literaturtests mit 260 Literaturdatensätzen lag bei 10–19%. Auch dieser Ansatz wurde wegen der unzureichenden Resultate verworfen.

In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass neuronale Netzwerke in der Lage sind, Monosaccharide anhand der chemischen Verschiebungen ihrer C-Atome nach Monosaccharid-Identität, nach der Konfiguration am anomeren C-Atom und nach ihrem Substitutionsmuster einzuteilen. Der erfolgreichste Ansatz, die chemischen Verschiebungen mit Monosaccharid-Gruppen zu korrelieren, sollte in weiteren Versuchen ausgebaut und verfeinert werden.

4 Einleitung

4.1 Glykoproteine

Das menschliche Genom enthält zwischen 30'000 und 40'000 Gene, die für bis zu 100'000 Proteine kodieren. Ein hoch-aktueller Forschungszweig untersucht, wie post-translationale Modifikationen, wie z.B. der Glykosylierung, Die Funktion dieser Proteine beeinflussen. Glykosylierte Proteine kommen ubiquitär in der extrazellulären Matrix und an der Zelloberfläche vor. Der Zuckerteil dieser Glykoproteine (= Glykan) ist oft an Zell-Zell- und Zell-Matrix-Wechselwirkungen beteiligt. Viele Viren und Bakterien binden mittels dieser Glykan-Strukturen an die Oberfläche ihrer Wirtszellen, um in sie einzudringen und sie zu infizieren. Schliesslich können viele Krankheiten^[5] oder das Wachstum von metastasierenden Tumoren^[6] über einen veränderten Kohlenhydrat-Metabolismus oder einer Veränderung von auf Kohlenhydraten basierenden Erkennungsprozessen definiert werden. Aus diesem Grund ist das Interesse an der Glykobiologie und im Speziellen an der Charakterisierung von Glykoproteinen stark gestiegen. Die Analyse und Sequenzierung ist wegen der grossen Variabilität der Glykane jedoch mühsam und kostspielig. Im Gegensatz zu den anderen Biomolekülen (Proteinen oder Nukleinsäuren) ist die Sequenz der Glykane nicht durch das Genom kodiert^[7], sondern sie werden posttranslatorisch mit zum Teil grosser Heterogenität synthetisiert.

Damit Glykoproteine therapeutisch eingesetzt werden können, muss bei der Produktion das natürliche Glykosylierungsmuster in engen Grenzen reproduziert werden. Falls Expressionssysteme stark modifizierte Glykane produzieren, können diese im menschlichen Organismus zu unerwünschten Reaktionen des Immunsystems führen^[8]. Deshalb muss die Produktion von Glykoproteinen durch eine leistungsfähige Glykan-Analyse laufend überwacht werden.

Für die Strukturaufklärung von Glykanen werden Techniken wie Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC), Massenspektrometrie (MS) und Kern-Resonanz Spektrometrie (NMR) eingesetzt. Zur Strukturaufklärung müssen die Glykane enzymatisch von den Proteinen abgespalten und mittels HPLC gereinigt werden. Mit hochempfindlichen MS-Techniken können das Molekulargewicht, die Monosaccharid-Sequenz, und in speziellen Fällen das Verknüpfungsmuster aufgeklärt werden. Für weitere Informationen, wie das genaue Verknüpfungsmuster, die Konfiguration am anomeren Zentrum (Kapitel 4.2.3) und die genaue Identität der einzelnen Monosaccharid-Einheiten können NMR-Experimente herangezogen werden (vgl. Kapitel 4.2).

Rekombinante Proteine und monoklonale Antikörper sind viel versprechende biotechnologisch hergestellte Wirkstoffe für eine grosse Anzahl von Krankheiten. Im Jahre 2004 befanden sich rund 324 biotechnologisch produzierte neue Wirkstoffe in der Entwicklung, wovon 76 monoklonale Antikörper und 23 rekombinante Glykoproteine waren^[9]. Die meisten dieser rekombinanten Proteine werden aus CHO-Zellen (*Chinese Hamster Ovary Cells*) exprimiert.

Durch die Glykosylierung wird das für die Funktion und die Struktur des Glykoproteins essentielle Glykosylierungsmuster aufgebaut. Die Reproduktion des natürlichen Glykosylierungsmusters ist eine der Hauptschwierigkeiten in der biotechnologischen Produktion von Glykoproteinen und eine grosse Herausforderung für die pharmazeutische Industrie, damit rekombinante Glykoproteine wirtschaftlich und sicher produziert werden können. Obwohl eine Vielzahl verschiedener Expressionssysteme für die Produktion von rekombinanten Proteinen zur Verfügung stehen, werden rekombinante Glykoproteine vorwiegend in Säugetierzellen (z.B. CHO-Zellen) produziert^[10, 11], da damit die humanen Glykosylierungsmuster am Besten reproduziert werden können.

CHO-Zellen, die für eine möglichst hohe Proteinproduktion optimiert sind, können in Abhängigkeit der Produktionsbedingungen sehr unterschiedliche Glykosylierungsmuster erzeugen^[12]. Dies führt zu nicht-konformen Endprodukten, was sich in den Kosten für einen Wirkstoff niederschlägt. Ein fehlerhaftes oder nicht-humanes Glykosylierungsmuster kann dazu führen, dass ein Wirkstoff eine Immunantwort auslöst^[8], oder dessen Halbwertszeit, Bioaktivität und Stabilität^[12] erniedrigt werden.

Dadurch werden die Produktkosten und damit die Behandlungskosten wie auch das Risiko des Auftretens von Nebenwirkungen (z.B. durch Histamin-Freisetzung ausgelöste allergische Reaktionen, wie Hautrötungen, Juckreiz) erhöht. Deshalb ist die pharmazeutische Industrie auf der Suche nach alternativen Methoden für die Produktion und die *in-process* Charakterisierung von Glykoproteinen. Alternative Expressionssysteme, wie zum Beispiel transgene Pflanzen oder Säugetierzellen werden vermehrt eingesetzt, da sie zu höheren Ausbeuten korrekt glykosylierter Proteine und damit geringeren Produktionskosten führen können. Trotzdem bleibt die Produktion von Glykoproteinen mit korrekter Glykosylierung eine wichtige noch zu überwindende Hürde, bevor eine breite Anwendung von rekombinanten Proteinen in parenteralen Darreichungsformen^[13] möglich wird.

4.1.1 Glykoproteinstrukturen und Biosynthese

Die strukturelle Vielfalt der Glykane wird durch die gewebsspezifische Regulation der Genexpression von Glykosyltransferasen und die Verfügbarkeit von Monosacchariden und entsprechenden Akzeptoren in Golgi-Apparat und im Endoplasmatischem Retikulum (ER) bestimmt. Glykosyltransferasen katalysieren regionsspezifisch die Übertragung eines definierten Monosaccharides vom Donor auf eine bestimmte Hydroxylgruppe in der wachsenden Zuckerkette. Die Geschwindigkeit, mit der diese Übertragung stattfindet, wird durch die räumliche Umgebung der ungeriffen Zuckerkette im Protein beeinflusst, wodurch je nach Glykoprotein unterschiedliche Glykanstrukturen entstehen^[14].

Die Struktur des synthetisierten Oligosaccharides hängt dabei vom Typ der Zelle, ihrem Entwicklungsstadium, von der Verfügbarkeit von Nahrungsbausteinen oder pathologischen Veränderungen ab^[15]. Die mögliche strukturelle Vielfalt ist enorm.

4. Einleitung

Oligosaccharide sind über O- oder N-glykosidische Bindungen kovalent mit dem Protein verbunden. In O-glykosylierten Proteinen (Abbildung 1, Abbildung 3) wird N-Acetyl Galactosamin (GalNAc) immer als erster Zucker des Glykanteils an die Hydroxylgruppe der Aminosäuren Serin (Ser) oder Threonin (Thr) gebunden. Der Glykanteil besteht bei O-Glykanen aus 1–20 Zuckern, woraus sich eine beträchtliche strukturelle Vielfalt ergibt. In gereiften O-Glykanen finden sich alle Säugetierzucker (Abbildung 2) ausser Mannose.

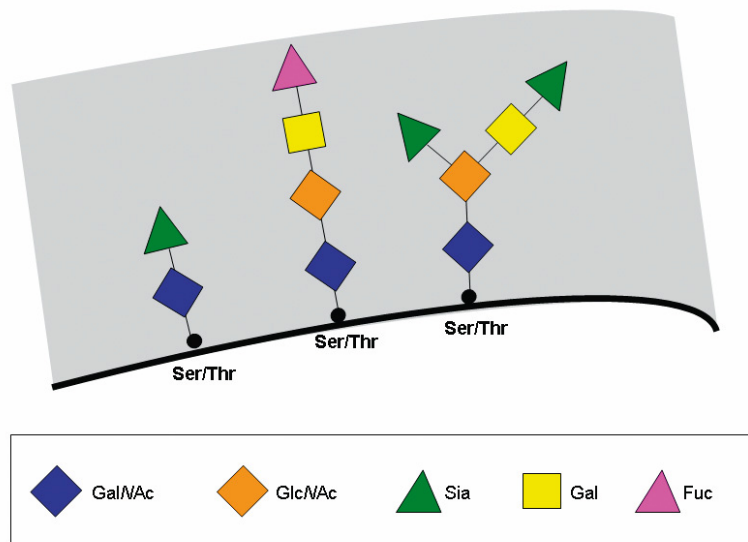


Abbildung 1. O-glykosylierte Oligosaccharide

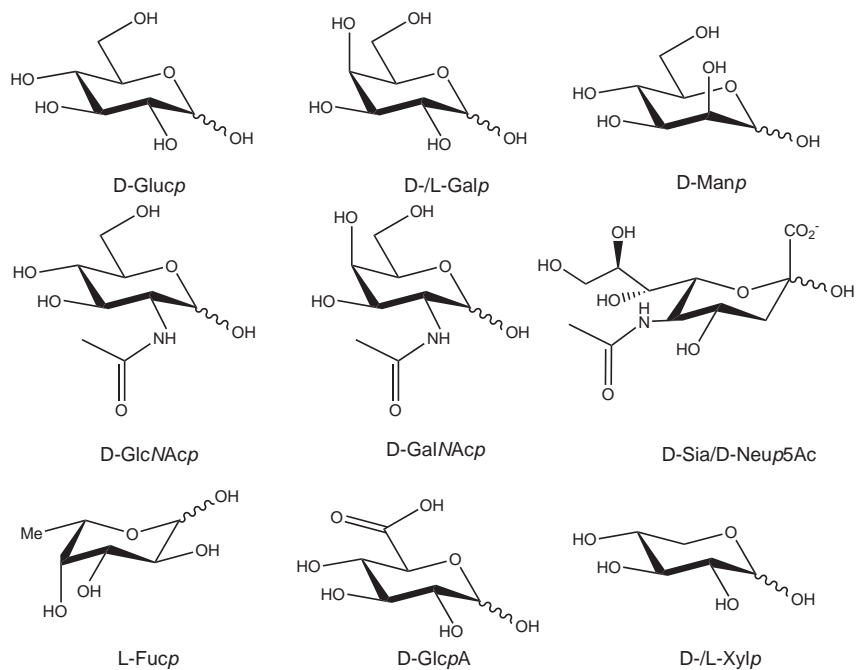


Abbildung 2. In Säugetieren vorkommende Monosaccharide

4. Einleitung

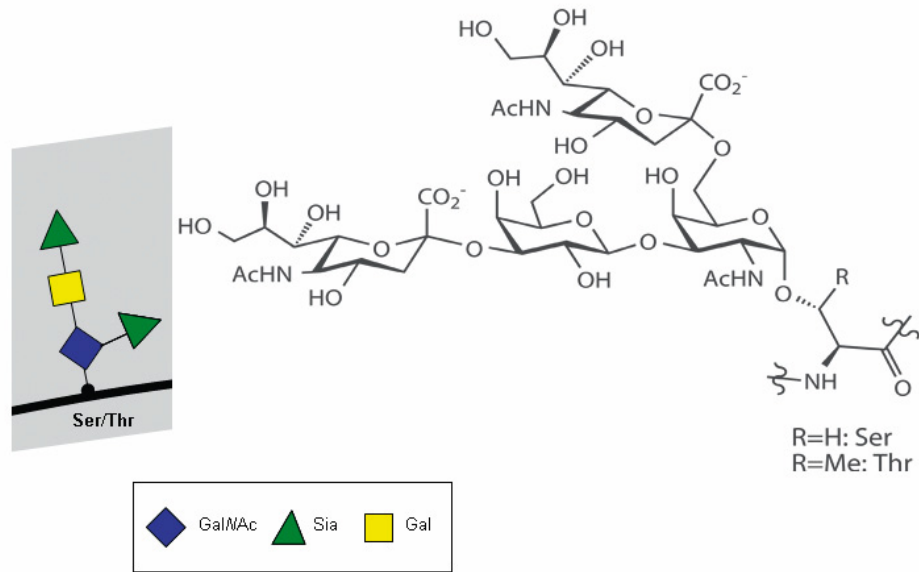


Abbildung 3. O-glykosyliertes Oligosaccharid (schematisch) mit entsprechender chemischer Formel

N-Glykane enthalten einen gemeinsamen *core*, der aus 5 Monosaccharid-Einheiten besteht und unterscheiden sich nur in den Seitenketten voneinander. Im Unterschied zu den *O*-Glykanen wird bei *N*-Glykanen *N*-Acetyl Glucosamin (GlcNAc) als erster Zucker über die Seitenkette von Asparagin (Asn) kovalent mit dem Protein verknüpft. Eine *N*-Glykosylierung ist nur an bestimmten Peptid-Sequenzen, wie Asn-X-Ser oder Asn-X-Thr möglich, wobei X jede Aminosäure ausser Prolin sein kann^[16].

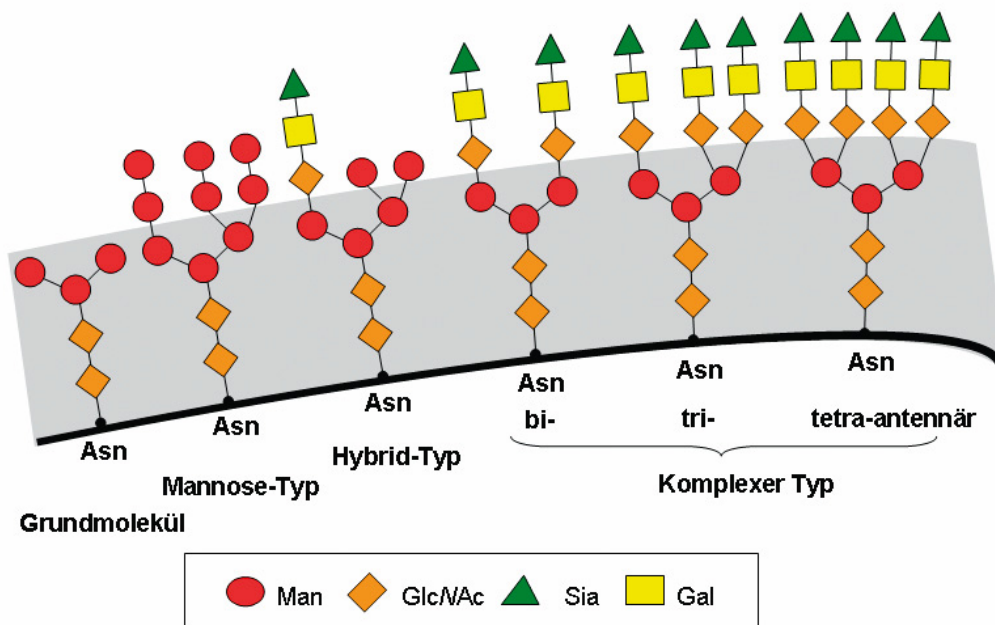


Abbildung 4. *N*-glykosylierte Oligosaccharide

4. Einleitung

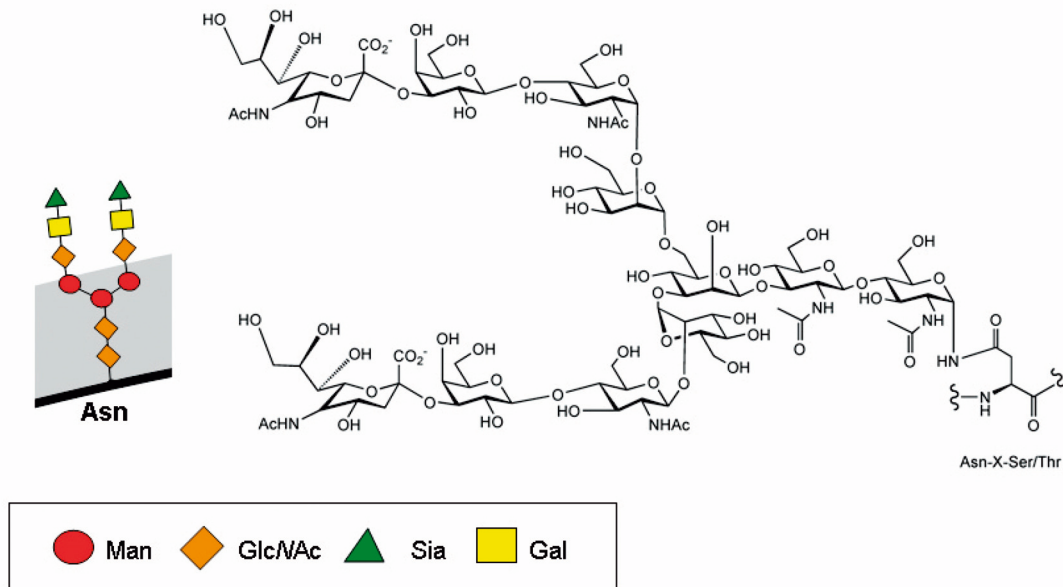


Abbildung 5. N-glykosyliertes Oligosaccharid (schematisch) mit entsprechender chemischer Formel

N-Glykane lassen sich in drei Klassen einteilen: (i) **Mannose-Typ**, (ii) **komplexer Typ**, (iii) **Hybrid-Typ** (Abbildung 4). N-Glykane vom **Mannose-Typ** bestehen neben dem Grundmolekül aus 2–6 zusätzlichen verzweigten Mannosemolekülen. N-Glykane des **komplexen Typs** bestehen aus dem Grundmolekül und 2 oder mehr Seitenketten, mit jeweils mindestens einer N-Acetyl Glucosamin-, einer Galactose- und eventuell einer terminalen Sialinsäure-Einheit (Sia). Die Seitenketten können bi-, tri- oder tetra-antennär verzweigt sein. Glykane des **Hybrid-Typs** bestehen aus einer Seitenkette mit komplexer Struktur und einer oder mehr Seitenketten des Mannose-Typs. In gereiften N-Glykanen finden sich alle in Säugetieren vorkommende Zucker (s. Abbildung 2) ausser Glucose. Serum Glykoproteine enthalten meistens N-Glykane des komplexen Typs.

Die Biosynthese von O-Glykanen beginnt auf der, dem Zellkern zugewandten Seite des Golgi-Apparates (cis-Golgi) mit dem Transfer des ersten Zuckermoleküls, durch eine spezifische Polypeptid O-GalNAc-Transferase, auf das fertige Polypeptid. In den Zisternen des Golgi-Apparates (medialer Golgi) findet die Verlängerung der Glykankette durch Verknüpfung mit weiteren Zuckerresten wie GlcNAc, Gal und Fuc statt. Auf der dem Zellkern abgewandten Seite (trans-Golgi) wird das fast fertige Glykoprotein an den nicht-reduzierenden Enden mit Sialinsäureresten verknüpft. Diese Zuckerreste schützen das Protein vor einer Aufnahme in Leberzellen über den Asialoglykoprotein Rezeptor (ASGPR) und dem vorzeitigen Abbau durch körpereigene Enzyme.

Die Biosynthese von N-Glykanen ist vergleichsweise komplexer. Sie startet im rauen endoplasmatischen Retikulum (rER) mit einem Vorläufermolekül (Abbildung 6) bestehend aus 14 Zuckern (Glc₃Man₉GlcNAc₂). Das Vorläufermolekül ist verbunden mit Dolicholpyrophosphat, einem Lipid, das dem Oligosaccharid als

4. Einleitung

Transporter dient. Durch die Energie, die bei der Abspaltung des Dolicholpyrophosphates frei wird, wird die Verknüpfung des Vorläufermoleküls an das Peptid ermöglicht.

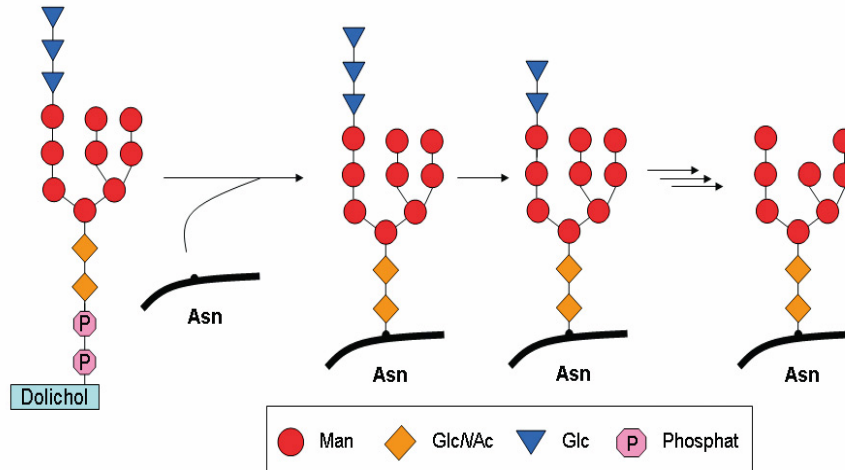


Abbildung 6. Synthese eines *N*-Glykans im rER

Das aktivierte Glykan wird auf die Aminosäure Asn des wachsenden Proteins übertragen. Noch während sich das entstehende Glykoprotein im rER befindet, werden alle drei Glucose- und ein Mannosebaustein durch spezifische Glykosidasen entfernt (Abbildung 6). So entsteht ein Oligosaccharid aus 10 Bausteinen, als Vorläufer für alle *N*-Glykane. Die weitere Reifung der *N*-Glykane findet nicht mehr im rER sondern im Golgi-Apparat statt. Im Folgenden wird das Vorläufermolekül durch das Entfernen (Glykosidasen) und Hinzufügen (Glykosyltransferasen) von Zuckereinheiten in cis- medialem- und trans-Golgi-Apparat umgebaut (s. Abbildung 7).

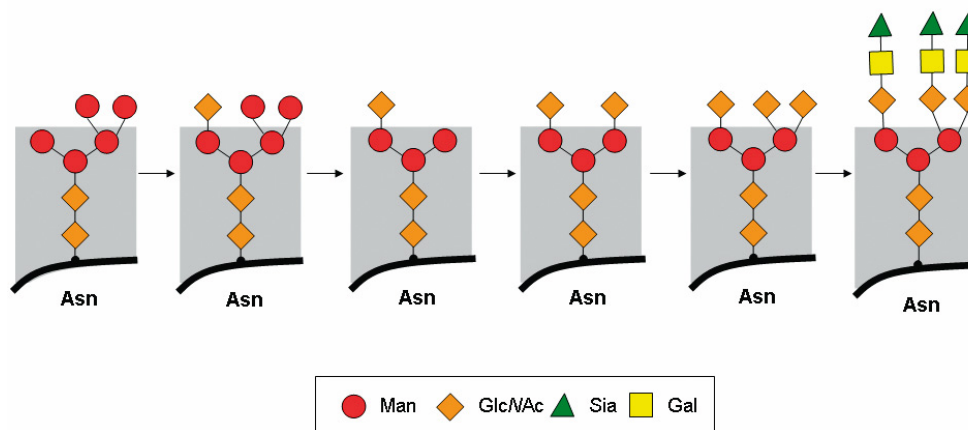


Abbildung 7. Reifung eines *N*-Glykans im Golgi

4. Einleitung

Viele der an der Glykosylierung beteiligten Enzyme reagieren extrem sensitiv auf Veränderungen in der Zelle. Aus diesem Grund hängt das Glykosylierungsmuster stark vom physiologischen Zustand der Zelle ab (Zelltyp, Ernährung, eventuelle Entartung, Reifestatus).

4.1.2 Rekombinante Proteine

Für die Produktion von rekombinanten Proteinen und Antikörpern, stehen verschiedene Expressionssysteme zur Verfügung. Auch wenn sich die Aminosäuresequenz korrekt produzieren lässt, wird das Glykosylierungsmuster durch den Typ des Expressionssystems (Tabelle 1) bestimmt.

Tabelle 1. Expressionssysteme für rekombinante Proteine^[13]

	Bakterien	Hefen	Säugetierzellen	Insektenzellen	Transgene Säugetierzellen	Transgene Pflanzen
Pathogenität	Ja	Unbekannt	Ja	Ja	Ja	Unbekannt
Produktionskosten	Mittel	Mittel	Hoch	Hoch	Hoch	Gering-Mittel
Zeitaufwand	Gering	Mittel	Hoch	Hoch	Hoch	Hoch
Scale-up Kosten	Hoch	Hoch	Hoch	Hoch	Hoch	Gering
Ertrag	Mittel (0.1-2 g/L)	Hoch (> 0.25 g/L)	Mittel-Hoch (0.4-2 g/L)	Mittel-Hoch (5-70 mg/L)	Hoch (4-14 g/L)	Hoch (1250-2500 g/ha/Zyklus)
Verlässlichkeit der Proteinfaltung	Gering	Mittel	Hoch	Hoch	Hoch	Hoch
N-Glykosylierung	Nein	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja
O-Glykosylierung	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja
Glykosylierungsstelle		Nicht konserviert	Konserviert	Konserviert	Konserviert	Konserviert
Nicht-humane Zucker		Ja	Ja	Ja	Ja	Ja
Homogenität des Produktes	Gering	Mittel	Mittel	Gering	Gering	Mittel-Hoch
Ethische Bedenken	Mittel	Mittel	Mittel	Mittel	Hoch	Mittel

4. Einleitung

	Bakterien	Hefen	Säugetierzellen	Insektenzellen	Transgene Säugetierzellen	Transgene Pflanzen
Anwender	GenWay Biotech Inc., Genentech, ATG Labs, Paragon Bioservices, Biological Mimetics	Paragon Bioservices, ApoLife Inc.	GenWay Biotech Inc., Paragon Bioservices, Cell Trends, Acceptys Inc., Lonza Biologics, Micromet/ Enzon, Biological Mimetics, Genentech	ATG Labs, Paragon Bioservices, Cell Trends, Biological Mimetics	Nexia Biotechnologies, GTC Biotherapeutics, PPL Therapeutics, Abgenix, Pharming	Biolex Inc., ProdiGene, Greenovation Biotech GmbH, SemBioSys, Medicago Inc., Meristem Therapeutics, Phytomedics Inc., Epicyte Pharmaceuticals

Bakterien:

Prokaryotische Zellen besitzen kein ER. Es wurde deshalb lange Zeit vermutet, dass Bakterien die Fähigkeit *N*-glykosylierte Proteine herzustellen, nicht besitzen und nur *O*-glykosylierte Proteine herstellen können. Vor kurzem konnte mit dem humanpathogenen Bakterium *Campylobacter jejuni* ein erster Vertreter der Bakterien identifiziert werden, der ein System zur Produktion von *N*-glykosylierten Proteinen besitzt^[17-20].

Hefen:

Hefen können neben *O*-Glykoproteinen auch *N*-glykosylierte Proteine herstellen. Diese Proteine sind vorwiegend vom Mannose-Typ. Dies führt zu einer kürzeren Halbwertszeit *in vivo* und erniedrigt so die Wirkdauer von vielen Glykoproteinen^[21]. Es konnte gezeigt werden, dass genetisch veränderte Hefezelllinien (wie z.B. *Pichia pastoris*) in der Lage sind, humanisierte *N*-Glykane des komplexen Typs zu produzieren^[22, 23].

Säugetierzellen:

Säugetierzellen, wie z.B. CHO-Zellen werden heutzutage am häufigsten für die Produktion von Glykoproteinen eingesetzt. Ihr Glykosylierungsmuster ist dem des Menschen sehr ähnlich. CHO-Zellen, die für eine möglichst hohe Proteinproduktion optimiert sind, haben aber oft Probleme die Proteine mit gleich bleibender Qualität zu glykosylieren^[12].

Insektenzellen:

Insektenzellen besitzen wie die Hefen die Fähigkeit neben *O*-Glykoproteinen auch *N*-Glykoproteine des Mannose-Typs herzustellen. Sie verknüpfen allerdings weniger

4. Einleitung

Mannose-Bausteine als Hefen. Ausserdem können sie keine terminalen Sialinsäuren einbauen, wodurch die Halbwertszeit der produzierten Glykoproteine *in vivo* sinkt. Ein Nachteil von Insektenzellen ist weiterhin, dass teilweise $\alpha(1,3)$ -verknüpfte Fucose-Bausteine vorhanden sind, die möglicherweise zu allergischen Reaktionen führen können^[8].

Transgene Pflanzen:

Transgene Pflanzen produzieren Glykan-Strukturen ohne Galactose und Sialinsäure. Durch gentechnische Veränderungen ist es heute aber möglich galactosylierte Glykane zu produzieren. Sialinsäure kann allerdings immer noch nicht eingebaut werden, was die Stabilität der produzierten Glykoproteine stark erniedrigt. Ein weiteres Hindernis könnte das Vorhandensein von $\alpha(1,3)$ -verknüpften Fucosen sein, was möglicherweise allergische Reaktionen auslösen kann^[8].

Transgene Säugetierzellen:

Um die Nachteile von Expressionssystemen aus unmodifizierten Säugetierzellen zu vermeiden (z.B. unvollständige Glykosylierung bei hoher Proteinausbeute) wird heute vermehrt mit genetisch modifizierten Säugetierzellen gearbeitet.

4.1.3 Ziele der Strukturaufklärung von Glykoproteinen

Die Glykoprotein-Analyse wird in folgenden Gebieten angewendet:

- Charakterisierung und Selektion von Klonen für „Scale-up“ Verfahren
- Überwachen von Veränderungen des Glykosylierungsmusters während der Produktion von therapeutischen Glykoproteinen
- Überprüfen der Veränderung der Glykosylierung durch Metabolismus in frühen klinischen Testphasen
- Stabilitäts- und Haltbarkeitsprüfungen
- Überprüfen der laufenden Produktion, zwecks Optimierung von Qualität und Quantität

4.2 Strukturaufklärung von Kohlenhydraten mit NMR

Für die Strukturaufklärung von Oligosacchariden durch NMR gibt es verschiedene Ansätze. Vliegenthart *et al.*^[24] führten das Konzept der „strukturellen Reporter-Gruppen“ ein. Es basiert auf Resonanzen von Kohlenhydraten im ¹H-NMR Spektrum ausserhalb des Bereiches von 3–4 ppm. Dieser Ansatz wird verwendet, um durch den Vergleich experimenteller Werte mit Datenbanken (Carb-Bank^[25, 26], Sugabase^[27, 28]) strukturelle Motive, spezifische Monosaccharide oder Substitutionsstellen zu identifizieren. Ein ähnliches Programm wurde von Kochetkov *et al.*^[29-31] entwickelt, das allerdings vorwiegend auf ¹³C-NMR Daten basiert. Im Weiteren existiert mit CASPER^[32-34] ein Datenbank-basiertes Programm zur Voraussage von

4. Einleitung

chemischen Verschiebungen der Kerne ^{13}C und ^1H . Durch den Vergleich der berechneten Werte mit den experimentellen Daten Strukturen zugeordnet werden.

NMR-basierte Strukturaufklärungsmethoden werden meist mit Informationen aus anderen Methoden (MS^[35], Methylierungsanalysen^[36]) kombiniert. Neben den zwei NMR-aktiven Kernen (^{13}C , ^1H) können auch weniger häufig auftretende Kerne (^2H , ^3H , ^{11}B , ^{15}N , ^{17}O , ^{19}F und ^{31}P) für die Strukturaufklärung verwendet werden. Für eine komplette Strukturaufklärung mit ^{13}C - und ^1H -NMR Spektroskopie werden heute dank Verbesserungen der NMR-Technologie, längeren Messzeiten und höheren Pulsfrequenzen noch Substanz-Mengen im Mikrogramm-Bereich benötigt. Wichtig ist, dass beim Vergleichen von chemischen Verschiebungen immer darauf geachtet wird, dass die Spektren unter identischen Bedingungen, d.h. vor allem bei gleicher Temperatur gemessen werden und die Verschiebungen auf vergleichbaren internen Referenz-Substanzen basieren.

4.2.1 Anzahl der Zuckerbausteine

Die chemische Verschiebung des Wasserstoffes am anomeren C-Atom (Kapitel 4.2.3) ist ein guter Startpunkt für die Strukturaufklärung eines Oligosaccharides. Die zu erwartenden chemischen Verschiebungen liegen im Bereich von 4.4–5.5 ppm, während bei ungeschützten Oligosacchariden die chemischen Verschiebungen der anderen Ring-Protonen im Bereich von 3.0–4.2 ppm zu finden sind. Die Anzahl der Zuckerbausteine eines Oligosaccharides kann auch mit Hilfe eines ^{13}C -NMR-Spektrums oder 2D Spektren (2D ^{13}C , ^1H HSQC; HMQC; HMBC) eruiert werden.

4.2.2 Monosaccharid-Identität

Für die Identifizierung der einzelnen Monosaccharid-Einheiten sind homonukleare TOCSY oder DQF-COSY Spektren hilfreich^[37, 38]. Bei TOCSY^[37, 38] Spektren mit hohen Mischzeiten (> 100 ms) ist es oft möglich, durch das Messen der Kopplungskonstanten die Identität der Monosaccharid-Bausteine aufzuklären. Die chemischen Verschiebungen der ^1H - und ^{13}C -Kerne sind für die meisten Monosaccharid-Bausteine publiziert^[39, 40]. Durch diese experimentellen Vergleichswerte ist es möglich, die einzelnen chemischen Verschiebungen eindeutig zuzuordnen.

4.2.3 Konfiguration am anomeren C-Atom

Das anomere C-Atom ist ein Chiralitätszentrum, das bei der Bildung des zyklischen Halbacetals /-ketals eines Kohlenhydrates am ursprünglichen Carbonylkohlenstoffatom der offenkettigen Form entsteht. Es ist dem Ringsauerstoff von Zuckern benachbart. Unterschieden werden die beiden Konfigurationen α mit axialer Stellung und β mit aequatorialer Stellung der Hydroxylgruppe am anomeren C-Atom. In Abbildung 8 sind die beiden möglichen Konfigurationen dargestellt.

4. Einleitung

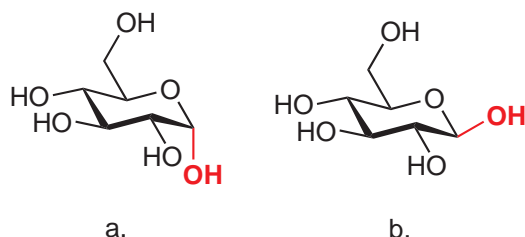


Abbildung 8. Konfiguration am anomeren C-Atom: (a) α -D-Glcp-OH, (b) β -D-Glcp-OH

Eine Kopplung zwischen den benachbarten Wasserstoffen an C1 und C2 im ^1H -NMR Spektrum gibt Aufschluss über die relative Orientierung der beiden Atome zueinander (Abbildung 9a-d).

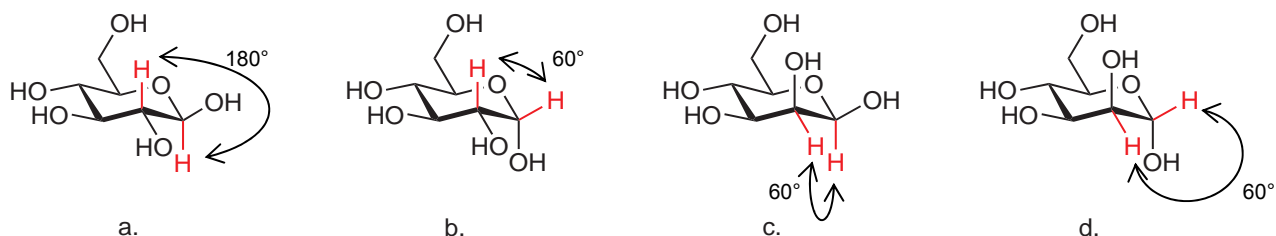


Abbildung 9. Unterschiedliche Stellungen der Wasserstoffatome an C1 und C2

Befinden sich beide Wasserstoffatome in der axialen Stellung (Abb. 9a), wird eine grosse Kopplungskonstante ($J_{1,2} \sim 7-8$ Hz) beobachtet, während für eine äquatorial-axiale Stellung (Abb. 9b) eine mittlere Konstante ($J_{1,2} \sim 4$ Hz) und für eine axial-äquatoriale (Abb. 9c) oder äquatorial-äquatoriale Anordnung (Abb. 9d) beider Wasserstoffatome eine kleine Kopplungskonstante ($J_{1,2} < 2$ Hz) beobachtet wird. Dass dieses Prinzip für die Bestimmung der relativen Orientierung von Wasserstoffatomen in einem Hexopyranosering verwendet werden kann, wurde bereits 1958 durch Lemieux *et al.*^[41] gezeigt. Auch aus der chemischen Verschiebung von ^{13}C -Kernen lässt sich sehr einfach die Konfiguration am anomeren C-Atom ablesen. Das α -anomere C-Atom einer D-Pyranose tritt im ^{13}C -NMR Spektrum bei tieferer Frequenz respektive bei höherem Feld in Resonanz als das β -anomere C-Atom. Für Pyranosen in β -Konfiguration lässt sich eine Tieffeldverschiebung von ungefähr 5 bis 7 ppm gegenüber der α -Konfiguration beobachten. Dies gilt sowohl für unsubstituierte (δ_α : 92.1–95.2 ppm; δ_β : 94.1–98.0 ppm), wie für substituierte (δ_α : 98.4–100.2 ppm; δ_β : 101.3–105.2 ppm) Pyranosen. Für D-Zucker gilt im Weiteren, dass eine Kopplungskonstante von $J_{\text{C1,H1}} \sim 170$ Hz auf einen α -anomeren Zucker hindeutet, während eine Kopplungskonstante von $J_{\text{C1,H1}} \sim 160$ Hz einen Zucker mit β -anomere Konfiguration vermuten lässt^[42]. Für L-Zucker sind diese Kopplungskonstanten umgekehrt.

4.2.4 Verknüpfung und Sequenz

Die chemischen Verschiebungen von ^1H - wie auch ^{13}C -Kernen können Aufschluss über die Verknüpfung und die Art der glykosidischen Bindung geben. Der Einfluss der Glykosylierung auf die chemische Verschiebung durch die Glykosylierung ist am Substitutionspunkt am stärksten und nimmt mit steigendem Abstand ab. Weitere Information über die Art der glykosidischen Bindung können *Nuclear Overhauser Effects* (NOE) geben. Dabei muss aber beachtet werden, dass der grösste NOE nicht zwingend zwischen anomerem H und dem Proton an der Verknüpfungsstelle am Akzeptor entsteht^[43, 44]. Über HMBC-Experimente^[45-48] kann schliesslich der Typus der glykosidischen Bindungen bestätigt werden.

4.2.5 Verknüpfungsmuster der Substituenten

Die chemischen Verschiebungen von ^1H - und ^{13}C -Kernen reagieren auf die Substitution mit zuckerfremden Gruppen, wie zum Beispiel Methyl-, Acetyl-, Sulfat- oder Phosphatgruppen. Durch diese Substitutionen verändern sich die chemischen Verschiebungen der Protonen an benachbarten Kohlenstoffen um $\sim 0.2\text{--}0.5\text{ ppm}$ ^[49].

4.2.6 Vor- und Nachteile der Kern-Resonanz Spektrometrie (NMR)

Durch die sehr grosse Anzahl möglicher Strukturisomere^[50] ist heute keine Methode alleine in der Lage, eine komplette Strukturaufklärung eines Oligosaccharides zu liefern. Mit NMR könnten theoretisch fast alle benötigten Informationen gewonnen werden. Leider ist aber NMR eine relativ unsensitive Analysetechnik und benötigt deshalb grössere Probenmengen für eine Analyse als beispielsweise MS. Durch die Verwendung von speziellen NMR-Röhrchen mit geringerem Durchmesser^[49, 51] und technischen Weiterentwicklungen der NMR-Geräte kann der Bedarf an Substanz auf einige wenige Mikrogramm reduziert werden. Die Analyse eines ganzen Glykoproteins bleibt aber immer noch schwierig und ist mit konventionellen Methoden (enzymatische Abspaltung mit Endoglykosidasen, Aufreinigung und anschliessende Analyse mittels HPLC, NMR und MS) zeitintensiv und teuer.

Durch die Genomik werden zunehmend neue Therapieansatzpunkte bekannt. Mit Hilfe biotechnologischer Methoden sollen die so identifizierten Glykoproteine produziert werden. Ein limitierender Faktor bleibt nach wie vor die korrekte Glykosylierung der Proteine. Nach wie vor müssen immer noch zu viele Chargen wegen fehlender oder unvollständiger Glykosylierung verworfen werden.

4.3 Künstliche Neuronale Netzwerke

4.3.1 Historischer Überblick

Die Ursprünge künstlicher neuronaler Netzwerke (*artificial neural networks*, ANN) gehen auf das Jahr 1943 zurück, als W. McCulloch und W. Pitts in ihrem Aufsatz "*A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity*"^[52] neurologische Netzwerke erstmals beschreiben und zeigten, dass auch einfache Klassen künstlicher neuronaler Netze prinzipiell jede arithmetische oder logische Funktion berechnen können.

1949 beschrieb D.O. Hebb in seinem Buch "*The Organization of Behaviour*" die nach ihm benannte Lernregel^[53] als einfaches, universelles Lernkonzept individueller Neuronen. In ihrer allgemeinen Form ist die Hebb'sche Lernregel bis heute Basis fast aller neuronalen Lernverfahren.

In den folgenden Jahren folgten die ersten praktischen Anwendungen neuronaler Netzwerke. Der erste erfolgreiche Neurocomputer (Mark I Perceptron) wurde in den Jahren 1957-1958 von F. Rosenblatt und seinen Mitarbeitern am *Massachusetts Institute of Technology* (MIT) entwickelt, und für Mustererkennungsprobleme eingesetzt. Damit wurde ein erstes Mal versucht, die Informationsverarbeitung visueller Eindrücke durch die Netzhaut mit technischen Mitteln nachzuahmen. Für sein Modell prägte F. Rosenblatt den Begriff des Perzeptrons. Neben dieser ersten praktischen Umsetzung neuronaler Netzwerke ist F. Rosenblatt besonders durch seine 1958 erschienene Arbeit "*The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain*"^[54] bekannt geworden.

Im Jahr 1969 zeigten M. Minsky und S. Papert in ihrem Buch "*Perceptrons*"^[55] mit einer genauen mathematischen Analyse, dass das Modell des Perzeptrons viele wichtige Probleme gar nicht repräsentieren kann. Anhand einiger sehr einfacher Probleme, wie zum Beispiel dem XOR-Problem (Kapitel 2 oder ^[4]), konnten sie zeigen, dass das ursprüngliche Perzeptron dieses und verwandte Probleme nicht lösen kann. Ihre Schlussfolgerung, dass auch neuere Modelle als das Perzeptron die gleichen Schwachstellen aufweisen würden und damit das ganze Gebiet der neuronalen Netze eine Sackgasse, ein so genanntes „*research dead-end*“ sei, ist aus heutiger Sicht nicht zutreffend. Sie führte aber zu einer Stagnation des Gebietes während mehr als 15 Jahren.

Der neuerliche Aufschwung neuronaler Netze erfolgte anfangs der achtziger Jahre. Oft wird der Einfluss John Hopfields für die Wiederbelebung des Gebiets zitiert, der 1985 in seinem Artikel „*Neural Computation of Decisions in Optimization Problems*“^[56] zeigte, wie Hopfield-Netze schwierige Optimierungsaufgaben (z.B. das „*traveling salesman problem*“, Kapitel 2 oder ^[3]) lösen können. Dadurch wurden viele Forscher von der Wichtigkeit des Forschungsgebiets überzeugt.

4. Einleitung

Einen vielleicht noch grösseren Einfluss hatte im Jahr 1986 die Entwicklung des Lernverfahrens Backpropagation durch Rumelhart, Hinton und Williams. Im Artikel *"Learning internal representations by error propagation"*, in dem von Rumelhart und McClelland herausgegebenen Buch: *"Parallel Distributed Processing"*^[57] und dem Artikel in Nature: *"Learning representations by back-propagating errors"*^[58] wurde mit Backpropagation ein im Vergleich zu bisherigen Lernverfahren sehr schnelles und robustes Lernverfahren für mehrschichtige, vorwärtsgerichtete Netze vorgestellt.

T. Sejnowski und Ch. Rosenberg stellten 1986 mit *"Nettalk: a parallel network that learns to read aloud"*^[59] eine überzeugende Anwendung vor, bei der ein mit Backpropagation trainiertes vorwärtsgerichtetes Netz die Aussprache geschriebener Einzelwörter des Englischen selbständig erlernen konnte (Kapitel 4.3.2) und dabei innerhalb weniger Wochen eine Leistung erreichte, die fast der des wissensbasierten DECTalk-Systems (ein digitales Sprachausgabesystem) entsprach, das viele Jahre an Entwicklungsarbeit gekostet hatte.

Seit 1986 hat sich das Gebiet sehr stark weiter entwickelt: Eine Literaturrecherche (Abbildung 10) zeigt den deutlichen Zuwachs der Publikationen über ANN.

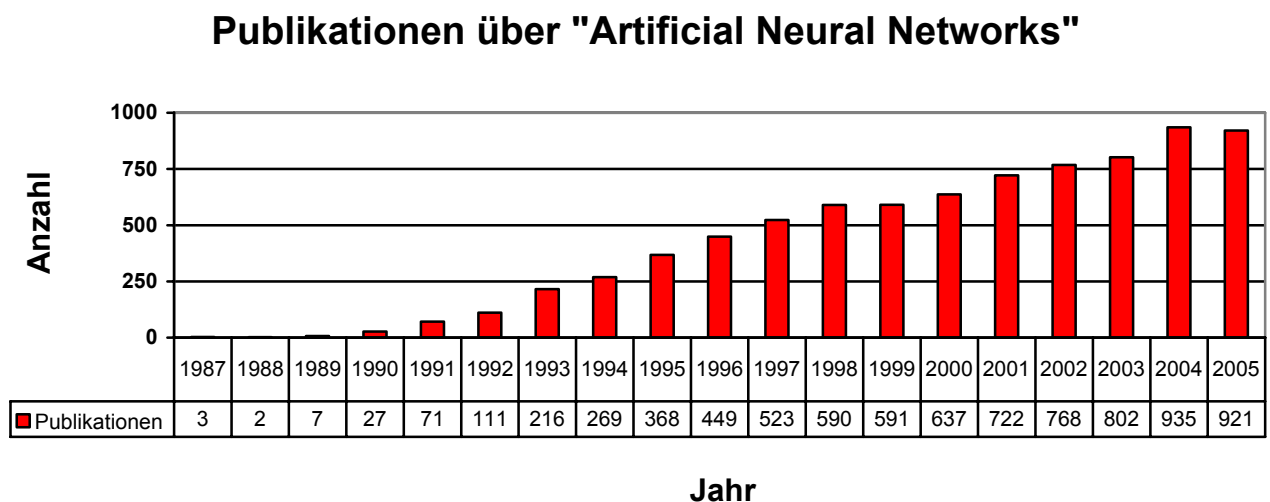


Abbildung 10. Publikationen über ANN (1987-2005)

Heute werden künstliche neuronale Netzwerke in vielen Bereichen von Wissenschaft und Industrie eingesetzt.

4.3.2 Kurze Theorie der künstlichen neuronalen Netzwerke

Biologische neuronale Netzwerke im Hirn von Säugetieren bestehen aus einer Vielzahl von miteinander verknüpften Einheiten, den Nervenzellen oder Neuronen (Abbildung 11). Neuronen haben einen Zellkörper (Soma), von dem mehrere Dendriten ausgehen. Über die Dendriten empfangen Nervenzellen vermittelt durch chemische Transmitter Signale von benachbarten Neuronen. Die Signale werden als elektrische Impulse bis zum Zellkörper weitergeleitet und summiert. Nur wenn die Summe der Signale einen bestimmten Schwellenwert übersteigt, wird die Information in Form eines elektrischen Impulses über das Axon weitergeleitet (Alles-oder-Nichts-Gesetz)^[60]. An den Synapsen wird das Signal wiederum mit Hilfe von chemischen Transmittern auf nachfolgende Zellen übertragen. Der Informationsfluss verläuft immer nur in eine Richtung: Synapse → Dendriten → Zellkörper → Axon → Synapse.

Auch wenn die Dauer der Informationsverarbeitung in einem biologischen Neuron mit einigen Millisekunden verglichen mit der Dauer in einem künstlichen Neuron (im Bereich von Nanosekunden) relativ gross ist, haben biologische neuronale Netzwerke dank ihrer hierarchischen Struktur und ihrer massiv parallelisierten Informationsverarbeitung dennoch eine erstaunliche Leistungsfähigkeit (Tabelle 2).

Tabelle 2. Vergleich zwischen Gehirn und Rechner

	Gehirn	Computer
Anzahl Recheneinheiten	$\approx 10^{11}$	$\approx 10^9$
Art der Recheneinheiten	Neuronen	Transistoren
Art der Berechnung	massiv parallel	i.d.R. seriell
Datenspeicherung	assoziativ	adressbasiert
Schaltzeit	$\approx 10^{-3}\text{s}$	$\approx 10^{-9}\text{s}$
Theoretische Schaltvorgänge	$\approx 10^{13}\text{s}^{-1}$	$\approx 10^{18}\text{s}^{-1}$
Tatsächliche Schaltvorgänge	$\approx 10^{12}\text{s}^{-1}$	$\approx 10^{10}\text{s}^{-1}$

Die Funktionsweise künstlicher neuronaler Netzwerke ist den biologischen Netzwerken nachempfunden. Auch sie bestehen aus einer Vielzahl von untereinander verknüpften Einheiten (Abbildung 11). In künstlichen neuronalen Netzwerken werden diese Einheiten als *processing elements* oder analog zum biologischen Vorbild, als Neuronen bezeichnet.

4. Einleitung

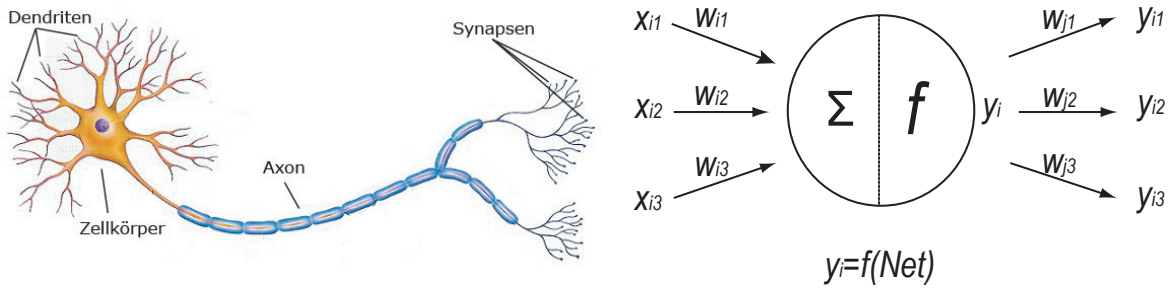


Abbildung 11. Biologisches und künstliches Neuron im Vergleich

Analog zum biologischen Neuron erhält das künstliche Neuron über viele Verknüpfungen Informationen (x_i) von benachbarten Zellen. Jeder dieser Verknüpfungen ist ein eigenes Gewicht (w_i) zugeordnet, welches mit der Information verarbeitet wird und somit deren Wichtigkeit widerspiegelt. Alle individuellen Signale (x_i) werden vom Neuron mit Hilfe der Summenfunktion zur Gesamteingabe Net zusammengefasst (eq. 1):

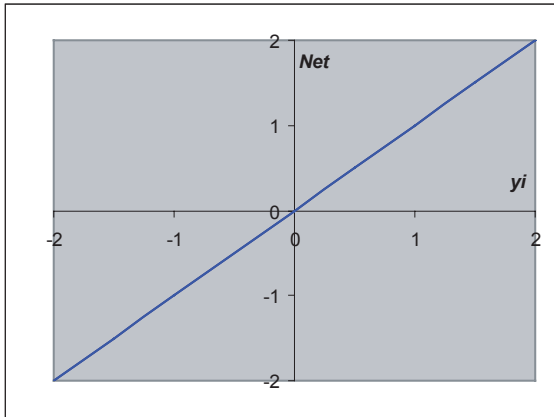
$$Net = \sum_{i=1}^m = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_i x_i + \dots + w_m x_m \quad (eq. 1)$$

Aus der Gesamteingabe (Net) berechnet das Neuron nun seine eigene Ausgabe (y_i) mit Hilfe einer Aktivierungsfunktion (eq. 2):

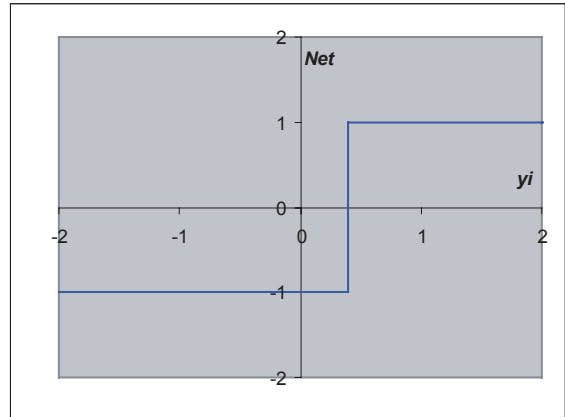
$$y_i = f(Net) \quad (eq. 2)$$

Einige häufig verwendete Aktivierungsfunktionen sind in Abbildung 12 dargestellt:

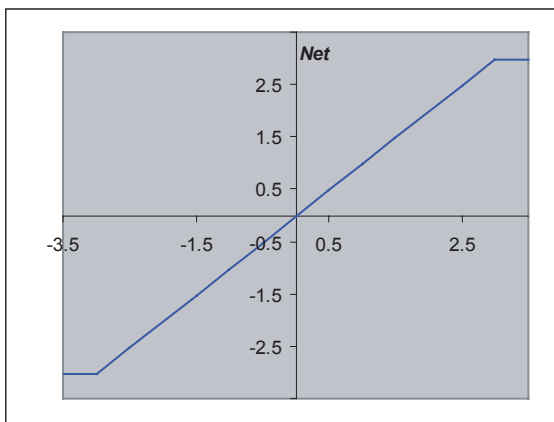
4. Einleitung



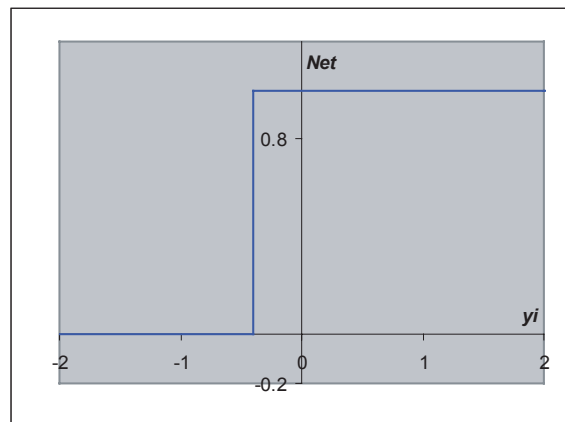
(a)



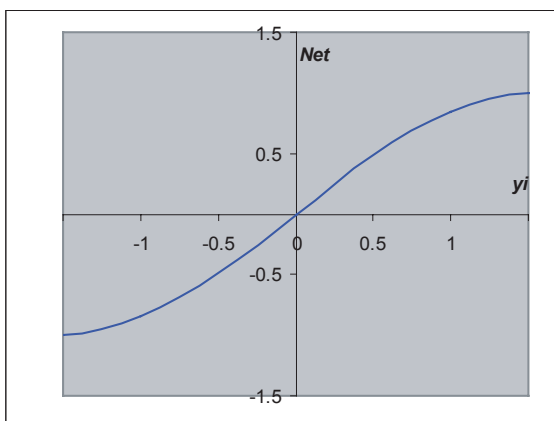
(b)



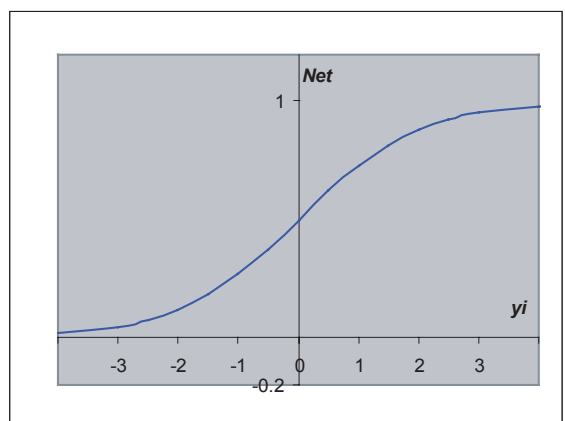
(c)



(d)



(e)



(f)

Abbildung 12. Gängige Aktivierungsfunktionen

(Abb. 12a): Identitätsfunktion: Die Gesamteingabe (Net) wird ohne Verarbeitung weitergeleitet ($y_i = Net$)

(Abb. 12b): Bipolare Schwellenwertfunktion $(-1,+1)$: Die kontinuierliche Eingabe (Net) wird in eine bipolare Ausgabe umgewandelt. Ist Net grösser als der

4. Einleitung

Schwellenwert (φ) wird der Wert +1 ausgegeben, ansonsten -1. Am Schwellenwert (φ) ist die Funktion nicht differenzierbar. Diese Funktion wird verwendet um hemmende Einflüsse zu simulieren.

(Abb. 12c): Identitätsfunktion mit Intervall: Die Eingabe (Net) wird im Intervall ohne Verarbeitung weitergeleitet. Ober- und unterhalb des Intervalls wird ein fixer Wert ausgegeben.

(Abb. 12d): Binäre Schwellenwertfunktion (0,+1): Die kontinuierliche Eingabe (Net) wird in eine binäre Ausgabe umgewandelt. Ist Net grösser als der Schwellenwert (φ) wird der Wert +1 ausgegeben, ansonsten 0. Am Schwellenwert (φ) ist die Funktion nicht differenzierbar.

(Abb. 12e): Tangens hyperbolicus: Der Tangens hyperbolicus ist eine voll differenzierbare Hyperbelfunktion. Die Gesamteingabe (Net) wird mit Hilfe der Formel:

$$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1} = \frac{2}{e^{-2x} + 1} - 1 = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} \quad (eq. 3)$$

berechnet. Die Funktion ist im Bereich von -1 bis +1 definiert. Mit dem Tangens hyperbolicus kann im Unterschied zur sigmoiden Aktivierungsfunktion auch ein hemmender Einfluss eines Neurons auf eine nachfolgende Schicht simuliert werden.

(Abb. 12f): Sigmoide oder logistische Aktivierungsfunktion: Diese Funktion gleicht dem Tangens Hyperbolicus. Hier sind allerdings nur Werte im Bereich von 0 bis +1 definiert. Sie ist ebenfalls vollständig differenzierbar.

Die Arbeit aller Neuronen (mit Ausnahme der Eingabeneuronen, s. unten) ist folglich immer die Gleiche. Sie summieren alle Eingaben (x_i) zu einer Gesamteingabe (Net) und transformieren sie mit Hilfe einer definierten Aktivierungsfunktion in eine Ausgabe (y_i).

In einem künstlichen neuronalen Netzwerk sind die Neuronen zu Schichten zusammengefasst. Alle Neuronen einer Schicht haben gleich viele Verknüpfungen und Gewichte und erhalten deshalb ein Eingangssignal derselben Dimension (m). Die erste Schicht ist die Eingabeschicht (auch *input layer*). Neuronen dieser Schicht haben keine Verknüpfungen mit vorangehenden Neuronen und spielen auch keine aktive Rolle, da sie nur dazu dienen die Information aufzunehmen und sie weiterzugeben und zwar ohne sie zu verarbeiten. Die verwendete Aktivierungsfunktion für Neuronen der Eingabeschicht ist deshalb meist die Identitätsfunktion.

Die auf die passive Eingabeschicht folgende Schicht wird versteckte Schicht (auch *hidden layer*) genannt, da sie von aussen nicht zugänglich ist. Ihre Aufgabe besteht in der Informationsverarbeitung. Je nach Komplexität der Aufgabe werden eine bis mehrere solcher Schichten verwendet. Die letzte Schicht schliesslich, dient dazu die

4. Einleitung

Information aus dem Netzwerk auszugeben. Sie wird deshalb Ausgabeschicht (auch *output layer*) genannt.

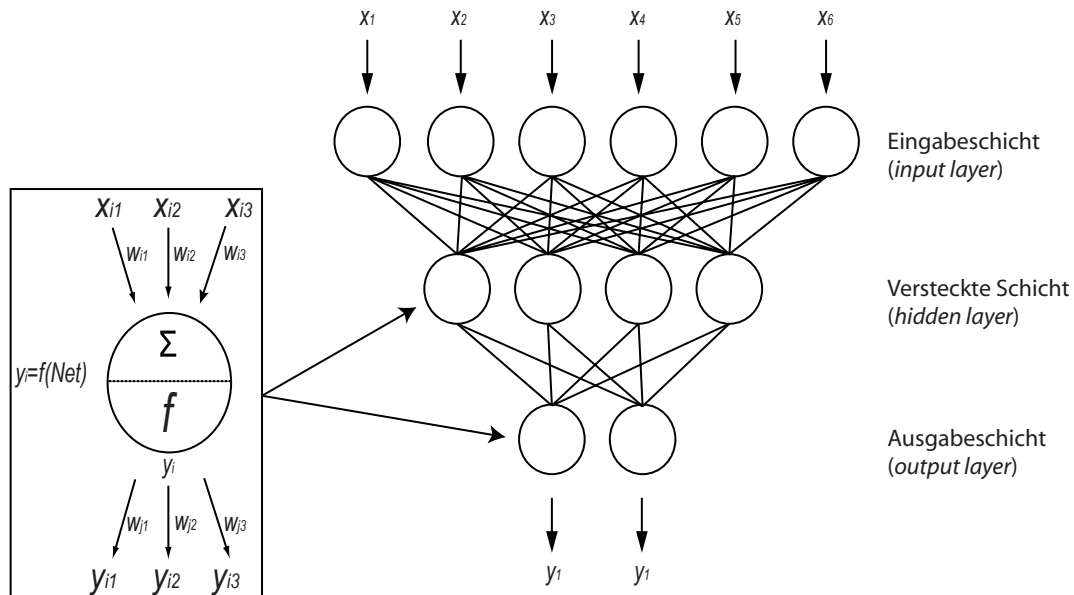


Abbildung 13. Netzwerk mit einer versteckten Schicht

Neuronale Netzwerke unterscheiden sich in Ihrer Topologie bezüglich:

- Anzahl der Eingabe- und Ausgabe-Neuronen
- Anzahl und Grösse der versteckten Schichten
- Anzahl der Verknüpfungen pro Neuron
- Art der verwendeten Aktivierungsfunktionen
- Verknüpfungsmuster innerhalb und zwischen den Schichten

Es werden folgende gängige Netzwerktopologien unterschieden:

Feed-Forward Netze:

Feed-Forward Netze (Abbildung 14) bestehen aus einer Eingabeschicht, einer oder mehreren versteckten Schichten und einer Ausgabeschicht. Die Verbindungen von einem Neuron zum nächsten dürfen bei einem Feed-Forward Netzwerk nur in Richtung der Ausgabeschicht zeigen, d.h. zu einem Neuron der nächsten Schicht. Mit Hilfe von *Shortcut-Connections* können eine oder mehrere Schichten übersprungen werden. Wiederum gilt, dass die Verbindungen nur in Richtung der Ausgabeschicht zeigen dürfen.

4. Einleitung

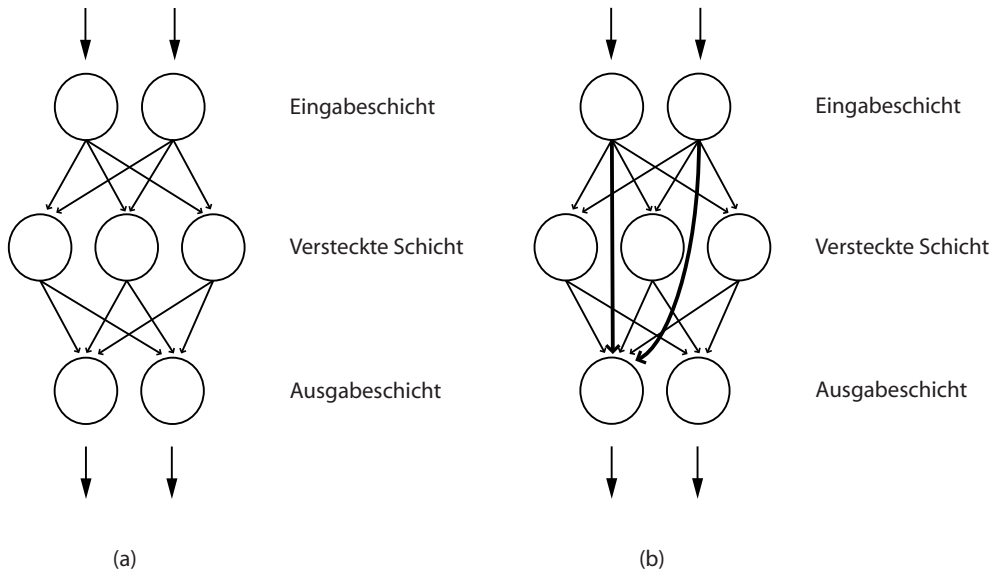


Abbildung 14. Feed-Forward Netzwerk (a) ohne und (b) mit *Shortcut-Connections*

Rückgekoppelte Netze:

Als Rückkopplung wird bezeichnet, wenn sich ein Neuron in irgendeiner Art selbst beeinflussen kann (Abbildung 15). Es werden im Weiteren 3 Arten der Rückkopplung unterschieden: **direkte** (Abb. 15a), **indirekte** (Abb. 15b) und **laterale** (Abb. 15c) **Rückkopplung**. Bei einer **direkten Rückkopplung** (Abb. 15a) ist eine Verbindung eines Neurons zu sich selbst erlaubt. Die Neuronen hemmen oder verstärken ihre eigenen Aktivierungen so selbst. Sind Verbindungen in Richtung der Eingabeschicht (d.h. rückwärts) erlaubt, wird von **indirekter Rückkopplung** (Abb. 15b) gesprochen. Hier kann ein Neuron nicht sich selbst, aber über vorangehende Schichten seine eigene Eingabe mit beeinflussen. Bei der **lateralen Rückkopplung** (Abb. 15c) sind Verbindungen zu Neuronen der gleichen Schicht gestattet. Oft verstärkt sich ein Neuron während alle benachbarten Neuronen abgeschwächt werden („*the winner-takes-it-all*“ Prinzip)

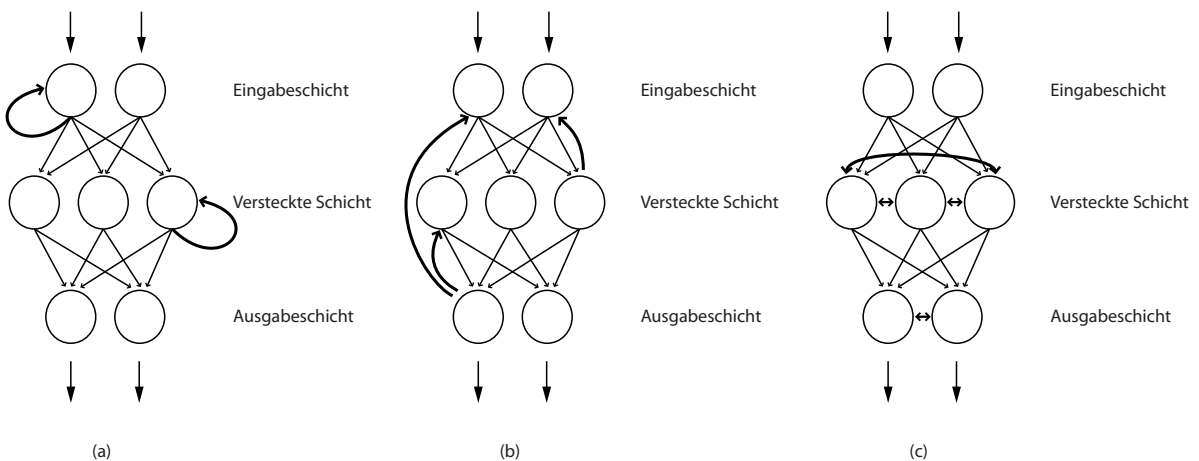


Abbildung 15. Netzwerke mit (a) direkter, (b) indirekter und (c) lateraler Rückkopplung

Vollständig verbundene Netze

Bei vollständig verbundenen Netzen sind alle Verbindungen mit Ausnahme direkter Rückkopplungen erlaubt. Ausserdem müssen die Verbindungen symmetrisch sein. Dieser Typ wird häufig in selbst-organisierenden Karten (Kapitel 4.3.4.2) verwendet.

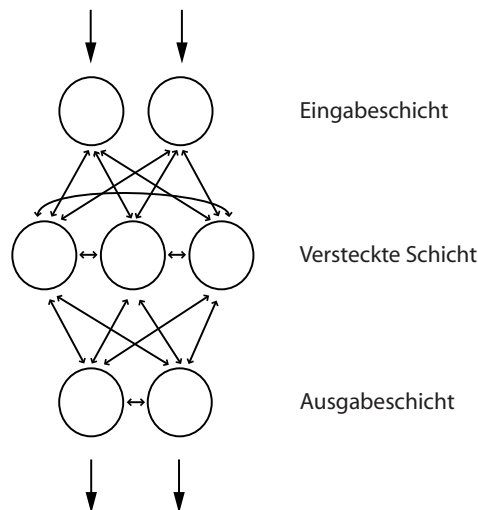


Abbildung 16. Vollständig verbundenes Netzwerk

Eine weitere Möglichkeit der Einteilung neuronaler Netzwerke einzuteilen, ist die Reihenfolge in der die Neuronen ihre Eingaben erhalten, verarbeiten und Ausgaben weiterpropagieren. Es werden die **synchrone** und die **asynchrone Aktivierung** unterschieden. Bei der **synchronen Aktivierung** berechnen alle Neuronen eines Netzes genau gleichzeitig ihre Ausgaben mit Hilfe von Summen- und Aktivierungsfunktion. Bei der **asynchronen Aktivierung** werden die Neuronen nach einem bestimmten Muster ausgewählt und ihre Ausgabe berechnet. Dies kann entsprechend der Netztopologie (Eingabeschicht → versteckte Schicht(en) → Ausgabeschicht) oder auch aufgrund einer zufälligen Permutation (die Aktivierung jedes Neurons wird pro Trainingszyklus einmal, jedoch in zufälliger Reihenfolge berechnet) geschehen. Als letzter Typ kann die asynchrone Aktivierung auch durch eine zufällige Ordnung erfolgen. Dabei wird pro Trainingszyklus ein Neuron zufällig ausgewählt und seine Aktivierung aktualisiert. Bei diesem Verfahren kann es vorkommen, dass ein Neuron mehrmals, andere hingegen nie aktualisiert werden.

4.3.3 Training von künstlichen neuronalen Netzwerken

Ein neuronales Netzwerk ist entgegen den klassischen Computerprogrammen nicht fix vordefiniert. Es muss durch einen Trainingsprozess auf seine Aufgabe vorbereitet werden. Analog zu einem biologischen neuronalen Netzwerk erlernt es die Lösung eines Problems. Im Folgenden werden einige Arten des Lernens und deren Vor- und Nachteile kurz erläutert.

4.3.4 Lernalgorithmen

Ein neuronales Netzwerk kann theoretisch durch viele verschiedene Arten lernen:

- Erstellen oder Löschen von Verbindungen
- Ändern von Verknüpfungsgewichten
- Ändern des Schwellenwertes bestimmter Neuronen
- Verwenden verschiedener Aktivierungsfunktionen
- Hinzufügen oder Löschen von Neuronen

Praktisch werden bei einem künstlichen neuronalen Netzwerk die Lernfortschritte meist durch das Anpassen der Verknüpfungsgewichte erzielt. Je nach Lernalgorithmus bezweckt die Veränderung des Gewichtes die Korrektur der Ausgabe in eine bestimmte Richtung (Kapitel 4.3.4.1), das Vermeiden von Kollisionen auf einer selbst-organisierenden Karte (Kapitel 4.3.4.2) oder die Anpassung der berechneten Ausgabe an eine gewünschte Ausgabe (Kapitel 4.3.4.3).

4.3.4.1 Bestärkendes Lernen

Beim *bestärkenden Lernen* wird dem Netzwerk nach jedem Trainingsschritt angezeigt ob es den Input richtig oder falsch klassifiziert hat oder nicht. Zum Teil wird dem Netzwerk zusätzlich der Grad der Richtigkeit angegeben. Das Netzwerk wird also nur in eine Richtung gelenkt, muss aber die korrekte Ausgabe für ein Problem selbst finden.

4.3.4.2 Unüberwachtes Lernen

Beim *unüberwachten Lernen* werden dem Netzwerk nur Eingabemuster präsentiert. Es gibt keine gewünschte Ausgabe, die sich das Netzwerk antrainieren soll. Ein Netzwerk, das mit dem *unüberwachten Lernalgorithmus* trainiert wird, dient dazu, ähnliche Eingaben selbständig (d.h. ohne Korrektur von aussen) in Klassen einzuteilen. Ein populäres Beispiel *unüberwachten Lernens* sind die selbst-organisierenden Karten nach Kohonen^[61]. Hier wird ein multi-dimensionales Problem durch das Netzwerk auf einer meist zwei-dimensionalen Karte repräsentiert. Dabei werden ähnliche Eingaben auf der Karte nahe beieinander abgebildet. Ein Nachteil dieses Lernverfahrens ist, dass nicht oder nur sehr schwer nachvollziehbar ist, worauf die entstandene Klassifizierung beruht. Das Training ist beendet, sobald die unterschiedlichen Klassen genügend räumlich getrennt werden können, und sich so keine Kollisionen mehr ergeben. In Abbildung 17 ist der Ablauf eines Trainings für ein frei erfundenes Beispiel schematisch dargestellt. Während zu Beginn (nach 200 Zyklen) noch Kollisionen zwischen den beiden zu trennenden Klassen bestehen, liegt nach 1000 Zyklen deutliche räumliche Trennung vor.

4. Einleitung

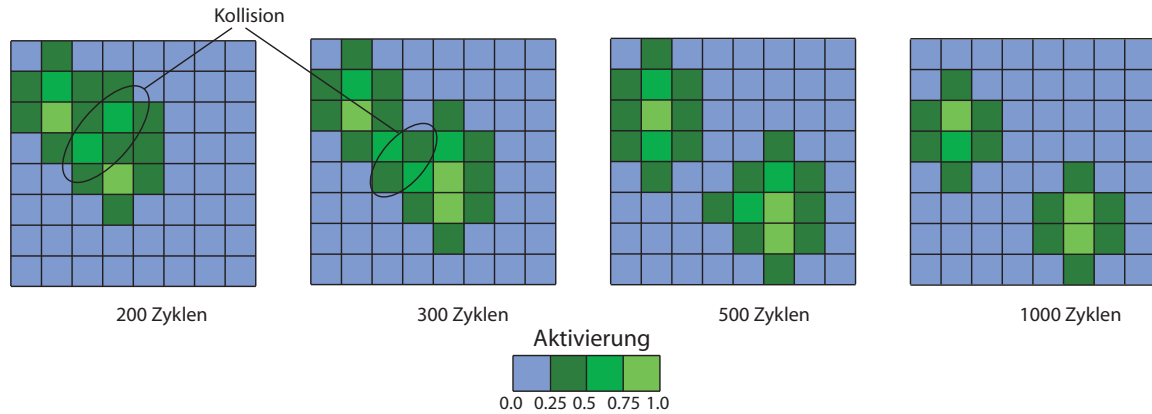


Abbildung 17. Training eines Kohonennetzwerkes

4.3.4.3 Überwachtes Lernen

Beim *überwachten Lernen* wird für jede Eingabe das gewünschte Ausgabemuster in Form der Aktivierungszustände aller Neuronen der Ausgabeschicht vorgegeben. Während des Trainings müssen die Gewichte so angepasst werden, dass das Netzwerk für die gegebenen Trainingsbeispiele das gewünschte Ausgabemuster erzeugen kann und auch neue, unbekannte, aber ähnliche Eingabemuster klassifizieren kann. Diese Eigenschaft wird als Generalisierungsfähigkeit des Netzwerkes bezeichnet. Eine zu genaue Anpassung der Gewichte (*overfitting*, Abbildung 18) durch zu langes Training führt zu einem Verlust der Generalisierungsfähigkeit. Das Training wird deshalb abgebrochen werden, wenn der Fehler des Testdatensatzes minimal ist. An diesem Punkt ist die Generalisierungsfähigkeit des Netzwerkes maximal.

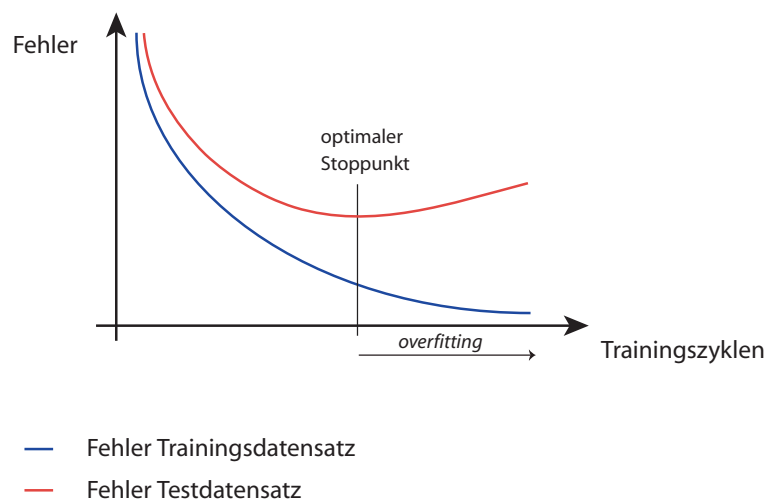


Abbildung 18. Optimale Trainingsdauer und *overfitting*

Ein typisches Beispiel eines *überwachten Lernverfahrens* ist Backpropagation ^[57, 58] (Abbildung 30). Es ist heutzutage wohl der am meisten benutzte *überwachte Lernalgorithmus*.

4.3.5 Vor- und Nachteile von künstlichen neuronalen Netzwerken

Vorteile:

- **Lernfähigkeit:** Neuronale Netzwerke sind adaptive Programme, d.h. sie passen sich durch den Trainingsprozess dem Problem an. Ein erneutes Training mit neuen Daten ist ebenfalls sehr einfach möglich.
- **Parallelisierung:** Neuronale Netzwerke sind vom Aufbau her für eine Parallelisierung geeignet. Sie können sehr gut auf parallelen Rechnerstrukturen implementiert werden.
- **Robustheit gegenüber Hardwarefehlern:** Das Wissen des Netzwerkes wird in all seinen Gewichten gespeichert. Dies macht es robuster gegenüber dem Ausfall eines einzelnen Neurons oder einer Verknüpfung.
- **Stabilität gegenüber leicht verfälschte oder unvollständigen Muster:** ANNs können Muster oft trotz Verzerrungen oder Fehlen von Bereichen dennoch korrekt erkennen und zuordnen
- **Selbständige Erzeugung eines Lösungsmodells durch das Netzwerk:** Es werde keine subjektiven Hypothesen des Benutzers verwendet. Der Benutzer muss kein mathematisches Wissen des Problems haben. Das Netzwerk erstellt selbständig die einfachst-mögliche Problemlösung.

Nachteile:

- **Lange Trainingszeiten:** Neuronale Netzwerke können sich ihr Wissen nur durch zum Teil sehr lange dauernde, iterative Trainingsprozesse aneignen.
- **Keine Garantie für einen Trainingserfolg:** Zu Beginn des Trainings ist nicht klar, ob das Problem erfolgreich gelöst werden kann oder nicht.
- **Verlust der Generalisierungsfähigkeit:** Durch zu langes Training kann sich das Netzwerk zu gut an die ihm präsentierten Trainingsdaten anpassen (*overfitting*) und dadurch seine Generalisierungsfähigkeit verlieren, das heisst die Fähigkeit neue, leicht unterschiedliche Eingabemuster korrekt zu klassifizieren.
- **Nicht nachvollziehbar, wie eine Ausgabe entsteht (*black box*):** Es ist nahezu unmöglich nachzuvollziehen, welches Wissen in einem neuronalen Netzwerk gespeichert ist oder wie eine Ausgabe zustande kommt.

4.3.6 Praktische Anwendungen von künstlichen neuronalen Netzwerken

Die Anwendungsgebiete für künstliche neuronale Netzwerke decken sich mit den Anwendungsgebieten für klassische statistische Methoden. Für komplexe Modelle mit grossen Datenmengen liefern ANNs oft bessere Resultate als herkömmliche statistische Methoden^[62]. Künstliche neuronale Netzwerke kommen heute in vielen Bereichen zur Anwendung:

- **Finanzwesen:** Kursprognosen für Aktien und Obligationen, Voraussage von Wechselkursen, Risikoabschätzungen für Kreditvergaben^[62-66]
- **Industrie:** Qualitätskontrollen, Überwachung der Produktion, Steuerung von Robotern, Steuerung der Zündung von Verbrennungsmotoren^[67]
- **Artikel des täglichen Gebrauchs:** Steuerung von Waschmaschinen, optischen Computermäusen, Toastern, Tintenstrahldruckern, Digitalkameras^[67]
- **Forschung und Medizin:** Diagnose (Brustkrebs, Leberzellschäden), Bioinformatik, Voraussagen bezüglich Toxikologie, Nebenwirkungen und Interaktionspotential neuer Wirkstoffe^[68-70], Voraussage der Überlebenswahrscheinlichkeit von Patienten^[67, 71-79]
- **Software:** Sicherheitssoftware, Suchmaschinen, Mustererkennung (Identifikation aufgrund von Sprache oder biometrischen Daten, Handschrifterkennung, Übersetzungsprogramme), in Computerspielen zur Steuerung der künstlichen Intelligenz^[67]

4.3.7 Anwendungen von künstlichen neuronalen Netzwerken im Bereich Kern-Resonanz Spektrometrie und Kohlenhydrate

Eine Literatursuche mit den Stichworten „NMR“, „Carbohydrate“ und „Neural Network“ ergab für den Zeitraum von 1989–2002 lediglich 12 Treffer^[80-91].

Folgende Arbeiten sind für unser Projekt speziell interessant:

- In ihrer ersten Arbeit zeigten Thomsen und Meyer^[87] bereits im Jahr 1989, dass eine Identifikation von ¹H-NMR Spektren sechs einfacher Alditole möglich ist. Anstelle von Peaklisten, wie bei unserer eigenen Methode, wurden für diesen Ansatz komplette ¹H-NMR-Spektren verwendet.
- In einer Erweiterung des ersten Ansatzes beschrieben Meyer *et al.*^[85] die Erkennung von 13 komplexeren Oligosacchariden (Xyloglukane). Wiederum wurden komplette ¹H-NMR-Spektren von Oligosacchariden antrainiert. Um bessere Resultate zu erhalten, wurde der Datensatz durch ein leichtes Verschieben der gesamten Spektren (–1,0; –0.5; +0.5; +1,0 Hz) künstlich erweitert.

4. Einleitung

- Amendolia, Doppiu, Ganadu und Lubinu^[84] zeigten, dass neuronale Netzwerke nicht nur für die Klassifizierung von sechs reinen Alditolen sondern auch für die Klassifizierung und Quantifizierung von 15 verschiedenen Gemischen aus zwei Alditolen verwendet werden können. Komplexere Gemische mit mehr als zwei Alditolen können mit diesem System aus 16 neuronalen Netzwerken ebenfalls klassifiziert werden, sofern die Konzentration der Komponenten grösser als 10% ist.

Seit 1998 wurden keine weiteren, auf neuronalen Netzwerken basierenden Systeme für die Strukturaufklärung publiziert.

4.3.8 Andere Computer-unterstützte Strukturaufklärungssysteme

Als computer-basierte Strukturaufklärungssysteme sind *Sugabase* und CASPER (*Computer Assisted SPectrum Evaluation of Regular polysaccharides*, <http://www.casper.org.au.se/>) zu nennen.

Sugabase^[27, 28, 92] wurde von Vliegthart *et al.* entwickelt und besteht aus einer Suchroutine, die auf den Datenbanken *CarbBank*^[25] und *Complex Carbohydrate Structure Data* (CCSD) basiert. Die Webapplikation von *Sugabase* erlaubt die Suche mit Hilfe von chemischen Verschiebungen aus ¹H- und ¹³C-NMR und liefert diejenigen Strukturen aus der Datenbank, die der Eingabe am Besten entsprechen (<http://www.boc.chem.uu.nl/sugabase/databases.html>). Leider wird *Sugabase* seit September 2000 nicht mehr aktualisiert.

Ein zweites Strukturaufklärungssystem ist CASPER^[32-34, 93-102]. Es wurde an der Universität Stockholm von P.E. Jansson und L. Kenne entwickelt und wird bis heute aktualisiert. Das Programm ermöglicht es, die Strukturen von verzweigten und nicht-verzweigten Oligosacchariden mit Hilfe von Daten aus ¹H- oder ¹³C-NMR Experimenten (chemische Verschiebungen von ¹H oder ¹³C, Kopplungskonstanten ¹J_{C,H} oder ³J_{H,H}) aufzuklären.

4.4 Integration von NeuroCarb in EuroCarbDB

EurocarbDB (<http://www.eurocarbdb.org>), hat das Ziel europaweit die Strukturaufklärung auf dem Gebiet der Zuckerchemie zu fördern. In einem ersten Schritt sollen gemeinsame Standards für den Austausch und die Speicherung experimenteller Daten von Zuckern definiert werden. In einem zweiten Schritt soll durch den Aufbau einer gemeinsamen Datenbank mit experimentellen Daten zu HPLC, NMR und MS das vorhandene Wissen Forschern zur Verfügung gestellt werden. Gefördert wird das Projekt durch das 6. Rahmenprogramm der Europäischen Union (http://europa.eu.int/comm/research/fp6/index_en.cfm?p=0). Ziel dieses Programms ist die Förderung internationaler wissenschaftlicher Projekte.

4. Einleitung

Beteiligt an EuroCarbDB sind Forschungsgruppen aus fünf verschiedenen Ländern:

- Deutschland: Deutsches Krebsforschungszentrum Heidelberg, Universität Giessen
- Niederlande: Bijvoet Universität Utrecht
- Schweden: Universität Stockholm
- Grossbritannien: European Bioinformatics Institute Hingston, Imperial College London, Universität Oxford
- Schweiz: Institut für Molekulare Pharmazie, Universität Basel

Im Rahmen dieses Projektes wird **NeuroCarb** in die WebApplikation von EuroCarbDB integriert und es Forschern weltweit ermöglichen, ^{13}C -NMR-Spektren von unbekanntem Oligosacchariden online aufzuklären.

4.5 Ziele der Arbeit

- Aufbau einer genügend grossen Datenbank für das Training (Literaturdaten)
- Testen verschiedener Methoden
- Prototyp eines ANNs für die Oligosaccharid-Identifizierung
- Ausbau des Systems auf die Säugetierzucker: Xyl, Fuc, GalNAc, GlcNAc, Neu5Ac, GlcA (für Glc, Gal, Man s. auch Dissertation Studer^[103])
- Erarbeitung von Lösungen für „problematische“ Substitutionsmuster
- Abschliessende Tests mit *in-house* gemessenen ^{13}C -NMR Spektren

5 Material und Methoden

5.1 Computerhardware

Die in dieser Arbeit diskutierten neuronalen Netzwerke und Auswertungen wurden mit folgender Hardware erstellt:

- Dell Precision Workstation, Dual Intel Xeon 1.8 GHz, 1GB RIMM Dual Channel PC800 ECC RAM, Red Hat Linux 7.2
- Dell Precision Workstation, Dual Intel Xeon 2.4 GHz, 1GB RIMM Dual Channel PC800 ECC RAM, Microsoft Windows XP Professional
- Dell Precision Workstation, Dual Intel Xeon 3.4 GHz, 1GB RIMM Dual Channel PC800 ECC RAM, Microsoft Windows XP Professional
- Apple G5 Dual PowerPC 1.8 GHz, 1GB DDR SDRAM, Mac OSX 10.4.2.

5.2 Software

Für die Erstellung der neuronalen Netzwerke wurden folgende Programme verwendet:

- Statistica^[104]: Modul Neuronale Netzwerke: kommerzielle Softwarelösung zur Erstellung und Auswertung neuronaler Netzwerkmodelle.
- SNNS^[2]: (*Stuttgart Neural Network Simulator*) ist ein Softwarepaket für künstliche neuronale Netze, das zunächst an der Universität Stuttgart entwickelt wurde und zur Zeit (2005) an der Universität Tübingen betreut wird. SNNS läuft nativ nur unter Unix, kann mit geeigneten Programmen (X-Server, Cygwin) aber auch unter Microsoft Windows ausgeführt werden.
- JavaNNS^[1]: (Java Neural Network Simulator) Das Nachfolgeprogramm von SNNS, nun nicht mehr in C sondern in Java programmiert. JavaNNS läuft im Unterschied zu seinem Vorgänger unter Unix, Windows und Macintosh OS X.
- SONNIA^[105]: Softwarepaket zur Erstellung und Analyse von selbstorganisierenden Karten. SONNIA ist kompatibel mit verschiedenen Unix-Betriebssystemen (IRIX6.5, SunOS5.6 and 5.8, Linux).

Weitere Programme:

- Filemaker v6.0.4^[106]: Datenbankprogramm für Macintosh und Windows.
- Microsoft Office 2003 für Windows^[107]: Anwendungspaket von Microsoft (Textverarbeitung, Tabellenkalkulation, Präsentation).
- Microsoft Office v.X für Mac^[108]: Anwendungspaket von Microsoft für Macintosh (Textverarbeitung, Tabellenkalkulation, Präsentation).

5. Material und Methoden

- EndNote 6.0^[109]: Literaturverwaltungsprogramm, ermöglicht je nach Textverarbeitungsprogramm das Einfügen von Referenzen als Fuss- oder Endnoten-Verweise in das Dokument. Ähnliches gilt auch für Bilder, Graphiken und Tabellen.
- Adobe Photoshop 6.0^[110] und Adobe Illustrator 11.0^[111]: Programme für die digitale Bildbearbeitung.
- Adobe Acrobat Pro 6.0^[112]: Programm zum Erstellen und Bearbeiten von Dokumenten des Formats PDF (*Portable Document Format*).
- Matlab v.6.5.1.200223^[113]: Matlab ist eine kommerzielle mathematische Software der Firma The MathWorks für die Lösung diverser mathematischer Probleme und für die grafischen Darstellung der Ergebnisse.
- SciFinder Scholar 2006^[114]: Das Programm SciFinder Scholar wurde für sämtliche Literaturrecherchen verwendet.

5.3 NMR Hardware & Software

Alle NMR Experimente wurden auf dem NMR-Gerät des Instituts (*BrukerTM 500 MHz UltraShieldTM AVANCETM Two-Bay Spectrometer*) aufgenommen. Für die Messung und Verarbeitung der Daten wurde die Software XWin-NMR^[115] von Bruker verwendet. Sämtliche experimentellen Daten wurden im JCAMP-DX^[116-118] File Format gespeichert und exportiert.

Die NMR-Spektren wurden vorwiegend mit dem Lösungsmittel D₂O (Abweichungen werden erwähnt), bei Raumtemperatur aufgenommen. Als externer Standard wurde 1,4-Dioxan (¹³C: $\delta = 67.19$ ppm; ¹H: $\delta = 3.75$ ppm^[119]) verwendet. Für jedes ¹³C-NMR Spektrum wurden 256 Scans aufgenommen und überlagert.

5.4 Methoden der Gruppeneinteilung

5.4.1 Nachbargruppen-Ansatz

Die chemische Verschiebung eines C-Atoms wird durch seine räumliche Umgebung beeinflusst. Eine Substitution beeinflusst die chemische Verschiebung deutlich im Umkreis von 1–2 C-Atomen. Im Beispiel sind die chemischen Verschiebungen von α -D-Galp-OMe und die Veränderungen der chemischen Verschiebungen ($\Delta\delta$) durch eine Substitution dargestellt:

Tabelle 3. Substitutionsanalyse α -D-Galp-OMe

	Literatur	C1	C2	C3	C4	C5	C6	OMe
α -D-Galp-OMe	[120-124]	100.20	69.03	70.31	70.05	71.44	61.95	55.85
α -D-Galp-OMe-2R	[121, 123,	98.41	75.96	69.51	70.92	71.79	61.75	55.44
$\Delta\delta$	125-130]	-1.80	6.93	-0.80	0.87	0.35	-0.20	-0.41
α -D-Galp-OMe-3R	[121, 123]	99.93	69.43	80.12	67.91	70.89	61.70	56.28
$\Delta\delta$		-0.28	0.40	9.81	-2.13	-0.55	-0.24	0.43
α -D-Galp-OMe-4R	[127, 130,	100.18	69.31	70.15	79.35	71.39	61.35	55.87
$\Delta\delta$	131]	-0.02	0.28	-0.15	9.30	-0.04	-0.60	0.02
α -D-Galp-OMe-6R	[120, 125,	100.22	69.21	70.11	69.65	69.97	68.24	55.97
$\Delta\delta$	126, 132- 134]	0.02	0.17	-0.20	-0.40	-1.47	6.30	0.12

Angabe der chemischen Verschiebungen in [ppm], relativ zu 1,4-Dioxan ($\delta = 67.19$ ppm, ^{13}C) in D_2O .

Das Beispiel zeigt deutlich, dass eine Substitution nur am substituierten C-Atom selbst und schwach an seinen beiden benachbarten C-Atomen spürbar ist. Deshalb entstand die Idee, die räumliche Umgebung eines Atoms als Gruppe zu kodieren. Während bei den beiden anderen Ansätzen (Monosaccharid- und Disaccharid-Ansatz) immer mindestens eine ganze Monosaccharid-Einheit eine Gruppe bildet und die chemischen Verschiebungen aller Atome des Zuckers mit Hilfe des ANNs mit ihr korreliert werden, wird beim Nachbargruppen-Ansatz nur eine chemische Verschiebung mit der räumlichen Umgebung eines Atoms korreliert (Abbildung 19). Für die Monosaccharid-Einheiten Glucose (Glc), Galactose (Gal) und Mannose (Man) wurde für jedes C-Atom die Stellung und der Substitutionsgrad der Hydroxylgruppe am C-Atom selbst und an beiden benachbarten C-Atomen definiert (Tabelle 4).

5. Material und Methoden

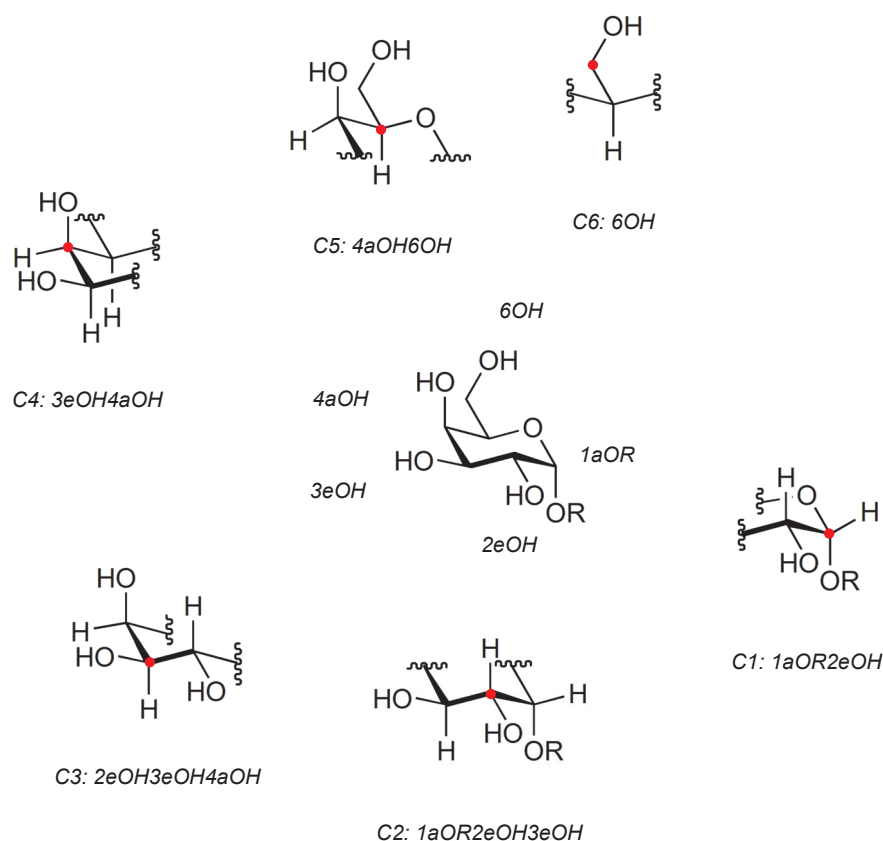


Abbildung 19. Nomenklatur Nachbargruppen-Ansatz

Für jede neue gefundene Konfiguration (Code) eines Atoms wurde eine Gruppe (No.) erstellt. Die Konfiguration der H-Atome wurde der Einfachheit halber weggelassen. Da C5 keine Hydroxylgruppe besitzt wurde seine Konfiguration nicht mit kodiert.

Tabelle 4. Codierung der Nachbargruppen

Gruppe	C1 Code	C2 Code	C3 Code	C4 Code	C5 Code	C6 Code
α-D-Galp-1R	1aOR2eOH	1aOR2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
α-D-Galp-OH	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
α-D-Galp-OH-3R	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOR	2eOH3eOR4aOH	3eOR4aOH	4aOH6OH	6OH
α-D-Galp-OH-4R	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOR	3eOH4aOR	4aOR6OH	6OH
α-D-Galp-OH-6R	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OR	6OR
α-D-Galp-OMe	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
α-D-Galp-OMe-2R	1aOMe2eOR	1aOMe2eOR3eOH	2eOR3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
α-D-Galp-OMe-3R	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOR	2eOH3eOR4aOH	3eOR4aOH	4aOH6OH	6OH

5. Material und Methoden

Gruppe	C1 Code	C2 Code	C3 Code	C4 Code	C5 Code	C6 Code
α-D-Galp-OMe-4R	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOR	3eOH4aOR	4aOR6OH	6OH
α-D-Galp-OMe-6R	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OR	6OR
β-D-Galp-1R	1eOR2eOH	1eOR2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
β-D-Galp-OH	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
β-D-Galp-OH-3R	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOR	2eOH3eOR4aOH	3eOR4aOH	4aOH6OH	6OH
β-D-Galp-OH-4R	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOR	3eOH4aOR	4aOR6OH	6OH
β-D-Galp-OH-6R	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OR	6OR
β-D-Galp-OMe	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
β-D-Galp-OMe-2R	1eOMe2eOR	1eOMe2eOR3eOH	2eOR3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OH	6OH
β-D-Galp-OMe-3R	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOR	2eOH3eOR4aOH	3eOR4aOH	4aOH6OH	6OH
β-D-Galp-OMe-6R	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4aOH	3eOH4aOH	4aOH6OR	6OR
α-D-Glcp-1R	1aOR2eOH	1aOR2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OH	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OH-2R	1aOH2eOR	1aOH2eOR3eOH	2eOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OH-3R	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOR	2eOH3eOR4eOH	3eOR4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OH-4R	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
α-D-Glcp-OH-6R	1aOH2eOH	1aOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR
α-D-Glcp-OMe	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OMe-2R	1aOMe2eOR	1aOMe2eOR3eOH	2eOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OMe-3R	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOR	2eOH3eOR4eOH	3eOR4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Glcp-OMe-4R	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
α-D-Glcp-OMe-6R	1aOMe2eOH	1aOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR
β-D-Glcp-1R	1eOR2eOH	1eOR2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OH	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OH-2R	1eOH2eOR	1eOH2eOR3eOH	2eOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OH-3R	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOR	2eOH3eOR4eOH	3eOR4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OH-4R	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
β-D-Glcp-OH-6R	1eOH2eOH	1eOH2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR
β-D-Glcp-OMe	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OMe-2R	1eOMe2eOR	1eOMe2eOR3eOH	2eOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OMe-3R	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOR	2eOH3eOR4eOH	3eOR4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Glcp-OMe-4R	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
β-D-Glcp-OMe-6R	1eOMe2eOH	1eOMe2eOH3eOH	2eOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR

5. Material und Methoden

Gruppe	C1 Code	C2 Code	C3 Code	C4 Code	C5 Code	C6 Code
α-D-Manp-1R	1aOR2aOH	1aOR2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Manp-OH	1aOH2aOH	1aOH2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Manp-OH-2R	1aOH2aOR	1aOH2aOR3eOH	2aOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Manp-OH-4R	1aOH2aOH	1aOH2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
α-D-Manp-OH-6R	1aOH2aOH	1aOH2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR
α-D-Manp-OMe	1aOMe2aOH	1aOMe2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Manp-OMe-2R	1aOMe2aOR	1aOMe2aOR3eOH	2aOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Manp-OMe-3R	1aOMe2aOH	1aOMe2aOH3eOR	2aOH3eOR4eOH	3eOR4eOH	4eOH6OH	6OH
α-D-Manp-OMe-4R	1aOMe2aOH	1aOMe2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
α-D-Manp-OMe-6R	1aOMe2aOH	1aOMe2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR
β-D-Manp-1R	1eOR2aOH	1eOR2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Manp-OH	1eOH2aOH	1eOH2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Manp-OH-2R	1eOH2aOR	1eOH2aOR3eOH	2aOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Manp-OH-4R	1eOH2aOH	1eOH2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH
β-D-Manp-OH-6R	1eOH2aOH	1eOH2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OR	6OR
β-D-Manp-OMe	1eOMe2aOH	1eOMe2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Manp-OMe-2R	1eOMe2aOR	1eOMe2aOR3eOH	2aOR3eOH4eOH	3eOH4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Manp-OMe-3R	1eOMe2aOH	1eOMe2aOH3eOR	2aOH3eOR4eOH	3eOR4eOH	4eOH6OH	6OH
β-D-Manp-OMe-4R	1eOMe2aOH	1eOMe2aOH3eOH	2aOH3eOH4eOR	3eOH4eOR	4eOR6OH	6OH

Insgesamt wurden für die drei Monosaccharid-Einheiten und alle gefundenen Substitutionsarten 72 verschiedene Konfigurationen ihrer Atome definiert.

5.4.2 Monosaccharid-Ansatz

Die Grundidee des Monosaccharid-Ansatzes ist es, die einzelnen Monosaccharid-Einheiten (Inkrement) eines Oligosaccharides direkt aus dem ^{13}C -NMR Spektrum des ganzen Moleküls zu identifizieren. Voraussetzung für diesen Ansatz ist, dass die ^{13}C -Kerne von Monosaccharid-Einheiten mit gleichem Substitutionsmuster, aber unterschiedlichen Substituenten bei ähnlichen Frequenzen in Resonanz treten (Tabelle 5):

5. Material und Methoden

Tabelle 5. Gruppenvergleich β -D-Glcp-OMe-4R

Rec No.	Quickname	Lit.Ref.	β -D-Glcp-OMe-4R						
			δ 1-1	δ 1-2	δ 1-3	δ 1-4	δ 1-5	δ 1-6	δ 1-7
6	β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-OMe	[134]	104.19	78.68	75.01	74.71	72.0	61.11	
20	α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-Ome	[135]	103.78	78.09	76.84	75.35	73.63	61.56	57.66
22	β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OMe	[135]	103.11	78.39	74.71	74.07	73.08	59.91	57.7
50	α -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-OMe	[129]	103.69	76.89	76.79	75.19	73.79	61.39	57.89
49	α -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-OMe	[129]	103.69	77.59	76.79	75.19	73.59	61.39	

Werden die chemischen Verschiebungen innerhalb der Gruppe (β -D-Glcp-OMe-4R) miteinander verglichen, zeigt sich eine deutliche Übereinstimmung (Abbildung 20):

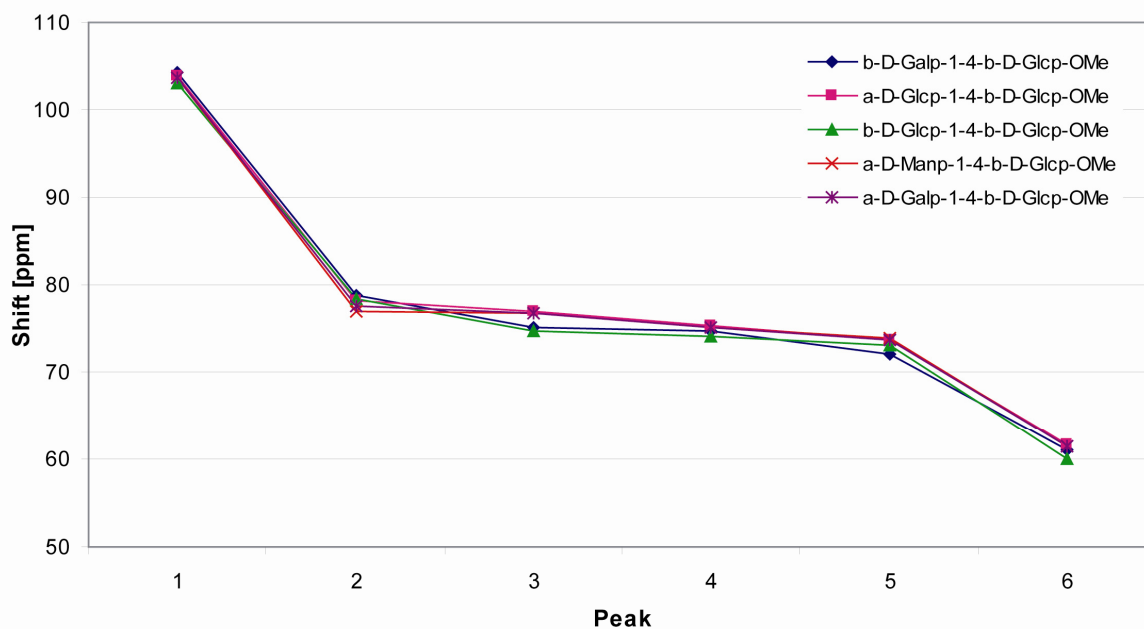


Abbildung 20. Gruppenvergleich β -D-Glcp-OMe-4R

Die Einteilung der Oligosaccharide in die einzelnen Gruppen (Abbildung 21) basiert auf den Monosaccharid-Einheiten und den verschiedenen Substitutionsmustern:

5. Material und Methoden

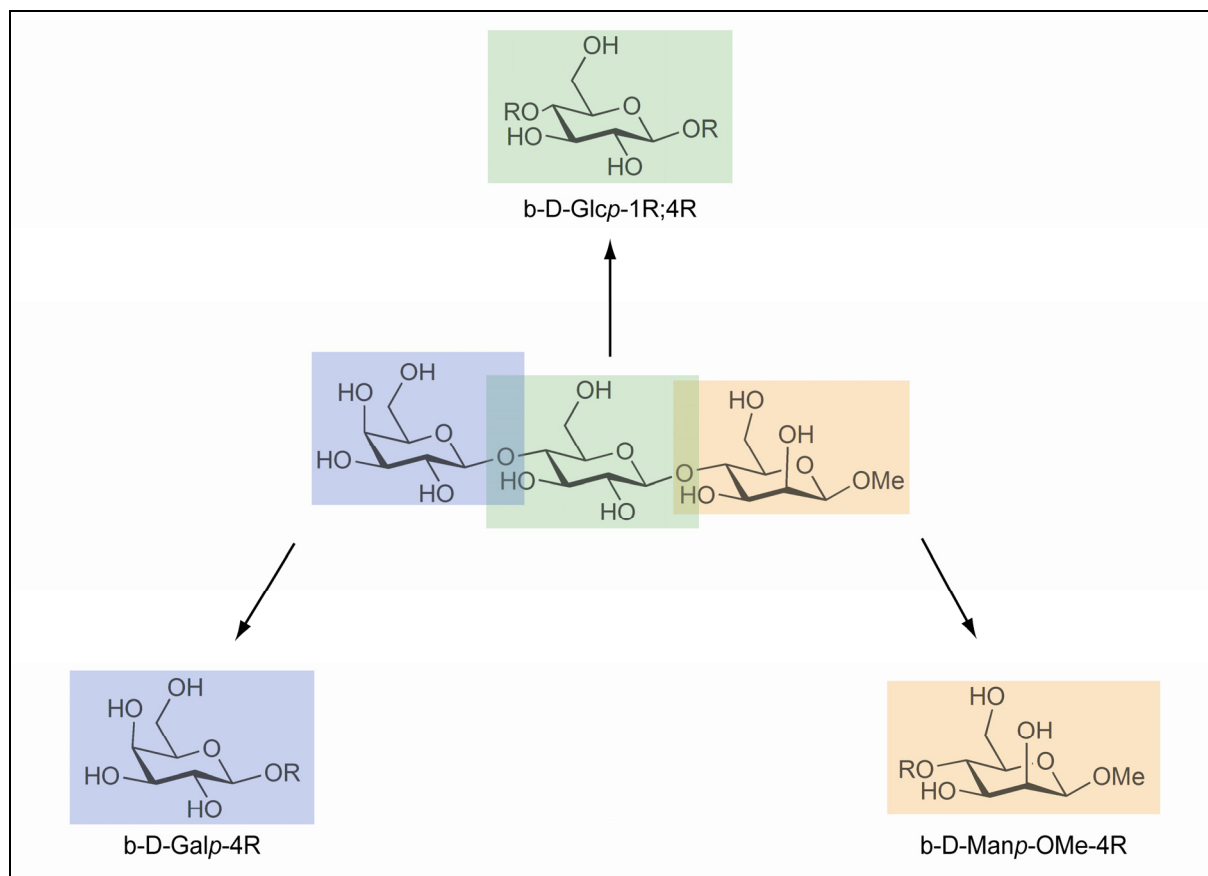


Abbildung 21. Gruppeneinteilung Monosaccharid-Ansatz

Aus der NMR-Datenbank wurden alle Datensätze der Zucker Glucose (Glc), Galactose (Gal), Mannose (Man), Fucose (Fuc), Xylose (Xyl), *N*-Acetyl Glucosamin (GlcNAc), *N*-Acetyl Galactosamin (GalNAc), Glucuronsäure (GlcA) und *N*-Acetyl Neuraminsäure (Neu5Ac) in 98 Gruppen eingeteilt (Tabelle 6):

Tabelle 6. Gruppen Monosaccharid-Ansatz

No.	Gruppe	No.	Gruppe	No.	Gruppe
1	α -D-Galp-1R	34	β -D-GlcpN-1R	67	β -D-GalpNAc-1R
2	α -D-Galp-OH	35	β -D-GlcpN-1R;3R	68	β -D-GalpNAc-OH-6R
3	α -D-Galp-OH-3R	36	β -D-GlcpN-OH-4R	69	D-GalNAc-ol-OH-3R
4	α -D-Galp-OH-4R	37	β -D-Glcp-OH	70	α -D-GlcpNAc-1R
5	α -D-Galp-OH-6R	38	β -D-Glcp-OH-2R	71	α -D-GlcpNAc-OH-3R
6	α -D-Galp-1R;2R	39	β -D-Glcp-OH-3R	72	α -D-GlcpNAc-OH-4R
7	α -D-Galp-1R;3R	40	β -D-Glcp-OH-4R	73	β -D-GlcpNAc-1R
8	α -D-Galp-1R;4R	41	β -D-Glcp-OH-6R	74	β -D-GlcpNAc-1R;3R
9	α -D-Galp-1R;6R	42	α -D-Manp-1R	75	β -D-GlcpNAc-1R;4R
10	β -D-L-Galp-1R	43	α -D-Manp-OH	76	β -D-GlcpNAc-OH

5. Material und Methoden

No.	Gruppe	No.	Gruppe	No.	Gruppe
11	β -D-Galp-OH	44	α -D-Manp-OH-2R	77	β -D-GlcpNAc-OH-3R
12	β -D-Galp-OH-3R	45	α -D-Manp-OH-4R	78	β -D-GlcpNAc-OH-4R
13	β -D-Galp-OH-4R	46	α -D-Manp-OH-6R	79	α -D-Xylf-1R
14	β -D-Galp-OH-6R	47	α -D-Manp-1R;2R	80	α -D-Xylp-1R
15	β -D-Galp-1R;2R	48	α -D-Manp-1R;3R	81	α -D-Xylp-OH
16	β -D-Galp-1R;3R	49	α -D-Manp-1R;4R	82	α -D-Xylp-OH-2R
17	β -D-Galp-1R;4R	50	α -D-Manp-1R;6R	83	α -D-Xylp-OH-3R
18	β -D-Galp-1R;6R	51	β -D-Manp-1R	84	α -D-Xylp-OH-4R
19	α -D-Glcp-1R	52	β -D-ManpNAc-1R	85	β -D_L-Xylp-1R
20	α -D-Glcp-1R;2R	53	β -D-Manp-OH	86	β -D-Xylp-1R;2R
21	α -D-Glcp-1R;3R	54	β -D-Manp-OH-2R	87	β -D-Xylp-1R;3R
22	α -D-Glcp-1R;4R	55	β -D-Manp-OH-4R	88	β -D-Xylp-1R;4R
23	α -D-Glcp-1R;6R	56	β -D-Manp-OH-6R	89	β -D-Xylp-OH
24	α -D-Glcp-OH	57	β -D-Manp-1R;2R	90	β -D-Xylp-OH-2R
25	α -D-Glcp-OH-2R	58	β -D-Manp-1R;4R	91	β -D-Xylp-OH-3R
26	α -D-Glcp-OH-3R	59	α -L_D-Fucp-1R	92	β -D-Xylp-OH-4R
27	α -D-Glcp-OH-4R	60	α -L-Fucp-OH	93	β -D-GlcpA-1R
28	α -D-Glcp-OH-6R	61	α -L-Fucp-1R;2R	94	β -D-GlcpA-1R;2R
29	β -D-Glcp-1R	62	β -L-Fucp-1R	95	β -D-GlcpA-1R;4R
30	β -D-Glcp-1R;2R	63	β -L-Fucp-OH	96	α -D-Neup5Ac-2R
31	β -D-Glcp-1R;3R	64	α -D-GalpNAc-1R	97	α -D-Neup5Ac-2R;7R
32	β -D-Glcp-1R;4R	65	α -D-GalpNAc-OH-6R	98	α -D-Neup5Ac-2R;8R
33	β -D-Glcp-1R;6R	66	α -D-GalpNAc-1R;3R		

Für jede Gruppe wurden aus den Literaturwerten der NMR-Datenbank (NMR.fp5) der Mittelwert und die Standardabweichung für jede chemische Verschiebung aller C-Atome berechnet (Kapitel 5.7.2).

5.4.3 Disaccharid-Ansatz

Mit dem Monosaccharid-Ansatz kann das Problem, dass die Sequenz der einzelnen Monosaccharid-Einheiten im Oligosaccharid nicht bekannt ist, nicht gelöst werden. Deshalb wurde der Disaccharid-Ansatz gewählt. Jetzt umfassen die antrainierten Gruppen Einheiten, die aus 2 Monosacchariden inklusive der glykosidischen Verknüpfung und dem gesamten Substitutionsmuster an den C-Atomen bestehen (Abbildung 22). Sind alle Disaccharidblöcke eines Oligosaccharides identifiziert, so

5. Material und Methoden

kann durch die Überlappung der einzelnen Blöcke die Sequenz des Oligosaccharides sehr einfach rekonstruiert werden. Allerdings ist dieser Ansatz nur für kleinere Oligosaccharide valid. Bei grösseren Oligosacchariden tritt erneut das Sequenzproblem auf.

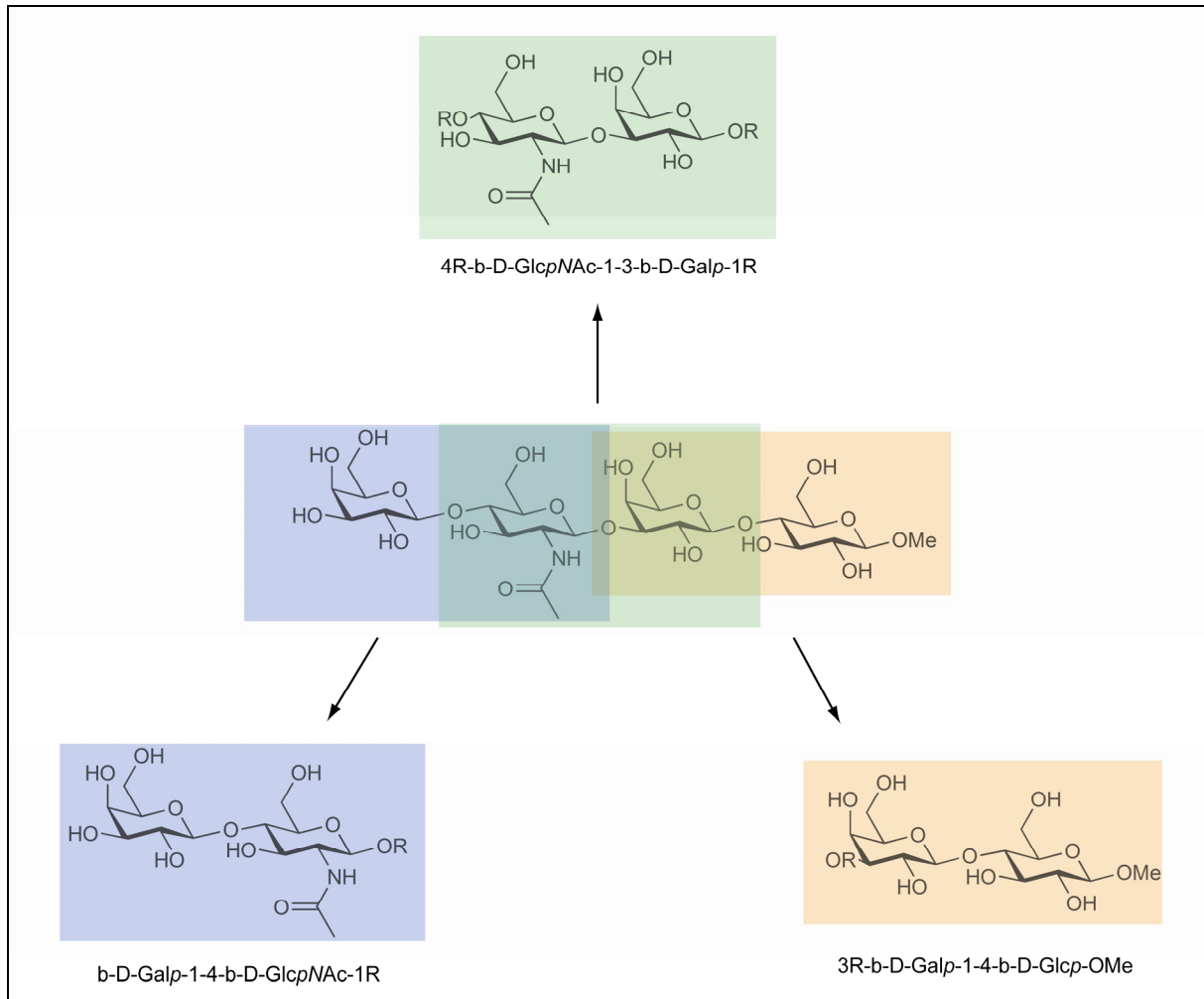


Abbildung 22. Gruppeneinteilung Disaccharid-Ansatz

Aus der NMR-Datenbank wurden alle vorkommenden Gruppen extrahiert. Für mehrere Gruppen wurden 2 verschiedene Formen (Sequenzen der Monosaccharid-Einheiten) gefunden (Gruppen 1, 33, 39, 46, 58, 66, 79 und 80). Dabei macht es keinen Unterschied, in welcher Sequenz die beiden Monosaccharid-Einheiten miteinander verknüpft sind. Die chemischen Verschiebungen ändern sich dadurch nicht. Für alle anderen Gruppen wurde in allen Oligosacchariden der Datenbank jeweils nur die unten aufgeführte Gruppe gefunden.

5. Material und Methoden

Tabelle 7. Gruppen Disaccharid-Ansatz

No.	Gruppe	No.	Gruppe
1	-2- α -D_L-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-/-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -D_L-Galp-1-	134	α -D-Glcp-1-2- β -D_L-Galp-1-
2	-2- α -D_L-Galp-1-6- α -D_L-Galp-1-	135	α -D-Glcp-1-2- β -D-Glcp-1-
3	-2- α -D-Glcp-1-2- α -D-Glcp-1-	136	α -D-Glcp-1-2- β -D-Glcp-OH
4	-2- α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-1-	137	α -D-Glcp-1-3- α -D-Glcp-1-
5	-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-	138	α -D-Glcp-1-3- α -D-Glcp-OH
6	-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-OH	139	α -D-Glcp-1-3- α -D-Manp-1-
7	-2- α -D-Manp-1-3- α -D_L-Galp-1-	140	α -D-Glcp-1-3- β -D-Glcp-OH
8	-2- α -D-Manp-1-6- α -D-Manp-OH	141	α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-1-
9	-2- β -D_L-Galp-1-2- β -D_L-Galp-1-	142	α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-OH
10	-2- β -D_L-Galp-1-3- α -D-GlcpNAc-OH	143	α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-1-
11	-2- β -D_L-Galp-1-3- β -D_L-Galp-1-	144	α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OH
12	-2- β -D_L-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-	145	α -D-Glcp-1-6- α -D_L-Galp-1-
13	-2- β -D_L-Galp-1-4- α -D-GlcpNAc-OH	146	α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-1-
14	-2- β -D_L-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-	147	α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-OH
15	-2- β -D_L-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-OH	148	α -D-Glcp-1-6- β -D_L-Galp-1-
16	-2- β -D_L-Galp-1-4- β -D-Xylp-1-	149	α -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-OH
17	-2- β -D-Manp-1-3- α -D_L-GalpNAc-1-	150	α -D-GlcpNAc-1-4- β -D_L-Galp-1-
18	-2- β -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-1-	151	α -D-Manp-1-2- α -D-Glcp-1-
19	-3- α -D_L-Galp-1-3- α -D-Manp-1-	152	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-
20	-3- α -D_L-Galp-1-3- β -D_L-GalpNAc-1-	153	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-OH
21	-3- α -D_L-Galp-1-4- β -D_L-Galp-1-	154	α -D-Manp-1-2- β -D-Glcp-1-
22	-3- α -D_L-GalpNAc-1-2- α -D_L-Fucp-1-	155	α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-
23	-3- α -D_L-GalpNAc-1-3- α -D_L-GalpNAc-1-	156	α -D-Manp-1-3- β -D_L-Galp-1-
24	-3- α -D_L-GalpNAc-1-3- β -D-GlcpNAc-1-	157	α -D-Manp-1-3- β -D-Manp-1-
25	-3- α -D_L-GalpNAc-1-4- α -D-Manp-1-	158	α -D-Manp-1-4- α -D-Glcp-OH
26	-3- α -D-Glcp-1-3- α -D-Glcp-1-	159	α -D-Manp-1-4- α -D-Manp-1-
27	-3- α -D-GlcpNAc-1-2- β -D-Manp-1-	160	α -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-1-
28	-3- α -D-GlcpNAc-1-4- α -D_L-Galp-1-	161	α -D-Manp-1-6- α -D-Manp-1-
29	-3- α -D-GlcpNAc-1-4- α -D_L-GalpNAc-1-	162	α -D-Xylp-1-2- α -D-Xylp-OH
30	-3- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-	163	α -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp-1-
31	-3- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-	164	α -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp-OH
32	-3- α -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-1-	165	α -D-Xylp-1-3- α -D-Xylp-OH

5. Material und Methoden

No.	Gruppe	No.	Gruppe
33	-3- α -D-Manp-1-6- α -D-Manp-1-/6- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-	166	α -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp-1-
34	-3- β -D_L-Galp-1-3- β -D_L-Galp-1-	167	α -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp-OH
35	-3- β -D_L-Galp-1-3- β -D_L-GalpNAc-1-	168	α -D-Xylp-1-4- α -D-Xylp-OH
36	-3- β -D_L-Galp-1-4- α -D_L-Galp-1-	169	α -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-1-
37	-3- β -D_L-Galp-1-4- α -D-Glcp-OH	170	α -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-OH
38	-3- β -D_L-Galp-1-4- β -D-Glcp-1-	171	α -D-Xylp-1-6- β -D-Glcp-1-
39	-3- β -D_L-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-/4- β -D-GlcpNAc-1-3- β -D_L-Galp-1-	172	α -D_L-Fucp-1-2- α -D-Glcp-1-
40	-3- β -D_L-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-OH	173	α -D_L-Fucp-1-2- α -D-Manp-1-
41	-3- β -D_L-Galp-1-4- β -D-Glcp-OH	174	α -D_L-Fucp-1-2- α -D-Manp-OH
42	-3- β -D_L-Galp-1-6- β -D-Glcp-1-	175	α -D_L-Fucp-1-2- α -D_L-Fucp-1-
43	-3- β -D_L-Galp-1-6- β -D-GlcpNAc-1-	176	α -D_L-Fucp-1-2- β -D_L-Galp-1-
44	-3- β -D_L-Galp-1-6- β -D-Manp-1-	177	α -D_L-Fucp-1-2- β -D-Glcp-1-
45	-3- β -D-Glcp-1-3- β -D_L-GalpNAc-1-	178	α -D_L-Fucp-1-2- β -D-Manp-OH
46	-3- β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-1-/4- β -D-Glcp-1-3- β -D-Glcp-1-	179	α -D_L-Fucp-1-3- α -D-Manp-1-
47	-3- β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OH	180	α -D_L-Fucp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-
48	-3- β -D-GlcpNAc-1-3- α -D_L-Galp-1-	181	α -D_L-Fucp-1-4- α -D-Glcp-1-
49	-3- β -D-GlcpNAc-1-4- β -D-GlcpNAc-1-	182	α -D_L-Fucp-1-6- α -D_L-Galp-1-
50	-3- β -D-Manp-1-4- α -D-GlcpNAc-OH	183	β -D_L-Galp-1-2- α -D-Glcp-1-
51	-3- β -D-Manp-1-4- β -D-GlcpNAc-OH	184	β -D_L-Galp-1-2- β -D_L-Galp-1-
52	-3- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-	185	β -D_L-Galp-1-2- β -D-Glcp-1-
53	-3- β -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-1-	186	β -D_L-Galp-1-3- α -D_L-Galp-1-
54	-4- α -D_L-Galp-1-4- β -D_L-Galp-1-	187	β -D_L-Galp-1-3- α -D_L-GalpNAc-1-
55	-4- α -D_L-GalpNAc-1-3- β -D-Manp-1-	188	β -D_L-Galp-1-3- α -D_L-Galp-OH
56	-4- α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-1-	189	β -D_L-Galp-1-3- α -D-GlcpNAc-OH
57	-4- α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-OH	190	β -D_L-Galp-1-3- β -D_L-Galp-1-
58	-4- α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-1-/4- β -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-1-	191	β -D_L-Galp-1-3- β -D_L-GalpNAc-1-
59	-4- α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OH	192	β -D_L-Galp-1-3- β -D_L-Galp-OH
60	-4- α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-OH	193	β -D_L-Galp-1-3- β -D-Glcp-1-
61	-4- α -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-OH	194	β -D_L-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-
62	-4- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-	195	β -D_L-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-OH
63	-4- β -D_L-Galp-1-3- α -D_L-GalpNAc-1-	196	β -D_L-Galp-1-4- α -D-GlcpNAc-OH
64	-4- β -D_L-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-	197	β -D_L-Galp-1-4- α -D-Glcp-OH
65	-4- β -D_L-Galp-1-4- β -D_L-Galp-1-	198	β -D_L-Galp-1-4- β -D_L-Galp-1-

5. Material und Methoden

No.	Gruppe	No.	Gruppe
66	-4-β-D_L-Galp-1-4-β-D-GlcpNAc-1-/-4-β-D-GlcpNAc-1-4-β-D_L-Galp-1-	199	β-D_L-Galp-1-4-β-D-Glcp-1-
67	-4-β-D_L-Galp-1-6-α-D-Glcp-OH	200	β-D_L-Galp-1-4-β-D-GlcpNAc-1-
68	-4-β-D_L-Galp-1-6-β-D-Glcp-OH	201	β-D_L-Galp-1-4-β-D-GlcpNAc-OH
69	-4-β-D-Glcp-1-3-α-D-GlcpNAc-1-	202	β-D_L-Galp-1-4-β-D-Glcp-OH
70	-4-β-D-Glcp-1-3-α-D-Glcp-OH	203	β-D_L-Galp-1-6-α-D_L-Galp-1-
71	-4-β-D-Glcp-1-3-β-D-Glcp-OH	204	β-D_L-Galp-1-6-α-D_L-Galp-OH
72	-4-β-D-Glcp-1-4-α-D-Glcp-OH	205	β-D_L-Galp-1-6-β-D_L-Galp-1-
73	-4-β-D-Glcp-1-4-α-D-Manp-OH	206	β-D_L-Galp-1-6-β-D_L-Galp-OH
74	-4-β-D-Glcp-1-4-β-D-Glcp-1-	207	β-D_L-Galp-1-6-β-D-Glcp-1-
75	-4-β-D-Glcp-1-4-β-D-Glcp-OH	208	β-D_L-GalpNAc-1-3-α-D_L-Galp-1-
76	-4-β-D-Glcp-1-4-β-D-Manp-1-	209	β-D_L-GalpNAc-1-6-α-D_L-GalpNAc-OH
77	-4-β-D-Glcp-1-4-β-D-Manp-OH	210	β-D-Glcp-1-2-α-D-Glcp-1-
78	-4-β-D-Glcp-1-4-β-D-Xylp-1-	211	β-D-Glcp-1-2-α-D-Glcp-OH
79	-4-β-D-Glcp-1-6-α-D-Glcp-1-/-6-α-D-Glcp-1-4-β-D-Glcp-1-	212	β-D-Glcp-1-2-α-D-Manp-1-
80	-4-β-D-Glcp-1-6-β-D-Glcp-1-/-6-β-D-Glcp-1-4-β-D-Glcp-1-	213	β-D-Glcp-1-2-β-D_L-Galp-1-
81	-4-β-D-GlcpNAc-1-2-α-D-Manp-1-	214	β-D-Glcp-1-2-β-D-Glcp-1-
82	-4-β-D-GlcpNAc-1-2-α-D-Manp-OH	215	β-D-Glcp-1-2-β-D-Manp-1-
83	-4-β-D-GlcpNAc-1-4-α-D-GlcpNAc-OH	216	β-D-Glcp-1-3-α-D_L-Galp-1-
84	-4-β-D-GlcpNAc-1-4-β-D-GlcpNAc-OH	217	β-D-Glcp-1-3-α-D-Glcp-1-
85	-4-β-D-GlcpNAc-1-6-α-D-Manp-OH	218	β-D-Glcp-1-3-α-D-Glcp-OH
86	-4-β-D-GlcpNAc-1-6-β-D-Manp-OH	219	β-D-Glcp-1-3-α-D-Manp-1-
87	-4-β-D-Manp-1-3-α-D-GlcpNAc-1-	220	β-D-Glcp-1-3-β-D-Glcp-1-
88	-4-β-D-Manp-1-4-α-D-Glcp-OH	221	β-D-Glcp-1-3-β-D-Glcp-OH
89	-4-β-D-Manp-1-4-α-D-Manp-OH	222	β-D-Glcp-1-4-α-D_L-Galp-1-
90	-4-β-D-Manp-1-4-β-D-Glcp-OH	223	β-D-Glcp-1-4-α-D-Glcp-1-
91	-4-β-D-Manp-1-4-β-D-Manp-OH	224	β-D-Glcp-1-4-α-D-Glcp-OH
92	-4-β-D-Xylp-1-4-α-D-Xylp-OH	225	β-D-Glcp-1-4-α-D-Manp-OH
93	-4-β-D-Xylp-1-4-β-D-Xylp-1-	226	β-D-Glcp-1-4-β-D-Glcp-1-
94	-4-β-D-Xylp-1-4-β-D-Xylp-OH	227	β-D-Glcp-1-4-β-D-Glcp-OH
95	-6-α-D_L-Galp-1-6-α-D-Glcp-1-/-6-α-D-Glcp-1-6-α-D_L-Galp-1-	228	β-D-Glcp-1-4-β-D-Manp-OH
96	-6-α-D-Glcp-1-2-α-D_L-Galp-1-	229	β-D-Glcp-1-6-α-D_L-Galp-1-
97	-6-α-D-Glcp-1-4-α-D-Glcp-1-	230	β-D-Glcp-1-6-α-D-Glcp-OH
98	-6-α-D-Glcp-1-4-α-D-Glcp-OH	231	β-D-Glcp-1-6-α-D-Manp-1-

5. Material und Methoden

No.	Gruppe	No.	Gruppe
99	-6- α -D-Glcp-1-4- β -D-L-Galp-1-	232	β -D-Glcp-1-6- β -D-L-Galp-1-
100	-6- α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OH	233	β -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-1-
101	-6- α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-OH	234	β -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-OH
102	-6- α -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-OH	235	β -D-GlcpNAc-1-2- α -D-Manp-1-
103	-6- α -D-Manp-1-6- α -D-Manp-1-	236	β -D-GlcpNAc-1-2- α -D-Manp-OH
104	-6- β -D-L-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-	237	β -D-GlcpNAc-1-3- α -D-L-Galp-1-
105	-6- β -D-L-Galp-1-4- α -D-GlcpNAc-OH	238	β -D-GlcpNAc-1-3- α -D-Glcp-1-
106	-6- β -D-L-Galp-1-4- α -D-Glcp-OH	239	β -D-GlcpNAc-1-3- α -D-Manp-1-
107	-6- β -D-L-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-	240	β -D-GlcpNAc-1-3- β -D-L-Galp-1-
108	-6- β -D-L-Galp-1-4- β -D-Glcp-OH	241	β -D-GlcpNAc-1-4- α -D-GlcpNAc-OH
109	-6- β -D-L-Galp-1-6- β -D-L-Galp-1-	242	β -D-GlcpNAc-1-4- α -D-Manp-1-
110	-6- β -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-OH	243	β -D-GlcpNAc-1-4- β -D-GlcpNAc-OH
111	-6- β -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-1-	244	β -D-GlcpNAc-1-6- α -D-Manp-1-
112	-6- β -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp-OH	245	β -D-GlcpNAc-1-6- β -D-L-Galp-1-
113	-6- β -D-GlcpNAc-1-6- β -D-L-Galp-1-	246	β -D-Manp-1-4- α -D-Manp-OH
114	-6- β -D-Manp-1-4- α -D-Manp-OH	247	β -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-1-
115	-6- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-OH	248	β -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-OH
116	α -D-L-Fucp-1-3- α -D-L-Galp-1-	249	β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-
117	α -D-L-Fucp-1-3- α -D-Glcp-1-	250	β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-OH
118	α -D-L-Fucp-1-3- β -D-Glcp-1-	251	β -D-Xylp-1-2- α -D-Xylp-OH
119	α -D-L-Galp-1-3- α -D-L-Galp-1-	252	β -D-Xylp-1-2- β -D-Manp-1-
120	α -D-L-Galp-1-3- α -D-GlcpNAc-1-	253	β -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp-1-
121	α -D-L-Galp-1-4- α -D-L-Galp-1-	254	β -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp-OH
122	α -D-L-Galp-1-4- α -D-Glcp-OH	255	β -D-Xylp-1-3- α -D-Xylp-OH
123	α -D-L-Galp-1-4- β -D-L-Galp-1-	256	β -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp-1-
124	α -D-L-Galp-1-4- β -D-Glcp-OH	257	β -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp-OH
125	α -D-L-Galp-1-6- α -D-L-Galp-1-	258	β -D-Xylp-1-4- α -D-Xylp-OH
126	α -D-L-Galp-1-6- α -D-Glcp-1-	259	β -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-1-
127	α -D-L-Galp-1-6- α -D-Glcp-OH	260	β -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-OH
128	α -D-L-Galp-1-6- β -D-L-Galp-1-	261	β -D-L-Fucp-1-2- α -D-Glcp-1-
129	α -D-L-Galp-1-6- β -D-Glcp-OH	262	β -D-L-Fucp-1-2- β -D-L-Galp-1-
130	α -D-L-Galp-1-6- β -D-Manp-1-	263	β -D-L-Fucp-1-2- β -D-Glcp-1-
131	α -D-L-GalpNAc-1-3- β -D-L-GalpNAc-1-	264	β -D-L-Fucp-1-2- β -D-Manp-OH

5. Material und Methoden

No.	Gruppe	No.	Gruppe
132	α -D-Glcp-1-2- α -D-Glcp-1-	265	β -D-L-Fucp-1-6- α -D-L-Galp-1-
133	α -D-Glcp-1-2- α -D-Glcp-OH		

Die chemischen Verschiebungen für die Gruppen des Disaccharid-Ansatzes wurden aus den Mittelwerten der Gruppen des Monosaccharid-Ansatzes erhalten (Kapitel 5.7.2). Ebenso wurden die Standardabweichungen der Gruppen des Monosaccharid-Ansatzes übernommen.

5.5 Verwendete Substanzen

5.5.1 Experimentelle Daten

5.5.1.1 Hindsgaul-Datenreihe

Die Hindsgaul-Datenreihe besteht aus sechs ungeschützten Disacchariden. Dieser Datensatz wurde freundlicherweise von Prof. Ole Hindsgaul (Carlsberg Research Center, Copenhagen) zur Verfügung gestellt.

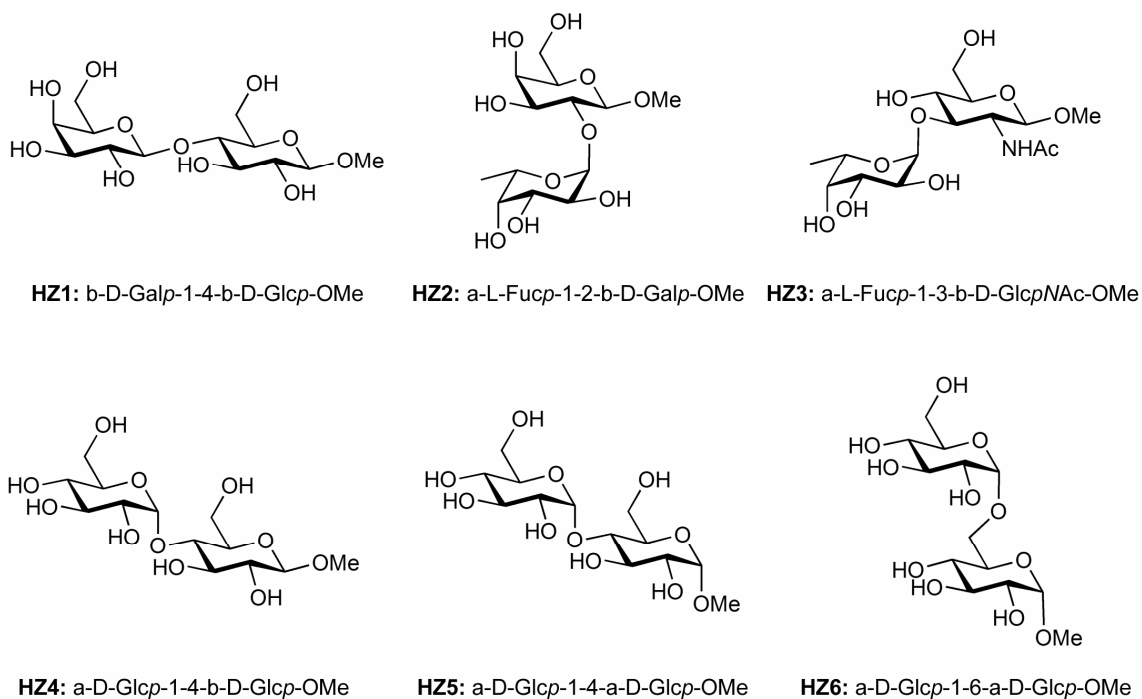


Abbildung 23. Hindsgaul-Datenreihe

5. Material und Methoden

Sämtliche Messungen wurden am Institut für Molekulare Pharmazie mit dem eigenen NMR-Spektrometer durchgeführt (s. Kapitel 5.3). Die Peaklisten der gemessenen Substanzen sind im Anhang zu finden (Tabelle 105).

5.5.1.2 Institutseigene Datenreihe

Aus der Substanzenbibliothek des Instituts wurde eine Test-Datenreihe zusammengestellt. Sie beinhaltet sowohl geschützte, wie auch ungeschützte Oligosaccharide.

Tabelle 8. Strukturen Institutseigene Datenreihe

Nr.	Messreferenz	Name	Struktur
1	Mar03_2006_50	α -D-Glcp-1-5- α -D-Fruf	
2	Mar31-2006_30	Anomerengemisch von β -D-Galp-1-4- α -D-Glcp und β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp	
3	Mar03-2006_30	Octaacetyl- β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp	
4	Mar03-2006_20	Octaacetyl- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-Derivat	
5	Mar03-2006_41	β -D-Glcp-Derivat	
6	Mar03-2006_70	α -D-Neup5Ac-1-3- β -D-Galp-Derivat	

Die Peaklisten der Datensätze sind im Anhang (Tabelle 108) zu finden.

5.5.2 Literaturdaten

5.5.2.1 FM-Datenbank (NMR.fp5)

Die Datenbank wurde durch eine umfangreiche Literatursuche zusammengestellt^[18, 22, 26, 29-31, 40, 44, 67, 98, 105, 120, 122-262]. Aus 175 Referenzen wurden insgesamt 1097 Datensätze mit ¹³C-NMR Daten von ungeschützten Oligosacchariden in die Datenbank aufgenommen:

Tabelle 9. Statistik NMR-DB

	Anzahl Datensätze	Anzahl Monosaccharid-Einheiten
Monosaccharide	184	184
Disaccharide	420	840
Trisaccharide	278	834
Tetrasaccharide	97	388
Pentasaccharide	63	315
Hexasaccharide	48	288
Heptasaccharide	5	35
Octasaccharide	0	0
Nonasaccharide	2	18
Total	1097	2902

Neben den in Säugetieren vorkommenden Zuckern (D-Glc, D-/L-Gal, D-Man, D-/L-Xyl, D-/L-Fuc, D-GalNAc, D-GlcNAc, D-Neu5Ac, D-GlcA) wurden auch weitere Zucker, wie Arabinose (D-Ara), Fructose (D-Fru), Rhamnose (D-Rha) und Ribose (D-Rib) erfasst, obwohl sie für das Training der ANNs nicht verwendet wurden.

5. Material und Methoden

Die Datenbank wurde mit dem Programm Filemaker^[106] erstellt. Das Layout beinhaltet folgende Bereiche:

13-C-NMR Datenbank 1

systematic_name: Train Test Valid Unused
 quickname: a-D-pGlc-1-2-a-D-pGlc-1-6-b-D-pGlc
 lit_ref: Bock K. C. Pedersen, et al. (1984) "Carbon-13" 401.xls
 entered_by: AS mod_date: 14-4-2005
 solvent: D2O Ref. (ppm): 67.19
 ext_ref: Dioxane concn_ppm: -0.21

Chemical structure (6): O[C@@H]1[C@H](O[C@@H]2[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]2O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@@H]1O

Sugar chain diagram (7):

nr_of_sugars	3					
Repeat	No					

1	b-D-pGlc	96.59	76.49	74.89	74.79	70.19	66.89		
1A1									
1A2									
1B1									
2	a-L-pRha	103.29	80.59	71.69	71.29	68.89	17.99		
2A1									
2A2									
2B1									
3	b-D-pMan	101.69	76.09	74.19	71.59	70.09	67.89		
3A1									
3A2									
3B1									
4	b-D-pGal	104.19	81.59	76.09	71.29	69.59	61.98		
4A1									
4A2									
4B1									
5	a-L-pRha	103.29	80.59	71.69	71.29	68.89	17.98		
5A1									
5B1									
6	b-D-pMan	101.69	77.29	74.19	71.59	67.89	61.97		

Export menu (9): All Sugars train, All Sugars test, Gal train, Gal test, Glc train, Glc test, Man train, Man test, Fuc train, Fuc test, Rha train, Rha test, Xyl train, Xyl test, NeuNAc train, NeuNAc test

Abbildung 24. ¹³C-NMR Filemaker© Datenbank

- **Datenreihe (1):** Gibt die Verwendung eines Datensatzes in einer Datenreihe an: *train*, *test* oder *valid* falls verwendet; *unused* falls nicht verwendet. Dies ermöglicht es fehlerhafte Datensätze von der Verwendung auszuschliessen

5. Material und Methoden

- **Rec. No (2):** Interne Nummerierung aller Datensätze
- **Nomenklatur (3):** Jeder Datensatz erhält einen systematischen Namen und einen Quickname. Die systematische Nomenklatur folgt weitgehend dem Vorschlag von IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*, <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/2carb/>). Der Quickname ist eine interne Nomenklatur, die auf gebräuchlichen Abkürzungen basiert (Tabelle 10)

Tabelle 10. Verwendete Abkürzungen für Quickname

Abkürzung	Erklärung	Abkürzung	Erklärung	Abkürzung	Erklärung
α	alpha	GlcA	Glukuronsäure	OMe	Methoxy
Ara	Arabinose	Man	Mannose	OPhosphate	O-Phosphat
β	beta	N	2-Amino (andere Substitutionsorte werden präzisiert)	OSulfate	O-Sulfat
D/L	Drehrichtung von linear polarisiertem Licht (D=Dexter/L=Levo)	NAc	2-N-Acetyl (andere Substitutionsorte werden präzisiert)	p	Pyranose
Fru	Fructose	Neu5Ac	N-Acetyl Neuraminsäure	Rha	Rhamnose
f	Furanose	NH2	Amino	Rib	Ribose
Fuc	Fucose	OAc	O-Acetyl	Xyl	Xylose
Gal	Galactose	OH	Hydroxyl		
Glc	Glucose	-ol	Reduzierte Form (Bsp Glucitol)		

- **LitRef. (4):** Literaturreferenz des Datensatzes
- **Messparameter (5):** Angaben zu Lösungsmittel, verwendeter externer Referenz mit chemischer Verschiebung, Korrekturfaktor gegenüber der Originalpublikation: alle chemischen Verschiebungen wurden nach Gottlieb *et al.*^[119] standardisiert
- **Struktur (6):** Chemische Strukturformel des Zuckers
- **Systematische Darstellung (7):** Schematische Darstellung der Struktur des Zuckers von links nach rechts (Abbildung 25)

5. Material und Methoden

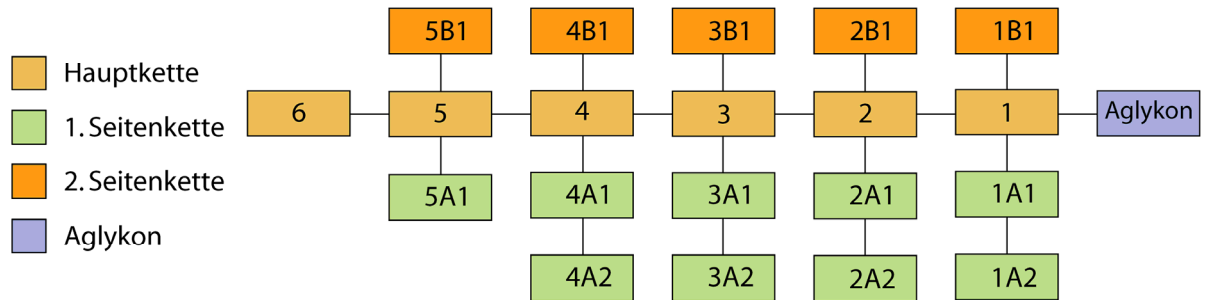


Abbildung 25. Strukturschema Datenbank

Die längstmögliche Kette bildet das Grundgerüst (1–6). Bei zwei gleich langen Ketten entscheidet der Verknüpfungspunkt über die Priorität (C1→C2→C3→C4→C6). Seitenketten werden nach den gleichen Kriterien geordnet. Die erste Seitenkette erhält das Suffix A, die zweite B. Jeder Monosaccharid-Baustein des Moleküls erhält eine eindeutige Nummer, die die Position im Oligosaccharid wiedergibt.

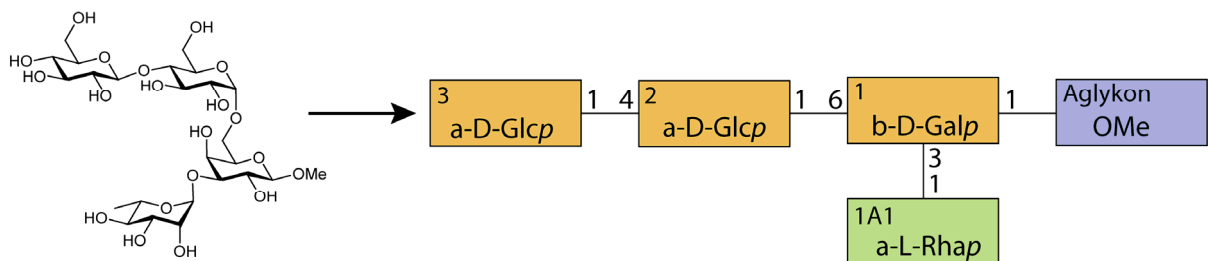


Abbildung 26. Klassifizierung von α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-1-6-(α -L-Rhap-1-3)- β -D-Galp-OMe

- **Messwerte (8):** Der Größe nach geordneten chemischen Verschiebungen aller Zuckerbausteine. Die Nummerierung entspricht der Position des Zuckerbausteines im Zucker (s. oben)
- **Export-Skripts (9):** Exportieren alle Datensätze eines Zuckers der gewünschten Datenreihe (train, test) in eine Csv-Datei (*Comma-separated values*)
- **Notizen (10):** zusätzliches Textfeld für weitere Angaben wie Messtemperatur oder weitere Literaturreferenzen

5.5.2.2 Stenutz-Datenreihe

Zum Vergleich der Performance von **NeuroCarb** mit CASPER^[32-34, 93-102, 180, 263] stellte Prof. Roland Stenutz (Universität Stockholm) eine Datenreihe bestehend aus 129 Datensätzen von ungeschützten Oligosacchariden^[31, 96, 98, 100, 101, 120, 122, 129, 131, 146, 148, 150, 155, 164, 166, 168, 171, 188, 190, 191, 198, 210, 214, 238, 255, 264-316] zur Verfügung:

Tabelle 11. Stenutz-Datenreihe

Nr.	Name
1	β -D-Galp-1-6- β -D-Galp-1-4- α -D-Glcp
2	α -D-Galp-1-4- α -D-Galp-OMe
3	α -D-Galp-1-4- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-OMe
4	-4- β -D-Glcp-1-3- α -L-Rhap-1-
5	-2- α -D-Manp-1-4- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-
6	-6- α -D-Glcp-1-2- α -D-Galp-1-6- α -D-Galp-1-
7	-2- α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-1-
8	-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -D-GlcpNAc-1-2-[β -L-Rhap-1-4- β -D-GlcpNAc-1-3]- α -L-Rhap-1-
9	-3-[α -D-Galp-1-6]- β -D-Glcp-1-3- β -D-GalpNAc-1-
10	-4- β -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-1-4- β -D-GalpA-1-
11	-4- α -D-Glcp-1-
12	-6-[α -D-Manp-1-2]- α -D-Manp-1-
13	-3- β -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-
14	-3- β -D-Glcp-1-3- α -D-GalpA-1-3- α -D-Manp-1-3-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Glcp-1-
15	-3- β -D-Manp-1-4- α -L-Rhap-1-3- α -D-Galp-1-
16	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp
17	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp
18	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp
19	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp
20	β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-1-3- α -D-Glcp
21	β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-1-3- β -D-Glcp
22	-3- α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-1-3- α -D-Glcp-1-
23	α -D-GlcpA-1-3- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap
24	-3-[α -L-Fucp-1-2]- α -L-Fucp-1-3- α -L-Fucp-1-3- α -L-Fucp-1-3- α -L-Fucp-1-3- α -L-Fucp-1-
25	-3- β -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-1-3- β -D-GalpNAc-1-4- β -D-GlcpA-1-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -D-Galp-1-
26	-6- α -D-Glcp-1-

5. Material und Methoden

Nr.	Name
27	-6- α -D-GlcpNAc-1-4- α -D-GalpNAc-1-
28	-3- α -L-Rhap-1-3- α -D-Galp-1-4- α -D-Galp-1-
29	-4- β -D-GalpNAc-1-3- α -L-Rhap-1-4- α -D-Glcp-1-4- β -D-Galp-1-3- α -D-GalpNAc-1-
30	-3- β -D-GalpNAc-1-6-[α -L-Fucp-1-2]- β -D-Galp-1-3- β -D-GalpNAc-1-4- α -D-Galp-1-
31	-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-4- α -D-GalpNAc-1-
32	-2- α -L-Rhap-1-6- α -D-Glcp-1-4-[β -D-GlcpNAc-1-3]- α -D-Galp-1-3- α -D-GlcpNAc-1-
33	-4-[β -D-GlcpNAc-1-2]- β -D-Glcp-1-3- β -D-GalpNAc-1-3-[β -D-Galp-1-4]- β -D-Galp-1-
34	-3- β -D-GlcpNAc-1-3- α -L-Rhap-1-4- α -L-FucpNAc-1-
35	-3- β -D-GlcpNAc-1-4- α -D-Galp-1-4-[β -D-Manp-1-3]- α -L-Rhap-1-
36	-4- β -D-GlcpNAc-1-6- α -D-Glcp-1-4- β -D-GlcpA-1-6- β -D-Galp-1-4- β -D-Galp-1-
37	-4- β -D-GlcpNAc-1-6- α -D-Glcp-1-4- β -D-GlcpA-1-6- β -D-Galp-1-4- β -D-Galp-1-
38	-3- β -D-GalpNAc-1-4- α -L-Fucp-1-2-[α -D-Galp-1-3]- β -D-Galp-1-3- α -D-GalpNAc-1-
39	β -D-Glcp-1-4- α -D-GlcpA-1-3- β -L-Fucp
40	-3-[β -D-GlcpNAc-1-2]- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-4- α -D-GlcpA-1-
41	-3- β -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-
42	-2- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-
43	-2- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-
44	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Manp
45	α -D-Glcp-1-2-[β -D-Glcp-1-4]- β -D-Galp-1-4- α -D-Glcp-1-3- α -L-Rhap
46	-3- β -L-Rhap-1-4- β -D-Glcp-1-4-[α -D-Glcp-1-2]- β -D-Galp-1-4- α -D-GlcpNAc-1-
47	-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
48	-4- β -D-ManpNAc-1-4- α -D-GlcpNAc-1-
49	-3- β -D-Glcp-1-3- α -D-Galp-1-3- α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-1-
50	-3- β -D-Glcp-1-3- β -D-Galp-1-3- α -D-Galp-1-
51	-3- β -D-Glcp-1-3-[β -D-GlcpA-1-4]- β -D-Galp-1-3-[α -D-Galp-1-2]- α -D-Galp-1-
52	-3- β -D-Galp-1-3- α -D-Galp-1-
53	-3- β -D-Galp-1-2- α -L-Rhap-1-4-[α -D-Galp-1-2]-[β -D-GlcpA-1-3]- α -D-Galp-1-4- α -L-Rhap-1-
54	α -L-Fucp-1-2- β -D-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc-1-3- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp
55	β -D-Galp-1-3-[α -L-Fucp-1-4]- β -D-GlcpNAc-1-3- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp
56	β -D-GlcpNAc-1-6- β -D-Galp-1-4- α -D-Glcp
57	-6-[α -D-Glcp-1-2]- α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-1-
58	-4- β -D-Glcp-1-4-[β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-1-6]- α -D-Glcp-1-4- β -D-Galp-1-
59	-3- β -D-Glcp-1-

5. Material und Methoden

Nr.	Name
60	α -L-Fucp-1-2- β -D-Galp-1-3-[α -L-Fucp-1-4]- β -D-GlcpNAc-OMe
61	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Manp
62	α -D-Galp-1-6- β -D-Manp-1-4- α -D-Manp
63	β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Manp
64	α -D-Manp-1-4- α -L-Rhap-1-3- α -D-Galp
65	β -D-Galp-1-3-[β -D-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-6]- β -D-Galp-1-4- α -D-Glcp
66	β -D-Galp-1-3-[β -D-GlcpNAc-1-6]- β -D-Galp-1-4- α -D-Glcp
67	β -D-Galp-1-3- β -D-Galp-1-3-[β -D-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-6]- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp
68	β -D-Galp-1-3-[β -D-Galp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-6]- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp
69	β -D-Galp-1-3-[β -D-GlcpNAc-1-6]- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp
70	β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OMe
71	-3- β -D-GlcpNAc-1-4- β -D-GlcpA-1-6- α -D-GalpNAc-1-6- β -D-GlcpNAc-1-
72	-4- β -D-Glcp-1-3- β -D-GalpNAc-1-4- β -D-GalpNAc-1-4- β -D-Galp-1-
73	-3-[β -D-GlcpA-1-4]- β -D-GalpNAc-1-4- α -D-GalpNAc-1-3- β -D-GalpNAc-1-
74	-2- α -D-Rhap-1-3- α -D-Rhap-1-3- α -D-Rhap-1-
75	-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
76	-3- β -D-GlcpNAc-1-3- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
77	-3- α -D-pRha-1-4- α -D-GalpNAc-1-3- α -D-Rhap-1-
78	-2- α -D-Rhap-1-3- α -D-Rhap-1-3- α -D-Rhap-1-2- α -D-Rhap-1-
79	-3- α -L-Rhap-1-3- α -D-Galp-1-3- α -D-Manp-1-
80	β -D-Manp-1-4- α -L-Rhap-1-3- α -D-Galp
81	β -D-Manp-1-4- α -L-Rhap-1-3- β -D-Galp-1-6- β -D-Manp-1-4- α -L-Rhap
82	-3- β -D-GlcpNAc-1-3- α -L-Rhap-1-
83	-4- β -D-ManpNAc-1-4- α -D-Glcp-1-
84	-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-
85	-3- α -L-Rhap-1-4- α -D-Glcp-1-
86	-3- α -L-Rhap-1-4- α -D-Glcp-1-
87	-3- β -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-1-
88	α -D-GlcpNAc-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-2- α -D-Galp-OMe
89	-3-[α -D-Glcp-1-6]- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
90	-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2-[α -D-Glcp-1-3]- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
91	-3- β -D-GlcpNAc-1-2-[α -D-Glcp-1-3]- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
92	-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-

5. Material und Methoden

Nr.	Name
93	-3-[α -D-Glcp-1-2- α -D-Glcp-1-4]- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
94	-3- β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
95	α -D-Glcp-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-OMe
96	α -L-Rhap-1-2-[α -D-Glcp-1-3]- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-OMe
97	β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-2-[α -D-Glcp-1-3]- α -L-Rhap-OMe
98	α -L-Rhap-1-2-[β -D-GlcpNAc-1-3]- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-OMe
99	β -D-ManpNAc-1-4- α -D-Glcp-1-2- α -L-Rhap
100	-3- β -D-Glcp-1-
101	β -D-ManpNAc-1-3- α -L-FucpNAc-1-3- α -D-GalpNAc
102	-3- β -D-Glcp-1-3- β -D-Glcp-1-3-[β -D-Glcp-1-6]- β -D-Glcp-1-
103	-2- α -L-Rhap-1-3-[β -D-GlcpNAc-1-2]- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
104	-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
105	-2- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -D-Galp-1-3-[α -L-Rhap-1-4]- α -D-GalpA-1-2- α -L-Rhap-1-
106	-3- β -L-Rhap-1-4- α -L-Rhap-1-3- α -D-Fucp-1-
107	-3- β -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-3- α -L-Rhap-1-
108	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Manp
109	β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Manp
110	α -D-Galp-1-6- β -D-Manp-1-4- α -D-Manp
111	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-4- α -D-Manp
112	β -D-Galp-1-3- α -D-GlcpNAc
113	β -D-Manp-1-4- α -D-Manp
114	α -D-Galp-1-3- β -D-Galp
115	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-OMe
116	α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-OMe
117	α -L-Fucp-1-2- α -D-Galp
118	α -L-Fucp-1-4- β -D-GlcpNAc-OMe
119	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- β -D-Manp
120	β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- β -D-Manp
121	α -D-Galp-1-6- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp
122	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp-1-4- β -D-Manp
123	β -D-Galp-1-3- β -D-GlcpNAc
124	β -D-Galp-1-3-[α -L-Fucp-1-4]- β -D-GlcpNAc
125	β -D-Manp-1-4- α -D-Manp

5. Material und Methoden

Nr.	Name
126	β -D-Manp-1-4-[α -D-Galp-1-6]- α -D-Manp
127	α -D-Galp-1-6- β -D-Manp-1-4- α -D-Manp
128	β -D-Galp-1-3-[α -L-Fucp-1-6]- α -D-GlcpNAc
129	β -D-Galp-1-3-[α -L-Fucp-1-6]- β -D-GlcpNAc

Die zugehörigen Peaklisten und Strukturformeln sind im Anhang zu finden. Alle Datensätze wurden nach Gottlieb *et al.*^[119] standardisiert.

5.6 Künstliche neuronale Netzwerke (ANN)

Für die Erstellung der Arbeit wurden in einer ersten Phase selbst-organisierende Netzwerke nach Kohonen verwendet. In einer zweiten Phase wurden mehrschichtige Netzwerke mit dem Backpropagation Lernverfahren trainiert. Die beiden verwendeten Netzwerktypen und die Lernalgorithmen werden im Folgenden kurz diskutiert.

5.6.1 Selbst-organisierende Netzwerke

Selbst-organisierende Netzwerke (Abbildung 27) oder auch Kohonen Netzwerke^[61, 105, 119, 317, 318] sind ein typisches Beispiel unüberwachten Lernens (vgl. Kapitel 4.3.4.2). Im Unterschied zum überwachten Lernen, bei dem im Patternfile Eingabemuster und gewünschtes Ausgabemuster gegeben sein müssen, enthält das Patternfile für ein Kohonen Netzwerk nur Eingabemuster.

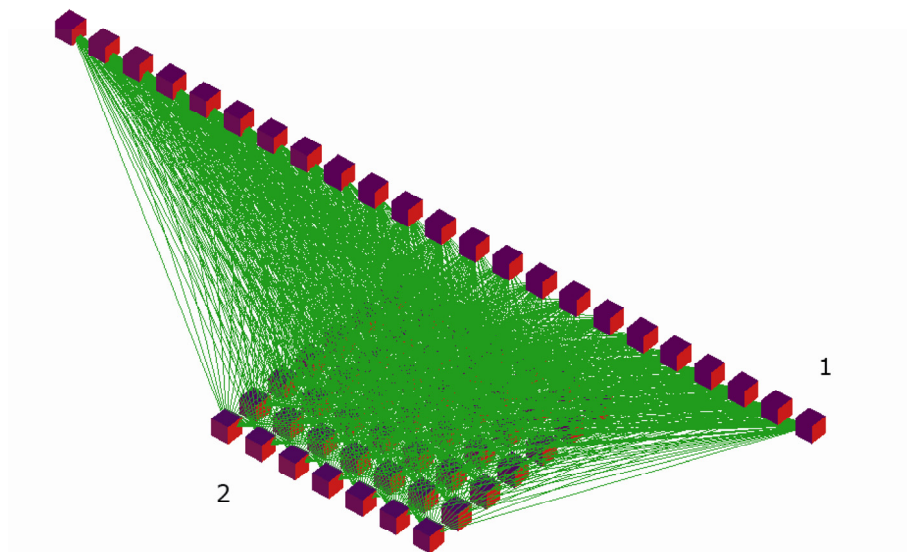


Abbildung 27. Kohonen Netzwerk mit Eingabeschicht (1) und Ausgabeschicht (2)

Ein selbst-organisierendes Netzwerk ist ein zweischichtiges Netzwerk. Speziell ist, dass es nur aus einer Eingabe- und einer Ausgabeschicht (der topologischen Karte) besteht. Die Neuronen der Ausgabeschicht sind in einer Ebene angeordnet.

Ein selbst-organisierendes Netzwerk erlernt die Ähnlichkeiten der Eingabemuster während des Trainingsprozesses selbst und versucht sie auf der Ausgabeschicht (meist einer zweidimensionalen Karte) zu visualisieren, indem für ähnliche Eingabemuster nahe beieinander liegende Neuronen aktiviert werden. Die ähnlichen Eingabemuster werden so auf der Karte in Klassen zusammengefasst. Worauf die Klassifizierung durch das neuronale Netzwerk beruht, ist für den Benutzer nicht ersichtlich. Neue unbekannte Eingabemuster werden entsprechend ihrer Ähnlichkeit auf der Karte abgebildet.

Lernverfahren der selbst-organisierenden Netzwerke

Für ein Eingabemuster wird die Ausgabe aller Neuronen berechnet. Das Neuron, dessen Ausgabe am nächsten zu dem Eingabemuster ist, wird als Sieger betrachtet. Nur dieses Neuron darf sein Gewicht anpassen. In einem bestimmten Radius um das Siegerneuron herum, werden die Gewichte der Neuronen ebenfalls angepasst. Wie gross diese Korrektur ist, wird durch die Nachbarschaftsfunktion definiert. Je weiter entfernt ein Neuron vom Sieger ist, desto geringer fällt diese Korrektur aus. Meist wird der Radius, in dem diese Korrektur durchgeführt zu Beginn des Trainings sehr gross gewählt (oft die Grösse des Netzwerkes) und über die Anzahl der Trainingszyklen immer stärker eingeschränkt. Dies bewirkt, dass am Anfang schnell eine grobe Ordnung gefunden wird, die gegen Ende des Trainings immer mehr verfeinert wird. Das Training ist beendet, sobald die Klassen genügend räumlich getrennt sind und so keine Konflikte durch Mehrfachbelegung von Neuronen der Kohonenkarte mehr bestehen (vgl. Abbildung 17). Sobald ein Netzwerk ausreichend trainiert ist, kann es für die Klassifizierung von Daten verwendet werden. Einen interessanten Überblick liefert die so genannte „winner-map“. Auf ihr werden die Siegerneuronen für alle Eingabemuster gleichzeitig aktiviert. So können Gemeinsamkeiten von Eingabemustern als Klassen auf der Karte identifiziert werden.

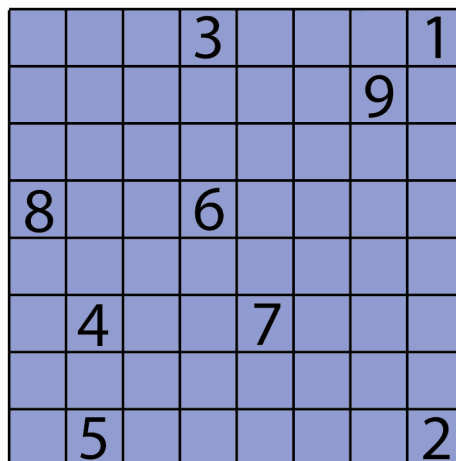


Abbildung 28. winner-map mit neun Klassen

Dargestellt ist eine *winner-map* einer Kohonenkarte, die mit neun Klassen trainiert wurde. Ähnliche Klassen werden nahe beieinander abgebildet (z.B. 1 und 9), sehr unterschiedliche Klassen nehmen einen grossen Abstand ein (z.B. 1 und 5 oder 8 und 2).

5.6.2 Counterpropagation Netzwerke

Ein Counterpropagation^[319] Netzwerk ist eine Erweiterung des Kohonen Netzwerkes. Es ist ein mehrschichtiges Netzwerk, das zusätzlich zu Eingabe- und Kohonenschicht aus einer Grossbergschicht besteht.

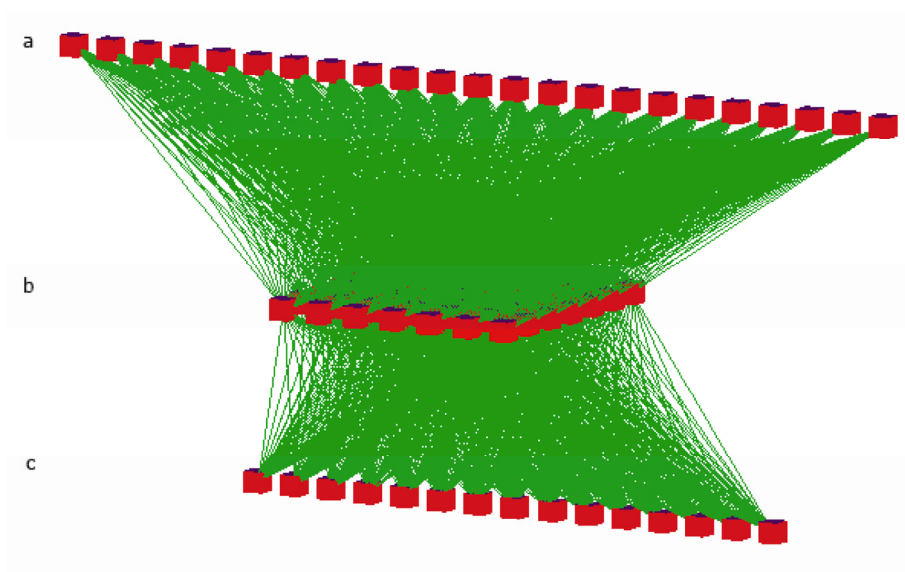


Abbildung 29. Counterpropagation Netzwerk mit (a) Eingabeschicht, (b) Kohonenschicht und (c) Grossbergschicht

Die Grossbergschicht ermöglicht es, die Ausgaben des Kohonen Netzwerkes in Klassen zu fassen. Ein Counterpropagation Netzwerk wird im Unterschied zum Kohonen Netzwerk durch ein überwachtes Lernverfahren trainiert. Dem Benutzer wird so nicht mehr die Kohonenkarte mit der räumlichen Repräsentation, sondern nur noch die Klassenzugehörigkeit des präsentierten Eingabemusters angezeigt.

5.6.3 Mehrschichtige Netzwerke mit Backpropagation Lernverfahren

Backpropagation ist heute das wohl am häufigsten verwendete überwachte Lernverfahren. Wie schon in der Einführung kurz beschrieben (vgl. Kap. 3.3.2.), summiert das Neuron alle empfangenen Eingaben und berechnet mit Hilfe einer Aktivierungsfunktion, welche Ausgabe an die Neuronen der nächsten Schicht weitergegeben wird. Die Neuronen sind in Schichten zusammengefasst und untereinander verknüpft. Bei einem vorwärtsgerichteten Netzwerk sind nur Verknüpfungen

zwischen Neuronen von aufeinander folgenden Schichten und nur in Richtung der Ausgabeschicht erlaubt.

Beim Erstellen eines mehrschichtigen Netzwerkes, das mit dem Backpropagation Lernverfahren trainiert werden soll, ist die Wahl der Anzahl und Grösse der versteckten Schicht(en) ein bestimmender Faktor, da die Grösse von Eingabe- und Ausgabeschicht durch das Problem selbst definiert ist. Es gibt für die Bestimmung der optimalen Netzwerkarchitektur einige Faustregeln, letztlich kann aber nur in einem iterativen „*trial and error*“-Prozess die beste Architektur bestimmt werden.

Das Ziel beim Training von mehrschichtigen Netzwerken mit dem Backpropagation Algorithmus ist es das Ausgabemuster aus den zugehörigen Eingabemustern korrekt voraussagen zu können. Dafür wird eine Trainingsdatenreihe mit Eingabemustern und zugehörigen gewünschten Ausgabemustern benötigt. Zu Beginn des Trainings wird dem Netzwerk mit zufällig initialisierten Gewichten ein Eingabemuster präsentiert. Dieses Eingabemuster wird durch alle Schichten des ganzen Netzwerkes propagiert und ein erstes Mal die Differenz zwischen dem produzierten und dem gewünschten Ausgabemuster berechnet.

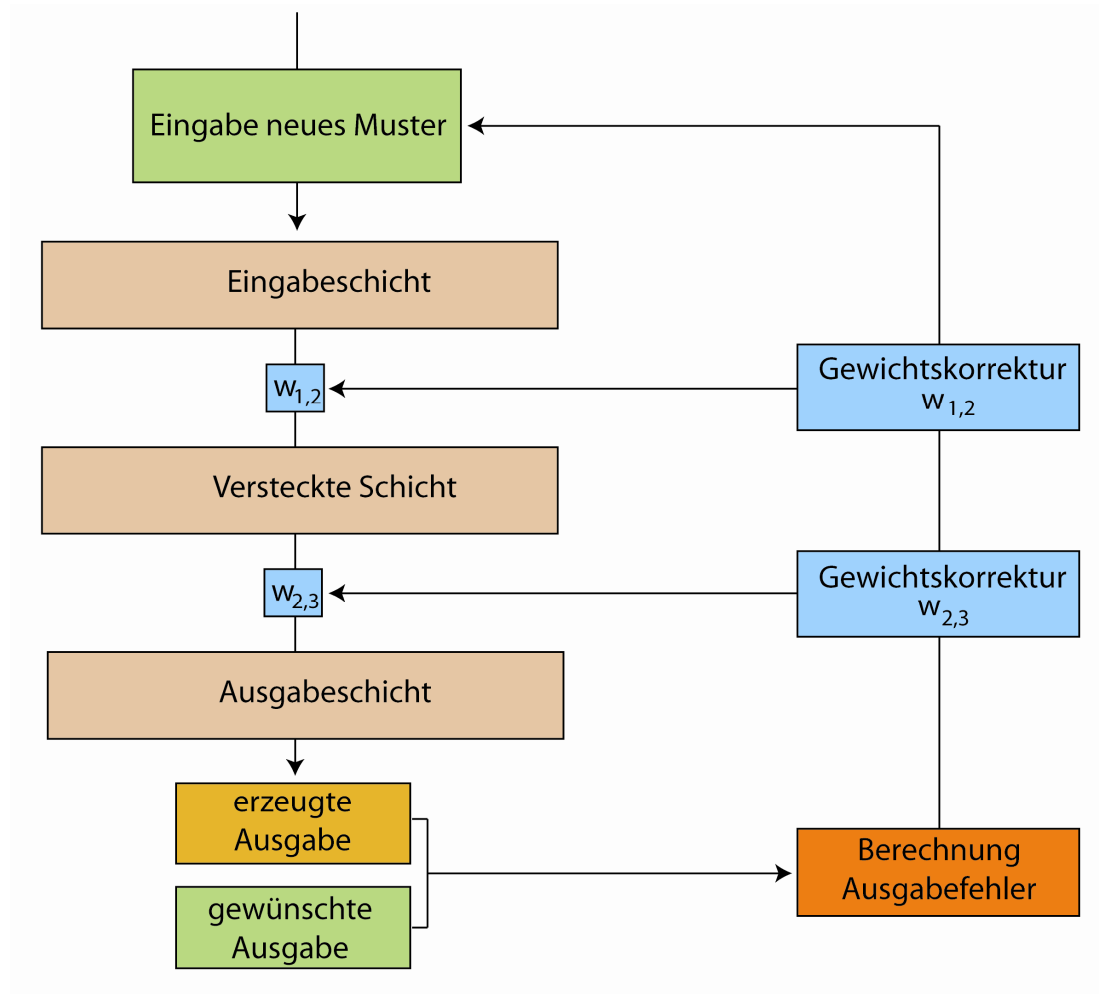


Abbildung 30. Fehlerkorrektur im Backpropagation Lernverfahren

Der Fehler der Voraussage kann für jede mögliche Einstellung aller Gewichte berechnet und auf einer mehrdimensionalen Ebene aufgetragen werden. Das Backpropagation Lernverfahren ist ein typisches Gradientenabstiegsverfahren. Gradientenverfahren berechnen die Steigung einer Funktion und versuchen durch die Verschiebung entlang des Gradienten (Veränderung der Gewichte) ein Minimum oder ein Maximum zu finden.

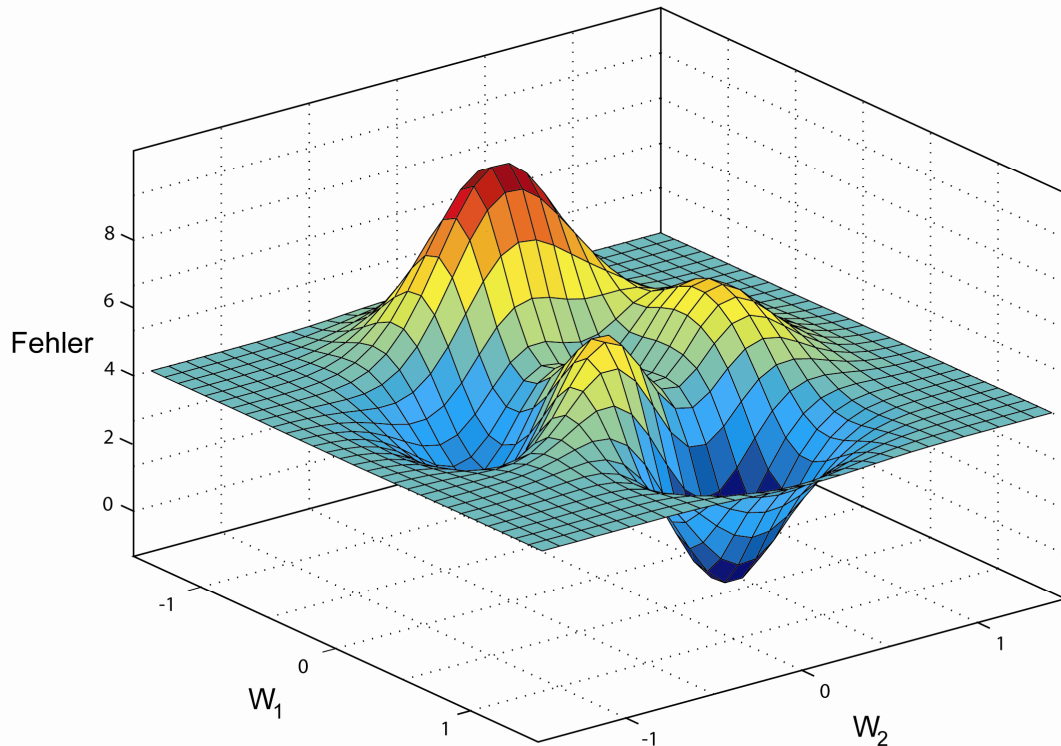


Abbildung 31. 3D Fehleroberfläche der Gewichte w_1 und w_2

Die Abbildung 31 zeigt eine dreidimensionale Oberfläche, die durch die Gewichte w_1 , w_2 , und den daraus resultierenden Gesamtfehler des Netzwerkes definiert ist. Jede mögliche Kombination der Gewichte w_1 und w_2 entspricht einem Punkt auf der Fehleroberfläche. Ziel des Trainingsprozesses ist es, den tiefsten Punkt auf dieser Oberfläche zu finden. Die Minimierung des Fehlers beginnt mit der Berechnung des Fehlergradienten für eine anfangs willkürlich gewählte Einstellung der Gewichte. Anhand des Gradienten wird entschieden, in welche Richtung die Gewichte korrigiert werden müssen, um den Fehler zu verringern. Schrittweise kann so das Minimum der Fehleroberfläche ermittelt werden. Gegenüber einer mehrdimensionalen Fehleroberfläche eines ganzen Netzwerkes mit oft mehreren tausend Gewichten ist dies eine starke Vereinfachung.

5.6.4 Probleme des Backpropagation Lernverfahrens

Lokale Minima (Abbildung 32a)

Gradientenverfahren haben oft das Problem, dass die Optimierung in einem lokalen Minimum stecken bleibt und das lokale Minimum durch den kleinen Gradienten nicht mehr verlassen werden kann. Bei neuronalen Netzwerken mit oft mehreren tausend Gewichten ist die Fehleroberfläche oft stark zerklüftet und durch viele lokale Minima charakterisiert.

Plateaus (Abbildung 32b)

Ein weiteres Problem von Gradientenabstiegsverfahren ist es, dass die Geschwindigkeit des Lernfortschrittes durch den Gradienten (d.h. die Steigung auf der Fehleroberfläche) bestimmt wird. So ist es zu erklären, dass der Lernfortschritt beim Training mit dem Backpropagation Algorithmus auf Plateaus der Fehleroberfläche oft fast vollständig zum Erliegen kommt und nur durch sehr viele Trainingsschritte ein Ausweg gefunden werden kann. Durch die Einführung des Momentum-Terms (Kapitel 5.6.4.3) kann dieses Problem gelöst werden.

Oszillation in engen Tälern (Abbildung 32c)

In engen Tälern mit grossen Steigungen kann es vorkommen, dass der Lernfortschritt durch Oszillieren ins Stocken gerät. Dies geschieht dann, wenn der Gradient auf einer Seite des Tales gerade so gross ist, dass der Lernprozess durch die Änderung des Gewichtes auf die gegenüberliegende Seite des Tales gelangt. Ist der Gradient hier genau gleich gross, wird der Lernprozess wieder zurückgeworfen und oszilliert. Durch das Hinzufügen des Momentum-Terms (Kapitel 5.6.4.3) kann das Problem gelöst werden.

Verfehlen eines guten Minimums (Abbildung 32d)

Die Lernrate bestimmt die Schrittlänge im Optimierungsprozess. Wird sie zu hoch gewählt, kann es geschehen, dass das globale Minimum verpasst wird und die Optimierung stattdessen nur ein lokales Minimum findet.

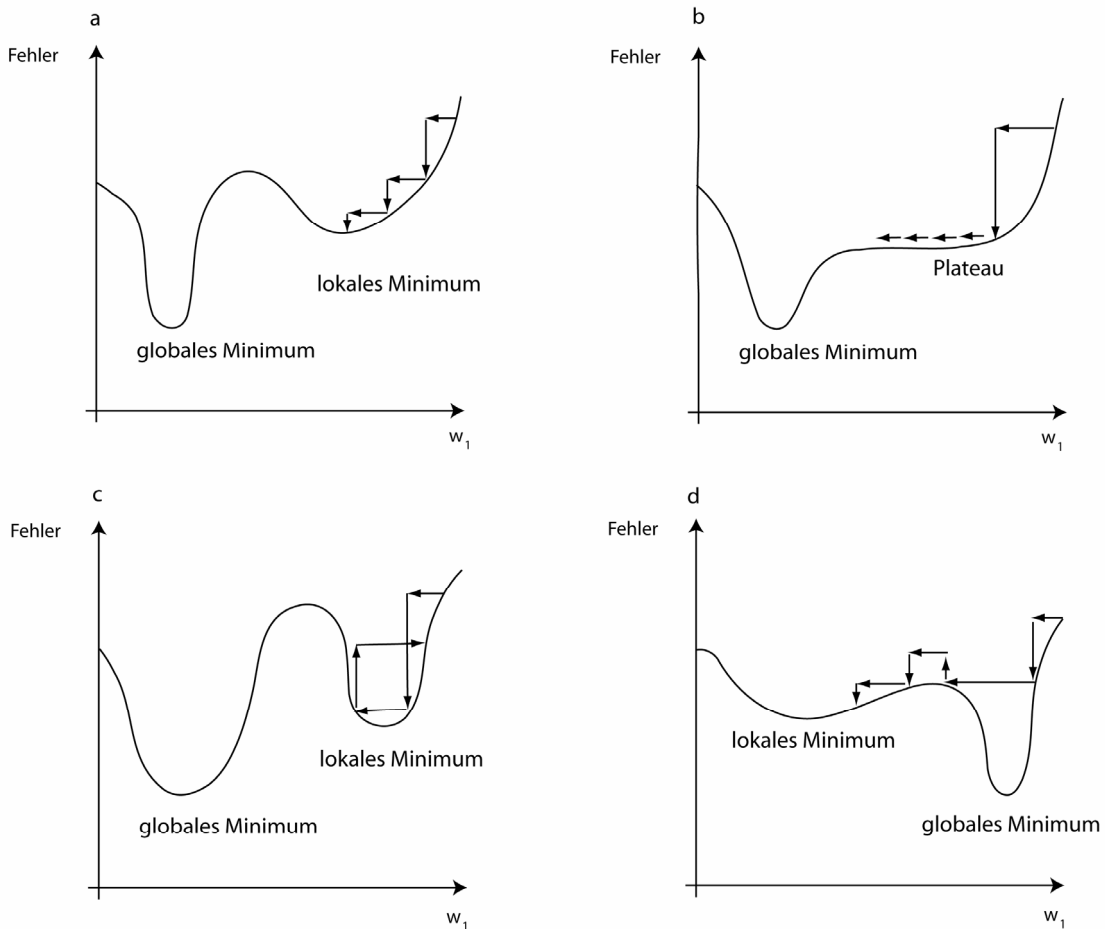


Abbildung 32. Probleme des Backpropagation Lernverfahrens: (a) Steckenbleiben in lokalem Minimum, (b) Plateau, (c) Oszillation in engen Tälern, (d) Verfehlen eines Minimums

5.6.4.1 Training mit dem Backpropagation Lernverfahren

Wie für alle überwachten Lernverfahren benötigt das Training von mehrschichtigen Netzwerken mit dem Backpropagation Lernverfahren eine Datenreihe bestehend aus Eingabemustern (x_i) und zugehörigen gewünschten Ausgaben (y_i). Die Gewichte werden so eingestellt, dass die gewünschte Ausgabe für so viele Eingabemuster wie möglich erzeugt wird. Die Korrektur der Gewichte wird nach jedem einzelnen Eingabemuster vorgenommen. Während des Trainings wird für jedes Eingabemuster (p) die erzeugte Ausgabe des Neurons j (y_{pj}) mit der gewünschten Ausgabe (t_{pj}) verglichen. Der Fehler (δ_{pj}) wird je nach Schicht unterschiedlich berechnet:

Der Fehler des Neurons j ergibt sich aus dem Vergleich von erzeugter und gewünschter Ausgabe (eq. 4), falls j ein Neuron der Ausgabeschicht ist.

$$\delta_{pj} = y_{pj}(1 - y_{pj})(t_{pj} - y_{pj}) \quad (\text{eq. 4})$$

Da die Fehlerkorrektur beim Backpropagation Lernverfahren rückwärts abläuft, wird bei Neuronen von versteckten Schichten (eq. 5) die Summe der gewichteten Fehlerkorrekturen ($\delta_{pk}w_{jk}$) der nachfolgenden Neuronen (k) in die Berechnung des Fehlers mit einbezogen.

$$\delta_{pj} = (1 - y_{pj}) \sum_k \delta_{pk} w_{jk} \quad (\text{eq. 5})$$

Sobald der Fehler der Voraussage errechnet ist, werden die Gewichte so verändert, dass der Fehler verkleinert wird. Die notwendige Änderung (Δ) des Gewichtes (w_{ij}) für das Muster (p) für die Verknüpfung zwischen dem betrachteten Neuron j und seinem Vorgängerneuron i wird berechnet mit:

$$\Delta_p w_{ij} = \eta y_{pi} \delta_{pj} \quad (\text{eq. 6})$$

Wobei η die Lernrate (Kapitel 5.6.4.2), y_{pi} die Ausgabe des Vorgängerneurons (i) für das Muster (p) und δ_{pj} der Fehler des Neurons j sind.

5.6.4.2 Lernrate

Die Lernrate (η) bestimmt die Schrittlänge, mit der das Minimum der Fehlerebene gesucht wird. Es werden typischerweise Werte zwischen 0 und 1 gewählt. Die optimale Lernrate ist bei jedem Problem neu zu bestimmen. Wird sie zu klein gewählt, findet kein oder nur sehr langsam ein Lernfortschritt statt und der Trainingsprozess dauert sehr lange. Wird sie zu gross gewählt, besteht das Risiko, dass durch die zu grosse Schrittlänge ein gutes Minimum übersprungen werden kann oder das Netzwerk zu oszillieren beginnt (Kapitel 5.6.4). Oft wird die Lernrate so gewählt, dass sie gegen Ende des Trainings immer kleiner wird, um durch sehr kleine Schrittlängen das Minimum der Talsohle möglichst genau zu treffen. Dies kann aber zu Folge haben, dass statt des globalen Minimums nur ein lokales Minimum gefunden wird.

5.6.4.3 Momentum-Term

Die Einführung eines Momentum-Terms ist eine einfache und häufig genutzte Methode zur Vermeidung der Probleme des Backpropagation Lernverfahrens auf Plateaus und in engen Tälern (Kapitel 5.6.4). Die Methode beruht auf der Einführung des Terms $\alpha \Delta_p w_{ij}(t)$ der bewirkt, dass die letzte Gewichtsänderung zum Zeitpunkt (t) in die Berechnung der nächsten Gewichtsänderung zum Zeitpunkt ($t + 1$) mit einbezogen wird.

$$\Delta_p w_{ij}(t+1) = \eta y_{pi} \delta_{pj} + \alpha \Delta_p w_{ij}(t) \quad (\text{eq. 7})$$

Dadurch wird auf Plateaus eine Beschleunigung und in engen Tälern ein Abbremsen bewirkt. Die Variable (α) hat dabei üblicherweise Werte zwischen 0.2 und 0.99, wobei als Faustregel meist Werte zwischen 0.6 und 0.99 verwendet werden.

5.6.4.4 Fehlerfunktionen

Mit Hilfe der Fehlerfunktion bestimmt das Lernverfahren seine momentane Position auf der Fehlerebene und mit dem Gradienten der Fehlerfunktion in welche Richtung die Gewichte korrigiert werden müssen, um einen minimalen Fehler der Voraussage zu erreichen. Gängige Fehlerfunktionen sind z.B. die „Summe der Fehlerquadrate“ (*sum-squared error*, SSE) oder der „Mittelwert der Fehlerquadrate“ (*mean-squared error*, MSE).

Der SSE ist die „Summe aller Fehlerquadrate“ für jedes Trainingsbeispiel (p) aller Neuronen der Ausgabeschicht (i). Das „Fehlerquadrat“ selbst, berechnet sich auch der Differenz zwischen gewünschter Ausgabe (t_{pi}) und produzierter Ausgabe (y_{pi})^[320].

$$SSE = \sum_{p=1}^m \sum_{i=1}^n (t_{pi} - y_{pi})^2 \quad (\text{eq. 8})$$

Der „Mittelwert der Fehlerquadrate“ wird berechnet aus dem berechneten Wert für SSE, geteilt durch die Anzahl der Trainingsbeispiele (m)^[320].

$$MSE = \frac{1}{m} \cdot SSE = \frac{1}{m} \cdot \sum_{p=1}^m \sum_{i=1}^n (t_{pi} - y_{pi})^2 \quad (\text{eq. 9})$$

5.7 Datenverarbeitung

5.7.1 Standardisierung der Daten

Die meisten Peaklisten der ¹³C-NMR Spektren, die für das Training verwendet wurden, stammen nicht aus eigenen Messungen, sondern aus 175 verschiedenen Literaturquellen^[18, 22, 26, 29-31, 40, 44, 67, 98, 105, 120, 122-262]. Damit die Daten untereinander verglichen werden können, wurden die chemischen Verschiebungen mit den verwendeten externen Standards geeicht^[119].

Tabelle 12. Häufig verwendete externe Standards für ¹³C-NMR in D₂O

Externer Standard	δ in [ppm]
1,4-Dioxan	67.19
Methanol	49.50
Aceton	30.89

Publikationen, in denen keine Angaben über die Lage des verwendeten externen Standards gefunden wurden, wurden durch Vergleich mit den standardisierten Referenzen überprüft. Bei zu grosser Abweichung wurden die Spektren nicht für das Training verwendet.

5.7.2 Berechnen von Mittelwerten und Standardabweichungen

Alle Daten wurden entsprechend der Zuckerart, dem Substitutionsmuster und der Konfiguration am anomeren C-Atom in Gruppen aufgeteilt und die chemischen Verschiebungen der Grösse nach geordnet. Ein Datensatz besteht aus der Gruppenbezeichnung und den 6–11 dazugehörigen chemischen Verschiebungen. Im Beispiel wird die Gruppeneinteilung eines Disaccharides dargestellt (Abbildung 33). Das Disaccharid wird eingeteilt in einen Datensatz pro Monosaccharid-Einheit. Substitutionsstellen werden mit R angegeben (1R, 2R, 3R, 4R und 6R). Ist das Monosaccharid an mehr als einer Stelle substituiert, werden die Substitutionsstellen durch ein Semikolon getrennt angegeben (1R;2R, 1R;3R, 1R;4R und 1R;6R). Da sich die chemische Verschiebung von C1 am reduzierenden Ende bei einer Substitution mit einem Zucker oder mit Methylgruppe ähnlich verändert, wird die Methylgruppe wie ein Substituent behandelt. D- und L- Formen eines Zuckers lassen sich im ^{13}C -NMR nicht unterscheiden, sie werden deshalb in der gleichen Gruppe zusammengefasst (D/L).

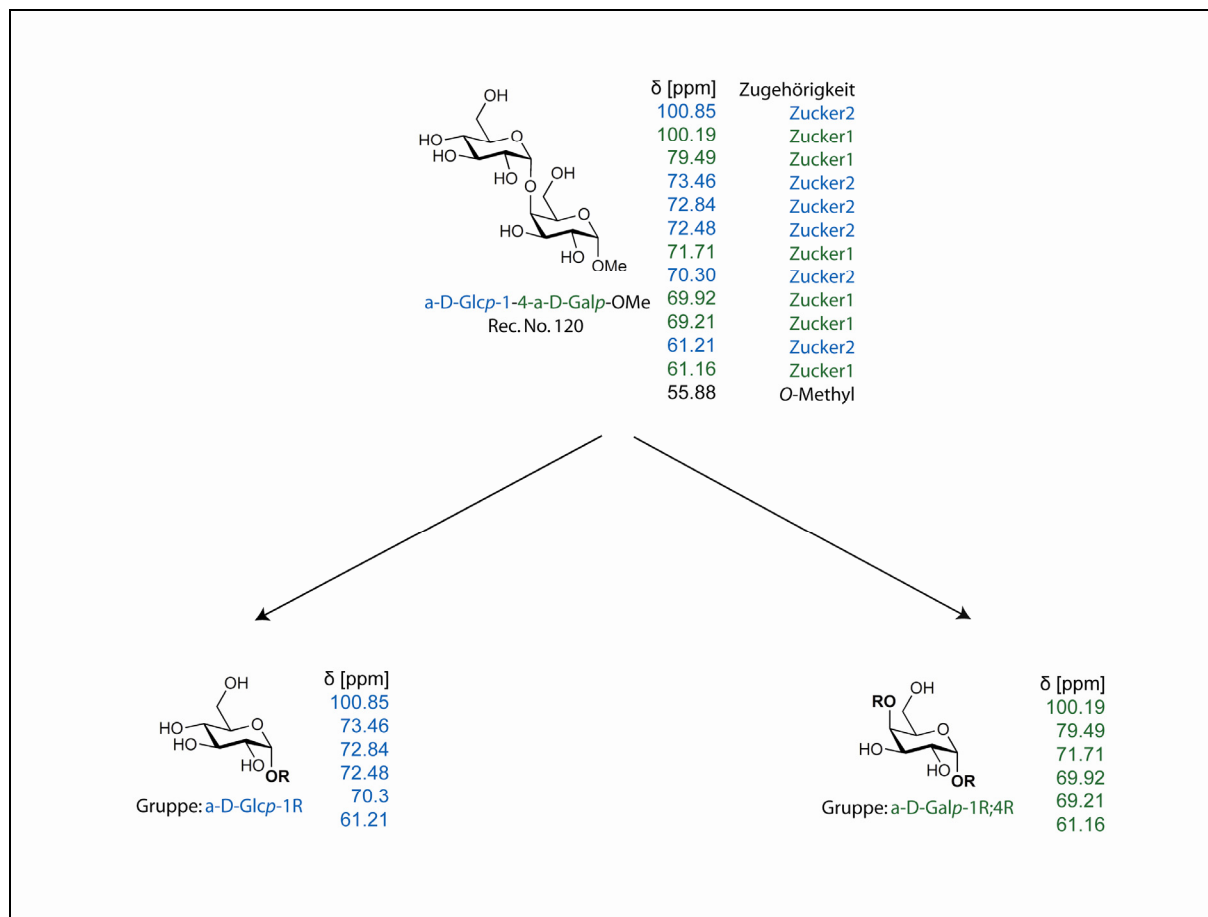


Abbildung 33. Gruppeneinteilung von α -D-Glcp-1-4- α -D-Galp-OMe

Alle Datensätze jeder Gruppe wurden mit Hilfe von Excel-Graphiken miteinander verglichen. Dabei wurden Ausreisser, deren chemische Verschiebungen sich deutlich, d.h. um mehrere ppm von den anderen Vertretern der Gruppe unterschieden, manuell entfernt und nicht mehr weiter für die Berechnung von Mittelwerten und Standardabweichungen verwendet. Diese Vorgehensweise lässt sich dadurch rechtfertigen, dass in den Literaturdatensätzen aus 175 verschiedenen Publikationen erstaunlich oft offensichtliche Fehler vorhanden waren (z.B. falsche Angabe der Konfiguration des anomeren C-Atoms oder falscher Substitutionsort). Diese offensichtlich falschen Werte konnten mit der Hilfe der Excel-Graphiken sehr leicht identifiziert und entfernt werden. Aus allen überprüften Datensätzen einer Gruppe wurden Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) der Peaks berechnet.

$$\sigma_{n-1} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{(n-1)}} \quad (\text{eq. 10})$$

Glucose

Tabelle 13. Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) Glucose-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
1	α -D-Glcp1R	\bar{x}	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38
		σ_{n-1}	± 0.59	± 0.24	± 0.29	± 0.20	± 0.21	± 0.18
2	α -D-Glcp-OH	\bar{x}	92.77	73.55	72.24	72.15	70.49	61.58
		σ_{n-1}	± 0.03	± 0.06	± 0.05	± 0.02	± 0.04	± 0.12
3	α -D-Glcp-OH-2R	\bar{x}	92.38	81.36	72.44	71.75	70.30	61.53
		σ_{n-1}	± 0.29	± 0.30	± 0.31	± 0.30	± 0.35	± 0.44
4	α -D-Glcp-OH-3R	\bar{x}	92.14	83.14	71.49	71.09	68.64	61.54
		σ_{n-1}	± 0.40	± 0.17	0.00	± 0.12	± 0.06	± 0.06
5	α -D-Glcp-OH-4R	\bar{x}	92.60	79.27	72.42	72.02	70.90	60.96
		σ_{n-1}	± 0.31	± 0.62	± 0.78	± 0.35	± 0.34	± 0.55
6	α -D-Glcp-OH-6R	\bar{x}	92.81	73.78	72.30	70.70	70.33	67.61
		σ_{n-1}	± 0.35	± 0.37	± 0.36	± 0.39	± 0.39	± 1.38
7	α -D-Glcp1R;2R	\bar{x}	99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54
		σ_{n-1}	± 0.76	± 1.01	± 0.20	± 0.12	± 0.37	± 0.30
8	α -D-Glcp1R;3R	\bar{x}	100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38
		σ_{n-1}	± 0.11	± 1.15	± 0.15	± 0.72	± 0.93	± 0.10

5. Material und Methoden

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
9	α -D-Glcp1R;4R	x	99.59	78.30	73.14	71.71	70.85	60.93
		σ_{n-1}	± 0.31	± 1.11	± 0.84	± 0.46	± 0.52	± 0.34
10	α -D-Glcp1R;6R	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29
		σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24
11	β -D-Glcp1R	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.60
		σ_{n-1}	± 0.60	± 0.14	± 0.23	± 0.12	± 0.10	± 0.10
12	β -D-GlcpN-1R	x	102.57	77.05	76.29	70.39	61.29	56.95
		σ_{n-1}	± 1.26	± 0.15	± 0.19	± 0.19	± 0.40	± 0.38
13	β -D-GlcpN-OH-4R	x	93.19	77.29	75.19	70.99	60.89	57.29
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	β -D-GlcpN-1R;3R	x	104.29	86.49	76.19	68.79	61.39	56.19
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	β -D-Glcp-OH	x	96.66	76.62	76.60	75.02	70.53	61.69
		σ_{n-1}	± 0.10	± 0.15	± 0.16	± 0.14	± 0.14	± 0.17
16	β -D-Glcp-OH-2R	x	96.99	79.39	76.59	75.29	70.59	61.49
		σ_{n-1}	± 0.18	± 0.18	± 0.18	± 0.18	± 0.18	± 0.18
17	β -D-Glcp-OH-3R	x	96.43	85.83	76.38	73.83	68.79	61.58
		σ_{n-1}	± 0.23	± 0.36	± 0.27	± 0.48	± 0.27	± 0.29
18	β -D-Glcp-OH-4R	x	96.49	79.36	75.61	75.10	74.68	60.86
		σ_{n-1}	± 0.11	± 0.29	± 0.21	± 0.14	± 0.13	± 0.18
19	β -D-Glcp-OH-6R	x	96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23
		σ_{n-1}	± 0.43	± 0.36	± 0.45	± 0.26	± 0.37	± 1.39
20	β -D-Glcp1R;2R	x	104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81
		σ_{n-1}	± 0.91	± 1.22	± 0.32	± 0.60	± 0.14	± 0.34
21	β -D-Glcp1R;3R	x	103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54
		σ_{n-1}	± 0.18	± 0.34	± 0.04	± 0.45	± 0.10	± 0.10
22	β -D-Glcp1R;4R	x	103.52	78.53	75.44	74.80	73.19	60.70
		σ_{n-1}	± 0.48	± 0.57	± 0.94	± 0.51	± 0.53	± 0.68
23	β -D-Glcp1R;6R	x	104.16	76.60	75.70	73.81	70.21	69.30
		σ_{n-1}	± 0.20	± 0.31	± 0.15	± 0.19	± 0.20	± 0.18

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 12.1.1.1) zu finden.

5. Material und Methoden

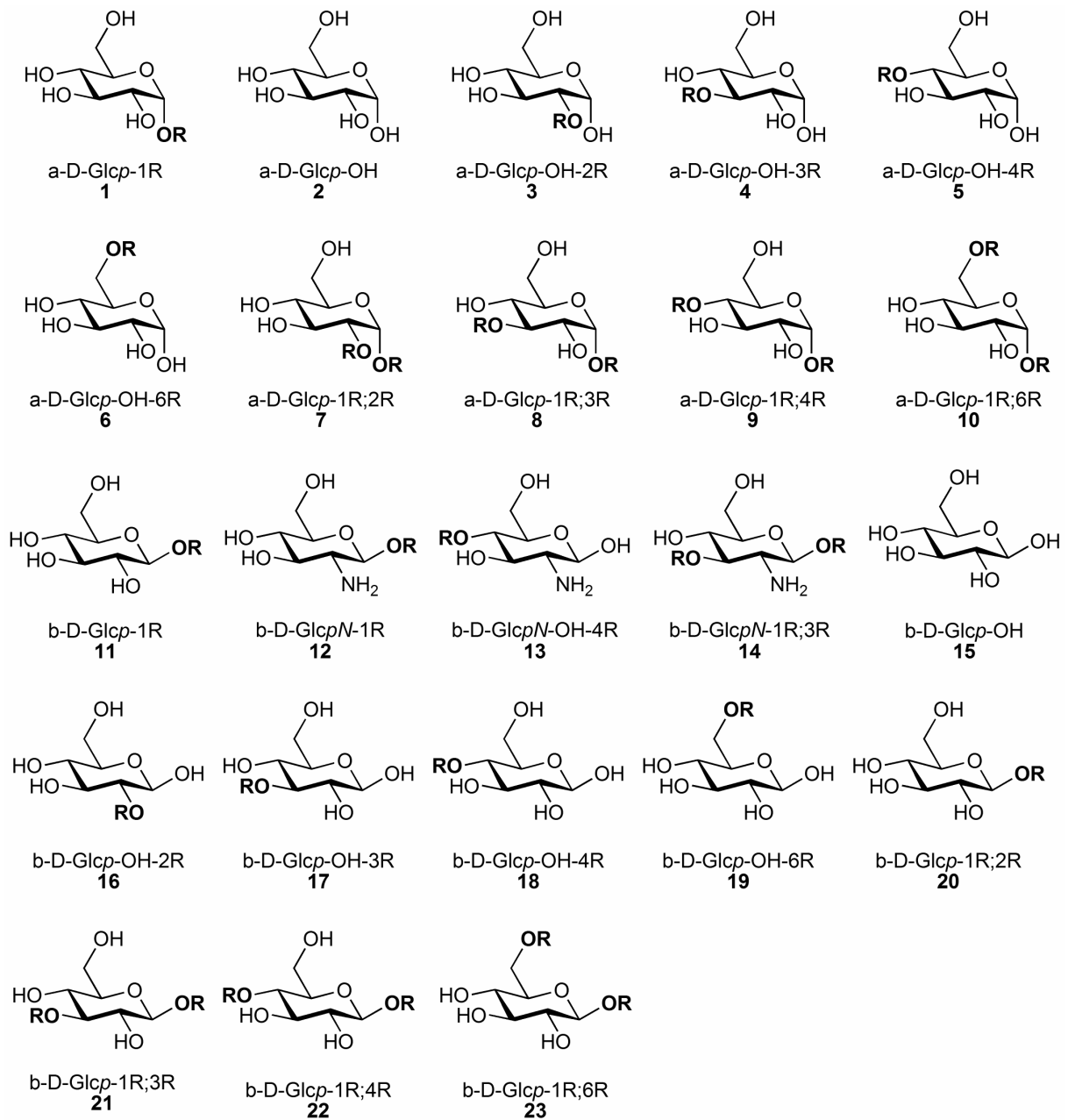


Abbildung 34. Glucose-Gruppen

5. Material und Methoden

Galactose:

Tabelle 14. Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) Galactose-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$
1	α -D-Galp-1R	x	99.99	71.69	70.09	69.90	69.12	61.75
		σ_{n-1}	± 0.96	± 0.37	± 0.18	± 0.16	± 0.18	± 0.26
2	α -D-Galp-OH	x	93.29	71.40	70.35	70.24	69.47	62.17
		σ_{n-1}	± 0.45	± 0.43	± 0.40	± 0.45	± 0.47	± 0.47
3	α -D-Galp-OH-3R	x	93.14	78.12	71.30	69.47	68.60	61.89
		σ_{n-1}	± 0.42	± 0.80	± 0.56	± 0.98	± 1.13	± 0.36
4	α -D-Galp-OH-4R	x	93.69	78.29	72.69	70.39	69.79	62.19
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	α -D-Galp-OH-6R	x	92.91	69.94	69.71	69.61	69.21	68.58
		σ_{n-1}	± 0.52	± 0.57	± 0.37	± 0.42	± 0.16	± 0.28
6	α -D-Galp-1R;2R	x	98.41	75.96	71.79	70.92	69.51	61.75
		σ_{n-1}	± 1.58	± 2.63	± 0.98	± 1.27	± 0.55	± 0.06
7	α -D-Galp-1R;3R	x	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.70
		σ_{n-1}	± 0.13	± 0.07	± 0.14	± 0.20	± 0.20	± 0.06
8	α -D-Galp-1R;4R	x	100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35
		σ_{n-1}	± 0.02	± 0.33	± 0.53	± 0.43	± 0.11	± 0.22
9	α -D-Galp-1R;6R	x	100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24
		σ_{n-1}	± 0.07	± 0.05	± 0.11	± 0.32	± 0.34	± 0.73
10	β -D/L-Galp-1R	x	104.07	75.89	73.36	71.72	69.32	61.65
		σ_{n-1}	± 0.76	± 0.47	± 0.44	± 0.49	± 0.51	± 0.45
11	β -D-Galp-OH	x	97.43	76.01	73.89	73.03	69.79	61.97
		σ_{n-1}	± 0.38	± 0.41	± 0.45	± 0.39	± 0.44	± 0.47
12	β -D-Galp-OH-3R	x	97.23	81.64	75.99	71.94	68.50	61.84
		σ_{n-1}	± 0.42	± 0.98	± 0.51	± 0.68	± 1.12	± 0.37
13	β -D-Galp-OH-4R	x	97.74	80.04	76.14	72.19	70.99	61.59
		σ_{n-1}	± 0.07	± 2.33	± 0.07	± 0.99	± 2.68	± 0.57
14	β -D-Galp-OH-6R	x	97.08	74.11	73.31	72.44	69.34	68.04
		σ_{n-1}	± 0.58	± 0.34	± 0.62	± 0.57	± 0.47	± 0.58
15	β -D-Galp-1R;2R	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44
		σ_{n-1}	± 0.14	± 0.21	0.00	± 0.14	± 0.07	± 0.07

5. Material und Methoden

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
16	β -D-Galp-1R;3R	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31
		σ_{n-1}	± 0.04	± 3.40	± 0.08	± 1.51	± 0.76	± 0.37
17	β -D-Galp-1R;4R	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39
		σ_{n-1}	± 0.45	± 0.13	± 0.06	± 0.07	± 0.11	± 0.32
18	β -D-Galp-1R;6R	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29
		σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 12.1.1.2) zu finden.

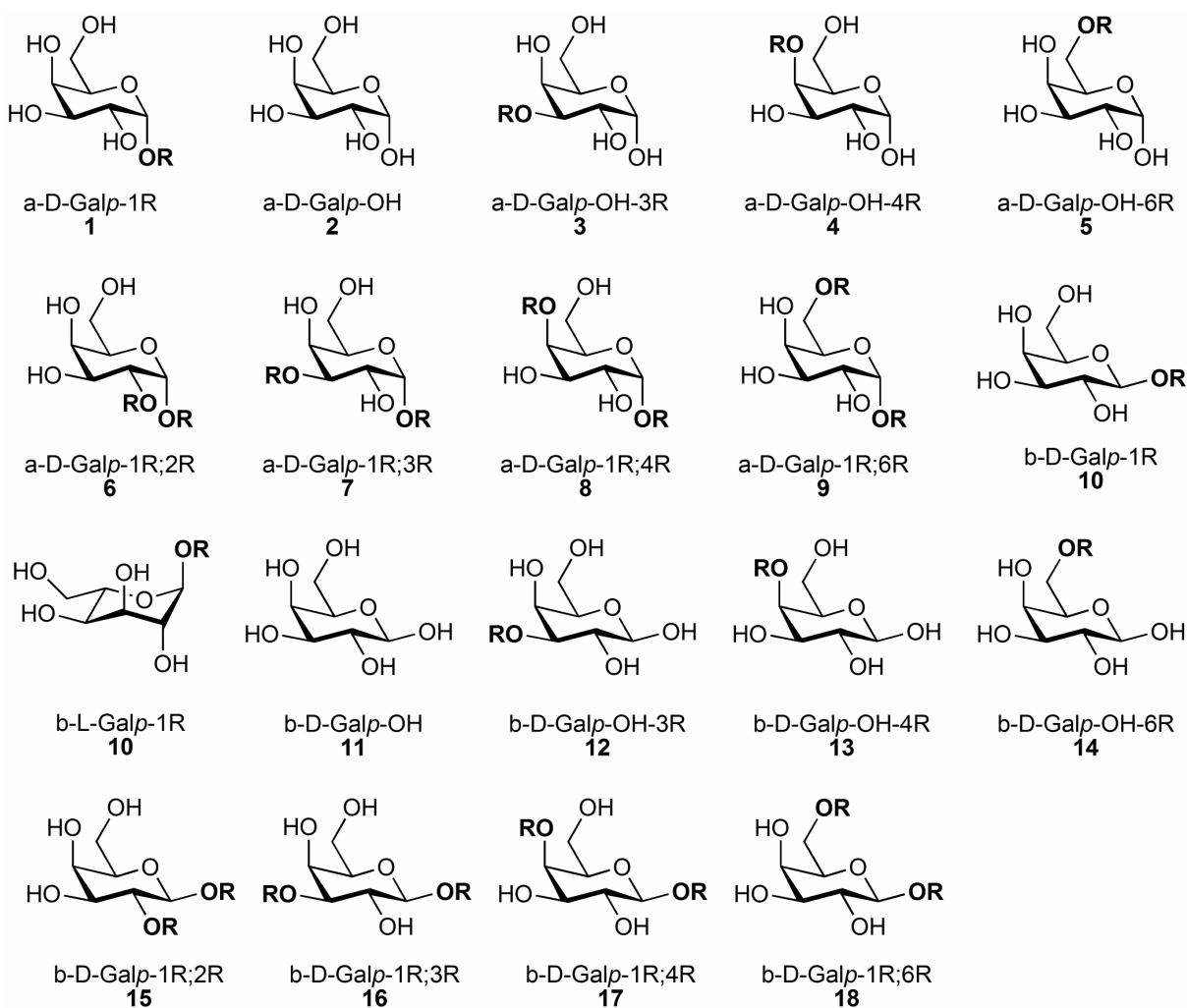


Abbildung 35. Galactose-Gruppen

5. Material und Methoden

Mannose

Tabelle 15. Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) Mannose-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$
1	α -D-Manp-1R	\bar{x}	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.80		
		σ_{n-1}	± 1.06	± 0.43	± 0.27	± 0.32	± 0.27	± 0.29		
2	α -D-Manp-OH	\bar{x}	94.92	73.32	71.64	71.20	67.90	61.97		
		σ_{n-1}	± 0.23	± 0.23	± 0.21	± 0.19	± 0.20	± 0.22		
3	α -D-Manp-OH-2R	\bar{x}	92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54		
		σ_{n-1}	± 0.21	± 0.71	± 0.07	± 0.20	± 0.47	± 0.65		
4	α -D-Manp-OH-4R	\bar{x}	94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65		
		σ_{n-1}	± 0.42	± 0.37	± 0.46	± 0.48	± 0.43	± 0.49		
5	α -D-Manp-OH-6R	\bar{x}	95.19	73.39	71.79	71.49	70.29	67.99		
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
6	α -D-Manp-1R;2R	\bar{x}	99.82	79.20	73.51	70.93	67.92	61.90		
		σ_{n-1}	± 0.60	± 0.57	± 0.35	± 0.33	± 0.20	± 0.30		
7	α -D-Manp-1R;3R	\bar{x}	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
		σ_{n-1}	± 0.28	± 0.53	± 0.52	± 0.45	± 0.38	± 0.42		
8	α -D-Manp-1R;4R	\bar{x}	101.76	74.76	71.63	71.63	70.93	61.53		
		σ_{n-1}	± 0.29	± 0.46	± 0.41	± 0.41	± 0.41	± 0.41		
9	α -D-Manp-1R;6R	\bar{x}	101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59		
		σ_{n-1}	± 0.69	± 0.21	± 0.46	± 0.38	± 0.79	± 0.25		
10	β -D-Manp-1R	\bar{x}	101.30	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92		
		σ_{n-1}	± 0.41	± 0.36	± 0.37	± 0.39	± 0.37	± 0.30		
11	β -D-ManpNAc-1R	\bar{x}	174.54	99.44	75.34	73.44	72.94	60.74	53.64	22.24
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	β -D-Manp-OH	\bar{x}	94.47	77.00	73.96	72.11	67.64	61.94		
		σ_{n-1}	± 0.15	± 0.24	± 0.16	± 0.22	± 0.18	± 0.18		
13	β -D-Manp-OH-2R	\bar{x}	94.11	81.41	76.97	73.42	67.72	61.64		
		σ_{n-1}	± 0.74	± 0.35	± 0.08	± 0.52	± 0.23	± 0.14		
14	β -D-Manp-OH-4R	\bar{x}	94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73		
		σ_{n-1}	± 0.42	± 0.48	± 0.48	± 0.50	± 0.32	± 0.55		

5. Material und Methoden

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
15	β -D-Manp-OH-6R	x	94.89	76.19	74.19	72.29	70.29	67.79		
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
16	β -D-Manp-1R;2R	x	101.53	78.61	77.00	72.66	68.01	61.52		
		σ_{n-1}	± 0.46	± 0.36	± 0.24	± 0.40	± 0.34	± 0.34		
17	β -D-Manp-1R;4R	x	101.70	77.50	75.80	72.50	70.60	61.20		
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 12.1.1.3) zu finden.

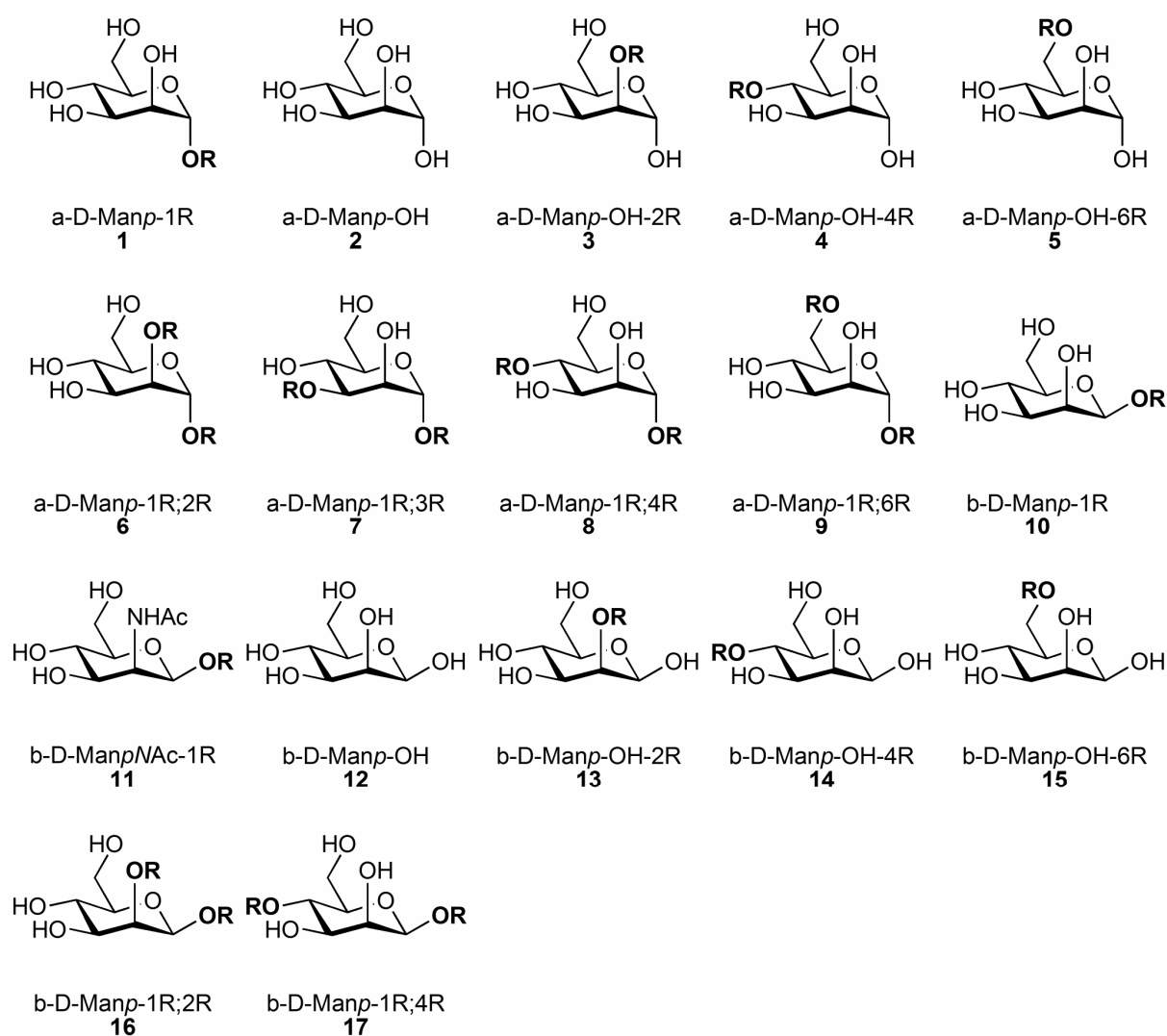
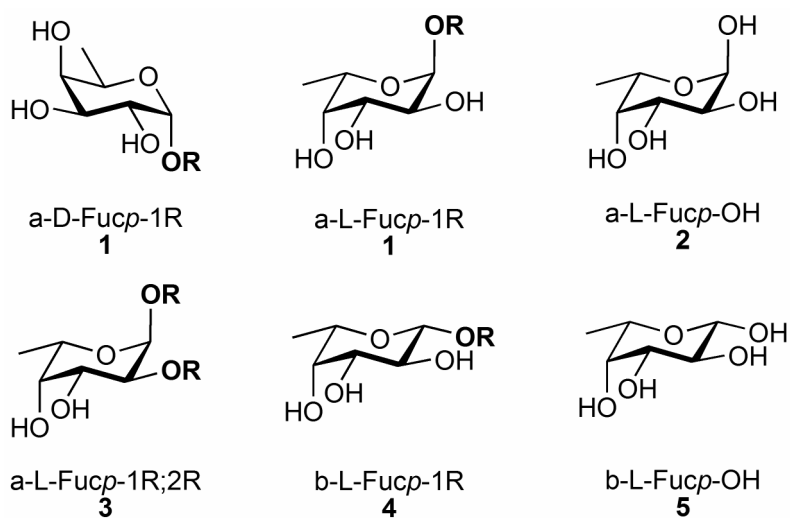


Abbildung 36. Mannose-Gruppen

Fucose:**Tabelle 16.** Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) Fucose-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
1	α -L/D-Fucp-1R	\bar{x}	99.86	72.56	70.17	68.87	67.50	15.96
		σ_{n-1}	± 0.91	± 0.28	± 0.38	± 0.40	± 0.40	± 0.29
2	α -L-Fucp-OH	\bar{x}	92.91	72.58	70.08	68.88	66.89	16.12
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	α -L-Fucp-1R;2R	\bar{x}	97.63	73.93	72.59	68.81	66.92	15.91
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	β -L-Fucp-1R	\bar{x}	103.12	73.43	71.91	71.57	71.19	15.88
		σ_{n-1}	± 0.52	± 0.25	± 0.26	± 0.15	± 0.36	± 0.21
5	β -L-FucpOH	\bar{x}	97.12	73.86	72.66	72.32	71.67	16.41
		σ_{n-1}	± 0.25	± 0.20	± 0.20	± 0.25	± 0.33	± 0.41

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 12.1.1.4) zu finden.

**Abbildung 37.** Fucose-Gruppen

Xylose**Tabelle 17.** Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) Xylose-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5
1	α -D-Xylf-1R	\bar{x}	102.44	78.64	77.84	75.24	60.74
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	α -D-Xylp-1R	\bar{x}	99.88	74.01	72.52	70.50	62.40
		σ_{n-1}	± 1.03	± 0.20	± 0.19	± 0.23	± 0.21
3	α -D-Xylp-OH	\bar{x}	93.30	73.90	72.50	70.40	62.10
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	α -D-Xylp-OH-2R	\bar{x}	92.89	81.69	72.79	70.19	61.49
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	α -D-Xylp-OH-3R	\bar{x}	93.09	82.69	71.89	68.69	61.89
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	α -D-Xylp-OH-4R	\bar{x}	92.47	77.27	71.95	71.53	59.63
		σ_{n-1}	± 0.27	± 0.48	± 0.15	± 0.19	± 0.26
7	β -D/L-Xylp-1R	\bar{x}	103.11	76.29	73.59	69.89	65.91
		σ_{n-1}	± 1.00	± 0.24	± 0.33	± 0.25	± 0.23
8	β -D-Xylp-OH	\bar{x}	97.60	76.90	75.10	70.30	66.30
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	β -D-Xylp-OH-2R	\bar{x}	97.99	79.19	75.39	69.79	65.99
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	β -D-Xylp-OH-3R	\bar{x}	97.39	85.09	74.69	68.69	65.29
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	β -D-Xylp-OH-4R	\bar{x}	97.17	77.05	74.63	74.57	63.57
		σ_{n-1}	± 0.18	± 0.09	± 0.17	± 0.08	± 0.11
12	β -D-Xylp-1R;2R	\bar{x}	105.19	78.29	75.29	70.49	65.89
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	β -D-Xylp-1R;3R	\bar{x}	105.09	82.69	72.49	70.39	65.99
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	β -D-Xylp-1R;4R	\bar{x}	104.88	77.32	74.78	73.80	63.91
		σ_{n-1}	± 0.13	± 0.43	± 0.06	± 0.15	± 0.11

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 12.1.1.5) zu finden.

5. Material und Methoden

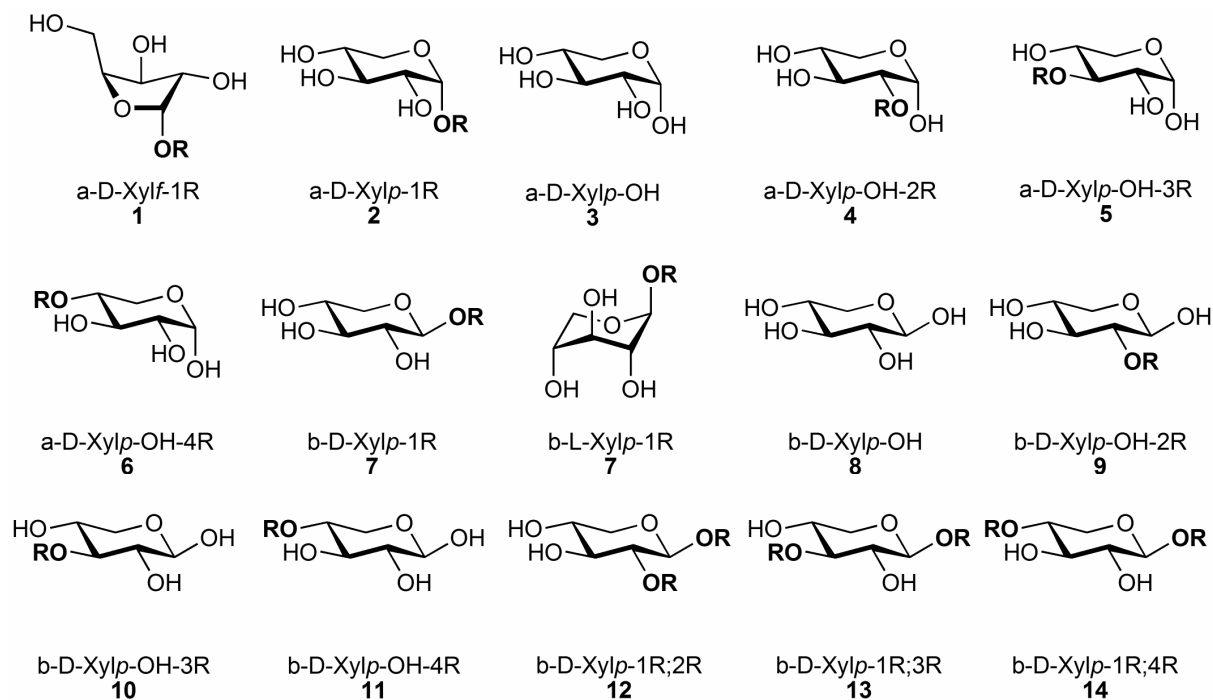


Abbildung 38. Xylose-Gruppen

Glucuronsäure

Tabelle 18. Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) Glucuronsäure-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
1	β -D-GlcpA-1R	\bar{x}	176.31	103.91	76.75	76.17	73.69	72.56
		σ_{n-1}	± 0.25	± 0.53	± 0.54	± 0.30	± 0.49	± 0.34
2	β -D-GlcpA-1R;2R	\bar{x}	173.89	104.49	77.59	77.29	75.69	72.79
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	β -D-GlcpA-1R;4R	\bar{x}	175.24	103.48	81.02	76.90	74.86	73.47
		σ_{n-1}	± 0.72	± 0.40	± 0.53	± 0.29	± 0.70	± 0.44

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 11.5.6) zu finden.

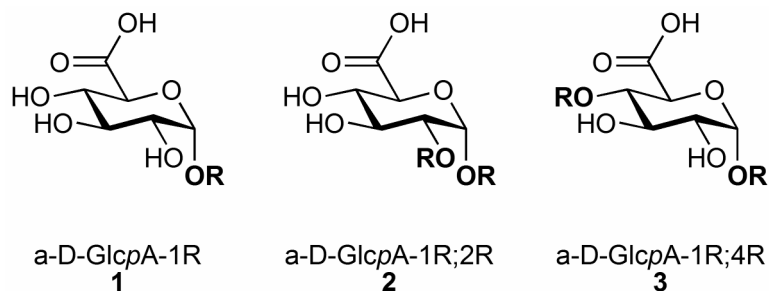
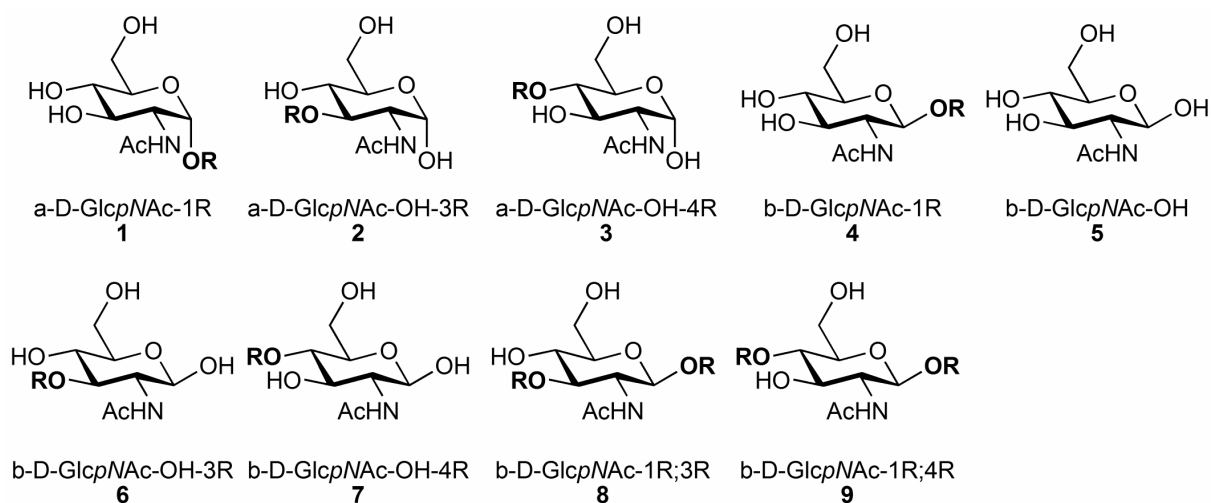


Abbildung 39. Glucuronsäure-Gruppen

N-Acetyl Glucosamin**Tabelle 19.** Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) N-Acetyl Glucosamin-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$
1	α -D-GlcpNAc-1R	\bar{x}	175.22	98.49	72.49	71.31	70.91	60.65	54.51	22.80
		σ_{n-1}	0.00	± 0.19	0.00	± 0.08	± 0.11	± 0.05	± 0.04	0.00
2	α -D-GlcpNAc-OH-3R	\bar{x}	175.19	91.72	80.59	72.05	69.59	61.22	53.50	22.64
		σ_{n-1}	0.00	± 0.08	± 0.56	± 0.22	± 0.61	± 0.07	± 0.10	0.00
3	α -D-GlcpNAc-OH-4R	\bar{x}	175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
		σ_{n-1}	0.00	± 0.29	± 0.65	± 0.31	± 0.23	± 0.20	± 0.43	0.00
4	β -D-GlcpNAc-1R	\bar{x}	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.80
		σ_{n-1}	± 0.29	± 0.80	± 0.60	± 0.36	± 0.43	± 0.44	± 0.70	± 0.34
5	β -D-GlcpNAc-OH	\bar{x}	175.28	95.64	76.61	74.60	70.85	61.64	57.65	22.89
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	β -D-GlcpNAc-OH-3R	\bar{x}	175.46	95.44	83.01	76.24	69.61	61.40	56.12	22.88
		σ_{n-1}	0.00	± 0.14	± 0.60	± 0.22	± 0.60	± 0.09	± 0.12	0.00
7	β -D-GlcpNAc-OH-4R	\bar{x}	175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.80
		σ_{n-1}	0.00	± 0.14	± 0.56	± 0.36	± 0.81	± 0.13	± 0.17	0.00
8	β -D-GlcpNAc-1R;3R	\bar{x}	175.19	102.30	83.45	76.13	69.57	61.60	57.59	22.94
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	β -D-GlcpNAc-1R;4R	\bar{x}	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
		σ_{n-1}	± 0.04	± 0.06	± 0.28	± 0.06	± 0.06	± 0.11	± 0.04	± 0.08

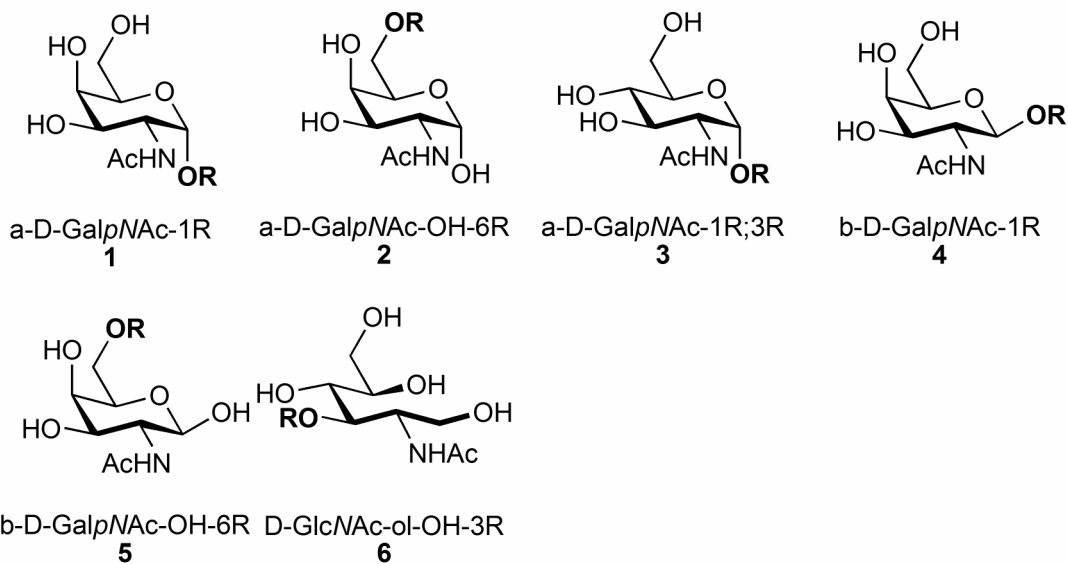
Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 11.5.7) zu finden.

**Abbildung 40.** N-Acetyl Glucosamin-Gruppen

N-Acetyl Galactosamin**Tabelle 20.** Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) N-Acetyl Galactosamin-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$
1	α -D-GalpNAc-1R	\bar{x}	175.26	98.90	71.60	69.17	68.50	61.80	50.18	22.67
		σ_{n-1}	± 0.12	± 0.96	± 0.23	± 0.10	± 0.14	± 0.16	± 0.12	± 0.12
2	α -D-GalpNAc-OH-6R	\bar{x}	175.13	91.99	70.09	69.49	68.79	68.29	51.29	22.72
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	α -D-GalpNAc-1R;3R	\bar{x}	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	β -D-GalpNAc-1R	\bar{x}	176.00	103.62	75.95	71.82	68.97	61.62	53.40	23.10
		σ_{n-1}	0.00	± 0.61	± 0.17	± 0.20	± 0.49	± 0.62	± 0.01	0.00
5	β -D-GalpNAc-OH-6R	\bar{x}	175.13	96.39	74.89	71.99	68.79	68.78	54.79	22.72
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	D-GlcNAc-ol-OH-3R	\bar{x}	175.13	76.26	69.86	69.52	66.52	60.99	51.89	22.72
		σ_{n-1}	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

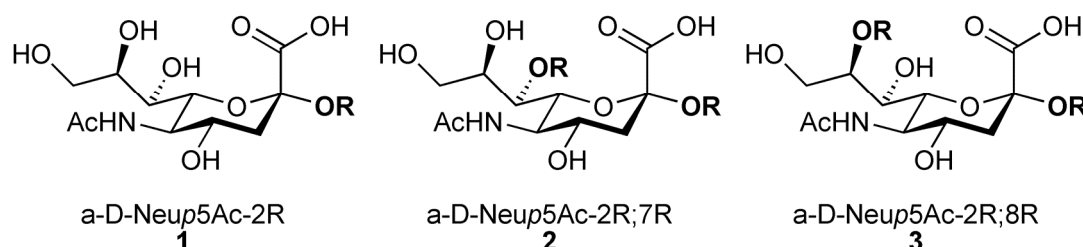
Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang (Kapitel 11.5.8) zu finden.

**Abbildung 41.** N-Acetyl Galactosamin-Gruppen

N-Acetyl Neuraminsäure**Tabelle 21.** Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) N-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen in [ppm]

No.	Gruppe		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}
1	a-D-Neup5Ac-2R	\bar{x}	176.09	174.42	100.91	73.52	72.55	69.16	69.02	63.44	52.67	40.71	23.09
		σ_{n-1}	± 0.30	± 0.26	± 0.57	± 0.23	± 0.13	± 0.13	± 0.17	± 0.19	± 0.18	± 0.70	± 0.30
2	a-D-Neup5Ac-2R;7R	\bar{x}		172.34	101.02	77.44	71.64	71.04	68.22	62.24	52.74	36.52	23.09
		σ_{n-1}		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	a-D-Neup5Ac-2R;8R	\bar{x}		174.05	101.65	77.30	73.50	69.05	69.04	62.35	52.10	39.60	23.09
		σ_{n-1}		± 0.08	± 0.21	± 0.28	± 0.29	± 0.08	± 0.08	± 0.22	± 0.15	± 0.57	0.00

Die Peaklisten der verwendeten Datensätze sind im Anhang zu finden.

**Abbildung 42.** N-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen**Disaccharidgruppen**

Für den Disaccharid-Ansatz wurden aus den Oligosacchariden der Literaturdatenbank insgesamt 265 verschiedene Gruppen gebildet (Kapitel 5.4.3). Die verwendeten Mittelwerte der Disaccharidgruppen sind im Anhang zu finden (Kapitel 12.1.2).

5.7.2.1 Modification Generator (MG)

Der *Modification Generator* (MG) ist ein in VBA (*Visual Basic for Applications*) programmiertes Makro. Es diente dazu, die Datenmenge künstlich zu vergrößern, bzw. die Anzahl der Datensätze pro Gruppe auszugleichen. Dadurch wurde vermieden, dass sich die Netzwerke Gruppen, wie z.B. α -D-Glcp-1R, die in der Literatur häufiger vorkommen und dadurch bei einem Training mit Literaturwerten häufiger präsentiert würden, besser antrainieren.

Aus den berechneten Mittelwerten und der dazugehörigen Standardabweichung konnten für eine Liste von Datensätzen in einem Schritt je 20, 40, 80, 100 oder 150 Modifikationen für *trainings*, *test* und *selection subset* erstellt werden (siehe Seite 85). Die chemischen Verschiebungen wurden dabei zufällig im Bereich von ± 1 Standardabweichung erhöht oder erniedrigt (geschiftet). Bei Gruppen mit weniger als drei Datensätzen, für die keine Standardabweichung berechnet werden konnte,

5. Material und Methoden

wurde zur Wiedergabe der natürlichen Varianz, mindestens in einem Bereich von ± 0.5 ppm geshiftet. Der Quellcode des Makros ist im Anhang (Kapitel 12.12) zu finden.

Beim Monosaccharid-Ansatz wurden für jede Monosaccharid-Einheit eigene Netze trainiert. Die Mittelwerte der acht anderen Monosaccharid-Einheiten wurden den Netzen jeweils als eine eigene Gruppe „*wrong*“ antrainiert. Die Anzahl der Datensätze für die Gruppe „*wrong*“ wurde mit dem MG ebenfalls erweitert. Dabei wurden für die Gruppe „*wrong*“ ungefähr gleich viele Modifikationen (400–500), wie von einer Gruppe des zu trainierenden Zuckers erstellt. Pro Mittelwert der *wrong* Zucker wurden also nur ca. 6–7 Modifikationen mittrainiert. Dies diente dazu ein Übertraining der „*wrong*“ Gruppe zu verhindern.

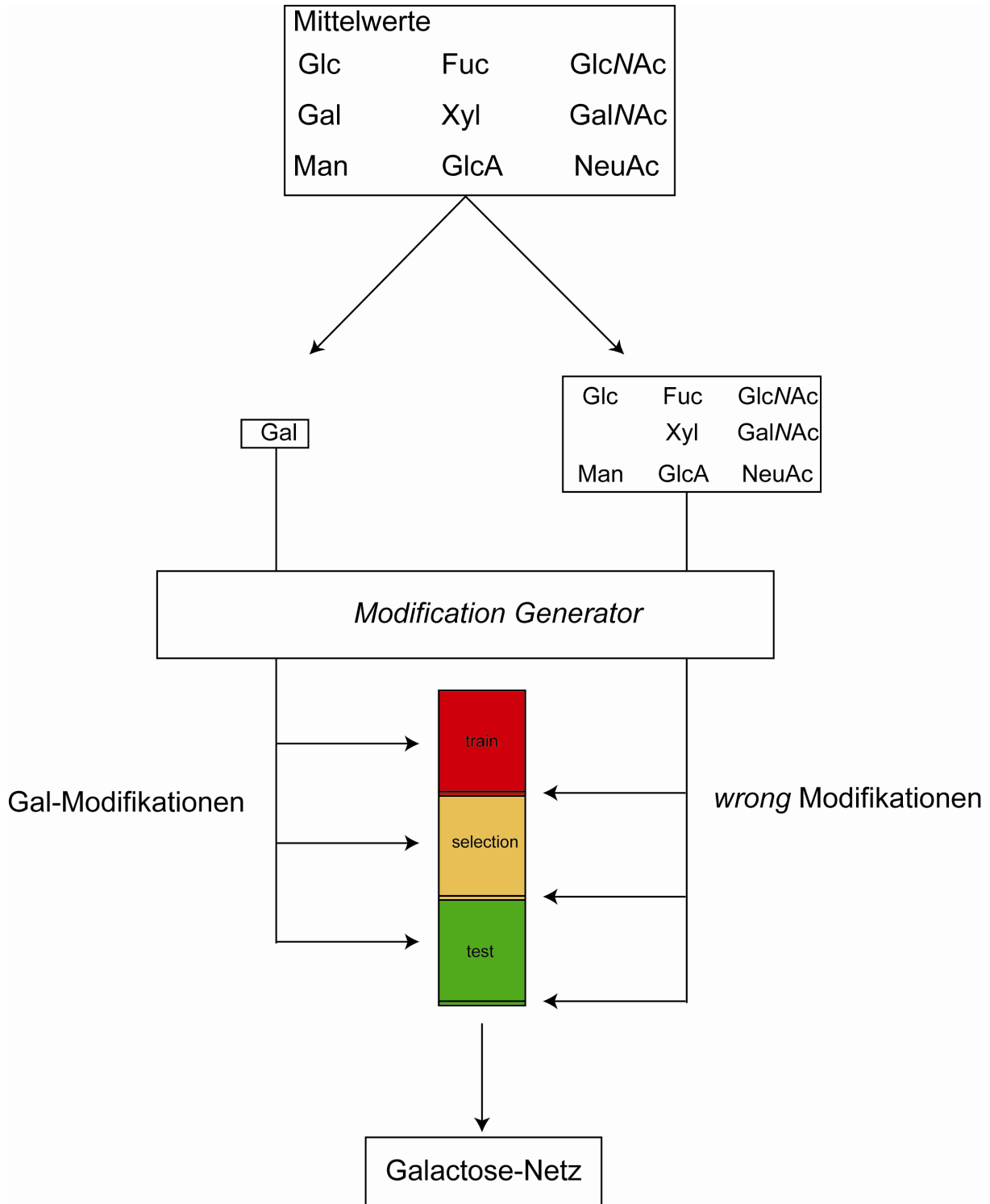


Abbildung 43. Erstellen der Modifikationen am Beispiel Galactose

Die verschiedenen *subsets* (*training*, *selection* und *test*) werden während verschiedenen Phasen des Trainings verwendet. Den neu erstellten Netzwerken wird das *trainings subset* in jedem Trainingszyklus immer wieder präsentiert. Dabei wird der Lernfortschritt laufend mit dem *selection subset* überprüft. Nachdem ein vordefiniertes Abbruchkriterium erreicht worden ist, werden die Gewichte fixiert und die Performance der Netzwerke mit dem *test subset* überprüft.

5.8 Programme für die Simulation neuronaler Netzwerke

5.8.1 Statsoft Statistica

Statistica^[104] beinhaltet eine Reihe von verschiedenen Programmen für Datenmanagement und Datamining. Das Modul *Neuronale Netzwerke* unterstützt viele verschiedene Netzwerk-Architekturen und Lernalgorithmen. Als Eingabeformat akzeptiert das Programm die meisten gängigen Formate für Datentabellen oder aber auch eine direkte Anbindung über eine ODBC- oder MySQL-Schnittstelle, sowie auch direkte Eingaben über Formulare auf Webseiten. In Verbindung mit dem ANN PFG (Kapitel 5.9) wurde das Csv-File Format (*comma-separated values*) verwendet. Dieses Format hat den Vorteil, dass es nicht komprimiert ist und daher mit einer Vielzahl Texteditoren oder Tabellenkalkulationsprogrammen direkt bearbeitet werden kann.

5.8.2 Stuttgarter Neuronale Netzwerke Simulator (SNNS) v4.2

SNNS^[2] ist ein effizienter Simulator neuronaler Netzwerke für Unix Workstations und Parallelrechner der 1989 am Institut für Parallele und Verteilte Höchstleistungsrechner (IPVR) der Universität Stuttgart entwickelt wurde.

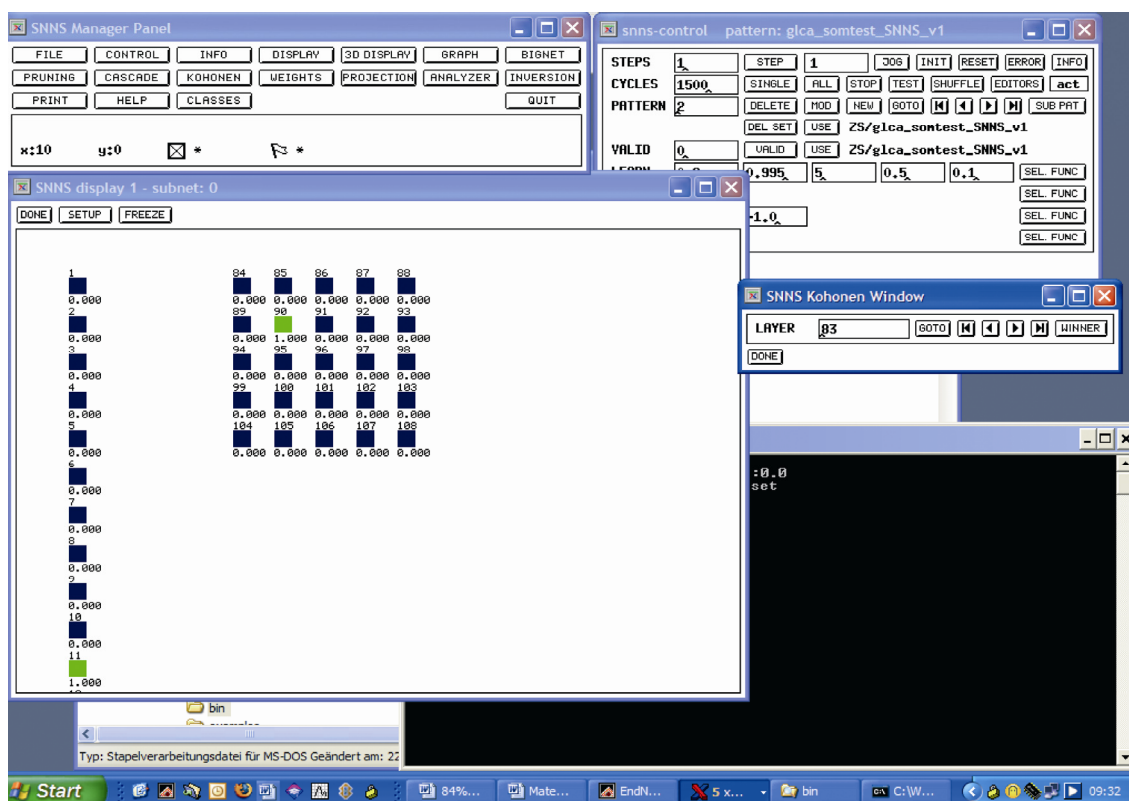


Abbildung 44. Graphische Oberfläche SNNS v4.2

5. Material und Methoden

SNNS besteht aus einem Simulatorekern, einer graphischen Oberfläche zur Generierung, Visualisierung und Modifikation der neuronalen Netze und einem Compiler zur Erzeugung grosser Netzwerke aus einer Netzwerk-Beschreibungssprache.

Der Simulatorekern verwaltet die interne Repräsentation der neuronalen Netze und führt alle Operationen für die Simulation in der Lern- und der Arbeitsphase durch. Er realisiert eine effiziente Speicherung und Manipulation der Netze und ist auch für grössere Netzwerke geeignet.

Die graphische Benutzerschnittstelle basiert auf X-Windows X11R4 bzw. X11R5 und stellt die Topologie und den Zustand des Netzwerks graphisch dar. Sie ermöglicht es auch, mit einem integrierten Netzwerk-Editor neuronale Netze interaktiv zu konstruieren und zu ändern.

SNNS ist portabel und durch in C programmierte benutzerdefinierte Funktionen erweiterbar. Die Komponenten sind modular aufgebaut und verwenden detailliert beschriebene Schnittstellen, sodass sie auch einzeln als Teile einer grösseren Anwendung eingesetzt werden können.

Folgende Netzmodelle und Lernverfahren sind derzeit in SNNS enthalten:

- *Backpropagation (verschiedene Varianten),*
- *Quickprop,*
- *Counterpropagation,*
- *Backpercolation,*
- *RProp (Resilient Propagation),*
- *Cascade-Correlation (mit Quickprop, Backpropagation oder RProp als Teilalgorithmus),*
- *Recurrent Cascade-Correlation,*
- *Dynamisches LVQ,*
- *„Time Delay“-Netze,*
- *Radiale Basisfunktionen-Netze (RBF) und Hyper-Basisfunktionen-Netze (HBF),*
- *ART-1 (Adaptive Resonance Theory für binäre Eingabemuster),*
- *ART-2 (Adaptive Resonance Theory für reellwertige Eingabemuster),*
- *ARTMAP,*
- *Backpropagation Through Time (BPTT), BATCH BPTT,*

5. Material und Methoden

- *Quickprop Through Time (QPTT)*,
- *Selbstorganisierende Karten (self-organizing maps, SOM)*,
- *Elman-Netze, Jordan-Netze, erweiterte hierarchische Elman-Netze*,
- *Hopfield-Netze, Bidirectional Associative Memory (BAM)*,
- „*Time Delay*“ Netzwerke mit *Backpropagation*.

Die einzelnen Verfahren werden im Manual zu SNNS genauer erklärt^[320].

Als Eingabeformat akzeptiert SNNS nur das eigene vordefinierte Patternfile Format.

5.8.3 Java Neuronale Netzwerke Simulator (JavaNNS) v1.1

JavaNNS^[1] ist die Java Version von SNNS, basierend auf Version 4.2. Das Eingabeformat ist dasselbe wie bei SNNS. JavaNNS wurde verwendet, wegen der guten Visualisierungswerkzeuge für selbst-organisierende Karten und weil Java Anwendungen auf vielen Betriebssystemen, wie Unix, Linux, Windows und Mac OSX ausgeführt werden können^[116-118].

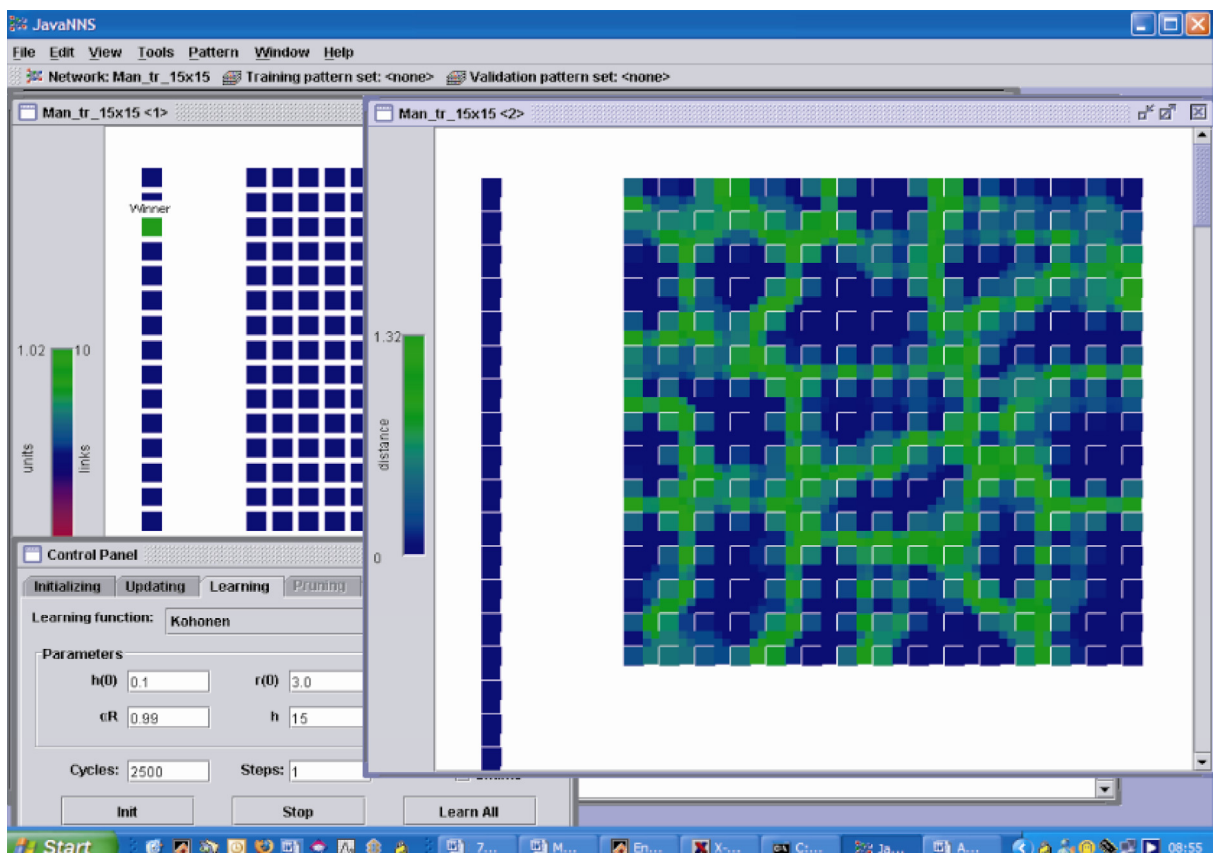


Abbildung 45. Graphische Oberfläche JavaNNS v1.1

5.8.4 SONNIA v4.10:

SONNIA^[105] (*Self Organizing Neural Network for Information Analysis*) ist ein selbstorganisierendes neuronales Netzwerk für die Analyse und Visualisierung von Daten. Das Programm kann unter anderem verwendet werden für:

- Analyse von multidimensionalen Datenmengen
- Analyse von Ähnlichkeiten und Unterschieden in Substanzbibliotheken
- Klassifizierung und Voraussage von biologischer Aktivität und physikochemischen Eigenschaften
- Simulation von IR-Spektren

Das Programm SONNIA ermöglicht sowohl das Training von neuronalen Netzwerken mit einem überwachten (*Counterpropagation*) wie auch mit einem unüberwachten (Kohonen) Lernverfahren. Dazu können mit SONNIA aus einer trainierten Kohonenkarte auf einfache Weise ausgelesen werden, wo welche Eingabemuster auf der Karte projiziert werden.

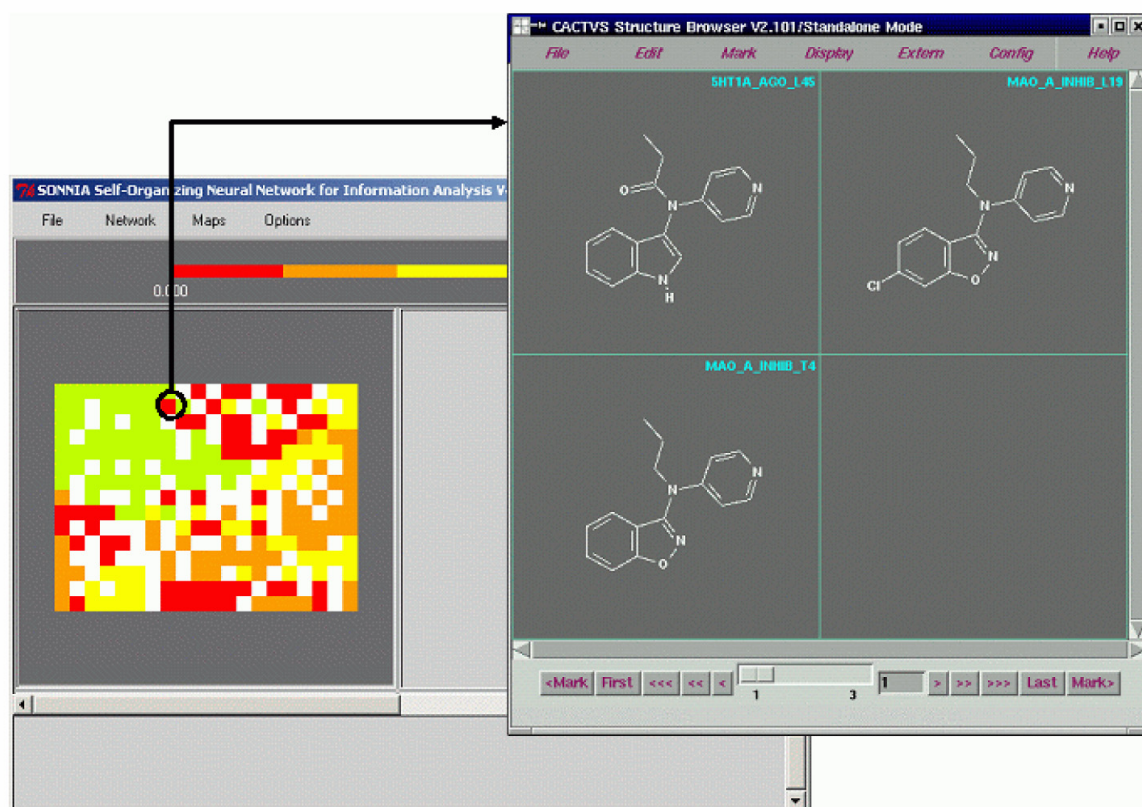


Abbildung 46. SONNIA v4.10

5.9 ANN Pattern File Generator (ANN PFG)

5.9.1 Übersicht

Der ANN PFG ist ein in Visual Basic 6.0 entwickeltes Softwaretool, das durch Matthias Studer im Rahmen seiner Dissertation entwickelt wurde^[103]. Die Hauptidee des Programms ist die Umwandlung und Komprimierung von ^{13}C - oder ^1H -NMR Daten einer Peakliste im Csv Format in ein für die verwendete ANN Software lesbares Format.

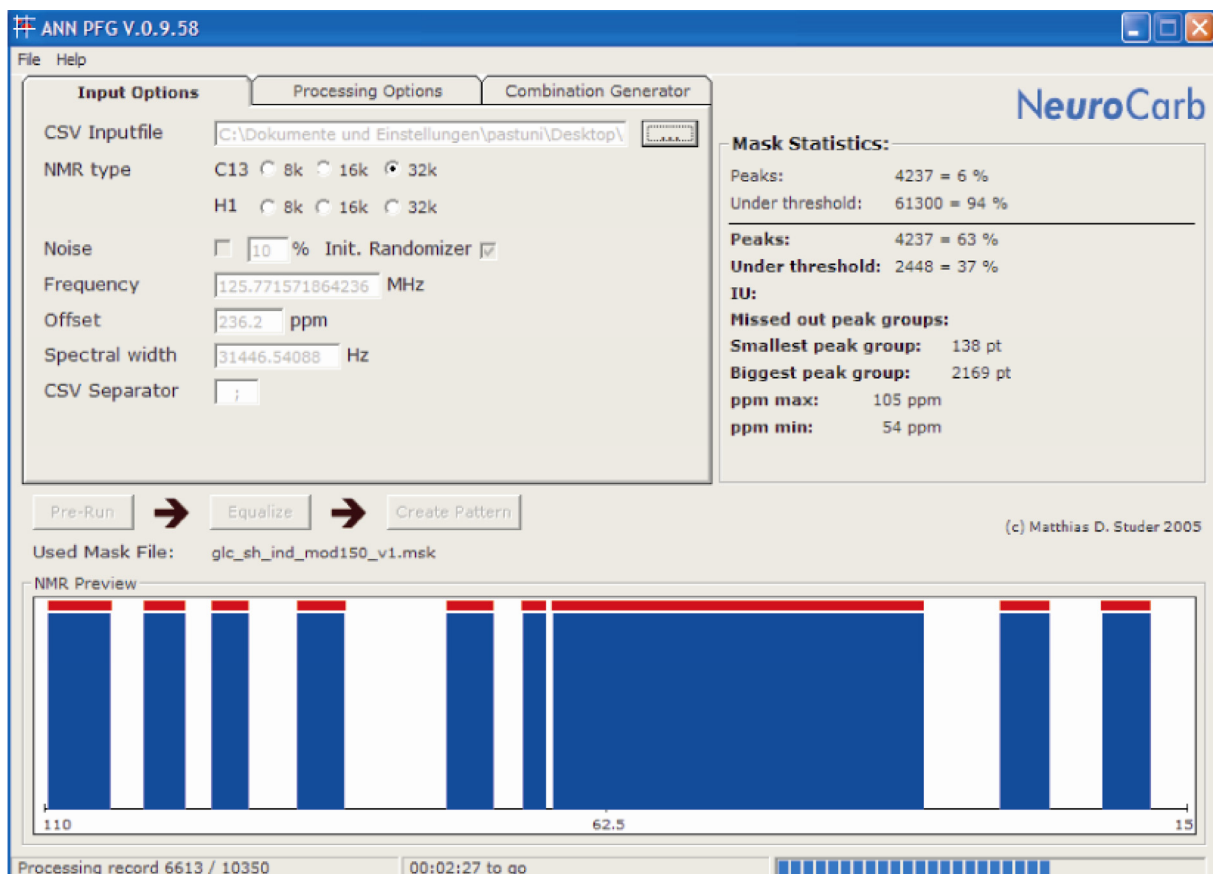


Abbildung 47. Bedienfeld ANN PFG v.0.9.58

Der ANN PFG schreibt in seiner finalen Version v.0.9.58 Patternfiles für Statistica, SNNS (Backpropagation und Kohonen) und JavaNNS (Backpropagation und Kohonen). Das Patternfile wird als ASCII Text File geschrieben und enthält die binär codierten Eingabemuster aller Datenreihen. Alle Einstellungen können in einem Konfigurationsfile (*.msk) abgespeichert werden. Dadurch kann jedes mit dem ANN PFG erstellte File reproduziert werden.

Ein weiterer Grund für die Entwicklung der Software war die grosse Menge der Daten pro NMR-Spektrum. Ein ^{13}C -NMR Spektrum enthält in Abhängigkeit von Auflösung und Dimensionen des Spektrums (1D oder 2D) normalerweise 32768

Datenpunkte (32k). Wenn diese ^{13}C -NMR Spektren unkomprimiert in ein Netzwerk eingelesen würden, resultierte daraus ein Netzwerk mit einer Eingabeschicht von 32768 Neuronen und Millionen von Verknüpfungen. Schon alleine die Tatsache, dass ^{13}C -NMR Spektren nur zu ca. 1% mit Peakwerten gefüllt sind, zeigt die Notwendigkeit einer Datenkomprimierung. Datenpunkte zu trainieren, die keine Information oder nur Rauschen enthalten (99%), würde die Menge der Trainingsdaten und damit auch die Dauer des Trainings massiv erhöhen. Eines der Hauptprobleme bei der Arbeit mit neuronalen Netzwerken mit vielen Freiheitsgraden ist die zu genaue Anpassung der Gewichte an das Problem (*overfitting*) und der damit verbundene Verlust der Generalisierungsfähigkeit. Die Generalisierungsfähigkeit ist die Fähigkeit eines Netzwerkes ähnliche aber unbekannte Eingabemuster korrekt der richtigen Klasse zuzuordnen. Aus diesem Grund sollte das verwendete künstliche neuronale Netzwerk so klein wie möglich sein.

Input File Format

Der ANN PFG v.0.9.58 liest *Csv Files* nur in einem bestimmten Format. In Tabelle 22 ist die erforderliche Formatierung erklärt

Tabelle 22. Formatierung Csv File

Spalte 1	Spalte 2	Spalte 3	Spalte 4	Spalte 5	Spalte 6	...
Herkunft	Name, Gruppe	subset	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak x
(Rec. No.; Mittelwert)		(train, test, selection)	[ppm]	[ppm]	[ppm]	[ppm]

Jeder neue Datensatz beginnt auf einer neuen Zeile. Die einzelnen *subsets* werden während unterschiedlichen Phasen des Trainings verwendet (siehe Seite 85). Die Peakwerte, die ab Spalte 4 stehen, müssen nicht zwingend der Grösse nach geordnet werden. Der ANN PFG sortiert die Werte jedes Datensatzes der Grösse nach während der Umwandlung. Die Spalten müssen soweit nach hinten mit 0 aufgefüllt werden, wie der grösste Datensatz Peakwerte enthält, so dass ein Block aus Werten entsteht.

5. Material und Methoden

Tabelle 23. Beispiel formatiertes Csv File für ANN PFG v.0.9.58

...										
398	β -D-Glcp-1R	test	103.92	76.57	76.57	73.78	70.48	61.61	0.00	0.00
1128	β -D-Glcp-1R	test	104.20	77.00	77.00	74.30	70.90	62.10	0.00	0.00
471	β -D-Glcp-1R	test	104.30	76.90	76.90	74.20	70.80	61.90	0.00	0.00
261	β -D-Glcp-1R_2R	test	103.00	80.68	76.98	76.36	70.37	61.60	0.00	0.00
12	β -D-Glcp-1R_2R	test	104.43	78.46	76.36	75.20	70.65	61.63	0.00	0.00
1096	β -D-Glcp-1R_2R	test	104.70	78.70	76.80	75.50	70.50	62.20	0.00	0.00
289	β -D-GlcpNAc-1R	test	175.24	102.35	76.53	74.50	70.75	61.51	56.57	22.93
290	β -D-GlcpNAc-1R	test	175.45	103.03	76.44	74.41	70.64	61.42	56.54	22.90
739	β -D-GlcpNAc-1R	test	101.59	75.99	73.59	69.89	60.49	55.69	0.00	0.00
742	β -D-GlcpNAc-1R	test	101.69	75.99	73.49	69.79	60.79	55.69	0.00	0.00
...										

5.9.2 Funktionen

In einem ersten Schritt werden alle Datensätze eingelesen und die Peakwerte in ein künstliches Spektrum umgewandelt. Danach werden aus allen Datensätzen die Werte des minimal vorkommenden Shifts (ppm min) und des maximal vorkommenden Shifts (ppm max) bestimmt. Vom gesamten Spektrum mit 32768 Datenpunkten wird danach nur noch der Bereich zwischen ppm min und ppm max verwendet. Im Weiteren werden in diesem Bereich nur die Datenpunkte in die Peakmaske übernommen, bei welchen der Schwellenwert erreicht wird.

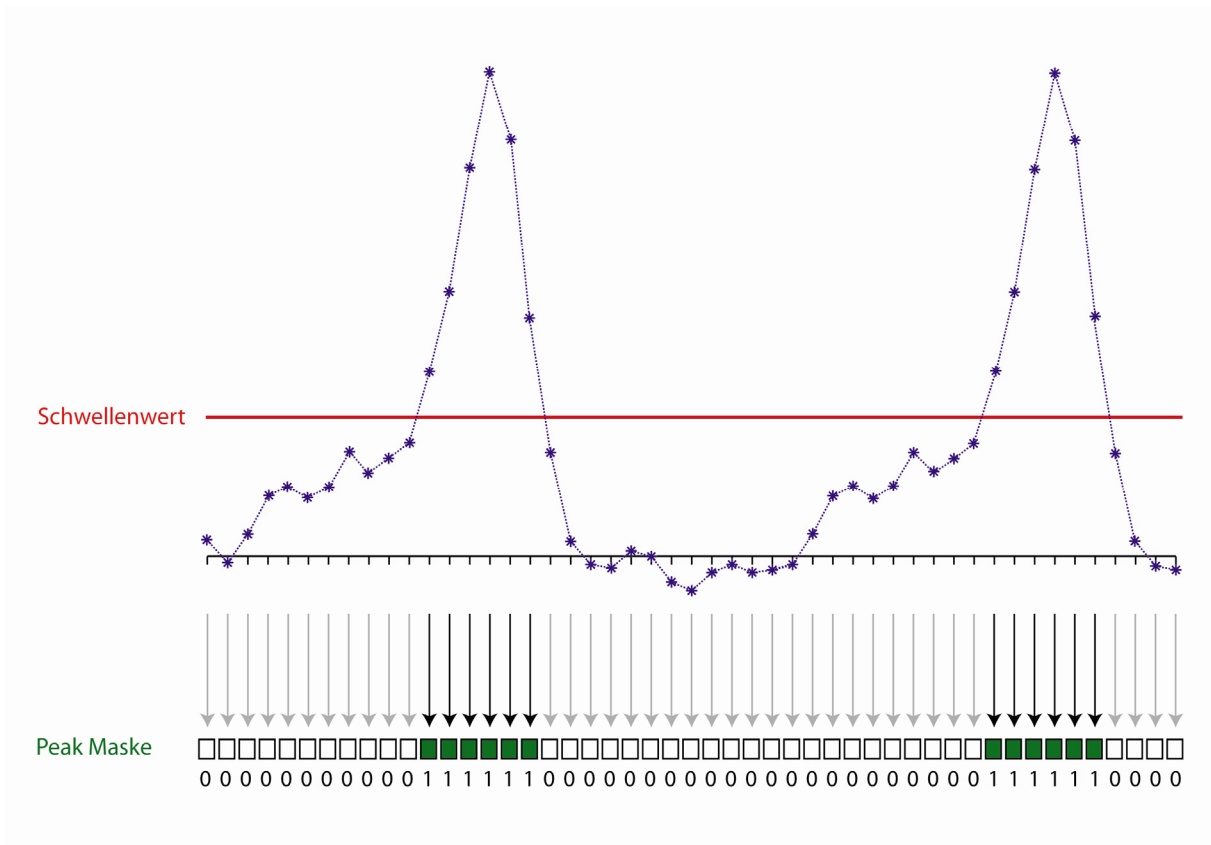


Abbildung 48. Erstellen der Peakmaske^[103]

Ein Peak in einem NMR-Spektrum besteht bei einer genügend hohen Auflösung aus mehr als einem Datenpunkt. Mit der Schrittlänge kann definiert werden ob alle Datenpunkte (Schrittlänge = 1) oder nur ein Teil des Spektrums eingelesen werden. Durch die variable Schrittlänge kann die Anzahl der Datenpunkte nochmals reduziert werden.

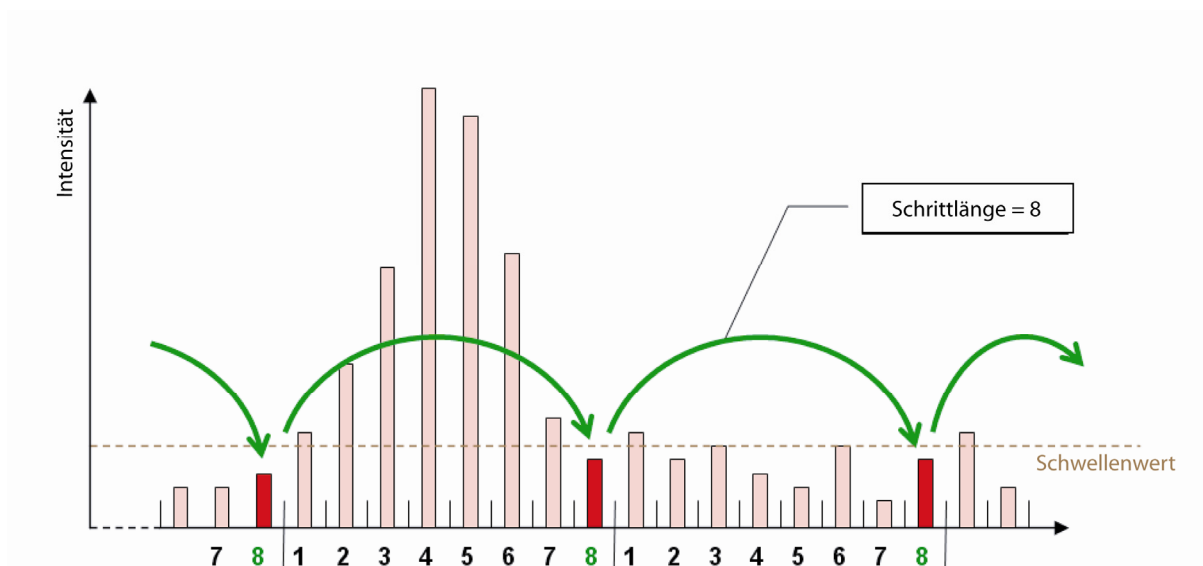


Abbildung 49. Beispiel Schrittlänge = 8^[103]

So kann die ursprüngliche Grösse der Eingabemusters von 32'768 Datenpunkten auf wenige hundert Datenpunkte reduziert werden:

Tabelle 24. Anzahl Datenpunkte für verwendete Zucker

Zucker	Datenpunkte	Reduktion (gegenüber 32k)
Glc	216 (0.66 %)	32'552 (99.34 %)
Gal	188 (0.57 %)	32'580 (99.43 %)
Man	177 (0.54 %)	32'591 (99.46 %)
Fuc	117 (0.36 %)	32'651 (99.64 %)
Xyl	211 (0.64 %)	32'557 (99.36 %)
GlcA	83 (0.25 %)	32'685 (99.75 %)
GlcNAc	180 (0.55 %)	32'588 (99.45 %)
GalNAc	167 (0.51 %)	32'601 (99.49 %)
Neu5Ac	132 (0.40 %)	32'636 (99.60 %)

Alle Einstellungen können in der Maske (*.msk) gespeichert werden, so dass für jeden Zucker immer dieselben Datenpunkte für das Eingabemuster verwendet werden.

5.9.3 Kombinationen

Das Problem des inkrementellen Ansatzes ist es, dass immer nur einzelne Monosaccharid-Einheiten antrainiert werden. Sollen nun die Peaks eines

unbekannten Oligosaccharids identifiziert werden, gibt es keine Information darüber welcher Peak zu welchem Ringsystem gehört. Werden dem künstlichen neuronalen Netzwerk alle möglichen Peakkombinationen des Oligosaccharides präsentiert, ist die richtige Kombination garantiert einmal vorhanden. Hier hilft ausserdem die Fähigkeit künstlicher neuronaler Netzwerke auch bei unvollständigen oder verrauschten Mustern, das richtige Muster erkennen zu können. So können auch viele Kombinationen, die nur einige der richtigen Peaks enthalten, der richtigen Klasse zugeordnet werden. Aus diesem Grund wurde der ANN PFG um eine weitere Funktion erweitert. Der ANN PFG berechnet je nach Grösse des Oligosaccharids die Anzahl der möglichen Kombinationen (c) aller Peaks (n) (mit Zurücklegen) für eine bestimmte Gruppengrösse (g) nach der Formel:

$$c = \frac{n!}{g \times (n-g)!} \quad (\text{eq. 11})$$

Je nach Monosaccharid-Einheit ist die Gruppengrösse unterschiedlich gross. Mögliche Eingaben sind: 5,6,7,9 und 12 (für die Berechnung der Gruppengrösse, wird der OMe-Peak teils mitgezählt). Dadurch ergeben sich verschiedene Grössen für die Anzahl möglicher Kombinationen:

Tabelle 25. Anzahl mögliche Kombinationen

	g	Disaccharid (10-25)		Trisaccharid (15-37)		Tetrasaccharid (20-49)		Pentasaccharid (25-61)	
		c _{min}	c _{max}	c _{min}	c _{max}	c _{min}	c _{max}	c _{min}	c _{max}
Xyl	5	252	53'130	3'003	435'897	15'504	1'906'884	53'130	5'949'147
Gal	6	210	177'100	5'005	2'324'784	38'760	13'983'816	177'100	55'525'372
Glc	6	210	177'100	5'005	2'324'784	38'760	13'983'816	177'100	55'525'372
Man	6	210	177'100	5'005	2'324'784	38'760	13'983'816	177'100	55'525'372
Fuc	6	210	177'100	5'005	2'324'784	38'760	13'983'816	177'100	55'525'372
GlcA	9	10	2'042'975	5'005	124'403'620	167'960	2'054'455'634	2'042'975	17'341'763'505
GlcNAc	9	10	2'042'975	5'005	124'403'620	167'960	2'054'455'634	2'042'975	17'341'763'505
GalNAc	9	10	2'042'975	5'005	124'403'620	167'960	2'054'455'634	2'042'975	17'341'763'505
Neu5Ac	12	0	5'200'300	455	1'852'482'996	125'970	92'263'734'836	5'200'300	1'742'058'970'275

g: Gruppengrösse; c_{min}: minimale Anzahl an Kombinationen; c_{max}: maximale Anzahl an Kombinationen

Die Anzahl der möglichen Kombinationen steigt auch bei einem Disaccharid sehr rasch an. In der Praxis sind für ein Disaccharid 10-15 Peaks üblich. Der Fall eines Disaccharides mit zwei Neu5Ac Bausteinen und OMe (= 25 Peaks) ist nie aufgetreten, so dass die Rechenzeiten in einem akzeptablen Rahmen blieben. Der ANN PFG schreibt für einen Datensatz alle möglichen Kombinationen der eingegebenen Peaks in ein File:

5. Material und Methoden

Tabelle 26. Beispiel eines Patternfiles für den Kombinationstest

Peaks	Komb. No.	subset	Dp1	Dp2	Dp3	Dp4	Dp5	Dp6
...								
2 4 5 8 14 16	3826	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 8 15 16	3827	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 10 11	3828	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 10 12	3829	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 10 13	3830	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 10 14	3831	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 10 15	3832	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 10 16	3833	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 11 12	3834	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 11 13	3835	CombTest	0	0	1	0	0	...
2 4 5 9 11 14	3836	CombTest	0	0	1	0	0	...
...								

Dp: Datenpunkt

6 Praktische Durchführung

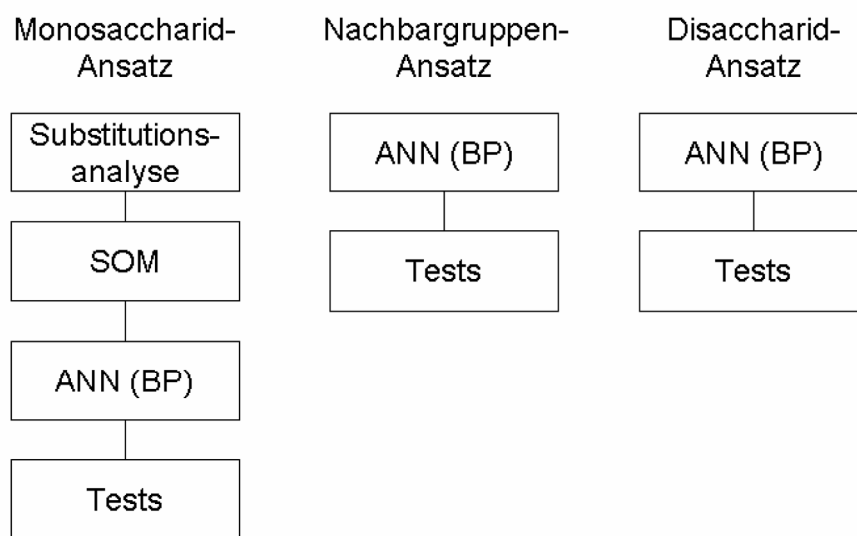


Abbildung 50 - workflow NeuroCarb

Monosaccharid-Ansatz:

Mit einer Substitutionsanalyse (Kapitel 6.1) wurde in einem ersten Schritt untersucht, ob sich die Gruppen des Monosaccharid-Ansatzes (vgl. Kapitel 5.4.2) anhand ihrer chemischen Verschiebungen deutlich voneinander unterscheiden, so dass eine Klassifizierung theoretisch möglich sein sollte. In einem zweiten Schritt wurde mit selbst-organisierenden Karten (*self organizing maps*, SOM) untersucht, ob sich die Daten auch mit ANN einteilen lassen (Kapitel 6.2). Nach diesen beiden einleitenden Schritten wurden ANNs mit dem *Backpropagation* Algorithmus trainiert (Kapitel 6.4) und die Qualität der Netzwerke mit verschiedenen Datensätzen (Abbildung 51, Kapitel 6.4.1–6.4.5) überprüft.

Nachbargruppen-Ansatz

Für den Nachbargruppen-Ansatz wurden ohne vorherige Überprüfung der Gruppeneinteilung ANN mit dem *Backpropagation* Algorithmus trainiert (Kapitel 6.3) und die Qualität der Netzwerke mit einem Literaturtest überprüft.

Disaccharid-Ansatz

Für den Disaccharid-Ansatz wurden ohne vorherige Überprüfung der Gruppeneinteilung ANN mit dem *Backpropagation* Algorithmus trainiert (Kapitel 6.5) und die Qualität der Netzwerke mit Hilfe eines Literaturtests überprüft.

6.1 Substitutionsanalyse ungeschützter Monosaccharid-Einheiten

Die Mittelwerte der chemischen Verschiebungen aller Monosaccharid-Gruppen von Glucose, Galactose und Mannose wurden untereinander verglichen. Dabei wurde untersucht, wie gross der Einfluss einer Substitution auf die Lage der chemischen Verschiebung an jedem C-Atom des Pyranoserings ist und wie weit eine Substitution durch eine starke Veränderung der chemischen Verschiebung feststellbar ist.

6.2 Selbst-organisierende Karten (SOM)

Mit Hilfe von selbst-organisierenden Karten sollte gezeigt werden, ob sich die gewählte Gruppeneinteilung des Monosaccharid-Ansatzes (vgl. Kapitel 5.4.2) auch mit ANNs nachvollziehen lässt. Alle Versuche wurden für die Monosaccharid-Einheiten Glc, Gal, Man, GlcA, GlcNAc, GalNAc, Xyl, Fuc und Neu5Ac durchgeführt. Im Unterschied zu früheren Arbeiten^[103], in welchen die experimentellen Peaklisten verwendet worden sind, wurden in dieser Arbeit mit dem ANN PFG aus den Peaklisten erstellte binäre Pattern verwendet (vgl. Kapitel 5.9). Damit stellte sich aber die Frage, ob in Pattern mit binär kodierter Eingabe die benötigte Information für die Auftrennung noch enthalten ist oder ob essentielle Informationen fehlen, bzw. verloren gegangen sind.

Parameter ANN PFG v.0.9.58:

In einem ersten Schritt wurden mit Hilfe des ANN PFG Patternfiles für die spätere Verwendung mit SONNIA erstellt. Die dafür verwendeten Mittelwerte der Monosaccharid-Einheiten sind im Anhang zu finden (Tabelle 109–Tabelle 117). Die verwendeten Parameter für die Erstellung der Patternfiles sind in Tabelle 27 dargestellt:

6. Praktische Durchführung

Tabelle 27. Parameter ANN PFG für SOM-Test

	msk	Bereich in [ppm]	IU	MA in Dp	MT in Dp	SS in Dp	Pattern- Typ	Patternfile
Glc	glc_sh_ind_mod150_v1.msk	105-54	0-1	10	0	20	SNNS	glc_somtest_v1.dat
Gal	gal_sh_ind_mod150_v1.msk	106-59	0-1	10	0	20	SNNS	gal_somtest_v1.dat
Man	man_sh_ind_mod150_v2.msk	176-20	0-1	10	0	20	SNNS	man_somtest_v1.dat
Fuc	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk	104-14	0-1	10	0	20	SNNS	fuc_somtest_v1.dat
Xyl	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk	106-58	0-1	10	0	20	SNNS	xyl_somtest_v1.dat
GlcA	glca_sh_ind_mod150_v1.msk	177-71	0-1	10	0	20	SNNS	glca_somtest_v1.dat
GlcNAc	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk	176-21	0-1	10	0	20	SNNS	glcnac_somtest_v1.dat
GalNAc	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk	177-21	0-1	10	0	20	SNNS	galnac_somtest_v1.dat
Neu5Ac	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk	175-21	0-1	10	0	20	SNNS	neunac_somtest_v1.dat

msk: Maskenfile; IU: Aktivierungsbereich Neuronen der Eingabeschicht; MA: Maskenausgleich; MT: Maskentoleranz; SS: *stepsize*

Netzwerkparameter SONNIA:

Mit dem Programm SONNIA^[105] wurden für alle Monosaccharid-Einheiten Kohonen-netzwerke erstellt (Tabelle 28):

Tabelle 28. Netzwerkparameter SONNIA

	Topologie	ES	KS	NP	Init	Seed
Glc	thoroidal	216	5x5	0.1	gauss	0
Gal	thoroidal	188	5x5	0.1	gauss	0
Man	thoroidal	177	5x5	0.1	gauss	0
Fuc	thoroidal	117	3x3	0.1	gauss	0
Xyl	thoroidal	211	4x4	0.1	gauss	0
GlcA	thoroidal	83	3x3	0.1	gauss	0
GlcNAc	thoroidal	180	3x3	0.1	gauss	0
GalNAc	thoroidal	167	3x3	0.1	gauss	0
Neu5Ac	thoroidal	132	2x2	0.1	gauss	0

ES: Grösse der Eingabeschicht; KS: Grösse der Kohonenschicht; NP-Verh.: Verhältnis zwischen Neuronen und Pattern (Standard = 0.1); Init: Initialisierungstyp der Verknüpfungsgewichte; Seed: Grundlage der Initialisierung

Trainingsparameter SONNIA:

Alle erstellten Kohonen-Netzwerke wurden mit dem Programm SONNIA während 1000 Trainingszyklen trainiert. Die dafür verwendeten Parameter sind in Tabelle 29 aufgelistet:

Tabelle 29. Trainingsparameter SONNIA

	V	Intervall	Span		Step		LR	LRF	SS	SR	Filename
			x	y	x	Y					
Glc	346	100	2.5	2.5	0.3	0.3	0.9	0.9	0	0	glc_1000.knet
Gal	344	100	2.5	2.5	0.25	0.25	0.9	0.9	0.1	0.1	gal_1000.knet
Man	345	100	2.5	2.5	0.25	0.25	0.9	0.9	0.1	0.1	man_1000.knet
Fuc	343	100	1.5	1.5	0.25	0.25	0.9	0.5			fuc_1000.knet
Xyl	350	100	2.0	2.0	0.5	0.5	0.9	0.9	0	0	xyl_1000.knet
GlcA	342	100	1.5	1.5	0.25	0.25	0.9	0.5			glca_1000.knet
GlcNAc	347	100	1.5	1.5	0.25	0.25	0.9	0.8			glcnac_1000.knet
GalNAc	348	100	1.5	1.5	0.25	0.25	0.9	0.8	0	0	galnac_1000.knet
Neu5Ac	349	100	1.0	1.0	0.01	0.01	0.9	0.5	0	0	neunac_1000.knet

V: Versuchsnummer; Span: Reichweite der Gewichtskorrektur; Step: Anpassung der Gewichtskorrektur; LR: Lernrate; LRF: Lernratenfaktor; SS: stop span; SR: stop rate

6.3 Nachbargruppen-Ansatz

Aus den vordefinierten Gruppen des Nachbargruppen-Ansatzes (Kapitel 5.4.1) wurden in einem ersten Schritt mit dem MG je 40 Modifikationen für jedes *subset* (Training, Selection und Test) gebildet (siehe Seite 85). Die Modifikationen aller Gruppen wurden mit dem ANN PFG in ein für Statistica lesbares Format umgewandelt. Die gesuchte Ausgabe wurde auf zwei verschiedene Arten kodiert:

- Im ersten File wurde die Ausgabe mit einer Gruppenbezeichnung als Text kodiert (mono-out)
- Im zweiten File wurde die Ausgabe binär, d.h. mit einem Neuron pro Gruppe kodiert (poly-out)

Nach dem Training wurde die Performance der Netzwerke mit einem Mono-saccharid-Test überprüft:

Erstellen der Modifikationen (MG):

Mittelwerte:	Einzelatome_gemittelt.xls
Anzahl Modifikationen pro Subgruppe:	40
Standardshift:	± 1 Standardabweichung
Minimal angewendeter Shift:	± 0.1, ± 0.2, ± 0.3, ± 0.4 und ± 0.5 ppm
Csv-Dateiname:	single_av_shXX_mod40.csv (XX = 01, 02, 03, 04, 05)

Parameter ANN PFG v0.9.58:**Tabelle 30.** Verwendete Parameter ANN PFG

Shift [ppm]	Filename	ppm-Bereich	IU-Aktivierung	Masken-Ausgleich	Toleranz	Schrittweite	Statistica Pattern
± 0.1	single_av_sh01_mod40_step20.msk	105-54	0-1	10 Pkte	0 Pkte	20 Pkte	Ja
± 0.2	single_av_sh02_mod40_step20.msk	105-54	0-1	10 Pkte	0 Pkte	20 Pkte	Ja
± 0.3	single_av_sh03_mod40_step20.msk	105-54	0-1	10 Pkte	0 Pkte	20 Pkte	Ja
± 0.4	single_av_sh04_mod40_step20.msk	105-54	0-1	10 Pkte	0 Pkte	20 Pkte	Ja
± 0.5	single_av_sh05_mod40_step20.msk	105-54	0-1	10 Pkte	0 Pkte	20 Pkte	Ja

Pattern:

monoout: Single_av_shXX_mod40_step20_monoout.pat (XX = 01, 02, 03, 04, 05)

polyout: Single_av_shXX_mod40_step20_polyout.pat (XX = 01, 02, 03, 04, 05)

Netzwerk- und Trainingsparameter Statistica:

Für alle Pattern wurden dieselben Netzwerk- und Trainingsparameter verwendet.

Shift ± 0.1–0.5 ppm, mono- und polyout:

Tabelle 31. Netzwerkparameter Statistica

Parameter	Beschreibung
Trainingsmethode	Custom Network Designer
Netzwerktyp	3 schichtiges Multilayer Perceptron
Fehlerfunktion	Entropy based
Grösse versteckte Schicht	10-50
Netzwerk-Dateiname monoout	Single_av_shXX_mod40_step20_monoout.snn
Netzwerk-Dateiname polyout	Single_av_shXX_mod40_step20_polyout.snn

XX = 01, 02, 03, 04, 05

Tabelle 32. Trainingsparameter Statistica

Parameter	Beschreibung
Lernalgorithmus	Standard Backpropagation
Trainingszyklen	1000
Lernrate	0.1
Momentum Term	0.3
Shuffle	Ja
Optimierungsmethode	conjugate gradient
Optimierungszyklen	500
Initialisierung	random gaussian, 0-1
Klassifizierung	<i>highest confidence</i>

Monosaccharid-Test

Die Qualität der trainierten Netzwerke wurde mit einem Literaturtest überprüft. Dabei wurden den Netzwerken ^{13}C -NMR Peaks von 812 Monosaccharid-Einheiten der Zucker Glc, Gal und Man aus der NMR-Datenbank präsentiert. Den Netzwerken wurden immer alle Peaks einer Monosaccharid-Einheit gemeinsam präsentiert. Die Parameter des Monosaccharidtests sind im Anhang zu finden (Kapitel 12.6.1).

6.4 Monosaccharid-Ansatz

Alle Datensätze wurden aus der Datenbank (NMR.fp5) exportiert und nach Monosaccharid-Einheit, Konfiguration am anomeren C-Atom und Substitution in Gruppen sortiert (Kapitel 5.4.2). Aus den Datensätzen jeder Gruppe wurden Mittelwerte und Standardabweichungen berechnet. Die Mittelwerte wurden mit dem MG entsprechend ihren Standardabweichungen geshiftet (Kapitel 5.7.2.1). Die entstandenen Datensätze wurden danach gleichmässig in drei verschiedene *subsets* (Training, Selection und Test) aufgeteilt. Jedes *subset* wurde in verschiedenen Phasen des Trainings mit Statistica verwendet (siehe Seite 85).

Erstellen der Modifikationen (MG):

Anzahl Modifikationen pro <i>subset</i> :	150
Standardshift:	± 1 Standardabweichung
Minimal angewandter Shift:	± 0.5 ppm

Tabelle 33. Csv Files Monosaccharid-Ansatz

Monosaccharid-Einheit	Csv-File
Glc	glc_sh_ind_mod150_newtest_v1.csv
Gal	gal_sh_ind_mod150_newtest_v1.csv
Man	man_sh_ind_mod150_newtest.csv
Fuc:	fuc_sh_ind2_mod150_newtest_v1.csv
Xyl:	xyl_sh_ind_mod150_newtest_v2.csv
GlcA:	glca_sh_ind_mod150_newtest_v1.csv
GlcNAc:	glcnac_sh_ind_mod150_newtest_v2.csv
GalNAc:	galnac_sh_ind_mod150_newtest_v2.csv
Neu5Ac:	neunac_sh_ind_mod150_newtest_v1.csv

Parameter ANN PFG v0.9.58:**Tabelle 34.** Parameter ANN PFG für Monosaccharid-Ansatz

	Maskenfile	Bereich in [ppm]	IU	MA in Dp	MT in Dp	SS in Dp	Pattern- Typ	Patternfile
Glc	glc_sh_ind_mod150_v1.msk	105-54	0-1	10	0	20	Statistica	glc_sh_ind_mod150_newtest_v1.pat
Gal	gal_sh_ind_mod150_v1.msk	106-59	0-1	10	0	20	Statistica	gal_sh_ind_mod150_newtest_v1.pat
Man	man_sh_ind_mod150_v2.msk	176-20	0-1	10	0	20	Statistica	man_sh_ind_mod150_newtest.pat
Fuc	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk	104-14	0-1	10	0	20	Statistica	fuc_sh_ind_mod150_newtest_v2.pat
Xyl	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk	106-58	0-1	10	0	20	Statistica	xyl_sh_ind_mod150_newtest_v2.pat
GlcA	glca_sh_ind_mod150_v1.msk	177-71	0-1	10	0	20	Statistica	glca_sh_ind_mod150_newtest_v1.pat
GlcNAc	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk	176-21	0-1	10	0	20	Statistica	glcnac_sh_ind_mod150_newtest_v2.pat
GalNAc	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk	177-21	0-1	10	0	20	Statistica	galnac_sh_ind_mod150_newtest_v2.pat
Neu5Ac	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk	175-21	0-1	10	0	20	Statistica	neunac_sh_ind_mod150_newtest_v1.pat

IU: Aktivierungsbereich Neuronen der Eingabeschicht; MA: Maskenausgleich;
 MT: Maskentoleranz; SS: *stepsize*, DP: Datenpunkte

Netzwerk- und Trainingsparameter Statistica:

In Tabelle 35 sind die verwendeten Parameter für das Erstellen und Training der Netzwerke mit dem Programm Statistica^[104] zusammengestellt. Mit Ausnahme der Versuchsnummer, der Größe der versteckten Schichten und der Versuchsdauer sind die gewählten Parameter für alle Monosaccharid-Einheiten identisch.

6. Praktische Durchführung

Tabelle 35. Netzwerk- und Trainingsparameter Statistica

Parameter	Glc	Gal	Man	Fuc	Xyl	GlcA	GlcNAc	GalNAc	Neu5Ac
Methode	<i>Intelligent Problem Solver</i>								
Algorithmus	<i>Standard Backpropagation</i>								
Netzwerktypen	3-4 schichtige <i>multilayer perceptrons</i>								
Grösse versteckte Schichten	10-200	10-200	20-250	10-205	20-250	20-250	10-200	10-200	20-250
Auswahl der Eingabevariablen	Ohne								
Schwellenwert	<i>highest confidence</i>								
Klassifizierung	<i>entropy based</i>								
Dauer in [Std]	15	68.5	48	90	72	62	36	272	62
Auswahlkriterien für Selektion der Netzwerke	Minimaler Fehler und möglichst grosse Diversität der Netzwerkarchitektur								
Versuchsnummer	V280, V281	V252, V253, V254	V306, V307	V217, V226	V294, V295	V318, V319	V262, V263	V216, V239	V320, V321

Von jeder Monosaccharid-Einheit wurden die 20-40 besten Netzwerke aller Versuche in einem Netzwerkfile gespeichert:

Tabelle 36. Netzwerkfiles Monosaccharid-Ansatz

Monosaccharid-Einheit	Anzahl Netzwerke	Netzwerkfile
Glc	40	Versuch280_281.snn
Gal	60	Versuch252_254.snn
Man	40	Versuch306_307.snn
Fuc	40	Versuch217_226.snn
Xyl	40	Versuch294_295.snn
GlcA	40	Versuch318_319.snn
GlcNAc	41	Versuch262_263.snn
GalNAc	40	Versuch216_239.snn
Neu5Ac	40	Versuch320_321.snn

Alle weiteren Tests des Monosaccharid-Ansatzes wurden mit diesen Netzwerkfiles durchgeführt. Der genaue Ablauf der Tests ist in Abbildung 51 illustriert.

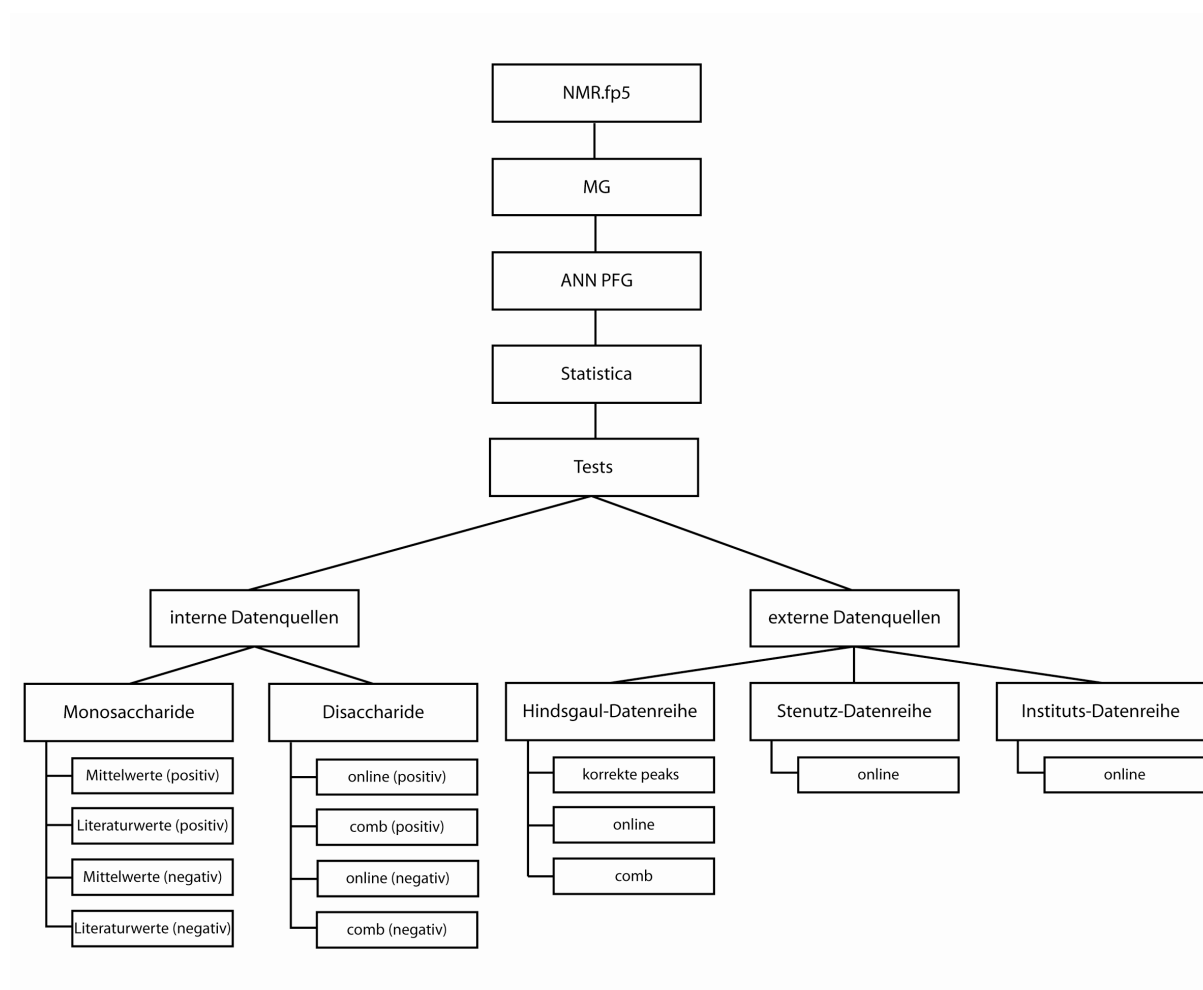


Abbildung 51. workflow Monosaccharid-Ansatz

Die Fähigkeit der Netzwerke zur Erkennung der antrainierten Monosaccharid-Einheiten wurde mit verschiedenen Tests überprüft. In einer ersten Phase wurden den Netzwerken als Testdatensätze Monosaccharid-Einheiten oder Disaccharide aus der NMR-Datenbank (interne Datenquelle) präsentiert.

6.4.1 Monosaccharid-Tests

Als Monosaccharid-Tests wurden den trainierten Netzwerken jeder Monosaccharid-Einheit sowohl Mittelwerte und Literaturwerte der antrainierten Monosaccharid-Einheiten (positiv), wie auch Mittelwerte und Literaturwerte der als *wrong* antrainierten Zucker (negativ) präsentiert. Die Parameter aller Monosaccharid-Tests sind im Anhang (Kapitel 12.7.1) zu finden.

6.4.2 Disaccharid-Tests

Für alle trainierten Netzwerke wurden folgende Test durchgeführt:

- Literaturwerte und Kombinationen von Disacchariden mit Gruppen der antrainierten Monosaccharid-Einheit (Positivtest).
- Literaturwerte und Kombinationen von Disacchariden ohne die antrainierte Monosaccharid-Einheit (Negativtest).

Die Testdatensätze wurden den Netzwerken in den Disaccharidtests sowohl als Ganzes (alle chemischen Verschiebungen auf einer Linie = online), wie auch in Form von Kombinationen ihrer chemischen Verschiebungen (alle Kombinationen ohne Zurücklegen = comb, Kapitel 5.9.3) präsentiert. Die Gruppengröße der Kombinationen wurde durch die jeweilige Monosaccharideinheit bestimmt. Die Parameter aller Disaccharid-Tests sind im Anhang (Kapitel 12.7.2) zu finden.

6.4.3 Hindsgaul-Test

Ein Test mit *in-house* gemessenen Werten sollte zeigen, wie gut die trainierten Netzwerke für reale Daten zu gebrauchen sind. Die Datensätze der Hindsgaul-Datenreihe wurden den Netzwerken sowohl als Test bestehend aus den chemischen Verschiebungen der jeweils antrainierten Monosaccharid-Einheiten (korrekte *peaks*), als Test mit allen chemischen Verschiebungen der Disaccharide als Ganzes (online), wie auch als Test bestehend aus allen möglichen Kombinationen der chemischen Verschiebungen aller gemessenen Disaccharide (comb) präsentiert. Die Parameter der Hindsgaul-Tests sind im Anhang (Kapitel 12.7.3) zu finden.

6.4.4 Stenutz-Test

Die Stenutz-Datenreihe besteht aus 129 Datensätzen von ungeschützten, kleineren Oligosacchariden (Datensätze_Stenutz.csv; Kapitel 12.3). Alle Netzwerke des Monosaccharid-Ansatzes wurden mit den standardisierten Datensätzen^[119] der Stenutz-Datenreihe getestet. Die Datensätze der Stenutz-Datenreihe wurden den Netzwerken jeweils als Ganzes (online) präsentiert. Die Parameter des Stenutz-Tests sind im Anhang (Kapitel 12.7.4) zu finden.

6.4.5 Instituts-Test

Der Instituts-Test besteht aus sechs *in-house* gemessenen Oligosacchariden (Kapitel 5.5.1.2). Sämtliche Messungen wurden auf dem NMR-Spektrometer des Instituts (Kapitel 5.3) durch Frau Bea Wagner durchgeführt. Als Lösungsmittel wurde für die Substanz 1 deuteriertes Wasser (D₂O), für die Substanz 2 Deuteromethanol

(CD₃OD) und für die restlichen Substanzen Deuterchloroform (CDCl₃) verwendet. Alle Substanzen wurden nach Gottlieb *et al.*^[119] mit 1,4-Dioxan geeicht.

Für den Test wurden sämtliche chemischen Verschiebungen aus dem Programm XWin-NMR^[115] exportiert und als Csv-File (*comma-separated values*) gespeichert. Die Datensätze der institutseigenen Datenreihe wurden den Netzwerken jeweils als Ganzes (online) präsentiert. Die Parameter des Institutstests sind im Anhang (Kapitel 12.7.5) zu finden.

6.5 Disaccharid-Ansatz

Aus den 265 Gruppen wurden in einem ersten Schritt mit dem MG je 40 Modifikationen für jedes *subset* (Training, Selection und Test) generiert. Die einzelnen *subsets* wurden während unterschiedlichen Phasen des Trainings verwendet (siehe Seite 85). Die Modifikationen aller Gruppen wurden mit dem ANN PFG in ein für Statistica lesbares Format umgewandelt.

Erstellen der Modifikationen (MG):

Anzahl Modifikationen pro Subgruppe:	40
Standardshift:	± 1 Standardabweichung
Minimal angewandter Shift:	± 0.5 ppm
Csv-Filename:	DS_sh_ind_mod40_v1.csv

Parameter ANN PFG v0.9.58:

Maske: DS_sh_ind_mod40_v1_step15.msk

ppm Bereich:	177-14 ppm
IU Aktivierung:	0-1
Masken Ausgleich:	10 Pkte
Toleranz:	0 Pkte
Schrittweite:	15 Pkte
SNNS-Kohonen	Ja
Patternfile:	DS_sh_ind_mod40_v1_step15.pat

Netzwerk- und Trainingsparameter Statistica:

Netzwerkparameter:

Methode:	Intelligent Problem Solver
Lernalgorithmus	Standard Backpropagation
Netzwerktypen	3-4 schichtige Multilayer Perzeptrons

6. Praktische Durchführung

Grösse versteckte Schichten:	50-300/70-90 HU
Training mit Auswahl der Eingabevariablen zulassen:	Nein
Schwellen wert:	<i>highest confidence</i>
Klassifizierung:	<i>entropy based</i>
Dauer:	98 Std./18 Std.
Auswahlkriterien:	Fehler und Diversität der Netzwerkarchitektur
Versuchsnummer:	V220, V225
Netzwerk-Filename:	Versuch220_225.snn

Trainingsparameter:

Lernalgorithmus:	Standard Backpropagation
Trainingszyklen:	1000
Lernrate:	0.1
Momentum Term:	0.3
Shuffle:	Ja
Optimierung:	<i>conjugate gradient</i>
Optimierungszyklen:	500
Initialisierung:	<i>random gaussian, 0-1</i>
Klassifizierung:	<i>highest confidence</i>

Literatur-Test (online):

Die Qualität der trainierten Netzwerke wurde mit einem Literatur-Test überprüft. Den trainierten Netzwerken wurden 260 Literaturbeispiele der trainierten Disaccharidgruppen aus der NMR-Datenbank präsentiert. Dabei wurden nur die Peaks der Literaturdatensätze, die den Disaccharidgruppen entsprechen präsentiert. Die Datensätze des Literatur-Tests wurden den Netzwerken jeweils als Ganzes (online) präsentiert. Die Parameter des Literatur-Tests sind im Anhang (Kapitel 12.8.1) zu finden.

7 Resultate und Diskussion

7.1 Substitutionsanalyse

Mit der Substitutionsanalyse sollte in einem ersten Schritt gezeigt werden, wie sich die chemischen Verschiebungen durch eine Substitution verändern ($\Delta\delta$; *glycosylation shift*) und wie weit dieser Einfluss reicht. Die Zuordnung der chemischen Verschiebungen zu den C-Atomen wurde mit Hilfe von Literaturdaten^[123, 130] für die Monosaccharid-Einheiten Glucose, Galactose und Mannose durchgeführt. Die Substitutionsanalyse wurde mit den Mittelwerten des Monosaccharid-Ansatzes erstellt (Kapitel 5.7.2).

7.1.1 Glucose

α -D-Glcp-OH und verwandte Gruppen:

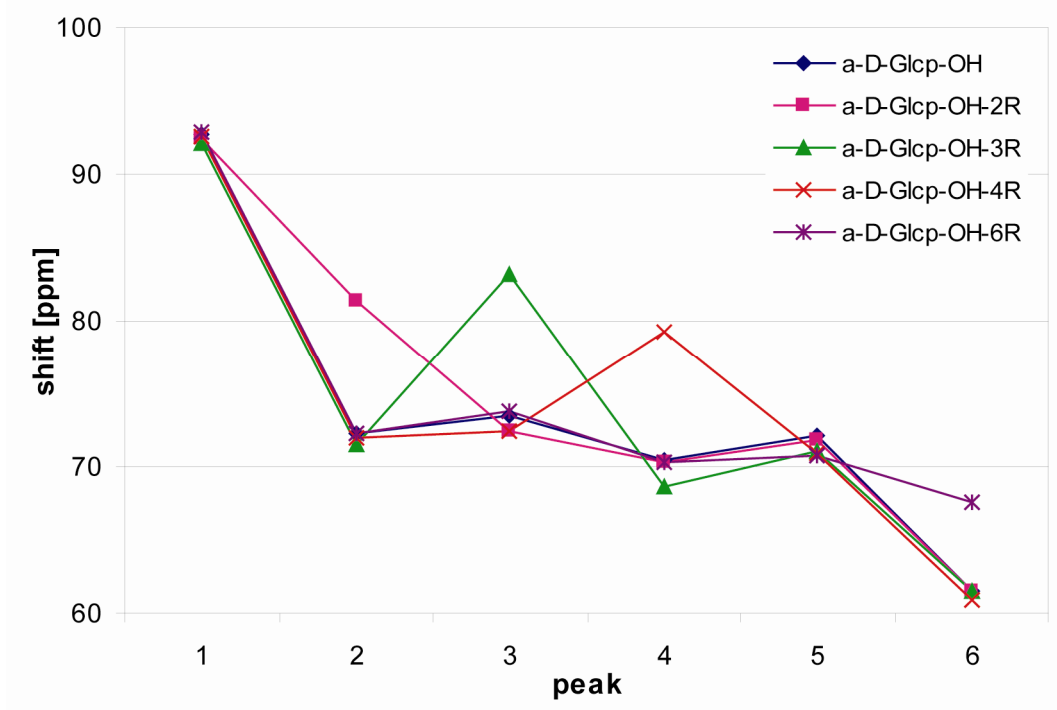


Abbildung 52. Vergleich der Gruppen von α -D-Glcp-OH

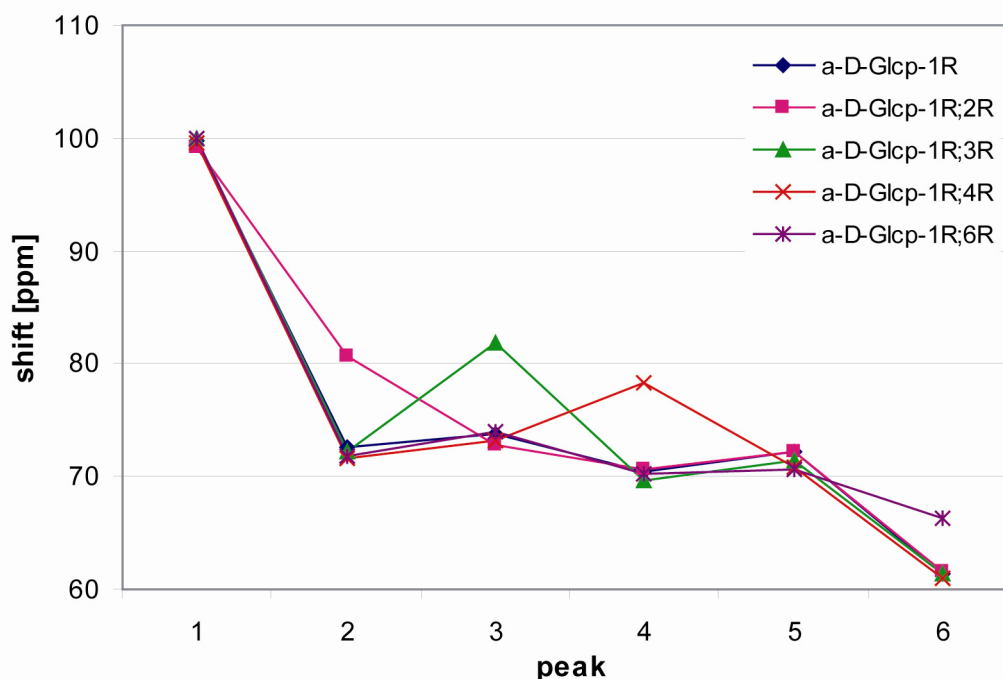
Ausgehend von der Gruppe α -D-Glcp-OH wurde der Einfluss einer Substitution auf die chemischen Verschiebungen der einzelnen C-Atome untersucht. Bei allen untersuchten Gruppen ist der Einfluss direkt am substituierten C-Atom am deutlichsten. Die chemische Verschiebung erhöht sich durch die Substitution in einem Bereich von $\Delta\delta = 6.0$ – 9.6 ppm. Die Substitution hat ebenfalls einen Einfluss auf die benachbarten C-Atome. Dieser Effekt nimmt mit dem Abstand zum Ort der Substitution rasch ab.

Tabelle 37. Substitutionsanalyse α -D-Glcp-OH und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
α -D-Glcp-OH	x	92.77	72.24	73.55	70.49	72.15	61.58
α -D-Glcp-OH-2R	x	92.38	81.36	72.44	70.30	71.75	61.53
	$\Delta\delta$	-0.39	9.11	-1.11	-0.19	-0.40	-0.05
α -D-Glcp-OH-3R	x	92.14	71.49	83.14	68.64	71.09	61.54
	$\Delta\delta$	-0.63	-0.75	9.59	-1.85	-1.06	-0.04
α -D-Glcp-OH-4R	x	92.60	72.02	72.42	79.27	70.90	60.96
	$\Delta\delta$	-0.17	-0.22	-1.13	8.78	-1.25	-0.62
α -D-Glcp-OH-6R	x	92.81	72.30	73.78	70.33	70.70	67.61
	$\Delta\delta$	0.05	0.06	0.23	-0.16	-1.45	6.03

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

α -D-Glcp-1R und verwandte Gruppen:

**Abbildung 53.** Vergleich der Gruppen von α -D-Glcp-1R

Für α -D-Glcp-1R (Abbildung 53) zeigt sich ein ähnliches Bild wie für α -D-Glcp-OH (Abbildung 52). Die chemischen Verschiebungen der anomeren C-Atome liegen hier bedingt durch die Substitution bei durchschnittlich ca. 100 ppm ($\Delta\delta = 6.9$ -7.9 ppm). Alle anderen chemischen Verschiebungen sind vergleichbar mit denjenigen der Gruppen von α -D-Glcp-OH. Auch hier ist der Einfluss der Substitution wiederum

direkt an der Verknüpfungsstelle am höchsten ($\Delta\delta = 4.9\text{--}8.1$ ppm) und nimmt mit zunehmendem Abstand deutlich ab.

Tabelle 38. Substitutionsanalyse α -D-Glcp-1R und verwandte Gruppen

Gruppe		$\Delta\delta_{C1}$ [ppm]	$\Delta\delta_{C2}$ [ppm]	$\Delta\delta_{C3}$ [ppm]	$\Delta\delta_{C4}$ [ppm]	$\Delta\delta_{C5}$ [ppm]	$\Delta\delta_{C6}$ [ppm]
α -D-Glcp-1R	x	99.72	72.59	73.82	70.35	72.15	61.38
α -D-Glcp-1R;2R	x	99.24	80.65	72.82	70.54	72.11	61.54
	$\Delta\delta$	-0.48	8.05	-1.00	0.19	-0.04	0.16
α -D-Glcp-1R;3R	x	100.02	72.17	81.79	69.68	71.37	61.38
	$\Delta\delta$	0.30	-0.42	7.97	-0.67	-0.78	0.00
α -D-Glcp-1R;4R	x	99.59	71.71	73.14	78.30	70.85	60.93
	$\Delta\delta$	-0.13	-0.89	-0.68	7.95	-1.30	-0.45
α -D-Glcp-1R;6R	x	100.01	71.85	74.02	70.21	70.67	66.29
	$\Delta\delta$	0.29	-0.74	0.20	-0.14	-1.48	4.91

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

β -D-Glcp-OH und verwandte Gruppen:

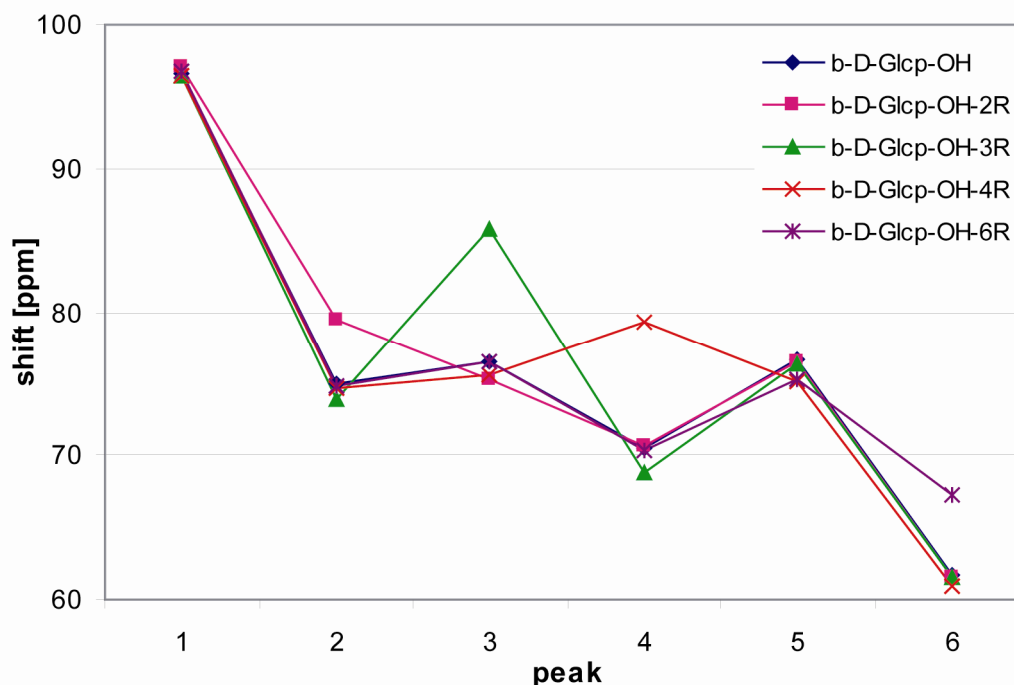


Abbildung 54. Vergleich der Gruppen von β -D-Glcp-OH

Die chemische Verschiebung des C-Atoms am reduzierenden Ende von β -D-Glcp-OH liegt ca. 4.5 ppm über der des gleichen C-Atoms bei α -D-Glcp-OH.

Ausserdem liegt die chemische Verschiebung von C5 verglichen mit den Gruppen von α -D-Glcp-OH immer ca. 4–5 ppm höher. Die chemischen Verschiebungen von C2 und C3 liegen jeweils 2–3 ppm höher. Die Gruppen von α -D-Glcp-OH und β -D-Glcp-OH sind also nicht nur anhand der chemischen Verschiebung ihrer anomeren C-Atome deutlich voneinander unterscheidbar, sondern auch aufgrund der chemischen Verschiebungen von C2, C3 und C5. Die Gruppen α -D-Glcp-OH und β -D-Glcp-OH sollten deshalb gut zu trennen sein.

Tabelle 39. Substitutionsanalyse β -D-Glcp-OH und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
β -D-Glcp-OH	x	96.66	75.02	76.60	70.53	76.62	61.69
β -D-Glcp-OH-2R	x	96.99	79.39	75.29	70.59	76.59	61.49
	$\Delta\delta$	0.34	4.37	-1.31	0.06	-0.03	-0.19
β -D-Glcp-OH-3R	x	96.43	73.83	85.83	68.79	76.38	61.58
	$\Delta\delta$	-0.22	-1.19	9.23	-1.74	-0.25	-0.10
β -D-Glcp-OH-4R	x	96.49	74.68	75.61	79.36	75.10	60.86
	$\Delta\delta$	-0.16	-0.35	-0.99	8.83	-1.52	-0.82
β -D-Glcp-OH-6R	x	96.78	74.88	76.48	70.33	75.22	67.23
	$\Delta\delta$	0.13	-0.15	-0.12	-0.20	-1.40	5.55

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

β -D-Glcp-1R und verwandte Gruppen:

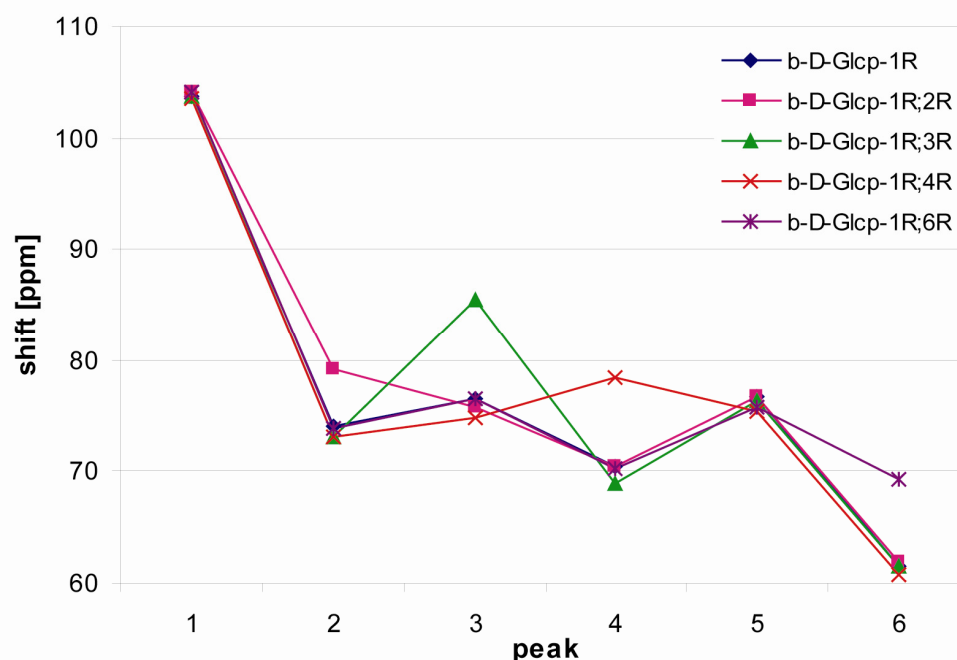


Abbildung 55. Vergleich der Gruppen von β -D-Glcp-1R

Die Substitution am reduzierenden Ende erhöht die chemischen Verschiebung des anomeren C-Atoms der Gruppen von β -D-Glcp-1R im Vergleich mit den entsprechenden Gruppen von α -D-Glcp-1R ($\Delta\delta = 3.8\text{--}4.8$ ppm) und mit β -D-Glcp-OH ($\Delta\delta = 7\text{--}7.4$ ppm) deutlich. Der Effekt einer Substitution an den anderen C-Atomen liegt im Bereich von $\Delta\delta = 5.3\text{--}8.1$ ppm.

Ein Vergleich der chemischen Verschiebungen von C2, C3 und C5 zwischen den Gruppen von α -D-Glcp-1R und β -D-Glcp-1R zeigt ein ähnliches Verhalten, wie bei α -D-Glcp-OH und β -D-Glcp-OH. Die chemischen Verschiebungen sind jeweils deutlich höher für C2 ($\Delta\delta = 1\text{--}2$ ppm), C3 ($\Delta\delta = 1.5\text{--}3.5$ ppm) und C5 ($\Delta\delta = 4.5\text{--}5$ ppm). Die chemischen Verschiebungen der Gruppen von β -D-Glcp-1R unterscheiden sich also ebenfalls deutlich von denen der Gruppen von α -D-Glcp-1R. Von den Gruppen von β -D-Glcp-OH sind die entsprechenden Gruppen durch die Verschiebung des anomeren C-Atoms ebenfalls deutlich unterscheidbar.

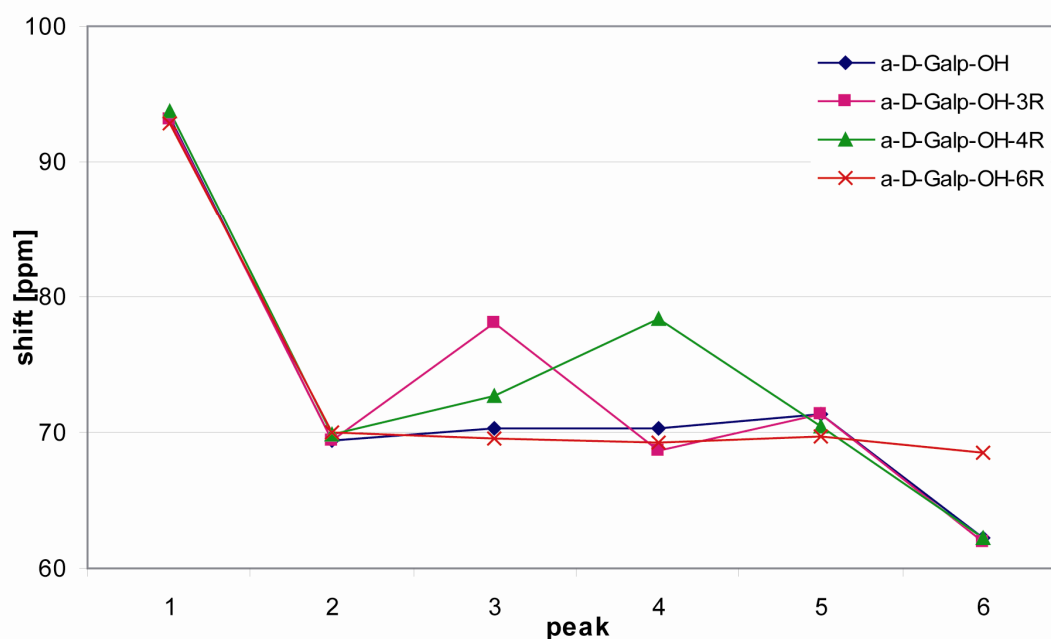
Tabelle 40. Substitutionsanalyse β -D-Glcp-1R und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
β -D-Glcp-1R	x	103.63	73.99	76.52	70.48	76.66	61.60
β -D-Glcp-1R;2R	x	104.04	79.28	75.69	70.51	76.71	61.81
	$\Delta\delta$	0.41	5.29	-0.83	0.03	0.05	0.21
β -D-Glcp-1R;3R	x	103.78	73.09	85.48	69.01	76.27	61.54
	$\Delta\delta$	0.14	-0.89	8.96	-1.47	-0.39	-0.06
β -D-Glcp-1R;4R	x	103.52	73.19	74.80	78.53	75.44	60.70
	$\Delta\delta$	-0.11	-0.80	-1.72	8.05	-1.22	-0.90
β -D-Glcp-1R;6R	x	104.16	73.81	76.60	70.21	75.70	69.30
	$\Delta\delta$	0.53	-0.17	0.08	-0.26	-0.96	7.70

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

Mit den Glucosamin-Gruppen wurde keine Substitutionsanalyse durchgeführt, da zu wenige Literaturdaten für einen Vergleich vorhanden sind.

7.1.2 Galactose

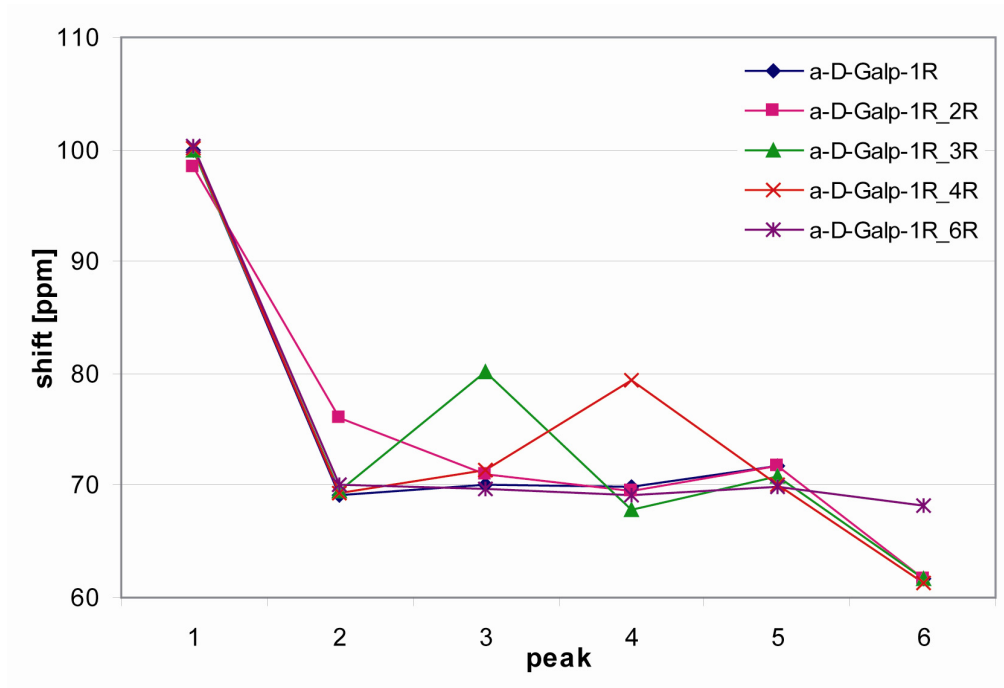
 α -D-Galp-OH und verwandte Gruppen:Abbildung 56. Vergleich der Gruppen von α -D-Galp-OH

Ausgehend von α -D-Galp-OH wurden die einzelnen Gruppen untereinander verglichen. Die chemischen Verschiebungen werden durch die Substitution deutlich erhöht ($\Delta\delta = 6.4\text{--}8.1$ ppm). Der Konfigurationsunterschied zwischen Glucose und Galactose an C4 (äquatoriale versus axiale Stellung der Hydroxylgruppe) bewirkt keinen signifikanten Unterschied der chemischen Verschiebungen. Ein deutlicher Unterschied hingegen zeigt sich für α -D-Glcp-OH / α -D-Galp-OH bei C2 ($|\Delta\delta| = 2.0\text{--}2.8$ ppm) und C3 ($|\Delta\delta| = 0.3\text{--}5.0$ ppm). Durch diese Unterschiede sollten die Monosaccharid-Einheiten Glucose und Galactose aufgetrennt werden können.

Tabelle 41. Substitutionsanalyse α -D-Galp-OH und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
α -D-Galp-OH	x	93.29	69.47	70.35	70.24	71.40	62.17
α -D-Galp-OH-3R	x	93.14	69.47	78.12	68.60	71.30	61.89
	$\Delta\delta$	-0.15	0.00	7.77	-1.64	-0.10	-0.28
α -D-Galp-OH-4R	x	93.69	69.79	72.69	78.29	70.39	62.19
	$\Delta\delta$	0.41	0.32	2.34	8.05	-1.01	0.02
α -D-Galp-OH-6R	x	92.91	69.94	69.61	69.21	69.71	68.58
	$\Delta\delta$	-0.38	0.47	-0.74	-1.03	-1.69	6.41

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

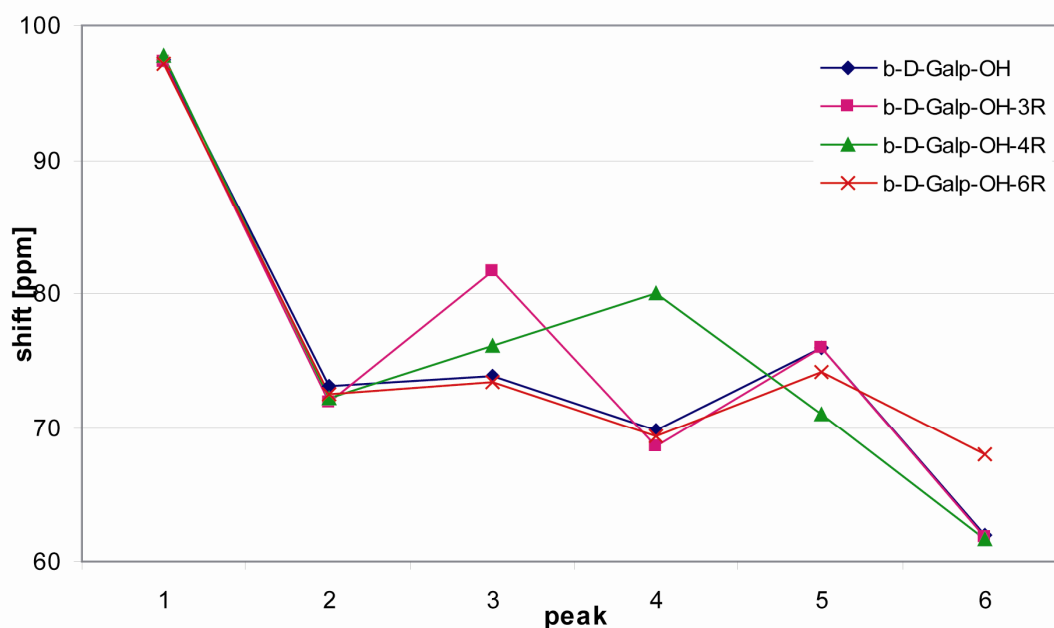
α -D-Galp-1R und verwandte Gruppen:Abbildung 57. Vergleich der Gruppen von α -D-Galp-1R

Die chemischen Verschiebungen der Gruppen für α -D-Galp-1R sind wie schon bei Glucose mit Ausnahme von C1 ($\Delta\delta = 6.5\text{--}7.3$ ppm) vergleichbar mit denen von α -D-Galp-OH. Auch hier ist der Effekt mit $\Delta\delta = 6.5\text{--}10.0$ ppm am Substitutionsort am höchsten und nimmt mit zunehmendem Abstand ab.

Tabelle 42. Substitutionsanalyse α -D-Galp-1R und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
α -D-Galp-1R	x	99.99	69.12	70.09	69.90	71.69	61.75
α -D-Galp-1R;2R	x	98.41	75.96	70.92	69.51	71.79	61.75
	$\Delta\delta$	-1.58	6.84	0.82	-0.39	0.09	0.00
α -D-Galp-1R;3R	x	99.93	69.43	80.12	67.91	70.89	61.70
	$\Delta\delta$	-0.06	0.31	10.03	-1.98	-0.80	-0.05
α -D-Galp-1R;4R	x	100.18	69.31	71.39	79.35	70.15	61.35
	$\Delta\delta$	0.19	0.19	1.30	9.45	-1.54	-0.41
α -D-Galp-1R;6R	x	100.22	70.11	69.65	69.21	69.97	68.24
	$\Delta\delta$	0.24	0.99	-0.44	-0.69	-1.72	6.49

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

β -D-Galp-OH und verwandte Gruppen:**Abbildung 58.** Vergleich der Gruppen von β -D-Galp-OH

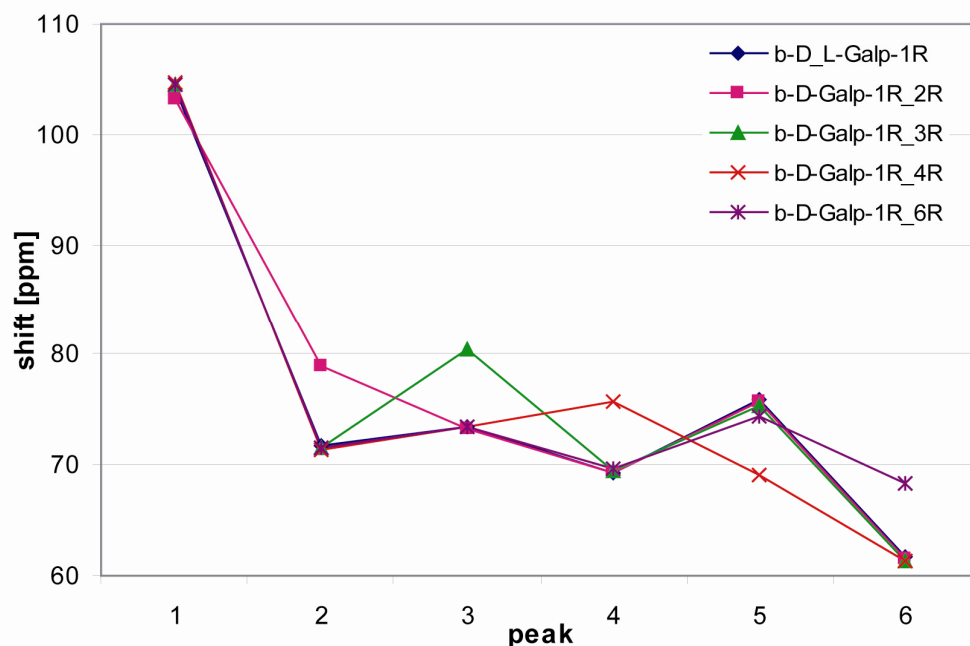
Im Vergleich der chemischen Verschiebungen von C1 β -D-Galp-OH mit den entsprechenden Gruppen von α -D-Galp-OH zeigt sich der zu erwartende deutliche Unterschied ($\Delta\delta = 4.1\text{--}4.2$ ppm). Auch bei C2, C3 und C5 zeigen sich deutliche Unterschiede. Einzig die chemischen Verschiebungen von C4 und C6 sind relativ ähnlich. Eine Unterscheidung zwischen α - und β -Konfiguration sollte aber dennoch möglich sein. Es existieren sowohl für α -D-Galp-OH wie auch für β -D-Galp-OH keine Literaturbeispiele für die an C2 substituierte Gruppe (α/β -D-Galp-OH-2R).

Die chemischen Verschiebungen der C-Atome von β -D-Galp-OH verändern sich durch eine Substitution im Bereich von $\Delta\delta = 6.1\text{--}10.3$ ppm.

Tabelle 43. Substitutionsanalyse β -D-Galp-OH und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
β -D-Galp-OH	x	97.43	73.03	73.89	69.79	76.01	61.97
β -D-Galp-OH-3R	x	97.23	71.94	81.64	68.50	75.99	61.84
	$\Delta\delta$	-0.20	-1.09	7.75	-1.29	-0.02	-0.13
β -D-Galp-OH-4R	x	97.74	72.19	76.14	80.04	70.99	61.59
	$\Delta\delta$	0.31	-0.84	2.26	10.25	-5.03	-0.38
β -D-Galp-OH-6R	x	97.08	72.44	73.31	69.34	74.11	68.04
	$\Delta\delta$	-0.35	-0.58	-0.58	-0.45	-1.90	6.08

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

β -D-Galp-1R und verwandte Gruppen:**Abbildung 59.** Vergleich der Gruppen von β -D-Galp-1R

Die Veränderung der chemischen Verschiebung an C1 bewegt sich im Vergleich mit α -D-Galp-1R ($\Delta\delta = 4.1\text{--}4.7$ ppm) und β -D-Galp-OH ($\Delta\delta = 6.6\text{--}7.4$ ppm) im erwarteten Rahmen. Auch die Veränderung der chemischen Verschiebung durch Substitution der anderen C-Atome von β -D-Galp-1R liegt im gewohnten Bereich von $\Delta\delta = 6.6\text{--}7.2$ ppm. Die Auftrennung von Galactose in die einzelnen Gruppen und eine Unterscheidung von den entsprechenden Gruppen von Glucose sollten also prinzipiell möglich sein.

Tabelle 44. Substitutionsanalyse β -D-Galp-1R und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
β -D-Galp-1R	x	104.07	71.72	73.36	69.32	75.89	61.65
β -D-Galp-1R;2R	x	103.09	78.94	73.29	69.34	75.69	61.44
	$\Delta\delta$	-0.98	7.22	-0.07	0.02	-0.20	-0.21
β -D-Galp-1R;3R	x	104.49	71.53	80.41	69.56	75.26	61.31
	$\Delta\delta$	0.41	-0.19	7.04	0.24	-0.63	-0.35
β -D-Galp-1R;4R	x	104.68	71.35	73.46	75.69	69.18	61.39
	$\Delta\delta$	0.61	-0.37	0.10	6.37	-6.71	-0.27
β -D-Galp-1R;6R	x	104.46	71.56	73.44	69.64	74.32	68.29
	$\Delta\delta$	0.38	-0.15	0.08	0.32	-1.57	6.64

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

7.1.3 Mannose

α -D-Manp-OH und verwandte Gruppen:

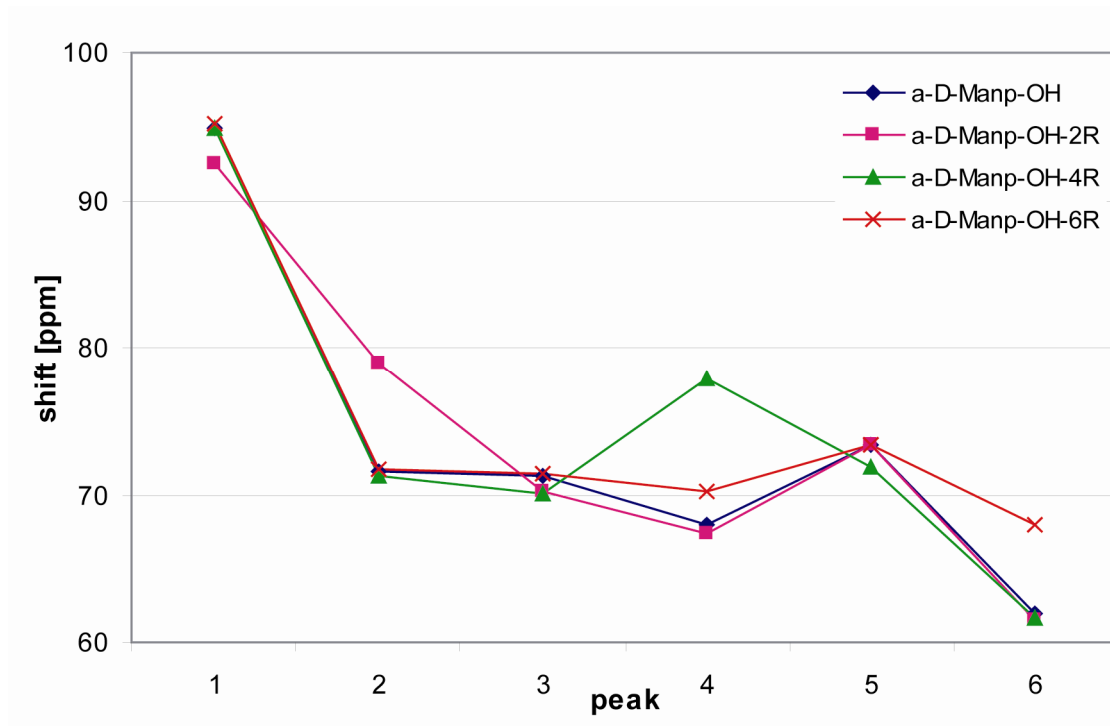


Abbildung 60. Vergleich der Gruppen von α -D-Manp-OH

Glucose und Mannose unterscheiden sich nur durch die äquatoriale respektive die axiale Stellung der Hydroxylgruppe an C2 voneinander (Abbildung 34 und Abbildung 36). Die chemischen Verschiebungen von α -D-Glcp-OH und α -D-Manp-OH unterscheiden sich jedoch nicht an C2 sondern vor allem an C1, C3 und C4 voneinander ($\Delta\delta = 2.2$ – 2.6 ppm).

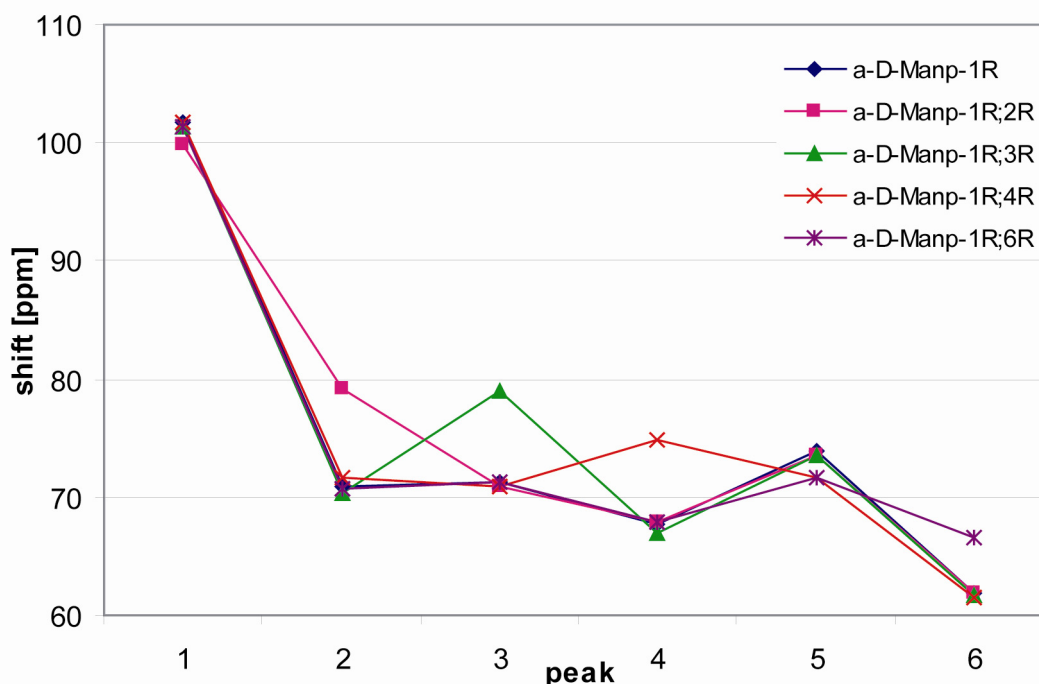
Die einzelnen Gruppen von α -D-Manp-OH unterscheiden sich deutlich untereinander. Der Effekt einer Substitution ist wie immer am Verknüpfungspunkt am stärksten ($\Delta\delta = 6.0$ – 10.0 ppm) und nimmt mit steigendem Abstand ab. In der Literatur wurden keine Datensätze für die Gruppe α -D-Manp-OH-3R gefunden.

Tabelle 45. Substitutionsanalyse α -D-Manp-OH und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
α -D-Manp-OH	x	94.92	71.64	71.20	67.90	73.32	61.97
α -D-Manp-OH-2R	x	92.41	78.88	70.16	67.37	73.31	61.54
	$\Delta\delta$	-2.50	7.24	-1.04	-0.53	-0.01	-0.43
α -D-Manp-OH-4R	x	94.83	71.25	70.05	77.89	71.93	61.65
	$\Delta\delta$	-0.09	-0.39	-1.15	9.99	-1.38	-0.32
α -D-Manp-OH-6R	x	95.19	71.79	71.49	70.29	73.39	67.99
	$\Delta\delta$	0.27	0.15	0.29	2.39	0.08	6.02

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

α -D-Manp-1R und verwandte Gruppen:

**Abbildung 61.** Vergleich der Gruppen von α -D-Manp-1R

Für α -D-Manp-1R wurden alle möglichen Substitutionsmuster gefunden. Im Vergleich von α -D-Manp-1R zu α -D-Manp-OH steigt die chemische Verschiebung durch eine Substitution an C1 um $\Delta\delta = 6.2$ – 7.4 ppm. Die chemischen Verschiebungen der restlichen C-Atome sind miteinander vergleichbar.

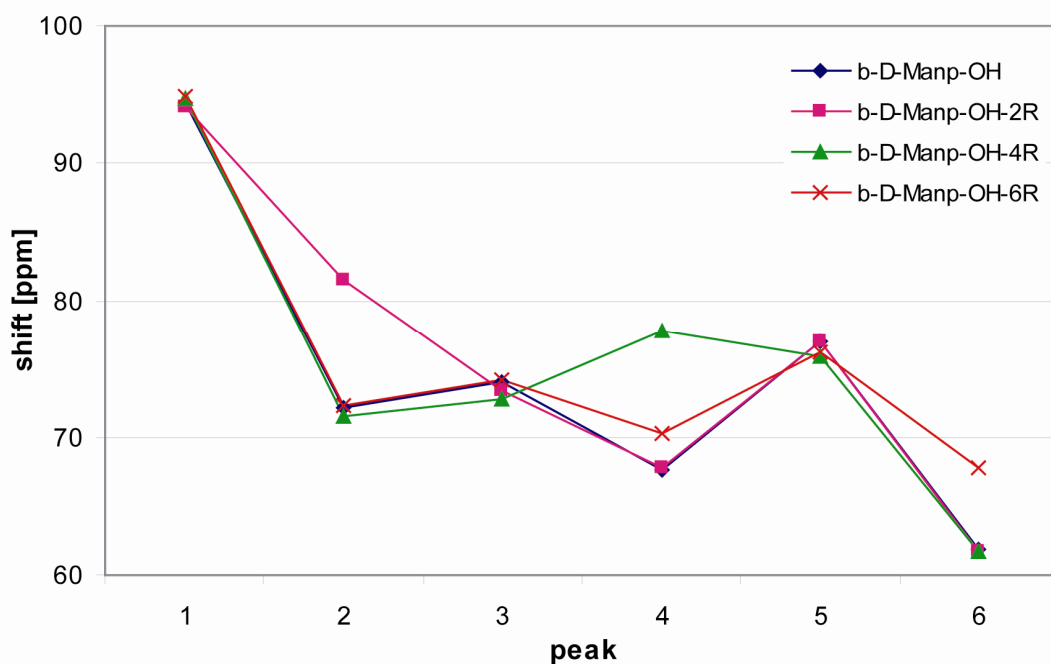
Der Effekt einer Substitution an den anderen C-Atomen des Pyranoserings bewegt sich in einem vergleichbaren Bereich von $\Delta\delta = 4.8$ – 8.2 ppm, wie bei den anderen untersuchten Monosaccharid-Einheiten.

Tabelle 46. Substitutionsanalyse α -D-Manp-1R und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
α -D-Manp-1R	x	101.74	70.96	71.35	67.65	73.91	61.80
α -D-Manp-1R;2R	x	99.82	79.20	70.93	67.92	73.51	61.90
	$\Delta\delta$	-1.91	8.24	-0.42	0.27	-0.40	0.10
α -D-Manp-1R;3R	x	101.41	70.32	79.07	66.89	73.58	61.64
	$\Delta\delta$	-0.33	-0.64	7.72	-0.76	-0.32	-0.16
α -D-Manp-1R;4R	x	101.76	71.63	70.93	74.76	71.63	61.53
	$\Delta\delta$	0.02	0.67	-0.42	7.11	-2.28	-0.27
α -D-Manp-1R;6R	x	101.35	70.69	71.35	67.83	71.59	66.59
	$\Delta\delta$	-0.39	-0.27	0.01	0.19	-2.31	4.79

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

β -D-Manp-OH und verwandte Gruppen:

**Abbildung 62.** Vergleich der Gruppen von β -D-Manp-OH

Die chemischen Verschiebungen der anomeren C-Atome in β -Konfiguration der Monosaccharid-Einheiten Glucose und Galactose liegen immer deutlich höher ($\Delta\delta = 3.8\text{--}7.4$ ppm) als in der entsprechenden α -Konfiguration. Im Vergleich dazu liegend die chemischen Verschiebungen der anomeren C-Atome von α -D-Manp-OH und β -D-Manp-OH erstaunlicherweise in einem vergleichbaren Bereichen um

7. Resultate und Diskussion

94 ppm. Die chemischen Verschiebungen der Atome C3 und C5 dagegen unterscheiden sich deutlich voneinander. Die Unterschiede liegen für C3 im Bereich von $\Delta\delta = 2.7\text{--}3.3$ ppm und für C5 im Bereich von $\Delta\delta = 2.8\text{--}3.9$ ppm. Dieser Unterschied sollte ausreichen, um die Gruppen von α -D-Manp-OH und β -D-Manp-OH voneinander unterscheiden zu können.

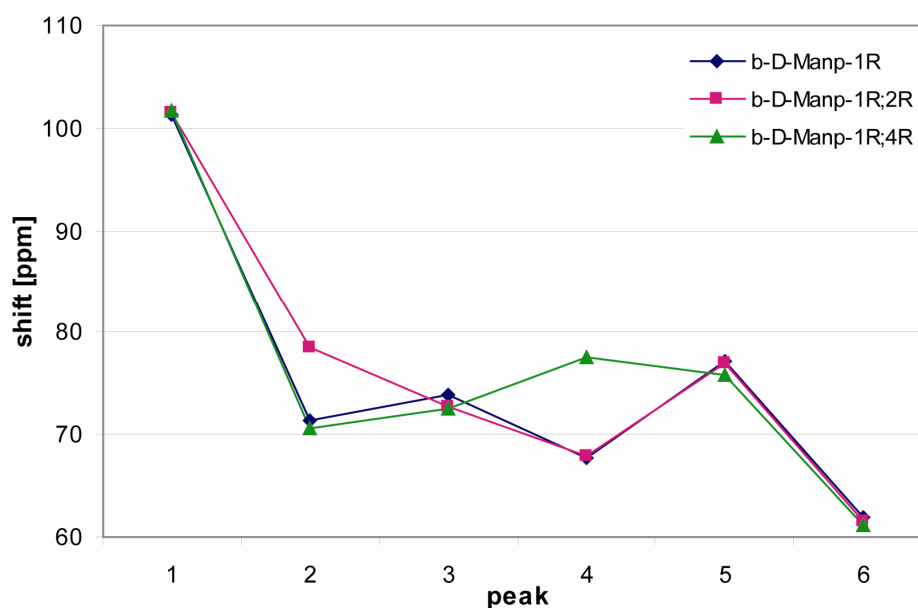
Der Effekt einer Substitution an den übrigen C-Atomen des Pyranoserings bewegt sich in einem vergleichbaren Bereich von $\Delta\delta = 5.9\text{--}10.2$ ppm, wie bei den anderen untersuchten Monosaccharid-Einheiten.

Trotz einer intensiven Literaturrecherche konnten für die Gruppe β -D-Manp-OH-3R, wie schon für α -D-Manp-OH-3R keine Literaturdatensätze gefunden werden.

Tabelle 47. Substitutionsanalyse β -D-Manp-OH und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
β -D-Manp-OH	x	94.47	72.11	73.96	67.64	77.00	61.94
β -D-Manp-OH-2R	x	94.11	81.41	73.42	67.72	76.97	61.64
	$\Delta\delta$	-0.36	9.30	-0.54	0.08	-0.03	-0.30
β -D-Manp-OH-4R	x	94.75	71.49	72.79	77.79	75.81	61.73
	$\Delta\delta$	0.28	-0.62	-1.17	10.15	-1.19	-0.21
β -D-Manp-OH-6R	x	94.89	72.29	74.19	70.29	76.19	67.79
	$\Delta\delta$	0.42	0.18	0.23	2.65	-0.81	5.85

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

β -D-Manp-1R und verwandte Gruppen:**Abbildung 63.** Vergleich der Gruppen von β -D-Manp-1R

Wie schon bei α -D-Manp-OH oder β -D-Manp-OH ist auch hier kaum ein Unterschied der chemischen Verschiebungen der anomeren C-Atome von α -D-Manp-1R und β -D-Manp-1R feststellbar. Auch hier unterscheiden sich die Atome C3 ($\Delta\delta = 1.6$ – 2.6 ppm) und C5 ($\Delta\delta = 3.3$ – 4.2 ppm) aber genügend deutlich voneinander, so dass eine Unterscheidung zwischen α - und β -Konfiguration möglich sein sollte. Der Effekt einer Substitution liegt für die Gruppen von β -D-Manp-1R im Bereich von $\delta\Delta = 7.2$ – 9.8 ppm. Für β -D-Manp-1R wurden für die Gruppen β -D-Manp-1R;3R und β -D-Manp-1R;6R keine Literaturdatensätze gefunden.

Tabelle 48. Substitutionsanalyse β -D-Manp-1R und verwandte Gruppen

Gruppe		δ_{C1} [ppm]	δ_{C2} [ppm]	δ_{C3} [ppm]	δ_{C4} [ppm]	δ_{C5} [ppm]	δ_{C6} [ppm]
β -D-Manp-1R	x	101.30	71.45	73.89	67.75	77.18	61.92
β -D-Manp-1R;2R	x	101.53	78.61	72.66	68.01	77.00	61.52
	$\Delta\delta$	0.23	7.16	-1.23	0.26	-0.17	-0.39
β -D-Manp-1R;4R	x	101.70	70.60	72.50	77.50	75.80	61.20
	$\Delta\delta$	0.40	-0.85	-1.39	9.75	-1.38	-0.71

x: Mittelwert; $\Delta\delta$: Veränderung durch Substitution

Durch die Substitutionsanalyse konnte gezeigt werden, welchen Einfluss eine Substitution auf das jeweilige C-Atom und seine benachbarten Atome hat. Die einzelnen Gruppen der Monosaccharid-Einheiten unterscheiden sich deutlich

voneinander. Eine Klassifizierung der Mittelwerte in die einzelnen Gruppen scheint prinzipiell möglich zu sein.

Die Veränderung der chemischen Verschiebungen durch eine Substitution liegt bei allen untersuchten Monosaccharid-Einheiten in einem vergleichbaren Bereich. Die Veränderung liegt im Bereich von 4–10 ppm und nimmt mit dem Abstand zur Substitutionsstelle rasch ab.

7.1.4 Substitution am anomeren Zentrum

Eine Substitution am anomeren C-Atom hat einen vergleichbaren Effekt bei allen untersuchten Monosaccharid-Einheiten. Durch die Substitution an C1 wird die chemische Verschiebung deutlich erhöht:

Tabelle 49. Veränderung der chemischen Verschiebung durch Substitution an C1

Monosaccharid-Einheit	Konfiguration	δ_{OH} [ppm]	$\delta_{1\text{R}}$ [ppm]	$\Delta\delta$ [ppm]
D-Glcp	α	92.77	99.72	+ 6.95
	β	96.66	103.63	+ 6.98
D-Galp	α	93.29	99.99	+ 6.70
	β	97.43	104.07	+ 6.64
D-Manp	α	94.92	101.74	+ 6.82
	β	94.47	101.30	+ 6.83

Die α - und β -Konfigurationen von Glucose und Galactose können an der chemischen Verschiebung des anomeren C-Atoms deutlich unterschieden werden. Eine Ausnahme bildet hingegen die Monosaccharid-Einheit Mannose. Erstaunlicherweise zeigt sich hier kaum ein Unterschied zwischen den chemischen Verschiebungen der α - und β -Konfigurationen der anomeren C-Atome. Dies gilt sowohl für unsubstituierte, wie auch für substituierte Mannosen (Tabelle 50). Eine Unterscheidung der α - und β -Konfigurationen von Mannose sollte aber durch den Unterschied der chemischen Verschiebungen von C3 und C5 trotzdem möglich sein.

Tabelle 50. Veränderung der chemischen Verschiebung bei Übergang von α - zu β -Konfiguration

Gruppe	δ_{α} [ppm]	δ_{β} [ppm]	$\Delta\delta$ [ppm]
D-Glcp-OH	92.77	96.66	3.89
D-Glcp-1R	99.72	103.63	3.91
D-Galp-OH	93.29	97.43	4.15
D-Galp-1R	99.99	104.07	4.09
D-Manp-OH	94.92	94.47	0.45
D-Manp-1R	101.74	101.30	0.44

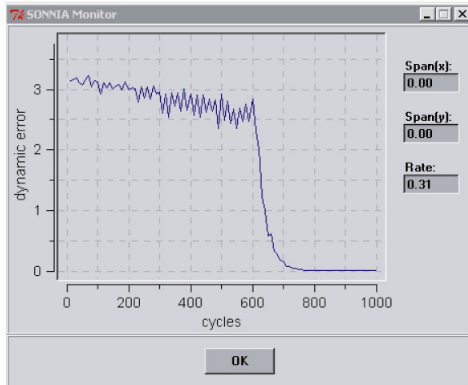
Da sich auch für die Literaturdaten von Monosaccharid-Einheiten gleichen Typs, Konfiguration und Substitution (Inkrementen) sehr ähnliche chemische Verschiebungsmuster ergeben (Kapitel 5.4.2), sollte es möglich sein diese Muster auch aus komplexen Oligosaccharidspektren heraus erkennen zu können.

7.2 Selbst organisierende Karten (SOM)

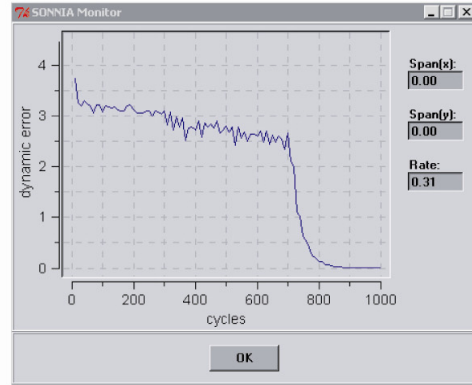
Zu Beginn der Arbeit mit künstlichen neuronalen Netzwerken sollte überprüft werden, ob die selbst gewählte Einteilung in die einzelnen Gruppen (Kapitel 5.7.2) sinnvoll ist und sich der Zusammenhang auch mit selbst-organisierenden Karten herstellen lässt. Der Nachweis dafür, dass die für die Einteilung notwendige Information in den Peaklisten der ^{13}C -NMR Spektren vorhanden ist, wurde bereits früher erbracht^[103]. Nun sollte in einem weiteren Schritt gezeigt werden, dass die für die Klassifizierung notwendige Information nicht durch die Datenkomprimierung des ANN PFG, von durchschnittlich 99.5% gegenüber einem klassischen ^{13}C -NMR Spektrum (Tabelle 24, Seite 94), verloren geht.

Wenn es möglich ist, die Gruppen mit einer selbst-organisierenden Karte aufzuteilen, dann sollte dies auch mit einem Netzwerk möglich sein, das nach dem Backpropagation Lernverfahren trainiert ist. Netzwerke, die nach dem Backpropagation Lernverfahren trainiert werden, besitzen den Vorteil, dass sie eine höhere Stabilität gegenüber verrauschten, verschobenen oder unvollständigen Mustern haben. Für jede Monosaccharid-Einheit wurde mit dem Programm SONNIA^[105] ein eigenes Kohonennetzwerk trainiert. Abbildung 64 und Abbildung 65 zeigen die Trainingskurven aller Netzwerke. Für alle Monosaccharid-Einheiten konnte während des Trainingsprozesses nach maximal 1000 Trainingszyklen ein lokales Minimum gefunden werden.

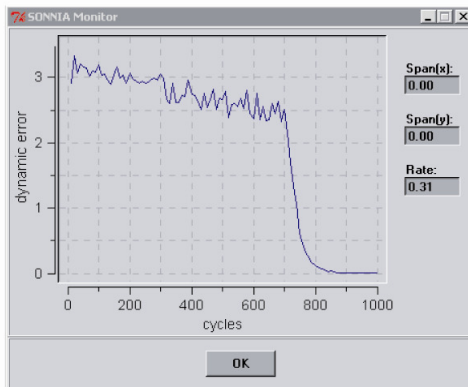
7. Resultate und Diskussion



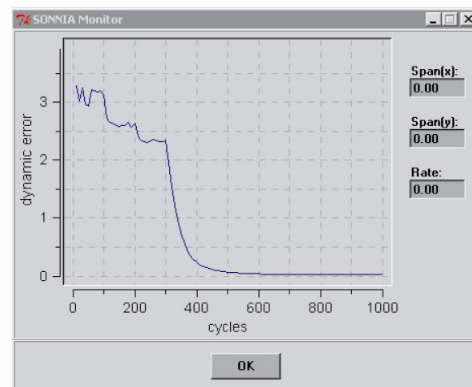
Lernkurve glc_1000.knet



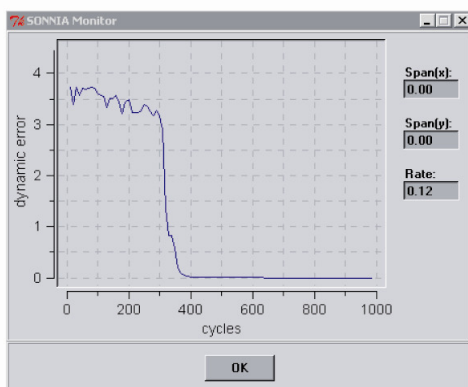
Lernkurve gal_1000.knet



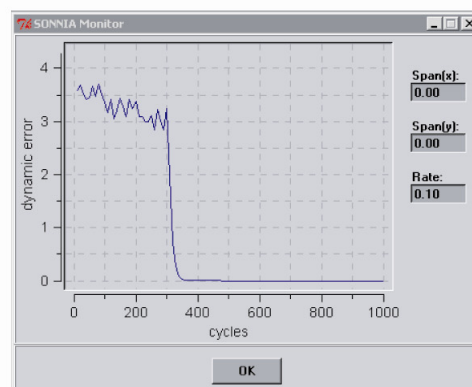
Lernkurve man_1000.knet



Lernkurve fuc_1000.knet



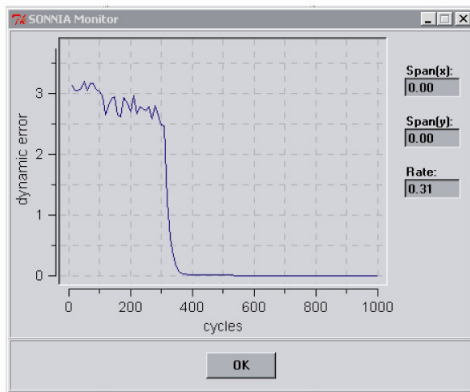
Lernkurve glcnac_1000.knet



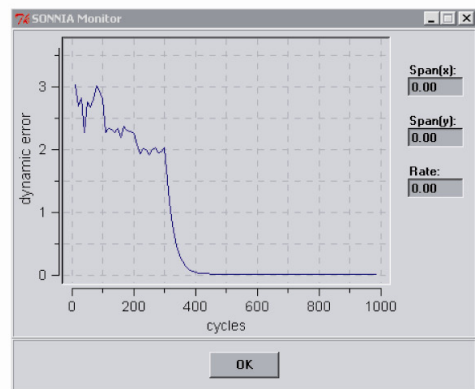
Lernkurve galnac_1000.knet

Abbildung 64. Trainingskurven selbst-organisierende Karten (1)

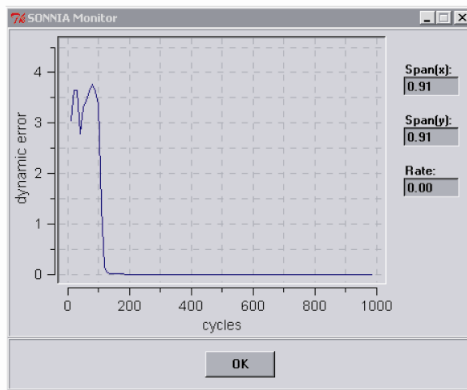
7. Resultate und Diskussion



Lernkurve xyl_1000.knet



Lernkurve glca_1000.knet



Lernkurve neunac_1000.knet

Abbildung 65. Trainingskurven selbst-organisierende Karten (2)

Die Auswertung der trainierten Kohonenkarten zeigte, dass alle Gruppen der Monosaccharid-Einheiten aufgetrennt werden konnten (Abbildung 66). Jede Gruppe einer Monosaccharid-Einheit wird auf der Kohonenkarte durch eine Farbe repräsentiert. Da die aktuelle Version von SONNIA^[105] nur 8 Farben unterstützt, wurden die Karten von Glucose, Galactose, Mannose, Xylose, *N*-Acetyl Glucosamin und *N*-Acetyl Galactosamin von Hand nachgefärbt. Weiße Felder auf der Karte stellen Neuronen ohne Aktivierungen dar. Auf allen Kohonenkarten ist jedes aktivierte Neuron mit nur einer Gruppe belegt. Dies bedeutet, dass keine Konflikte mehr zwischen den Gruppen bestehen und die Monosaccharid-Gruppen mit den Kohonennetzwerken erfolgreich aufgeteilt werden konnten.

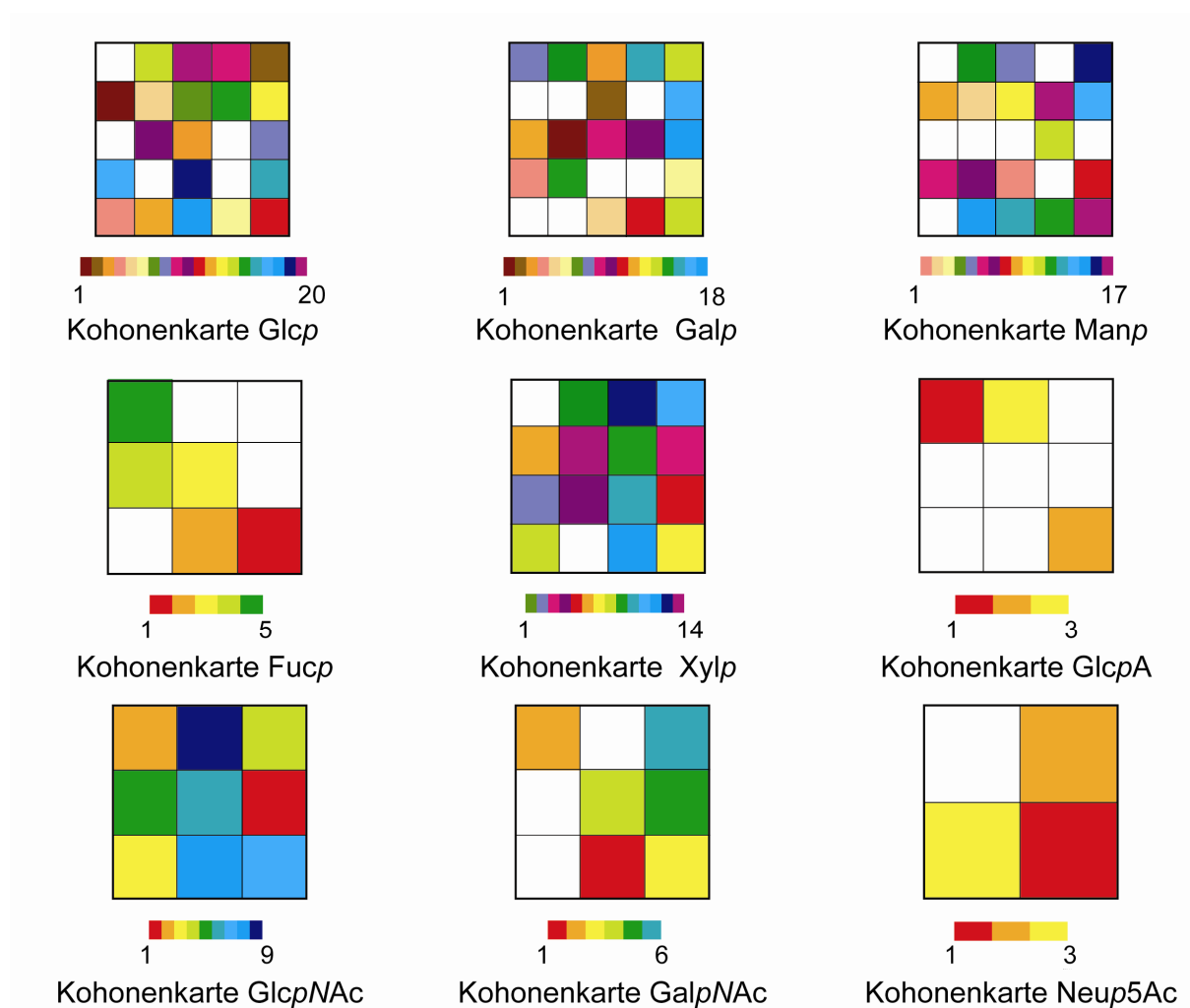


Abbildung 66. Kohonenkarten Monosaccharide

Damit wurde gezeigt, dass die gewählte Auftrennung in die Monosaccharid-Gruppen möglich ist, und der Informationsgehalt trotz der Datenkomprimierung durch den ANN PFG erhalten bleibt.

7.3 Nachbargruppen-Ansatz

In einem zweiten Lösungsansatz wurde die räumliche Umgebung der einzelnen Atome statt des ganzen Zuckers als Gruppe zu kodieren. Eine Übersicht der mit Statistica^[104] trainierten Netzwerke ist in den folgenden Tabellen dargestellt. Training, Test und Selection sind verschiedene *subsets*, die während unterschiedlichen Phasen des Trainingsprozesses verwendet werden (siehe Seite 85). Die Netzwerke sind nach Ausgabemuster (mono-out, poly-out) und nach Variation (*shift*) getrennt aufgelistet (Kapitel 6.3).

7.3.1 Auswertung der trainierten Netzwerke

Die Performance der Netzwerke kann Werte zwischen 0 (keine Erkennung) und 1 (maximale Erkennung aller präsentierten Muster) annehmen. Sie ist ein Mass für die Güte des trainierten Netzwerkes. In Abbildung 67 ist die Test-Performance der Netzwerke, die mit Mono-out trainiert wurden, dargestellt. Je grösser die Variation (*shift*) der Trainingsdaten ist (Kapitel 5.7.2.1), desto geringer ist die Testperformance der Netzwerke. Eine zu grosse Variation der Trainingsdaten könnte also einen negativen Einfluss auf die Generalisierungsfähigkeit des Netzwerkes haben. Interessanterweise nimmt die Performance bei Netzwerken mit grösserer versteckter Schicht tendenziell ab. Obwohl das Problem mit 72 Gruppen subjektiv relativ kompliziert scheint, gelingt es kleineren Netzwerken besser die präsentierten Eingaben korrekt zu klassifizieren. In weiteren Versuchen sollte die optimale Grösse der versteckten Schicht noch genauer bestimmt werden. Eine detaillierte Auswertung der trainierten Netzwerke ist im Anhang (Kapitel 12.9) zu finden.

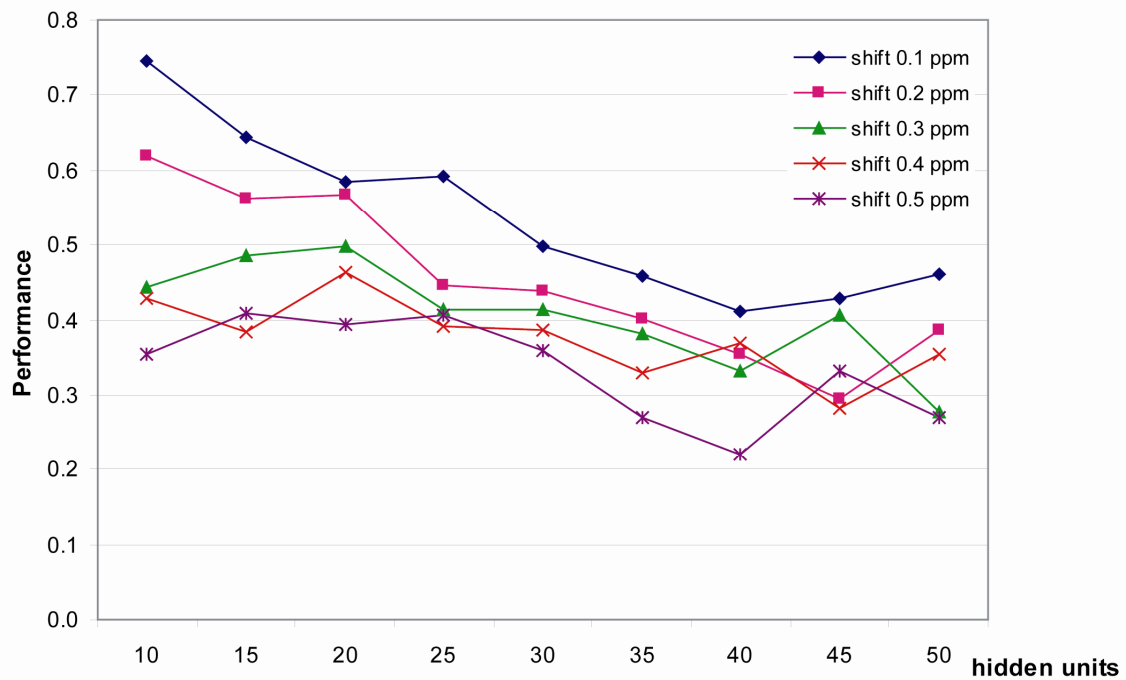


Abbildung 67. Testperformance Mono-out

Tabelle 51. Testperformance Mono-out

Grösse versteckte Schicht	Shift in [ppm]				
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
10	0.75	0.62	0.44	0.43	0.35
15	0.64	0.56	0.49	0.38	0.41
20	0.58	0.57	0.50	0.46	0.39
25	0.59	0.45	0.41	0.39	0.41
30	0.50	0.44	0.41	0.39	0.36
35	0.46	0.40	0.38	0.33	0.27
40	0.41	0.35	0.33	0.37	0.22
45	0.43	0.29	0.41	0.28	0.33
50	0.46	0.39	0.28	0.36	0.27

Der mittlere Fehler (Kapitel 5.6.4.4) ist die mittlere Abweichung der Fehlerquadrate des einzelnen Ausgabemusters von der gewünschten Ausgabe. Der mittlere Fehler des Trainingsdatensatzes ist ein guter Indikator für die Generalisierungsfähigkeit eines Netzwerkes. Der mittlere Fehler des Testdatensatzes der trainierten Netzwerke nimmt mit der Grösse der versteckten Schicht tendenziell zu. Dieser Anstieg deutet analog zum Vergleich der Test-Performance, darauf hin, dass sich die Netzwerke die präsentierten Pattern, mit einer grösseren versteckten Schicht als 10–20 Neuronen, zu gut antrainieren können. Die zu gute Anpassung der Gewichte (auch *overfitting*, Abbildung 18), führt zu einer erniedrigten Generalisierungsfähigkeit der trainierten Netzwerke. Analog zum Vergleich der Testperformance steigt der Fehler, je grösser die Variation (*shift*) der präsentierten Trainingsdaten (Kapitel 5.7.2.1) ist. Für die Pattern des Nachbargruppen-Ansatzes ist eine zu grosse Variation der Trainingsdaten offenbar nicht von Vorteil.

7. Resultate und Diskussion

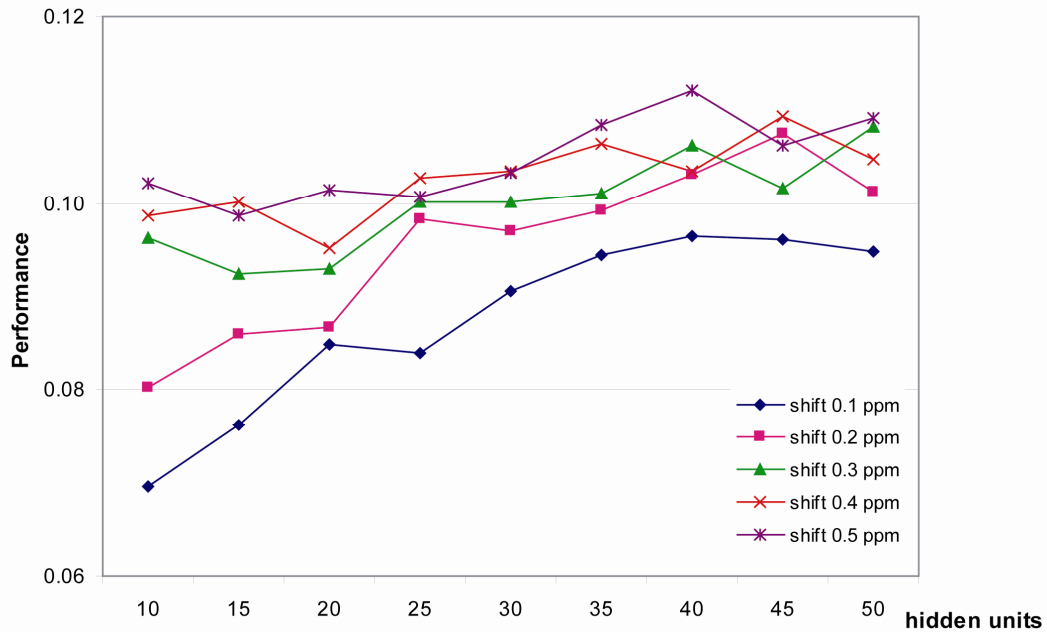


Abbildung 68. Mittlerer Fehler Mono-out

Tabelle 52. Mittlerer Fehler Mono-out

Grösse versteckte Schicht	Shift in [ppm]				
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
10	0.07	0.08	0.10	0.10	0.10
15	0.08	0.09	0.09	0.10	0.10
20	0.08	0.09	0.09	0.10	0.10
25	0.08	0.10	0.10	0.10	0.10
30	0.09	0.10	0.10	0.10	0.10
35	0.09	0.10	0.10	0.11	0.11
40	0.10	0.10	0.11	0.10	0.11
45	0.10	0.11	0.10	0.11	0.11
50	0.09	0.10	0.11	0.10	0.11

Die Netzwerke mit der binär codierten Ausgabe (Poly-out) zeigen im Vergleich eine gute Performance. Dabei scheinen weder die Grösse der versteckten Schicht noch die Grösse der verwendeten Variation (*shift*) einen Einfluss auf das Resultat zu haben. Die beiden untersuchten Parameter scheinen also nicht die richtigen Grössen für eine weitere Optimierung der Netzwerke zu sein. Nach dem Ende des Trainingsprozesses wurden die besten Netzwerke ausgewählt. Alle Netzwerke zeigen eine Performance von nahezu 1.

7. Resultate und Diskussion

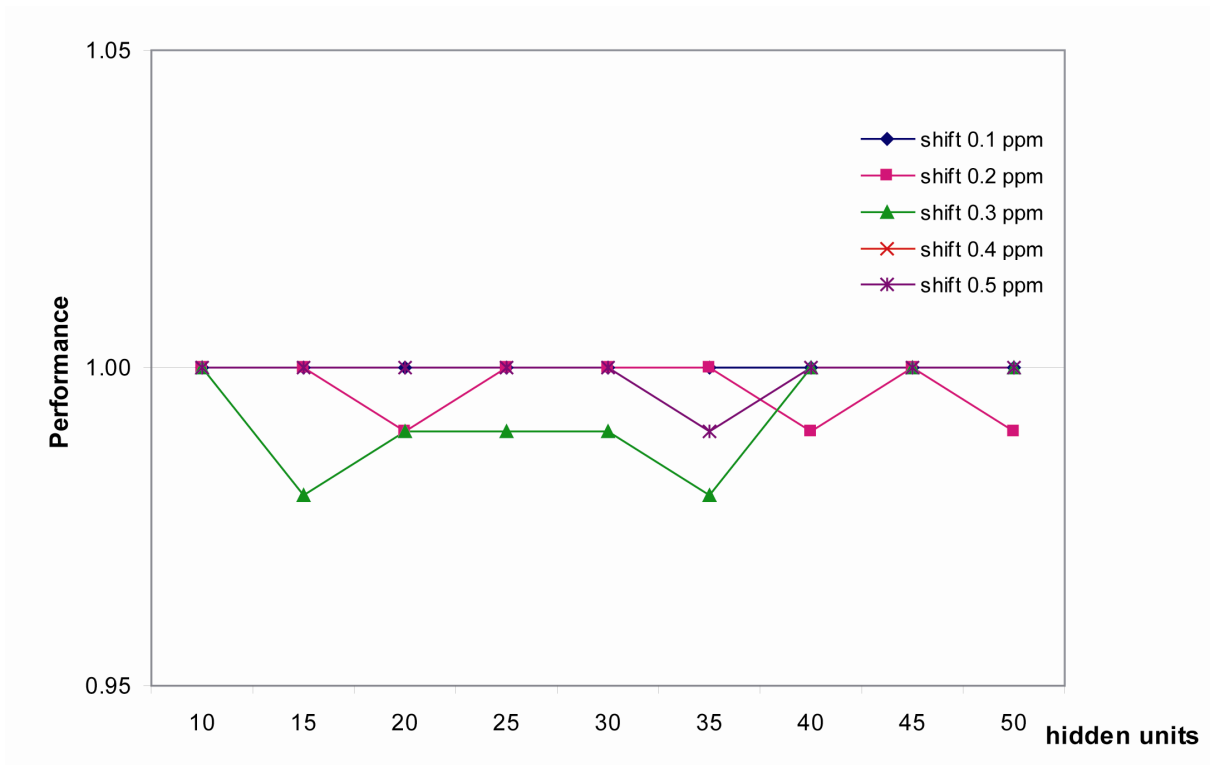


Abbildung 69. Testperformance Poly-out

Tabelle 53. Testperformance Poly-out

Grösse versteckte Schicht	Shift in [ppm]				
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
10	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
15	1.00	1.00	0.98	1.00	1.00
20	1.00	0.99	0.99	1.00	1.00
25	1.00	1.00	0.99	1.00	1.00
30	1.00	1.00	0.99	1.00	1.00
35	1.00	1.00	0.98	0.99	0.99
40	1.00	0.99	1.00	1.00	1.00
45	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
50	1.00	0.99	1.00	1.00	1.00

Der mittlere Fehler des Testdatensatzes (Kapitel 5.6.4.4) ist für alle Netzwerke ungefähr gleich gross. Eine Abschätzung bei welcher Grösse der versteckten Schicht die Generalisierungsfähigkeit maximal ist, lässt sich hier nicht machen.

7. Resultate und Diskussion

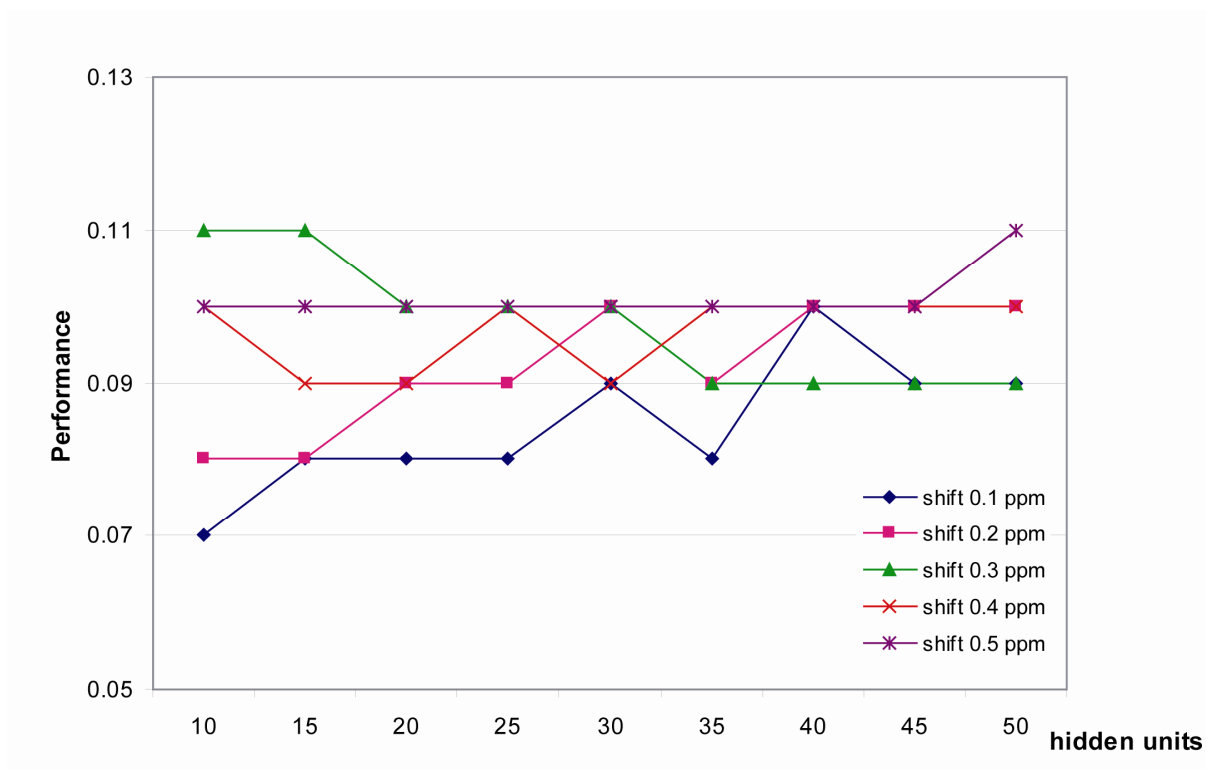


Abbildung 70. Mittlerer Fehler Poly-out

Tabelle 54. Mittlerer Fehler Poly-out

Grösse versteckte Schicht	Shift in [ppm]				
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
10	0.07	0.08	0.11	0.10	0.10
15	0.08	0.08	0.11	0.09	0.10
20	0.08	0.09	0.10	0.09	0.10
25	0.08	0.09	0.10	0.10	0.10
30	0.09	0.10	0.10	0.09	0.10
35	0.08	0.09	0.09	0.10	0.10
40	0.10	0.10	0.09	0.10	0.10
45	0.09	0.10	0.09	0.10	0.10
50	0.09	0.10	0.09	0.10	0.11

7.3.2 Monosaccharid-Test

Jedes der Netzwerke, das mit der mono-out Ausgabe trainiert wurde, produziert für eine Eingabe (hier bestehend aus sechs chemischen Verschiebungen) nur eine einzelne Ausgabe. Da die Netzwerke nur mit Pattern, bestehend aus einzelnen chemischen Verschiebungen trainiert wurden, ist es einem Netzwerken unmöglich,

alle chemischen Verschiebungen eines Monosaccharides korrekt zu klassifizieren. Die gefundenen Ausgaben aller Netzwerke mit verschiedenen grossen versteckten Schichten ermöglichen auch zusammen keine eindeutige Zuordnung.

Keines der Netzwerke war in der Lage von den 812 präsentierten Monosacchariden mehr als 363 Eingaben (7.5%) korrekt zu klassifizieren. In Tabelle 55 ist die Anzahl korrekt klassifizierter Eingaben pro Netzwerk als absoluter und relativer Wert (100.0% = $812 \cdot 6 = 4872$) angegeben.

Tabelle 55. Korrekt klassifizierte Eingaben Netzwerke Mono-out

Grösse versteckte Schicht	Shift 0.1 ppm		Shift 0.2 ppm		Shift 0.3 ppm		Shift 0.4 ppm		Shift 0.5 ppm	
	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>
10	57	1.2%	65	1.3%	139	2.9%	48	1.0%	49	1.0%
15	110	2.3%	220	4.5%	54	1.1%	60	1.2%	58	1.2%
20	94	1.9%	47	1.0%	244	5.0%	203	4.2%	122	2.5%
25	112	2.3%	190	3.9%	51	1.1%	58	1.2%	121	2.5%
30	155	3.2%	47	1.0%	154	3.2%	189	3.9%	141	2.9%
35	55	1.1%	60	1.2%	243	5.0%	36	0.7%	50	1.0%
40	59	1.2%	151	3.1%	50	1.0%	254	5.2%	51	1.0%
45	33	0.7%	30	0.6%	180	3.7%	83	1.7%	363	7.5%
50	107	2.2%	35	0.7%	237	4.9%	65	1.3%	350	7.2%

abs: absolut; rel: relativ

Werden die einzelnen Substanzen detailliert ausgewertet zeigt sich, dass wie erwartet immer nur 1 Ausgabeneuron aktiviert ist.

Das Problem soll im Folgenden an Hand eines isolierten Beispiels (Rec. No 721 aus NMR-DB.fp5) aus dem Monosaccharidtest erklärt werden:

Der Datensatz der Testsubstanz Rec. No. 721 besteht aus folgenden 6 chemischen Verschiebungen 95.99, 71.49, 69.89, 69.79, 68.89 und 61.59 (in [ppm]). Das korrekte Ausgabemuster für die Gruppe α -D-Galp-1R wäre: 1aOR2eOH, 1aOR2eOH3eOH, 2eOH3eOH4aOH, 3eOH4aOH, 4aOH6OH und 6OH.

Nur neun von 45 Netzwerken berechnen für das präsentierte Eingabemuster der Substanz 721 eines der korrekten Ausgabemuster:

Tabelle 56. Gefundene Ausgaben Substanz 721 (Mono-out)

Grösse versteckte Schicht	0.1 ppm	0.2 ppm	0.3 ppm	0.4 ppm	0.5 ppm
10					
15		C6 (6OH)			
20			C6 (6OH)	C6 (6OH)	
25					
30	C6 (6OH)				
35			C6 (6OH)		
40				C6 (6OH)	
45					
50	C6 (6OH)				C6 (6OH)

Aus der gefundenen Ausgabe „6OH“ lässt sich nicht eindeutig auf die korrekte Gruppe α -D-Galp-1R schliessen. Diese Ausgabe ist für insgesamt 49 verschiedene Monosaccharid-Gruppen korrekt. Die Netzwerke, die mit der Mono-out Ausgabe trainiert wurden, sind nicht in der Lage die präsentierten Eingabemuster komplett korrekt zu klassifizieren. Der Ansatz wurde aus diesem Grund nicht weiter verfolgt.

Netzwerke Poly-out:

Auch die Netze, die mit dem binären Ausgabemuster trainiert wurden, waren nicht in der Lage alle präsentierten Eingaben richtig zu klassifizieren. Die erreichte Performance ist vergleichbar mit den Netzwerken der Methode Mono-out.

Tabelle 57. Korrekt klassifizierte Eingaben Netzwerke Poly-out

Grösse versteckte Schicht	Shift 0.1 ppm		Shift 0.2 ppm		Shift 0.3 ppm		Shift 0.4 ppm		Shift 0.5 ppm	
	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>	<i>abs</i>	<i>rel</i>
10	89	1.8%	55	1.1%	73	1.5%	9	0.2%	78	1.6%
15	89	1.8%	37	0.8%	108	2.2%	26	0.5%	87	1.8%
20	89	1.8%	13	0.3%	63	1.3%	31	0.6%	93	1.9%
25	115	2.4%	39	0.8%	67	1.4%	18	0.4%	334	6.9%
30	121	2.5%	15	0.3%	5	0.1%	19	0.4%	158	3.2%
35	126	2.6%	50	1.0%	15	0.3%	12	0.3%	324	6.7%
40	96	2.0%	3	0.1%	12	0.3%	24	0.5%	78	1.6%
45	89	1.8%	55	1.1%	12	0.3%	38	0.8%	333	6.8%
50	94	1.9%	49	1.0%	84	1.7%	23	0.5%	53	1.1%

abs: absolut; rel: relativ

Auch hier werden nur für sehr wenige der präsentierten Eingabemuster Ausgabe-neuronen aktiviert. Im Speziellen für die Substanz 721 (α -D-Galp-1R):

Tabelle 58. Korrekte Ausgaben Substanz 721 (Poly-out)

Grösse versteckte Schicht	0.1 ppm	0.2 ppm	0.3 ppm	0.4 ppm	0.5 ppm
10	-	-	-	-	-
15	-	-	-	-	-
20	C1 (1aOR2eOH)	-	-	-	-
25	C1 (1aOR2eOH)	C5 (4aOH6OH)	-	-	C4 (3eOH4aOH)
30	C1 (1aOR2eOH)	-	-	-	-
35	-	-	-	-	C4 (3eOH4aOH)
40	-	-	-	-	C4 (3eOH4aOH)
45	-	-	-	-	-
50	-	-	-	-	-

Werden die korrekten Ausgaben aller Netzwerke zusammengefasst, ergeben sich daraus tatsächlich die korrekten Konfigurationen aller C-Atome der präsentierten Gruppe α -D-Galp-1R.

α -D-Galp-1R: 1aOR2eOH3eOH4aOH6OH

C1: 1aOR2eOH

C4: 3eOH4aOH

C5: 4aOH6OH

Von 45 Netzwerken produzierten allerdings nur sieben Netzwerke eine korrekte Ausgabe. Alle anderen Netzwerke berechneten eine falsche Ausgabe oder aktivierten keines ihrer Ausgabeneuronen. Eine Aussage darüber, welche Ausgaben korrekt und welche falsch sind, ist bei einer unbekanntem Testsubstanz nicht möglich. Der Nachbargruppenansatz wurde schliesslich wegen der schlechten Performance zu Gunsten des Monosaccharid-Ansatzes aufgegeben.

7.4 Monosaccharid-Ansatz

7.4.1 Auswertung der trainierten Netzwerke

Für alle Monosaccharid-Einheiten konnten aus allen mit dem Programm Statistica^[104] trainierten Netzwerken, jeweils 40–60 Netzwerke mit einer guten bis sehr guten Performance von 0.91–1.0 ausgewählt werden.

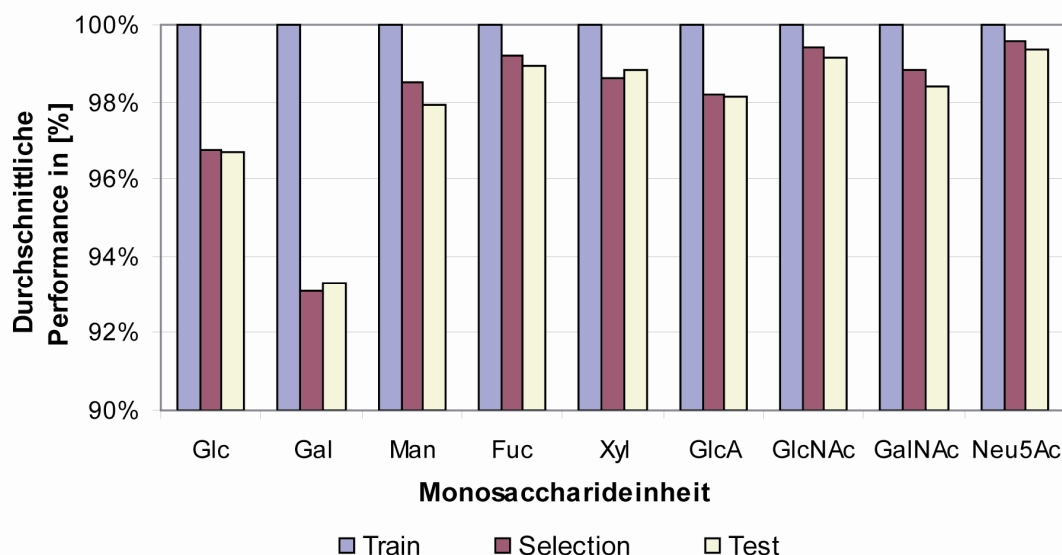


Abbildung 71. Durchschnittliche Performance Netzwerke Monosaccharid-Ansatz

In Abbildung 71 ist die durchschnittliche Netzwerkperformance nach *subsets* (Training, Selection und Test) aufgeteilt für jede Monosaccharid-Einheit dargestellt. Die zugehörigen Werte sind in Tabelle 59 zu finden.

Tabelle 59. Werte durchschnittliche Performance Monosaccharid-Ansatz

	Train	Selection	Test
Glc	100.0%	96.8%	96.7%
Gal	100.0%	93.1%	93.3%
Man	100.0%	98.5%	97.9%
Fuc	100.0%	99.2%	98.9%
Xyl	100.0%	98.6%	98.8%
GlcA	100.0%	98.2%	98.1%
GlcNAc	100.0%	99.4%	99.2%
GalNAc	100.0%	98.8%	98.4%
Neu5Ac	100.0%	99.6%	99.4%

Ein Vergleich des durchschnittlichen Fehlers (Abbildung 72) zeigt, dass die präsentierten Datensätze der Trainingsdatensätze von den Netzwerken aller Monosaccharid-Einheiten sehr gut klassifiziert werden können. Die durchschnittliche Abweichung der Fehlerquadrate zwischen produzierter und gesuchter Ausgabe ist für das Trainingsdatensatz sehr gering (Tabelle 60).

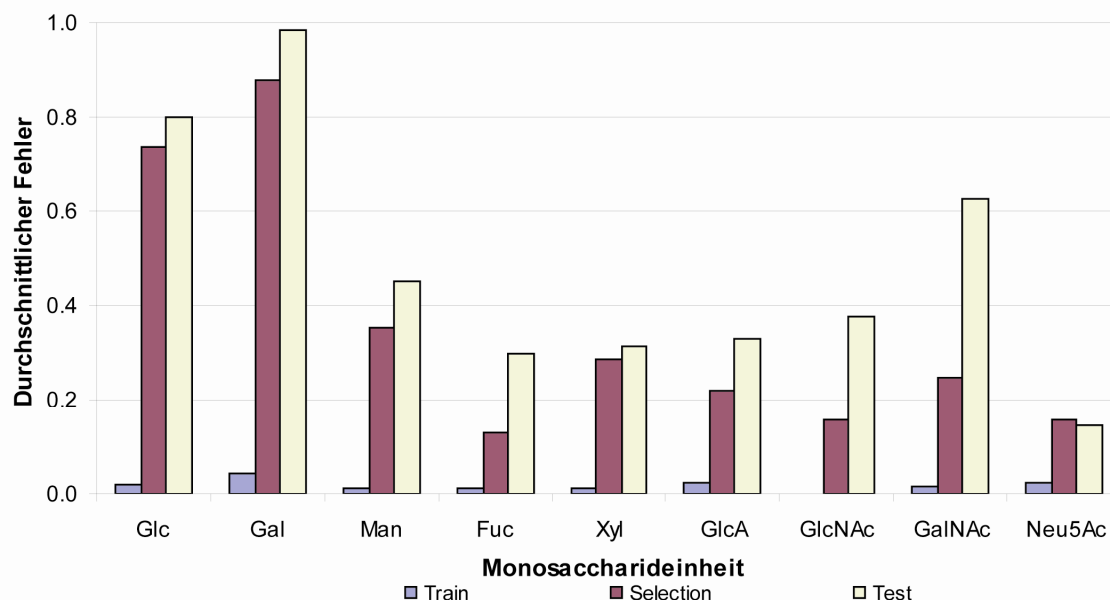


Abbildung 72. Durchschnittlicher Fehler Netzwerke Monosaccharid-Ansatz

Für die beiden anderen *subsets* sind die durchschnittlichen Fehler deutlich höher (0.13–0.98). Die grössten durchschnittlichen Fehler für Selection- und Testdatensatz haben die beiden Monosaccharid-Einheiten mit den meisten antrainierten Gruppen (Glc, Gal). Je mehr Gruppen vorhanden sind, desto schwieriger ist es, ein Netzwerk mit einer guten Generalisierungsfähigkeit zu finden.

Tabelle 60. Werte durchschnittlicher Fehler Monosaccharid-Ansatz

	Train	Selection	Test
Glc	0.02	0.74	0.80
Gal	0.04	0.88	0.98
Man	0.01	0.35	0.45
Fuc	0.01	0.13	0.30
Xyl	0.01	0.29	0.31
GlcA	0.02	0.22	0.33
GlcNAc	0.00	0.16	0.38
GalNAc	0.02	0.25	0.63
Neu5Ac	0.02	0.16	0.14

Eine detaillierte Auswertung der Netzwerke ist im Anhang zu finden (Tabelle 131 bis Tabelle 139).

7.4.2 Monosaccharid-Tests

Allen Netzwerken wurden in ersten Tests die antrainierten Mittelwerte, die Mittelwerte der *wrong*-Gruppe, und die in Monosaccharid-Gruppen aufgeteilten Literaturdatensätze präsentiert. Die Resultate der verschiedenen Monosaccharid-tests sind nach Testmethode getrennt dargestellt. Eine Übersicht über die durchgeführten Tests ist in Abbildung 51 gegeben.

Mittelwert-Test positiv:

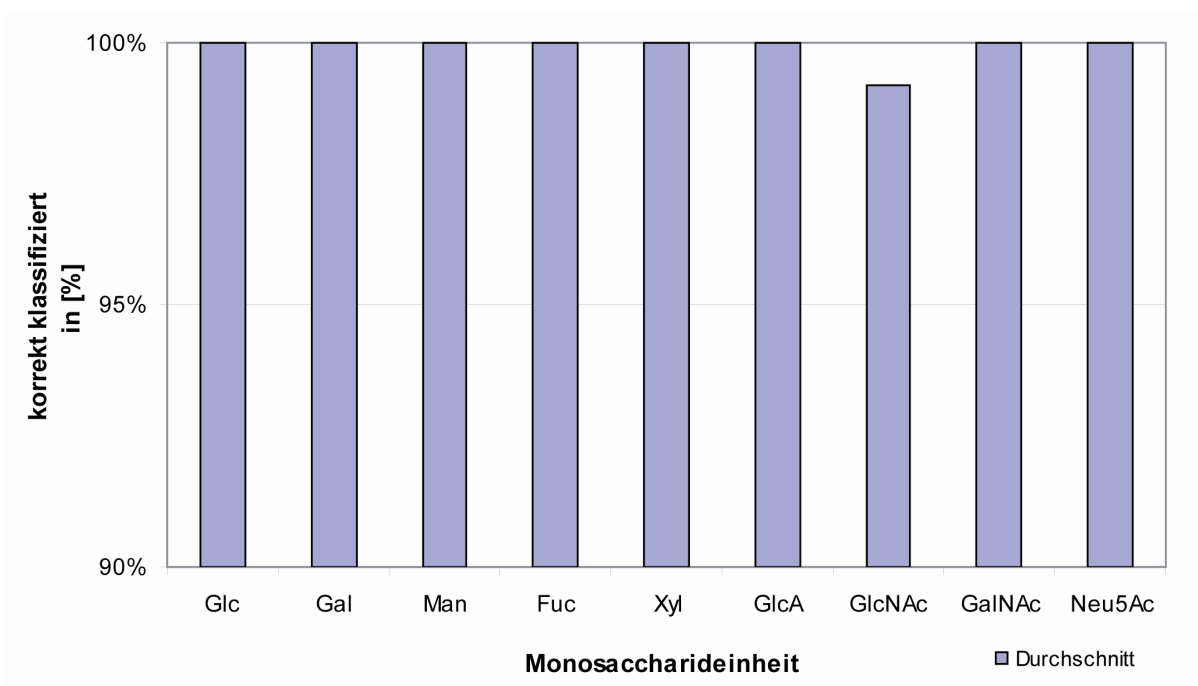
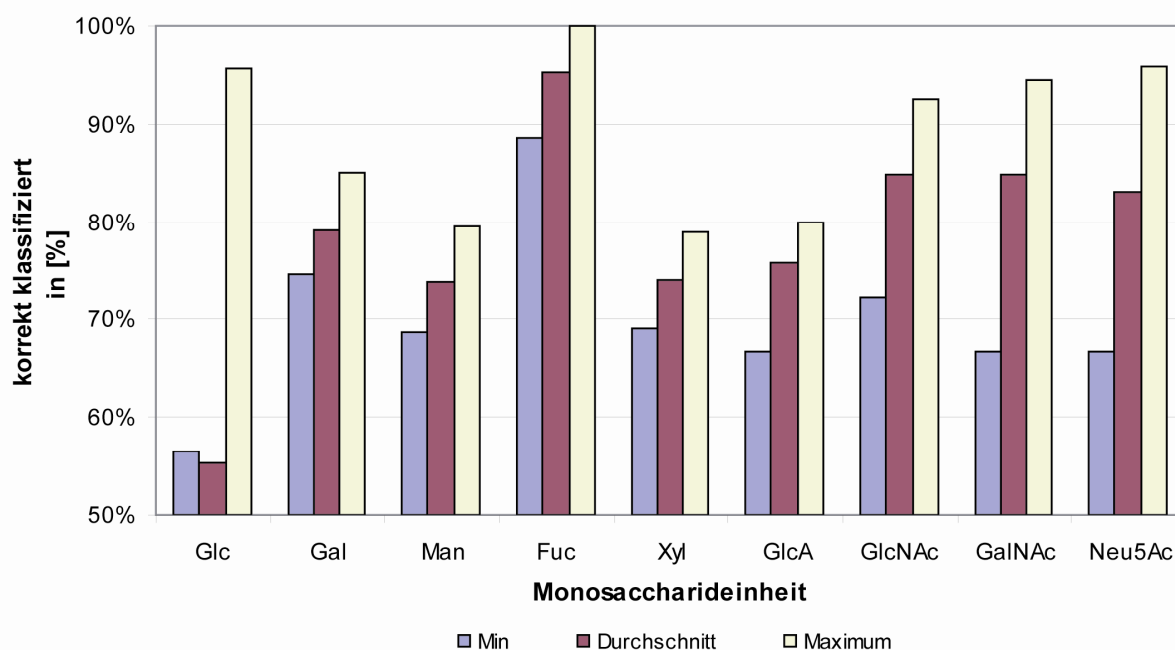


Abbildung 73. Mittelwert-Test Monosaccharide (positiv)

Bis auf *N*-Acetyl Glucosamin werden alle Mittelwerte von allen Netzwerken korrekt klassifiziert. Die Mittelwerte von *N*-Acetyl Glucosamin werden jedoch nur von 3 Netzwerken (v216_17, v216_20, v216_21) nicht korrekt erkannt. Auf eine detaillierte Auswertung der Resultate nach Monosaccharid-Einheit wurde aufgrund der durchwegs guten Resultate verzichtet.

Tabelle 61. Zusammenfassung Mittelwert-Test positiv

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Netzwerke	Anzahl Mittelwerte	korrekt klassifiziert	Bemerkungen
Glc	V282	Versuch280_281.snn	40	23	100.0%	-
Gal	V256	Versuch252_254.snn	60	18	100.0%	-
Man	V308	Versuch306_307.snn	40	17	100.0%	-
Fuc	V221	Versuch217_226.snn	40	5	100.0%	-
Xyl	V296	Versuch294_295.snn	40	14	100.0%	-
GlcA	V322	Versuch318_319.snn	40	3	100.0%	-
GlcNAc	V270	Versuch262_263.snn	41	9	99.2%	38/41 Netze zu 100.0% korrekt-
GalNAc	V241, V243	Versuch216_239.snn	40	6	100.0%	-
Neu5Ac	V324	Versuch320_321.snn	40	3	100.0%	-

Literatur-Test positiv:**Abbildung 74.** Literatur-Test Monosaccharide (positiv)

In Abbildung 74 sind die Resultate der Literatur-Tests dargestellt. Für die Monosaccharid-Einheiten mit mehr als einem durchgeführten Literatur-Test (Glc, Fuc, GalNAc), wurden die Mittelwerte der Tests gemittelt dargestellt. Minima und Maxima wurden um die Streuung besser darzustellen beibehalten. Die Resultate der Literatur-Tests (Tabelle 62) sind deutlich schlechter als die der Mittelwert-Tests. Die durchschnittliche Erkennung aller Netzwerke liegt nun bei 78.5% für den Literatur-

7. Resultate und Diskussion

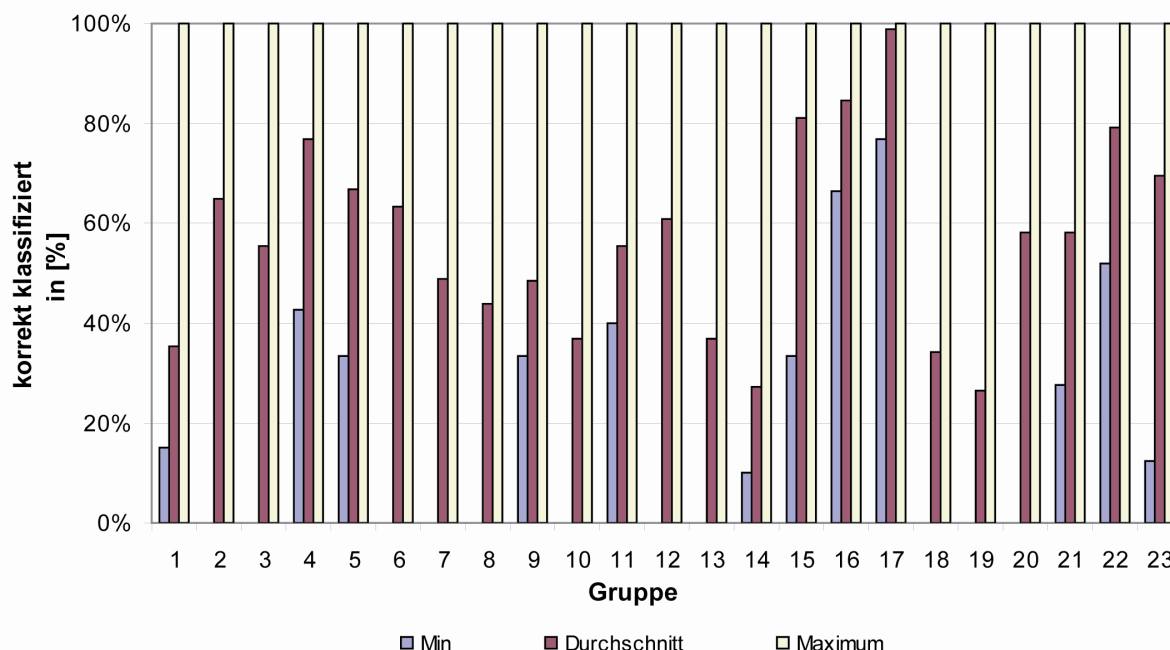
Test verglichen mit 99.9% im Mittelwert-Test. Vor allem die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen antrainierten Gruppen (Glc, Gal, Man, Xyl), erkennen die ihnen präsentierten Literaturwerte nur schlecht.

Tabelle 62. Zusammenfassung Literatur-Test positiv

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Literaturwerte	korrekt klassifiziert in [%]		
				Average	Min	Max
Glc	V283	Versuch280_281.snn	504	46.9%	40.1%	55.2%
	V284	Versuch280_281.snn	336	63.9%	56.5%	95.7%
Gal	V257	Versuch252_254.snn	167	79.1%	74.6%	85.1%
Man	V309	Versuch306_307.snn	147	73.8%	68.7%	79.6%
Fuc	V222	Versuch217.snn	88	95.5%	88.6%	100.0%
	V227	Versuch226.snn	88	94.9%	88.6%	97.7%
Xyl	V297	Versuch294_295.snn	81	74.1%	69.1%	79.0%
GlcA	V326	Versuch318_319.snn	15	75.7%	66.7%	80.0%
GlcNAc	V271	Versuch262_263.snn	54	84.8%	72.2%	92.6%
GalNAc	V242	Versuch216.snn	18	85.6%	66.7%	94.4%
	V244	Versuch239.snn	18	84.2%	77.8%	88.9%
Neu5Ac	V328	Versuch320_321.snn	24	83.0%	66.7%	95.8%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

In der Detailauswertung nach Monosaccharid-Einheit sind durchschnittliche, minimale und maximale Erkennung der einzelnen Gruppen berechnet über alle Netzwerke dargestellt:

Glucose:**Abbildung 75.** Literatur-Test Monosaccharide Glucose (positiv)

In Abbildung 75 sind Mittelwert, minimale und maximale Erkennung jeder Gruppe dargestellt. Die Mittelwerte der einzelnen Literatur-Tests (Tabelle 63) wurden für die Darstellung gemittelt. Minima und Maxima wurden um die Streuung besser darzustellen beibehalten.

Die Gruppen 16–18 waren im ersten Literatur-Test (V283) nicht vertreten. Beim zweiten Testfile (V284) gibt es nur eine Gruppe (Nr. 13), die von keinem der Netzwerke richtig klassifiziert werden kann. Für alle anderen Gruppen existieren Netzwerke, welche die Gruppe zu 100% erkennen kann.

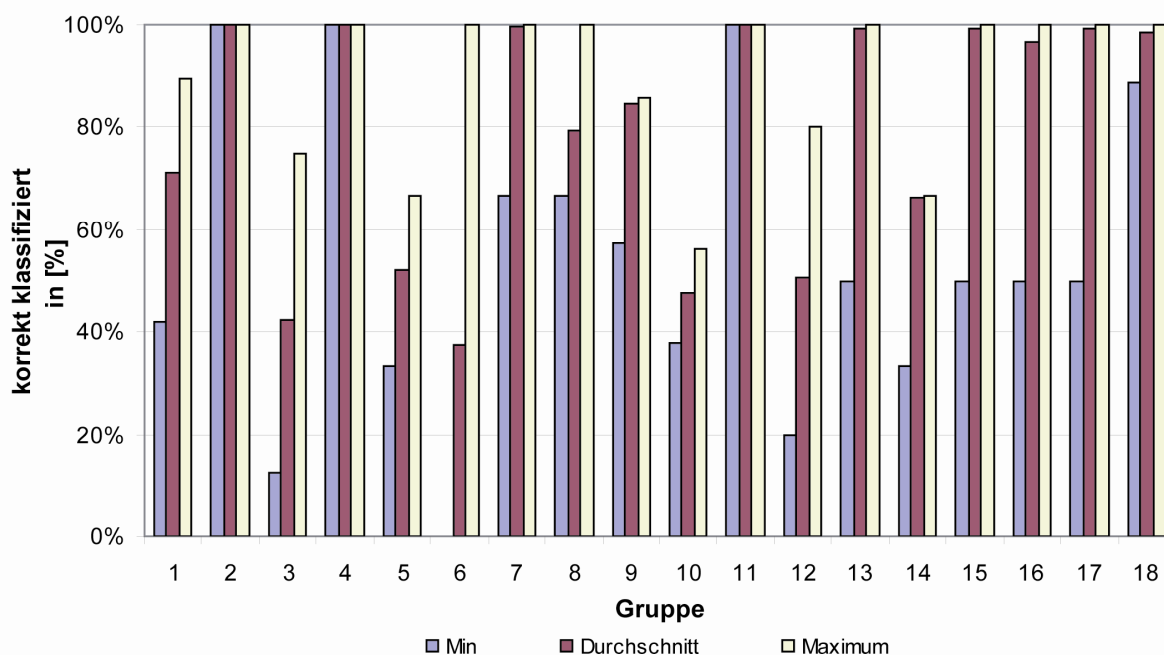
Tabelle 63. Detailauswertung Literatur-Test positiv Glucose

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]					
		V283			V284		
		Average	Min	Max	Average	Min	Max
1	α -D-Glcp-1R	27.1%	15%	40.6%	44.0%	23.0%	100.0%
2	α -D-Glcp-1R;2R	31.7%	0.0%	50.0%	98.2%	85.7%	100.0%
3	α -D-Glcp-1R;3R	18.6%	0.0%	55.6%	91.9%	25.0%	100.0%
4	α -D-Glcp-1R;4R	53.6%	42.9%	71.4%	100.0%	100.0%	100.0%
5	α -D-Glcp-1R;6R	73.5%	33.3%	100.0%	60.1%	50.0%	100.0%

7. Resultate und Diskussion

6	α -D-Glcp-OH	98.2%	85.7%	100.0%	29.0%	0.0%	100.0%
7	α -D-Glcp-OH-2R	49.2%	16.7%	50.0%	48.8%	0.0%	100.0%
8	α -D-Glcp-OH-3R	63.4%	62.5%	100.0%	24.3%	0.0%	100.0%
9	α -D-Glcp-OH-4R	43.3%	33.3%	54.2%	53.8%	50.0%	100.0%
10	α -D-Glcp-OH-6R	18.5%	0.0%	58.8%	55.1%	48.3%	100.0%
11	β -D-Glcp-1R	46.1%	39.9%	51.5%	65.0%	60.0%	100.0%
12	β -D-Glcp-1R;2R	21.9%	0.0%	25.0%	100.0%	100.0%	100.0%
13	β -D-Glcp-1R;3R	73.9%	42.9%	100.0%	0.0%	0.0%	0.0%
14	β -D-Glcp-1R;4R	41.5%	24.0%	60.0%	13.3%	10.0%	100.0%
15	β -D-Glcp-1R;6R	94.1%	75.0%	100.0%	68.3%	33.3%	100.0%
16	β -D-GlcpN-1R	-	-	-	84.6%	66.7%	100.0%
17	β -D-GlcpN-1R;3R	-	-	-	98.9%	76.9%	100.0%
18	β -D-GlcpN-OH-4R	-	-	-	34.1%	0.0%	100.0%
19	β -D-Glcp-OH	0.6%	0.0%	11.1%	52.5%	0.0%	100.0%
20	β -D-Glcp-OH-2R	17.5%	0.0%	33.3%	98.3%	66.7%	100.0%
21	β -D-Glcp-OH-3R	65.3%	50.0%	100.0%	51.1%	27.8%	100.0%
22	β -D-Glcp-OH-4R	58.4%	52.0%	68.0%	100.0%	100.0%	100.0%
23	β -D-Glcp-OH-6R	41.4%	12.5%	68.8%	98.0%	80.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Galactose:**Abbildung 76.** Literatur-Test Monosaccharide Galactose (positiv)

Die präsentierten Galactose-Gruppen werden im Durchschnitt besser erkannt als die Glucose-Gruppen. Es gibt aber auch hier noch zu viele Gruppen, die nur ungenügend erkannt werden. Eine Aussage, dass eine der beiden Konfigurationen (α/β) oder eines der Substitutionsmuster (1R, 2R, 3R, etc.) schlechter als andere erkannt wird, ist nicht möglich.

Tabelle 64. Detailauswertung Literatur-Test positiv Galactose

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]		
		V257		
		Average	Min	Max
1	α -D-Galp-1R	71.1%	42.1%	89.5%
2	α -D-Galp-OH	100.0%	100.0%	100.0%
3	α -D-Galp-OH-3R	42.5%	12.5%	75.0%
4	α -D-Galp-OH-4R	100.0%	100.0%	100.0%
5	α -D-Galp-OH-6R	52.2%	33.3%	66.7%
6	α -D-Galp-1R;2R	37.5%	0.0%	100.0%
7	α -D-Galp-1R;3R	99.4%	66.7%	100.0%
8	α -D-Galp-1R;4R	79.4%	66.7%	100.0%
9	α -D-Galp-1R;6R	84.8%	57.1%	85.7%

7. Resultate und Diskussion

10	β -D_L-Galp-1R	47.7%	37.9%	56.3%
11	β -D-Galp-OH	100.0%	100.0%	100.0%
12	β -D-Galp-OH-3R	50.5%	20.0%	80.0%
13	β -D-Galp-OH-4R	99.2%	50.0%	100.0%
14	β -D-Galp-OH-6R	66.1%	33.3%	66.7%
15	β -D-Galp-1R;2R	99.2%	50.0%	100.0%
16	β -D-Galp-1R;3R	96.7%	50.0%	100.0%
17	β -D-Galp-1R;4R	99.2%	50.0%	100.0%
18	β -D-Galp-1R;6R	98.3%	88.9%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Mannose:

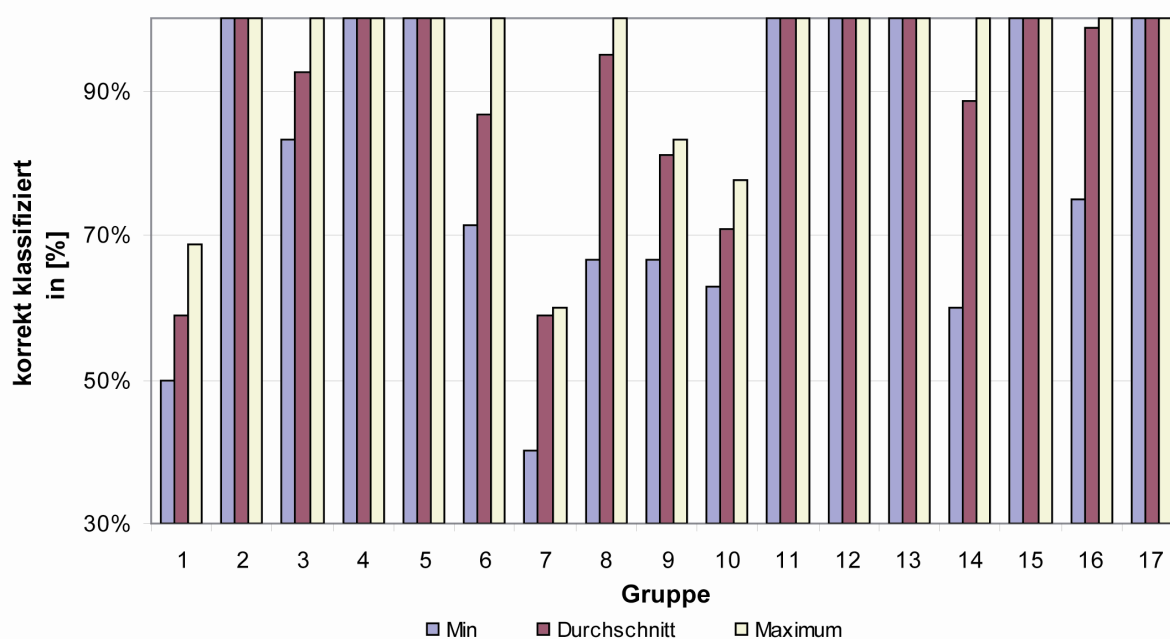


Abbildung 77. Literatur-Test Monosaccharide Mannose (positiv)

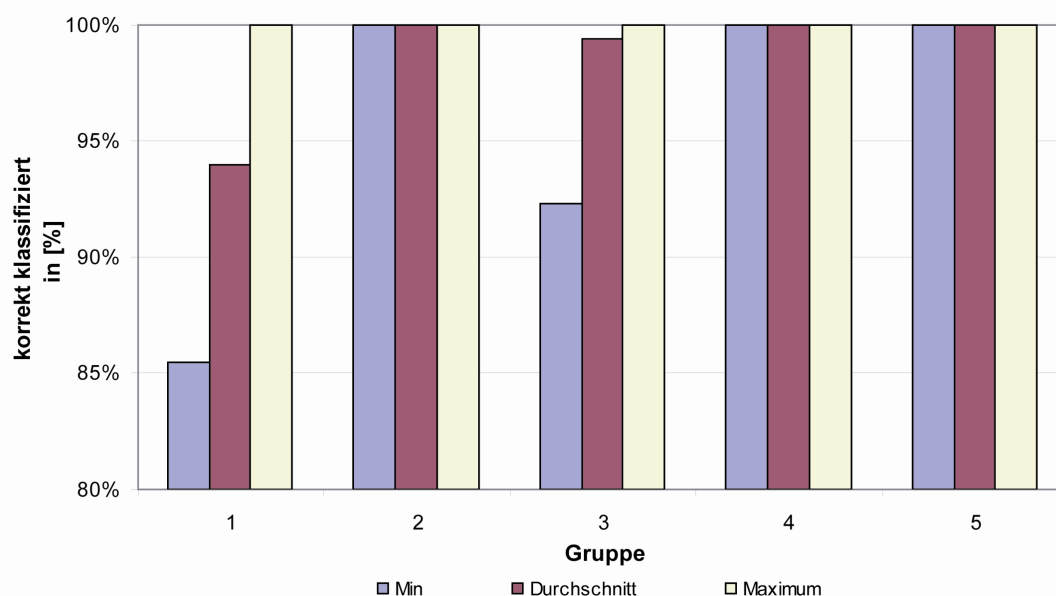
Die 147 präsentierten Mannose-Literaturdatensätze können im Allgemeinen relativ gut klassifiziert werden. Davon werden die Gruppen α -D-Manp-1R und α -D-Manp-1R;3R mit 58.9%, respektive 59% deutlich schlechter klassifiziert, als die restlichen Mannose-Gruppen. Ein Unterschied der Klassifizierung zwischen Mannosen mit α -Konfiguration und solchen mit β -Konfiguration ist nicht feststellbar.

7. Resultate und Diskussion

Tabelle 65. Detailauswertung Literatur-Test positiv Mannose

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]		
		V309		
		Average	Min	Max
1	α -D-Manp-1R	58.9%	50.0%	68.8%
2	α -D-Manp-OH	100.0%	100.0%	100.0%
3	α -D-Manp-OH-2R	92.5%	83.3%	100.0%
4	α -D-Manp-OH-4R	100.0%	100.0%	100.0%
5	α -D-Manp-OH-6R	100.0%	100.0%	100.0%
6	α -D-Manp-1R;2R	86.8%	71.4%	100.0%
7	α -D-Manp-1R;3R	59.0%	40.0%	60.0%
8	α -D-Manp-1R;4R	95.0%	66.7%	100.0%
9	α -D-Manp-1R;6R	81.3%	66.7%	83.3%
10	β -D-Manp-1R	70.9%	63.0%	77.8%
11	β -D-ManpNAc-1R	100.0%	100.0%	100.0%
12	β -D-Manp-OH	100.0%	100.0%	100.0%
13	β -D-Manp-OH-2R	100.0%	100.0%	100.0%
14	β -D-Manp-OH-4R	88.5%	60.0%	100.0%
15	β -D-Manp-OH-6R	100.0%	100.0%	100.0%
16	β -D-Manp-1R;2R	98.8%	75.0%	100.0%
17	β -D-Manp-1R;4R	100.0%	100.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

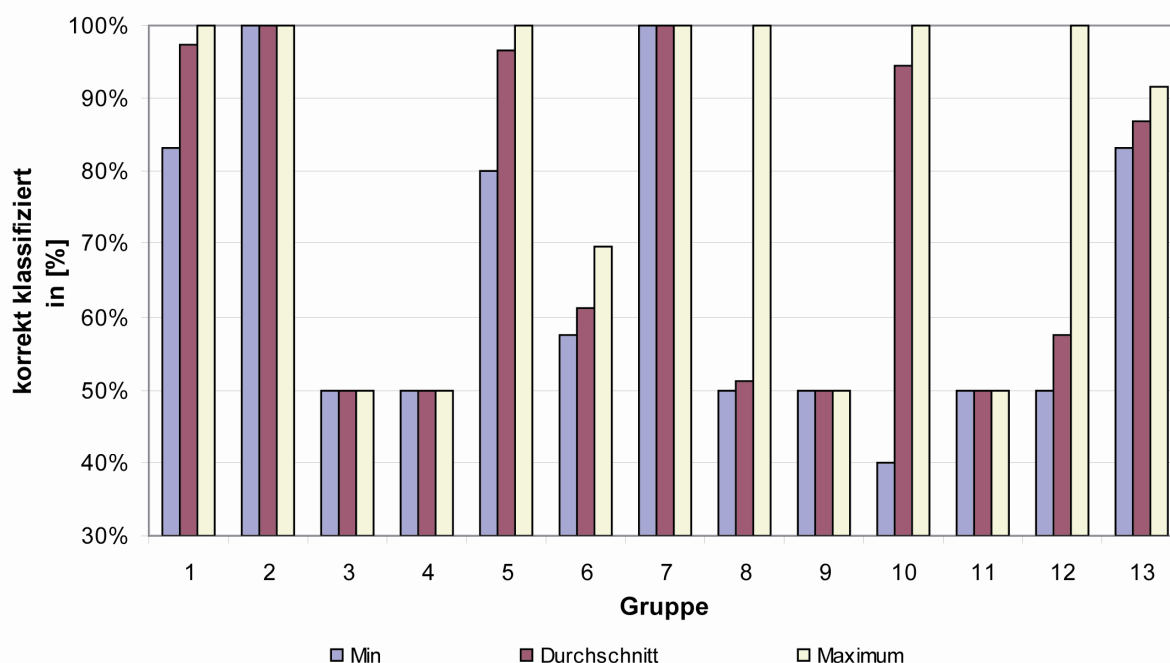
Fucose:**Abbildung 78.** Literatur-Test Monosaccharide Fucose (positiv)

In Abbildung 78 sind Mittelwerte, Minima und Maxima des Fucose Literatur-Test dargestellt. Die Mittelwerte der beiden Versuche wurden für die Darstellung gemittelt. Minima und Maxima wurden für die Darstellung über beide Tests berechnet. Die 88 (V222), respektive 89 (V227) präsentierten Fucose-Literaturdaten konnten in den durchgeführten Tests sehr gut klassifiziert werden. Alle Gruppen, mit Ausnahme von α -L/D-Fucp-1R (93.6%) und β -L-Fucp-1R (99.2%), werden von allen Netzwerken zu 100% korrekt erkannt. Trotz der nahen Verwandtschaft mit Galactose (Fuc = 6-deoxy-Gal), scheinen die Netzwerke keine Probleme mit der korrekten Zuordnung der Literaturdatensätze zu haben. Durch die fehlende Hydroxylgruppe liegt die chemische Verschiebung an C6 bei einem sehr tiefen Wert von 15.88–16.41 ppm. In diesem Bereich liegt keine chemische Verschiebung eines C-Atoms einer anderen Monosaccharid-Einheit.

Tabelle 66. Detailauswertung Literatur-Test positiv Fucose

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]					
		V222			V227		
		Average	Min	Max	Average	Min	Max
1	α -L_D-Fucp-1R	94.4%	85.5%	100.0%	93.6%	85.5%	97.1%
2	α -L-Fucp-OH	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
3	β -L-Fucp-1R	99.2%	92.3%	100.0%	99.6%	92.3%	100.0%
4	β -L-Fucp-OH	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
5	α -L-Fucp-OMe-2R	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Xylose:**Abbildung 79.** Literatur-Test Monosaccharide Xylose (positiv)

Die 81 präsentierten Xylose-Gruppen werden weniger gut erkannt als die Fucose-Gruppen. Interessanterweise scheinen vor allem die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen Gruppen Probleme mit der korrekten Klassifizierung der Literaturdatensätze zu haben. Bei Xylose im Speziellen könnte die nahe Verwandtschaft mit Glucose (Xyl= 6-deoxy-6-decarbo-Glc) ebenfalls eine Rolle für die vielen falsch zugeordneten Datensätze spielen.

Tabelle 67. Detailauswertung Literatur-Test positiv Xylose

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]		
		V297		
		<i>Average</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
1	α -D-Xylp-1R	97.5%	83.3%	100.0%
2	α -D-Xylp-OH	100.0%	100.0%	100.0%
3	α -D-Xylp-OH-2R	50.0%	50.0%	50.0%
4	α -D-Xylp-OH-3R	50.0%	50.0%	50.0%
5	α -D-Xylp-OH-4R	96.5%	80.0%	100.0%
6	β -D_L-Xylp-1R	61.1%	57.6%	69.7%
7	β -D-Xylp-OH	100.0%	100.0%	100.0%
8	β -D-Xylp-OH-2R	51.3%	50.0%	100.0%

7. Resultate und Diskussion

9	β -D-Xylp-OH-3R	50.0%	50.0%	50.0%
10	β -D-Xylp-OH-4R	94.5%	40.0%	100.0%
11	β -D-Xylp-1R;2R	50.0%	50.0%	50.0%
12	β -D-Xylp-1R;3R	57.5%	50.0%	100.0%
13	β -D-Xylp-1R;4R	86.9%	83.3%	91.7%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Glucuronsäure:

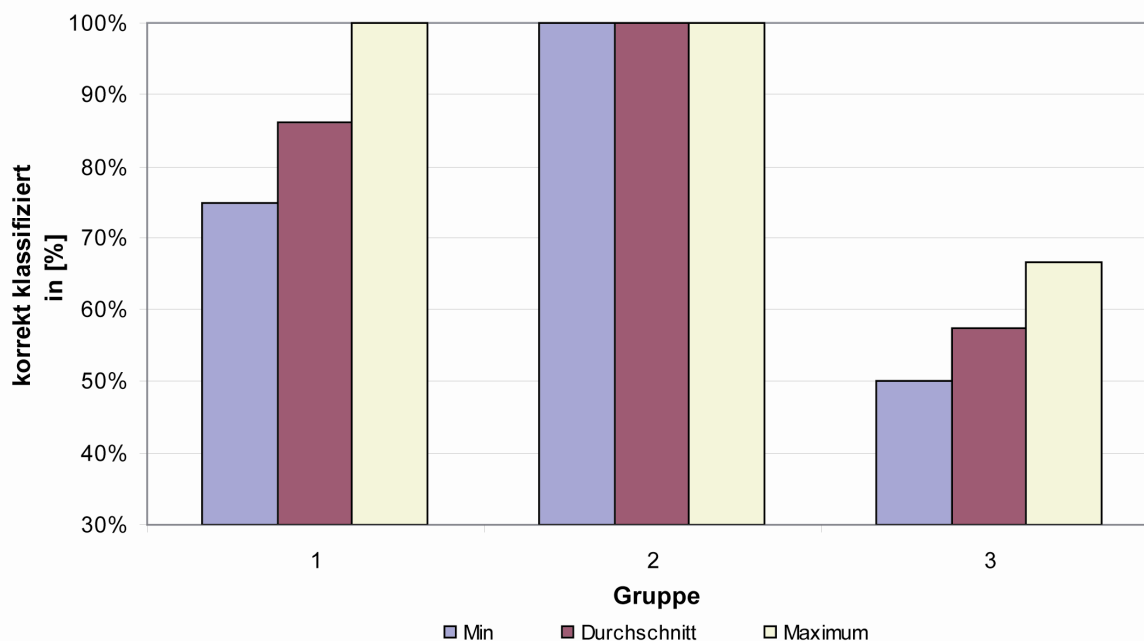


Abbildung 80. Literatur-Test Monosaccharide Glucuronsäure (positiv)

Von Glucuronsäure wurden in der NMR-Literaturdatenbank nur 15 Beispiele gefunden. Die präsentierten Literaturdatensätze werden mit Ausnahme von β -D-GlcpA-1R;4R relativ gut erkannt.

Tabelle 68. Detailauswertung Literatur-Test positiv Glucuronsäure

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]		
		V326		
		Average	Min	Max
1	β -D-GlcpA-1R	86.3%	75.0%	100.0%
2	β -D-GlcpA-1R;2R	100.0%	100.0%	100.0%
3	β -D-GlcpA-1R;4R	57.5%	50.0%	66.7%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Von Glucuronsäure wurden in der NMR-Literaturdatenbank nur 15 Beispiele gefunden. Die präsentierten Literaturdatensätze werden mit Ausnahme von β -D-GlcpA-1R;4R (86.3%) relativ gut erkannt.

N-Acetyl Glucosamin:

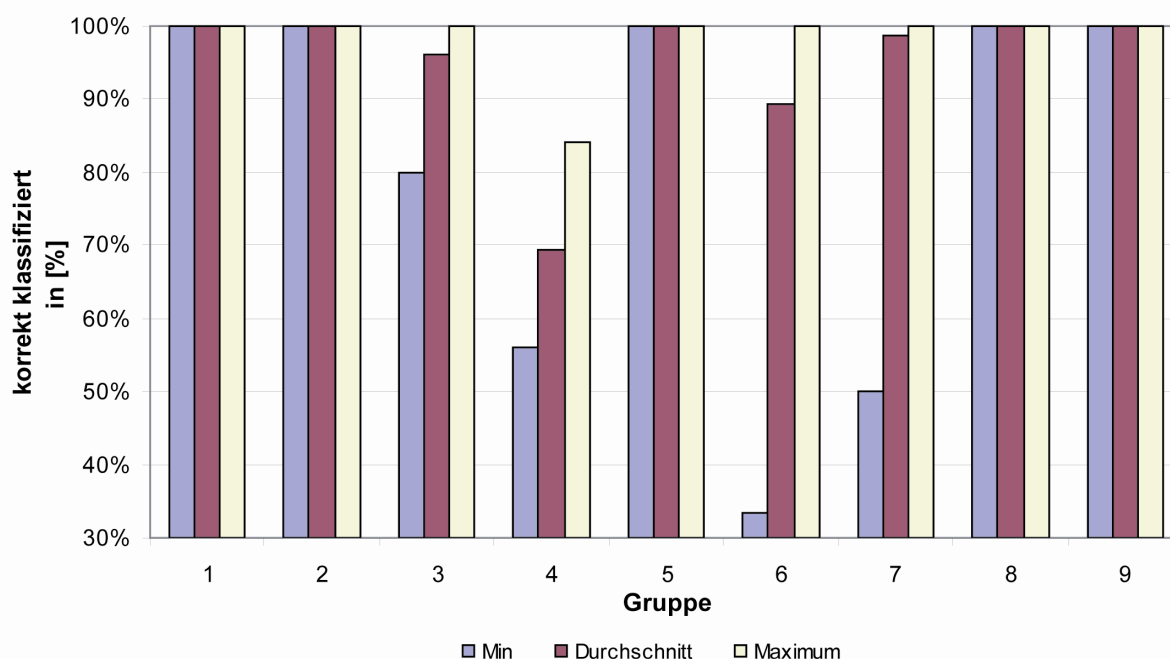


Abbildung 81. Literatur-Test Monosaccharide N-Acetyl Glucosamin (positiv)

Die 54 präsentierten Datensätze von N-Acetyl Glucosamin werden sehr gut erkannt. Mit 94.9% ist die durchschnittliche Erkennung aller Gruppen sehr hoch. Einzig für die Gruppe β -D-GlcpNAc-1R findet sich kein Netzwerk, dass die Literaturdatensätze zu 100.0% korrekt klassifizieren kann.

Tabelle 69. Detailauswertung Literatur-Test positiv N-Acetyl Glucosamin

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]		
		V271		
		Average	Min	Max
1	α -D-GlcpNAc-1R	100.0%	100.0%	100.0%
2	α -D-GlcpNAc-OH-3R	100.0%	100.0%	100.0%
3	α -D-GlcpNAc-OH-4R	96.1%	80.0%	100.0%
4	β -D-GlcpNAc-1R	69.4%	56.0%	84.0%
5	β -D-GlcpNAc-OH	100.0%	100.0%	100.0%
6	β -D-GlcpNAc-OH-3R	89.4%	33.3%	100.0%

7. Resultate und Diskussion

7	β -D-GlcpNAc-OH-4R	98.8%	50.0%	100.0%
8	β -D-GlcpNAc-1R;3R	100.0%	100.0%	100.0%
9	β -D-GlcpNAc-1R;4R	100.0%	100.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

N-Acetyl Galactosamin:

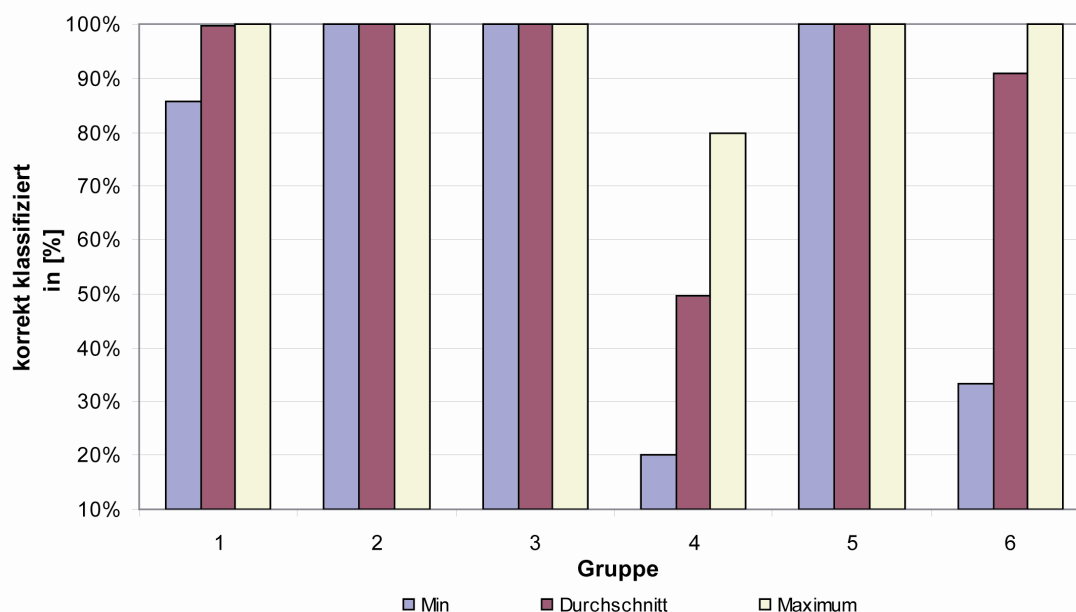


Abbildung 82. Literatur-Test Monosaccharide N-Acetyl Galactosamin (positiv)

In Abbildung 82 sind Mittelwerte, Minima und Maxima des Literatur-Tests von N-Acetyl Galactosamin dargestellt. Die Mittelwerte der einzelnen Tests wurden wiederum kombiniert dargestellt. Minima und Maxima wurde über beide Tests neu berechnet. Die 18 präsentierten Literaturdatensätze von N-Acetyl Galactosamin werden ebenfalls gut erkannt. Die Gruppe β -D-GalpNAc-1R wird mit Abstand am schlechtesten erkannt.

Tabelle 70. Detailauswertung Literatur-Test positiv N-Acetyl Galactosamin

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]					
		V242			V244		
		Average	Min	Max	Average	Min	Max
1	α -D-GalpNAc-1R	99.3%	85.7%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
2	α -D-GalpNAc-OH-6R	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
3	α -D-GalpNAc-1R;3R	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
4	β -D-GalpNAc-1R	51.0%	20.0%	80.0%	48.0%	20.0%	60.0%

7. Resultate und Diskussion

5	β -D-GalpNAc-OH-6R	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
6	D-GalNAc-ol-OH-3R	90.0%	33.3%	100.0%	91.7%	66.7%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

N-Acetyl Neuraminsäure:

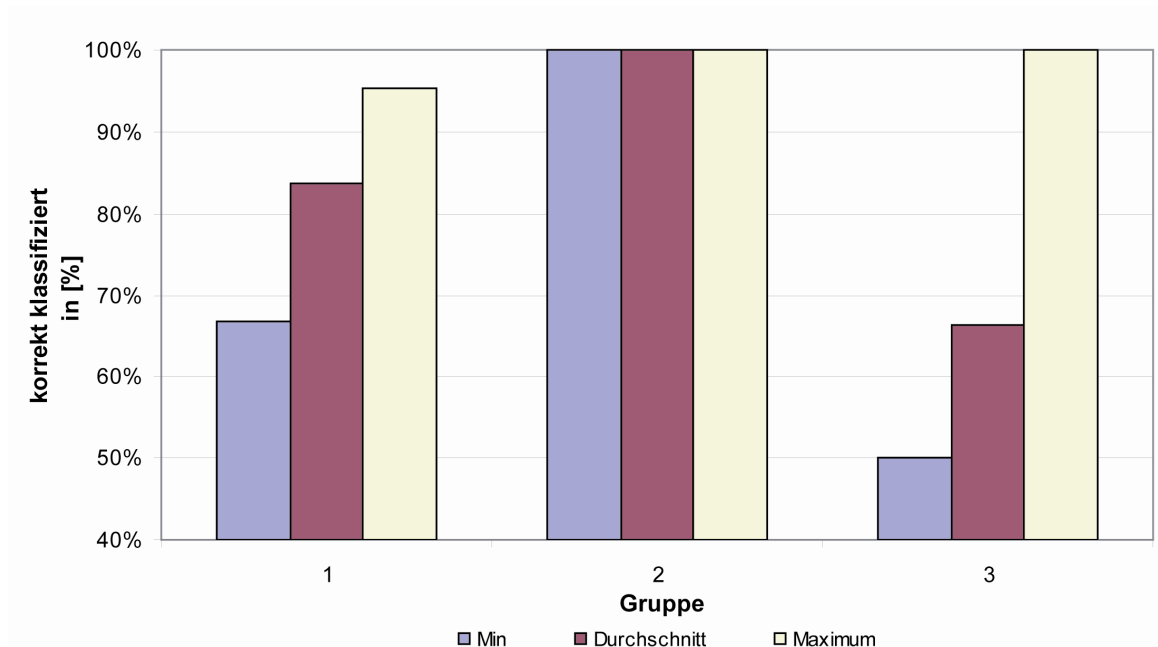


Abbildung 83. Literatur-Test Monosaccharide N-Acetyl Neuraminsäure (positiv)

Die präsentierten Datensätze von N-Acetyl Neuraminsäure können ebenfalls gut klassifiziert werden. Für die Gruppe α -D-Neup5Ac-2R_8R sind in der Datenbank nur 2 Beispiele vorhanden. Eine falsche Zuordnung eines Datensatzes bewirkt bereits eine Reduktion der Erkennung um 50%. Dies ist auch die Ursache für den sehr schlechten Durchschnitt dieser Gruppe. Durch den Mangel an Datensätzen lässt sich dieses Problem leider nicht vermeiden. Die Gruppe α -D-Neup5Ac-2R_8R sollte eventuell aus weiteren Versuchen ausgeschlossen werden.

Tabelle 71. Detailauswertung Literatur-Test positiv N-Acetyl Neuraminsäure

	Gruppe	korrekt klassifiziert in [%]		
		V328		
		Average	Min	Max
1	α -D-Neup5Ac-2R	83.8%	66.7%	95.2%
2	α -D-Neup5Ac-2R_7R	100.0%	100.0%	100.0%
3	α -D-Neup5Ac-2R_8R	66.3%	50.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Die Auswertung nach den einzelnen Gruppen zeigt, dass es durchaus Netzwerke gibt, welche die meisten Gruppen zu 100% erkennen können. Auffallend ist, dass vor allem die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen Gruppen Probleme haben die präsentierten Literaturwerte korrekt zu klassifizieren. Die Resultate sind aber zu wenig konstant, als dass von einer sehr guten Erkennung der Literaturwerte gesprochen werden könnte.

Mittelwert-Test negativ:

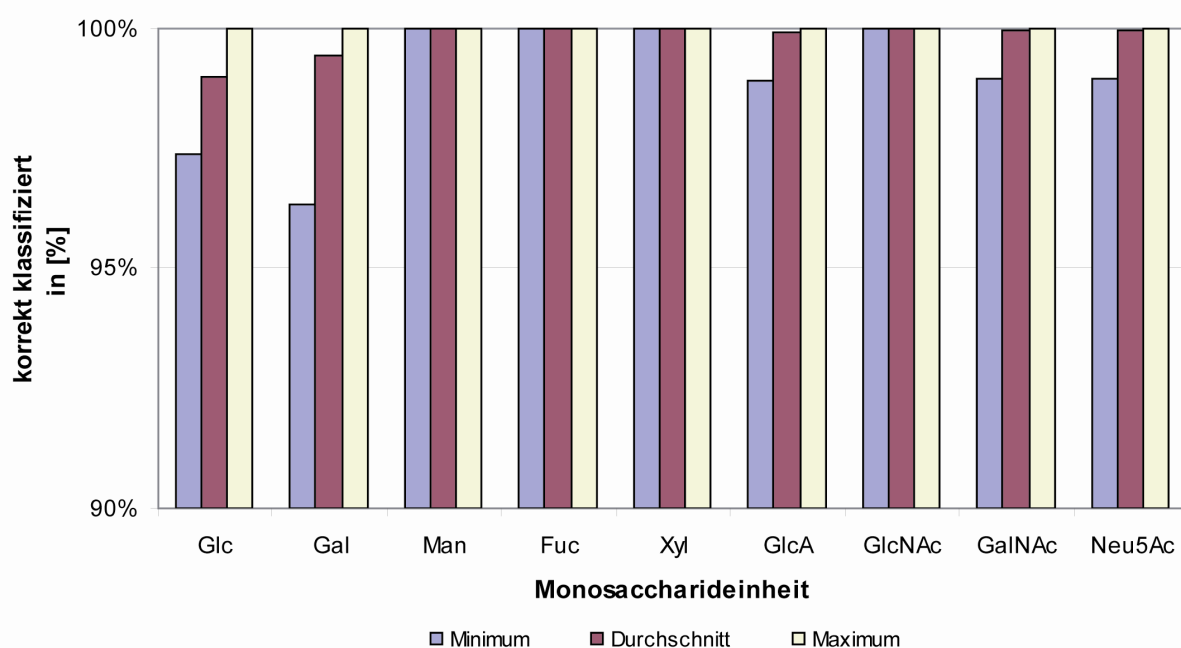


Abbildung 84. Mittelwert-Test Monosaccharide (negativ)

Als erster Negativtest wurden den Netzwerken die Mittelwerte der als *wrong* antrainierten Monosaccharid-Einheiten präsentiert. Die *wrong*-Gruppe setzt sich für jedes Netzwerk aus den Mittelwerten aller anderen Monosaccharid-Einheiten ausser der trainierten Einheit zusammen. Von allen Netzwerken können die Mittelwerte dieser heterogenen Gruppe sehr gut klassifiziert werden. Analog zum Positivtest sind auch hier nur sehr wenige Netzwerke nicht in der Lage, 100% der Mittelwerte zu erkennen.

Tabelle 72. Zusammenfassung Mittelwert-Test (negativ)

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Mittelwerte	korrekt klassifiziert in [%]		
				Average	Min	Max
Glc	V285	Versuch280_281.snn	76	99.0%	97.4%	100.0%
Gal	V258	Versuch252_254.snn	82	99.4%	96.3%	100.0%
Man	V310	Versuch306_307.snn	81	100.0%	100.0%	100.0%

7. Resultate und Diskussion

Fuc	V228	Versuch217_226.snn	95	100.0%	100.0%	100.0%
Xyl	V298	Versuch294_295.snn	85	100.0%	100.0%	100.0%
GlcA	V323	Versuch318_319.snn	95	99.9%	98.9%	100.0%
GlcNAc	V272	Versuch262_263.snn	90	100.0%	100.0%	100.0%
GalNAc	V245	Versuch216_239.snn	94	100.0%	98.9%	100.0%
Neu5Ac	V325	Versuch320_321.snn	95	100.0%	99.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Literatur-Test negativ:

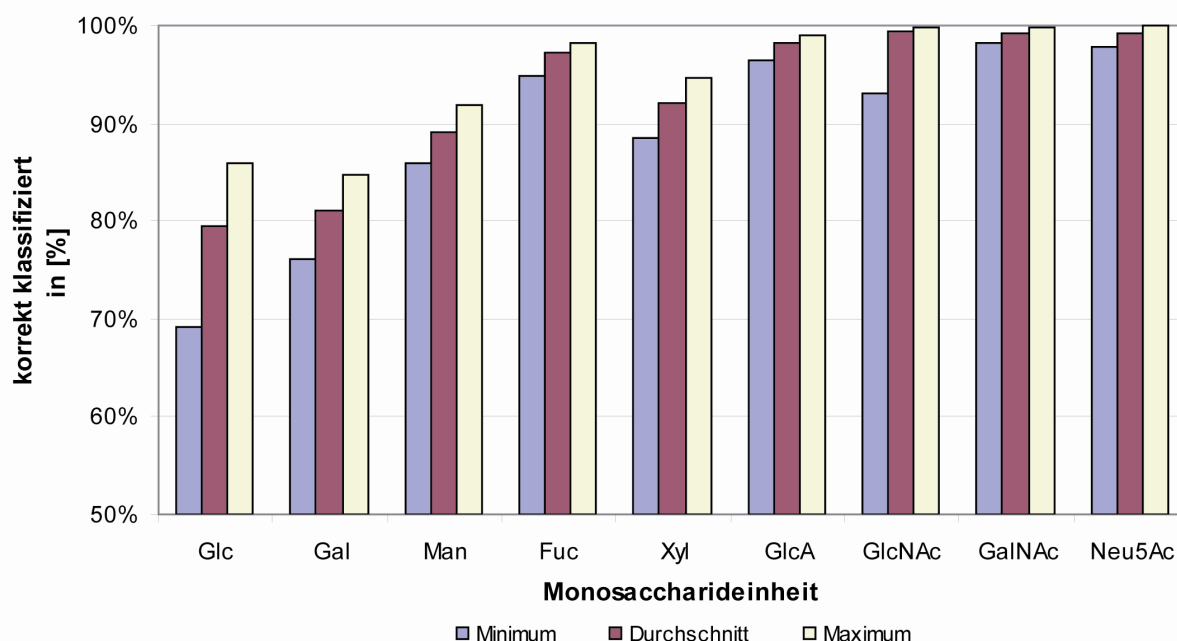


Abbildung 85. Literatur-Test Monosaccharide (negativ)

Als zweiter Negativtest wurden den Netzwerken Literaturdatensätze der als *wrong* antrainierten Monosaccharid-Einheiten präsentiert. Diese Datensätze werden von allen Netzwerken durchwegs besser erkannt als der Literatur-Test der eigenen Monosaccharid-Einheit. In Abbildung 85 sind die Resultate des Literatur-Tests dargestellt. Für Galactose und Fucose sind jeweils nur die Mittelwerte der Versuche dargestellt.

Eine Aufteilung des Literatur-Tests nach Gruppen macht hier keinen Sinn, da nur eine Gruppe (*wrong*) getestet wurde. Aus diesem Grund wurde darauf verzichtet.

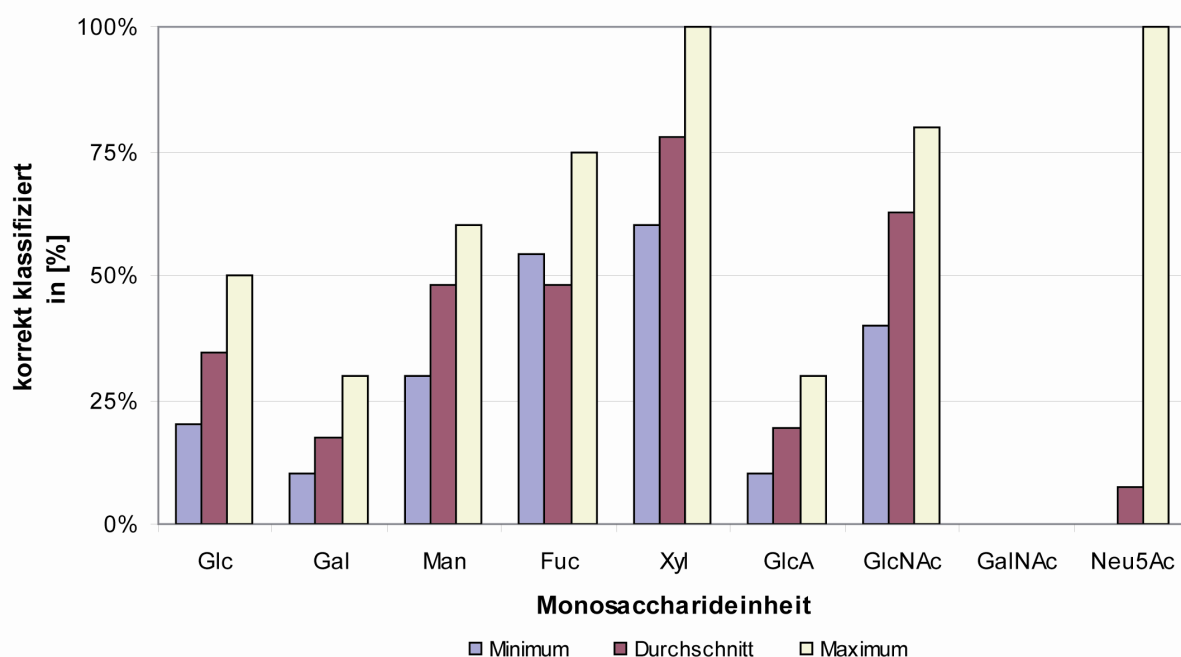
Tabelle 73. Zusammenfassung Literatur-Test Monosaccharide (negativ)

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Literaturwerte	korrekt klassifiziert in [%]		
				Average	Min	Max
Glc	V286	Versuch280_281.snn	682	76.7%	67.5%	82.6%
	V287	Versuch280_281.snn	574	82.2%	71.1%	89.2%
Gal	V259	Versuch252_254.snn	950	80.9%	76.1%	84.8%
Man	V311	Versuch306_307.snn	1029	89.2%	86.0%	91.9%
Fuc	V230	Versuch217_226.snn	134	97.3%	93.3%	98.5%
	V231	Versuch217_226.snn	1862	96.8%	95.1%	97.9%
	V269	Versuch217_226.snn	1094	97.5%	96.3%	98.5%
Xyl	V299	Versuch294_295.snn	1105	92.1%	88.6%	94.6%
GlcA	V327	Versuch318_319.snn	1172	98.2%	96.4%	99.0%
GlcNAc	V273	Versuch262_263.snn	1115	99.3%	93.2%	99.8%
GalNAc	V268	Versuch216_239.snn	1169	99.2%	98.2%	99.7%
Neu5Ac	V329	Versuch320_321.snn	1163	99.3%	97.9%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

7.4.3 Disaccharid-Tests

Nachdem gezeigt wurde, dass unsere Netzwerke Monosaccharid-Einheiten (jedenfalls deren Mittelwerte) gut erkennen können, wurden die Tests in einem ersten Schritt auf Disaccharide bestehend aus Literaturdaten ausgeweitet. Dabei wurden die Testdatensätze mit zwei verschiedenen Methoden getestet. In einem ersten Test wurden alle Peaks der Disaccharide auf einmal präsentiert (online-Test). In einem zweiten Test wurden den Netzwerken die Kombinationen derselben Literaturdatensätze präsentiert (comb-Test; siehe Kapitel 5.9.3).

Disaccharid-Test positiv (online)**Abbildung 86.** Disaccharid-Test Positiv (online)

In der NMR-Datenbank sind nicht für alle Monosaccharid-Einheiten genügend Test-Datensätze enthalten. Die Netzwerke von *N*-Acetyl Galactosamin und *N*-Acetyl Neuraminsäure konnten deshalb nur mit weniger als 10 Substanzen getestet werden. Werden die Disaccharide als Ganzes präsentiert, können sie nur sehr schlecht klassifiziert werden. Die durchschnittliche Erkennung liegt, über alle Monosaccharid-Einheiten gemittelt, bei 35%. Obwohl es noch einige Netzwerke gibt, welche die präsentierten Disaccharide zu 100% richtig in die antrainierten Monosaccharid-Gruppen klassifizieren können, ist die Mehrheit der Netzwerke dazu nicht mehr in der Lage. Die zusätzlichen Peaks scheinen die Netzwerke so zu stören, dass sie die Disaccharide nicht mehr gut klassifizieren können.

Tabelle 74. Zusammenfassung Disaccharid-Test positiv (online)

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Disaccharide	korrekt klassifiziert in [%]		
				Average	Min	Max
Glc	V288	Versuch280_281.snn	10	34.5%	20.0%	50.0%
Gal	V260	Versuch252_254.snn	10	17.3%	10.0%	30.0%
Man	V312	Versuch306_307.snn	10	48.0%	30.0%	60.0%
Fuc	V232	Versuch217_226.snn	24	48.0%	54.2%	75.0%
Xyl	V300	Versuch294_295.snn	11	77.8%	60.0%	100.0%
GlcA	V330	Versuch318_319.snn	10	19.3%	10.0%	30.0%
GlcNAc	V274	Versuch262_263.snn	10	62.7%	40.0%	80.0%

7. Resultate und Diskussion

GalNAc	V247	Versuch216_239.snn	3	0.0%	0.0%	0.0%
Neu5Ac	V336	Versuch320_321.snn	1	7.5%	0.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Disaccharid-Test positiv (comb)

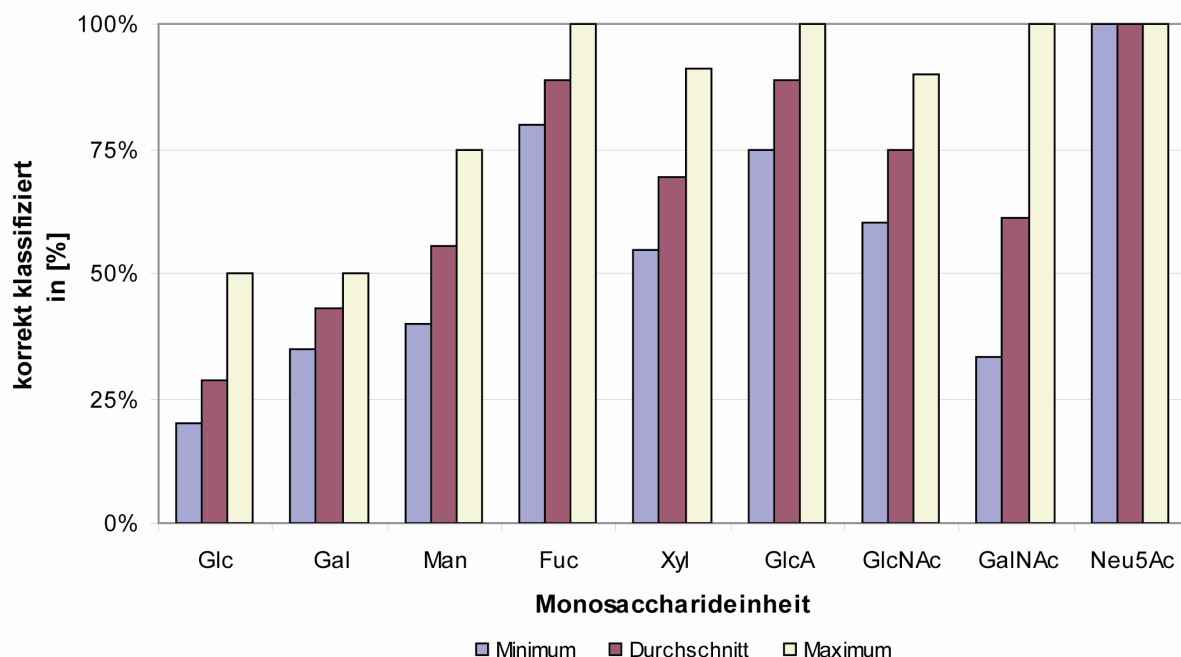


Abbildung 87. Disaccharid-Test Positiv (comb)

Für jedes getestete Netzwerk wurden die Aktivierungen jeder Kombination einzeln ausgezählt und summiert. Als korrekt klassifiziert gilt, wenn die zu aktivierenden Gruppen am meisten Aktivierungen von allen Gruppen besitzt. Die Aktivierungen von *wrong* wurden nicht gewertet, ausser wenn *wrong* eine der korrekten Aktivierungen ist. Die durchschnittliche Erkennung liegt in diesem Test bei 67.8 %. Auffallend ist auch hier, dass die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen Gruppen (Glc, Gal, Man) mehr Mühe bekunden, die präsentierten Kombinationen korrekt zuzuordnen, als die Netzwerke der anderen Monosaccharid-Einheiten.

Tabelle 75. Zusammenfassung Disaccharid-Test positiv (comb)

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Disaccharide	korrekt klassifiziert in [%]		
				Average	Min	Max
Glc	V289	Versuch280_281.snn	10	27.9%	20.0%	50.0%
Gal	V261	Versuch252_254.snn	10	42.9%	35.0%	50.0%
Man	V313	Versuch306_307.snn	10	55.5%	40.0%	75.0%
Fuc	V233	Versuch217_226.snn	24	88.9%	80.0%	100.0%

7. Resultate und Diskussion

Xyl	V302	Versuch294_295.snn	11	69.3%	54.6%	90.9%
GlcA	V331	Versuch318_319.snn	10	88.8%	75.0%	100.0%
GlcNAc	V276	Versuch262_263.snn	10	74.8%	60.0%	90.0%
GalNAc	V248	Versuch216_239.snn	3	61.3%	33.3%	100.0%
Neu5Ac	V356	Versuch320_321.snn	1	100.0%	100.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Glucose (V289):

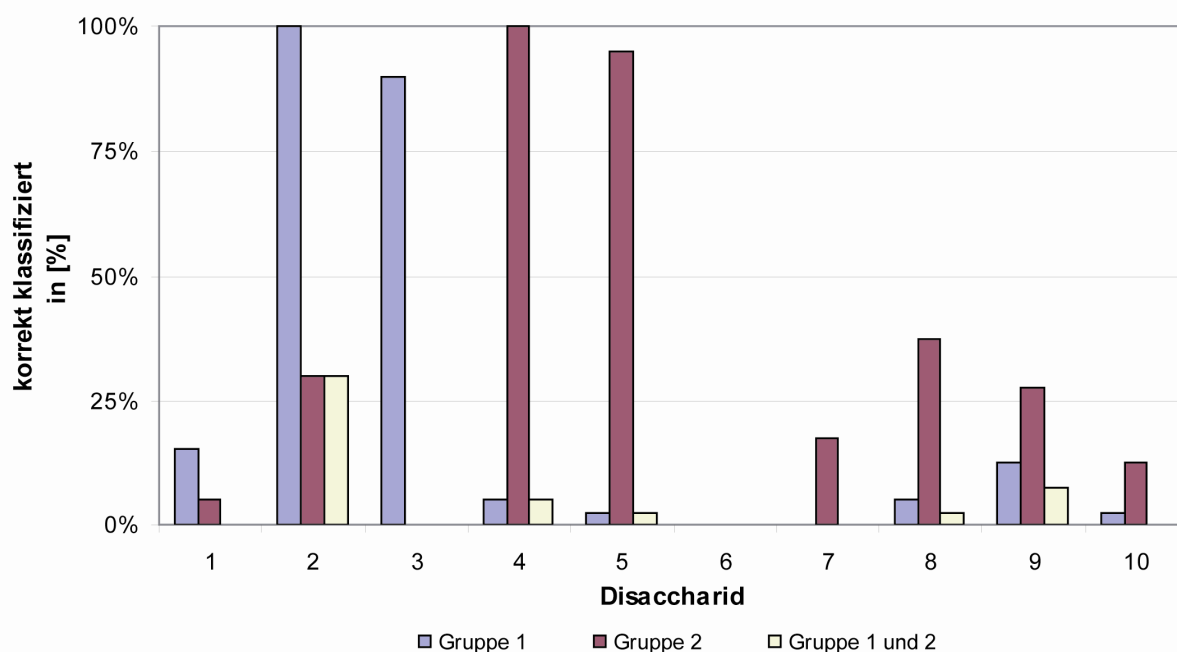


Abbildung 88. Disaccharid-Test Glucose positiv (comb)

Durchschnittlich werden nur 27.9% der präsentierten Monosaccharid-Einheiten der Glucose-Disaccharide korrekt erkannt. Es ist aber keine Tendenz zu erkennen, dass die Netzwerke nur mit der Klassifikation von gewissen Gruppen Probleme haben. Betrachtet man die Disaccharide als Ganzes (Gruppe 1 und 2) können im Durchschnitt nur 4.8% der Disaccharide korrekt erkannt werden.

Tabelle 76. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) Glucose

	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	α -D-Glcp-1-2- α -D-Glcp-OMe	α -D-Glcp-1R	α -D-Glcp-1R;2R	15.0%	5.0%	0.0%
2	α -D-Glcp-1-3- α -D-Glcp-OMe	α -D-Glcp-1R	α -D-Glcp-1R;3R	100.0%	30.0%	30.0%
3	β -D-Glcp-1-2- β -D-Glcp-OMe	β -D-Glcp-1R	β -D-Glcp-1R;2R	90.0%	0.0%	0.0%

7. Resultate und Diskussion

4	α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-OMe	α -D-Glcp-1R	α -D-Glcp-1R;4R	5.0%	100.0%	5.0%
5	β -D-Glcp-1-3- β -D-Glcp	β -D-Glcp-1R	β -D-Glcp-OH-3R	2.5%	95.0%	2.5%
6	α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp	α -D-Glcp-1R	α -D-Glcp-OH-4R	0.0%	0.0%	0.0%
7	α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OMe	α -D-Glcp-1R	β -D-Glcp-1R;4R	0.0%	17.5%	0.0%
8	α -D-Glcp-1-2- β -D-Glcp	α -D-Glcp-1R	β -D-Glcp-OH-2R	5.0%	37.5%	2.5%
9	α -D-Glcp-1-6- β -D-Glcp	α -D-Glcp-1R	β -D-Glcp-OH-6R	12.5%	27.5%	7.5%
10	β -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp	β -D-Glcp-1R	α -D-Glcp-OH-6R	2.5%	12.5%	0.0%

Galactose (V261):

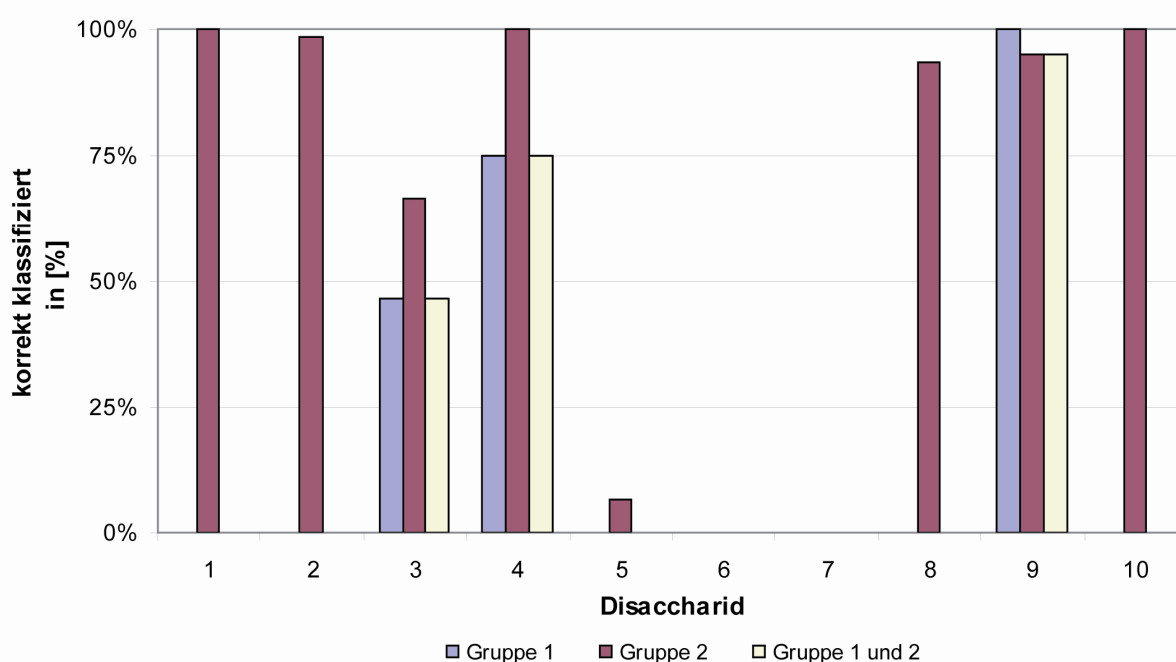
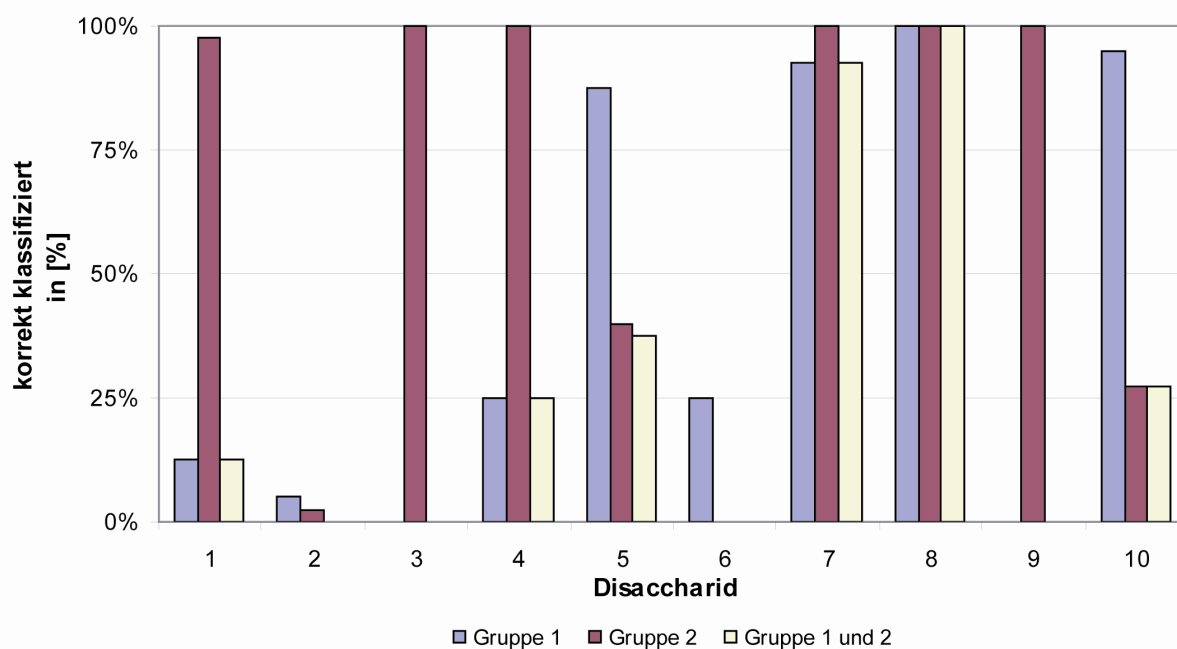


Abbildung 89. Disaccharid-Test Galactose positiv (comb)

Die präsentierten Monosaccharid-Einheiten der Galactose-Disaccharide können im Durchschnitt zu 42.9 % korrekt klassifiziert werden (Gruppe 1 oder Gruppe 2). Für sieben der Disaccharide kann wenigstens eine der beiden Gruppen sehr gut klassifiziert werden. Für die Disaccharide 5, 6 und 7 werden kaum oder überhaupt keine Ausgaben erzeugt. Im Durchschnitt können nur 21.7% der Disaccharide (als Ganzes betrachtet; Gruppe 1 und 2) korrekt klassifiziert werden.

Tabelle 77. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) Galactose

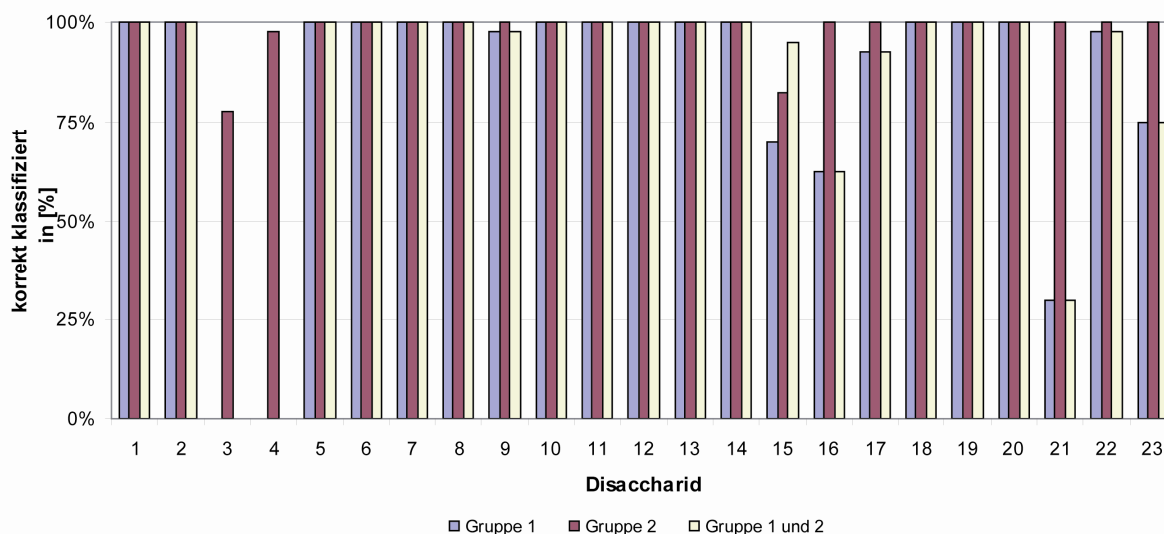
	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	β -D-Galp-1-3- α -L-Rhap-OMe	β -D-Galp-1R	wrong	0.0%	100.0%	0.0%
2	β -D-Galp-1-4- β -D-Frup	β -D-Galp-1R	wrong	0.0%	98.3%	0.0%
3	β -D-Galp-1-2- β -D-Galp-OMe	β -D-Galp-1R	β -D-Galp-1R;2R	46.7%	66.7%	46.7%
4	α -D-Galp-1-4- α -D-Galp-OMe	α -D-Galp-1R	α -D-Galp-1R;4R	75.0%	100.0%	75.0%
5	β -D-Galp-1-6- α -D-Galp	β -D-Galp-1R	α -D-Galp-OH-6R	0.0%	6.7%	0.0%
6	β -D-Galp-1-6- β -D-Galp	β -D-Galp-1R	β -D-Galp-OH-6R	0.0%	0.0%	0.0%
7	β -D-Galp-1-3- α -D-Galp	β -D-Galp-1R	α -D-Galp-OH-3R	0.0%	0.0%	0.0%
8	β -D-Galp-1-6- β -D-Galp-OMe	β -D-Galp-1R	β -D-Galp-1R;6R	0.0%	93.3%	0.0%
9	α -D-Galp-1-4- α -D-Galp-OMe	α -D-Galp-1R	α -D-Galp-1R;4R	100.0%	95.0%	95.0%
10	β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-OMe	β -D-Galp-1R	wrong	0.0%	100.0%	0.0%

Mannose (V313):**Abbildung 90.** Disaccharid-Test Mannose positiv (comb)

Von rund 55.5% der präsentierten Mannose-Disaccharide kann mindestens eine der beiden Monosaccharid-Einheiten korrekt klassifiziert werden. Nur für 1 Disaccharid (No. 8) können beide Gruppen von allen Netzwerken korrekt klassifiziert werden. Im Durchschnitt resultiert eine Erkennung der Disaccharide von nur 29.5%.

Tabelle 78. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) Mannose

	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	α -D-Manp-1-4- β -D-Glcp-OMe	α -D-Manp-1R	wrong	12.5%	97.5%	12.5%
2	β -D-Manp-1-1- α -D-GlcpN	β -D-Manp-1R	wrong	5.0%	2.5%	0.0%
3	β -D-Manp-1-4- β -D-Glcp	β -D-Manp-1R	wrong	0.0%	100.0%	0.0%
4	α -D-Manp-1-4- α -L-Rhap	α -D-Manp-1R	wrong	25.0%	100.0%	25.0%
5	β -D-Manp-1-4- α -L-Rhap	β -D-Manp-1R	wrong	87.5%	40.0%	37.5%
6	α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-OMe	α -D-Manp-1R	α -D-Manp-1R;3R	25.0%	0.0%	0.0%
7	α -D-Manp-1-2- α -D-Manp-OMe	α -D-Manp-1R	α -D-Manp-1R;2R	92.5%	100.0%	92.5%
8	β -D-ManpNAC-1-4- α -D-GlcpNAC	β -D-ManpNAC-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
9	β -D-Manp-1-6- α -D-Glcp-OMe	β -D-Manp-1R	wrong	0.0%	100.0%	0.0%
10	α -D-Manp-1-3- α -D-Manp-OMe	α -D-Manp-1R	α -D-Manp-1R;3R	95.0%	27.5%	27.5%

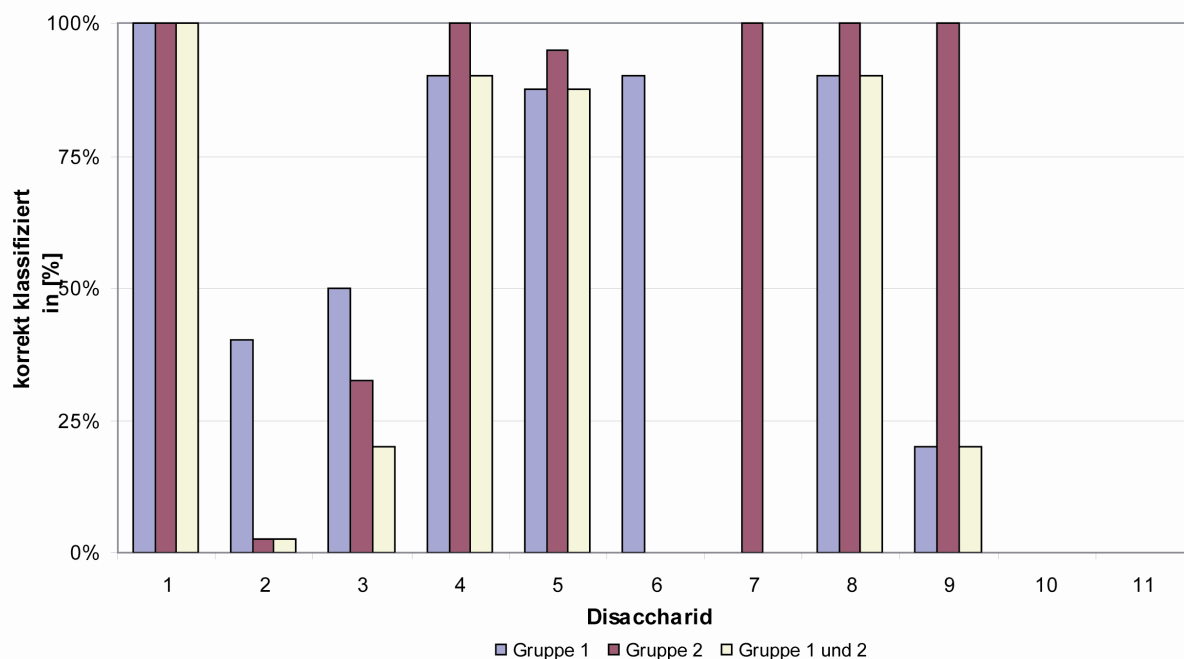
Fucose (V233):**Abbildung 91.** Disaccharid-Test Fucose positiv (comb)

In der Datenbank existieren leider nur Disaccharide mit 2 der 5 Fucose-Gruppen (α -L-Fucp-1R, β -L-Fucp-1R). Der durchgeführte Disaccharid-Test hat deswegen nur eine beschränkte Aussagekraft. Die beiden präsentierten Gruppen werden aber bis auf 3 Beispiele (3,4 und 21) gut erkannt. Die durchschnittliche Erkennung der Disaccharide liegt bei 83.1%.

7. Resultate und Diskussion

Tabelle 79. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) Fucose

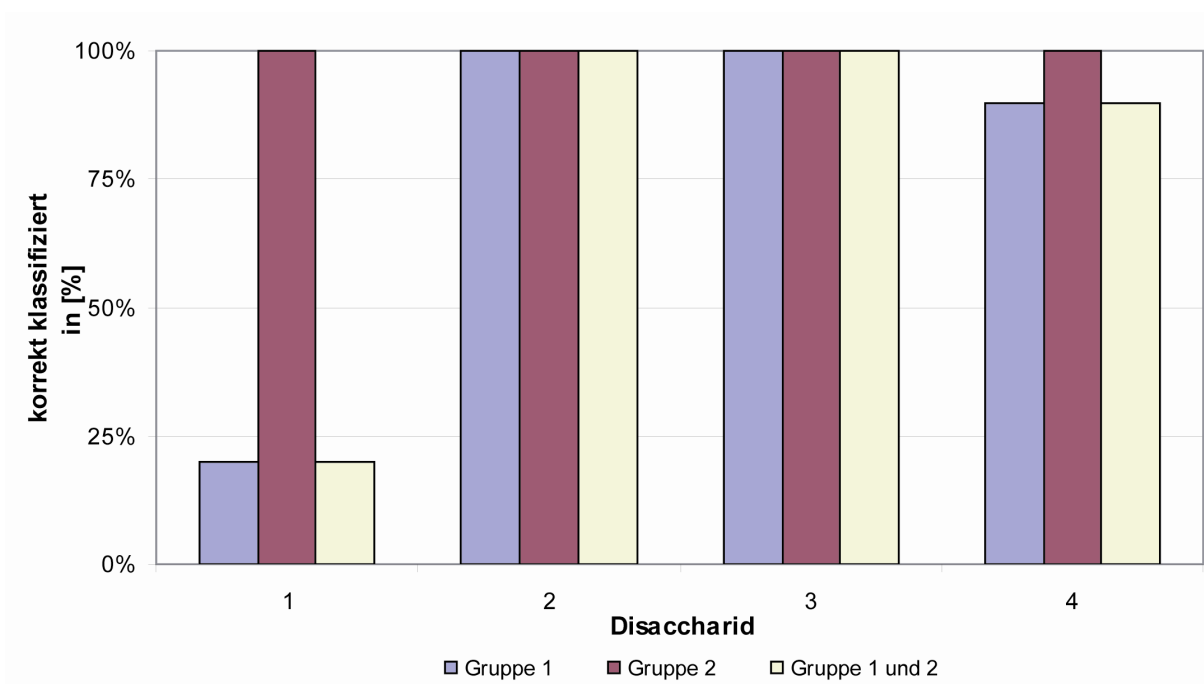
	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	α -L-Fucp-1-2- β -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
2	α -L-Fucp-1-4- α -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
3	β -L-Fucp-1-4- α -D-Glcp-OMe	β -L-Fucp-1R	wrong	0.0%	77.5%	0.0%
4	α -L-Fucp-1-3- α -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	0.0%	97.5%	0.0%
5	α -D-Fucp-1-3- α -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
6	α -L-Fucp-1-3- β -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
7	α -D-Fucp-1-3- β -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
8	α -L-Fucp-1-3- α -D-Galp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
9	α -D-Fucp-1-3- α -D-Galp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	97.50%	100.0%	97.5%
10	α -L-Fucp-1-3- α -D-Manp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
11	α -D-Fucp-1-3- α -D-Manp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
12	α -L-Fucp-1-2- α -D-Manp	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
13	α -L-Fucp-1-2- β -D-Manp	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
14	β -L-Fucp-1-2- β -D-Manp	β -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
15	α -L-Fucp-1-2- α -L-Fucp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	70.0%	82.5%	95.0%
16	β -L-Fucp-1-2- α -D-Glcp-OMe	β -L-Fucp-1R	wrong	62.5%	100.0%	62.5%
17	β -L-Fucp-1-3- α -D-Glcp-OMe	β -L-Fucp-1R	wrong	92.5%	100.0%	92.5%
18	α -L-Fucp-1-6- α -D-Glcp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
19	β -L-Fucp-1-6- α -D-Glcp-OMe	β -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
20	α -L-Fucp-1-6- α -D-Galp-OMe	α -L-Fucp-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
21	β -L-Fucp-1-6- α -D-Galp-OMe	β -L-Fucp-1R	wrong	30.0%	100.0%	30.0%
22	α -L-Fucp-1-4- β -D-GlcpNAc-1-9-O-(1-methoxy)-nonanoate	α -L-Fucp-1R	wrong	97.5%	100.0%	97.5%
23	α -L-Fucp-1-2- β -D-Galp-1-9-O-(1-methoxy)-nonanoate	α -L-Fucp-1R	wrong	75.0%	100.0%	75.0%

Xylose (V302):**Abbildung 92.** Disaccharid-Test Xylose positiv (comb)

Die in der Datenbank vorhandenen Xylose-Disaccharide bestehen meistens aus 2 Xyloseeinheiten. Im Durchschnitt können die getesteten Disaccharide nur zu 37.3% korrekt klassifiziert werden.

Tabelle 80. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) Xylose

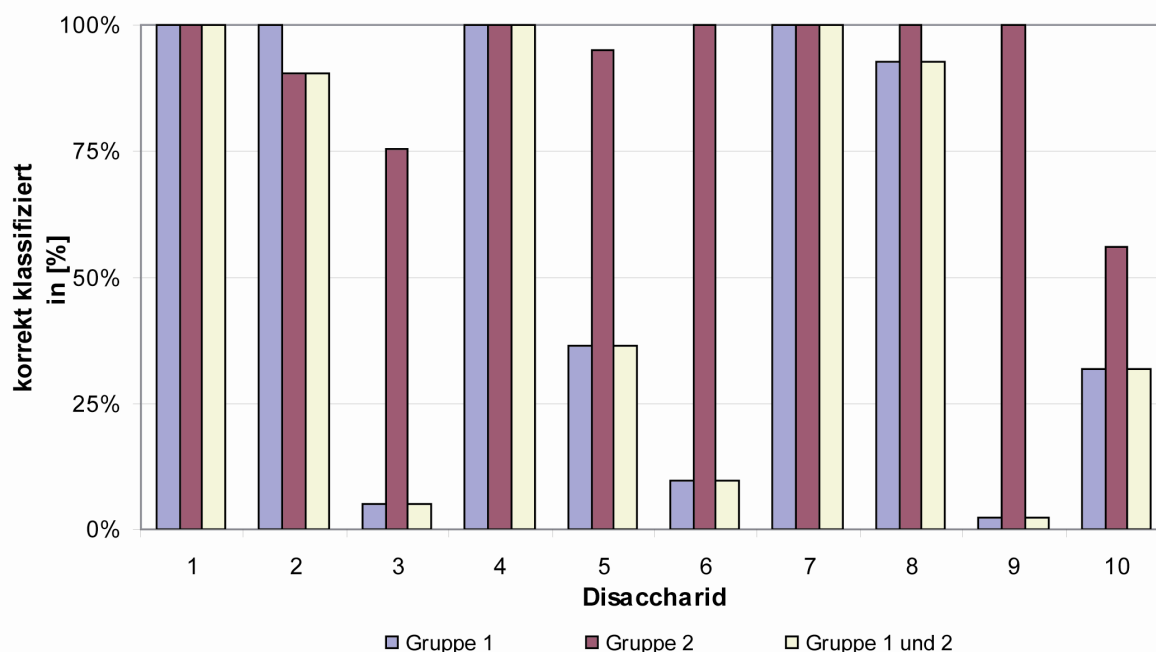
	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	α -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp-OMe	α -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-1R;2R	100.0%	100.0%	100.0%
2	α -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp-OMe	α -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-1R;3R	40.0%	2.5%	2.5%
3	α -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-OMe	α -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-1R;4R	50.0%	32.5%	20.0%
4	β -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp-OMe	β -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-1R;2R	90.0%	100.0%	90.0%
5	β -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp-OMe	β -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-1R;3R	87.5%	95.0%	87.5%
6	β -D-Xylp-1-4- β -D-Xylp-OMe	β -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-1R;4R	90.0%	0.0%	0.0%
7	α -D-Xylp-1-2- β -D-Xylp	α -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-OH-2R	0.0%	100.0%	0.0%
8	α -D-Xylp-1-2- α -D-Xylp	α -D-Xylp-1R	α -D-Xylp-OH-2R	90.0%	100.0%	90.0%
9	β -D-Xylp-1-3- β -D-Xylp	β -D-Xylp-1R	β -D-Xylp-OH-3R	20.0%	100.0%	20.0%
10	β -D-Xylp-1-4- α -D-Xylp	β -D-Xylp-1R	α -D-Xylp-OH-4R	0.0%	0.0%	0.0%
11	β -D-Xylp-1-2- β -D-Manp-OMe	β -D-Xylp-1R	wrong	0.0%	0.0%	0.0%

Glucuronsäure (V331):**Abbildung 93.** Disaccharid-Test Glucuronsäure positiv (comb)

Die Datenbank beinhaltet nur 4 Disaccharide, die Glucuronsäure enthalten. Drei der vier darin enthaltenen Glucuronsäure-Gruppen können sehr gut klassifiziert werden. Die durchschnittliche Erkennung von Gruppe 1 und 2 liegt bei 77.5%.

Tabelle 81. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) Glucuronsäure

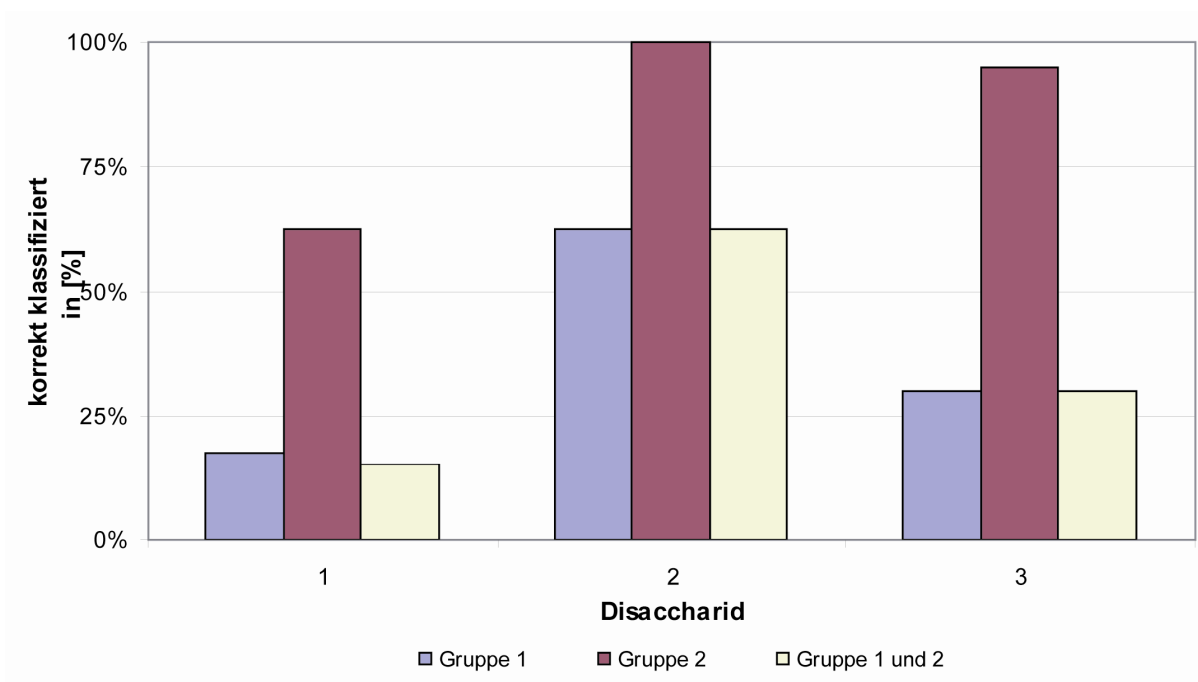
	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	β -D-GlcpA-1-3- α -D-GlcpNAc	β -D-GlcpA-1R	wrong	20.0%	100.0%	20.0%
2	β -D-GlcpA-1-3- β -D-GlcpNAc	β -D-GlcpA-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
3	β -D-GlcpA-1-3- α -D-GalpNAc	β -D-GlcpA-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
4	β -D-GlcpA-1-3- β -D-GalpNAc	β -D-GlcpA-1R	wrong	90.0%	100.0%	90.0%

N-Acetyl Glucosamin (V276):**Abbildung 94.** Disaccharid-Test N-Acetyl Glucosamin positiv (comb)

Nur für 3 der präsentierten Disaccharide können beide Gruppen korrekt zugeordnet werden. Bei allen anderen Disacchariden haben die Netzwerke zum Teil erhebliche Probleme. Bezogen auf die Erkennung beider Gruppen resultiert im Durchschnitt eine Erkennung von nur 56.8%.

Tabelle 82. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) N-Acetyl Glucosamin

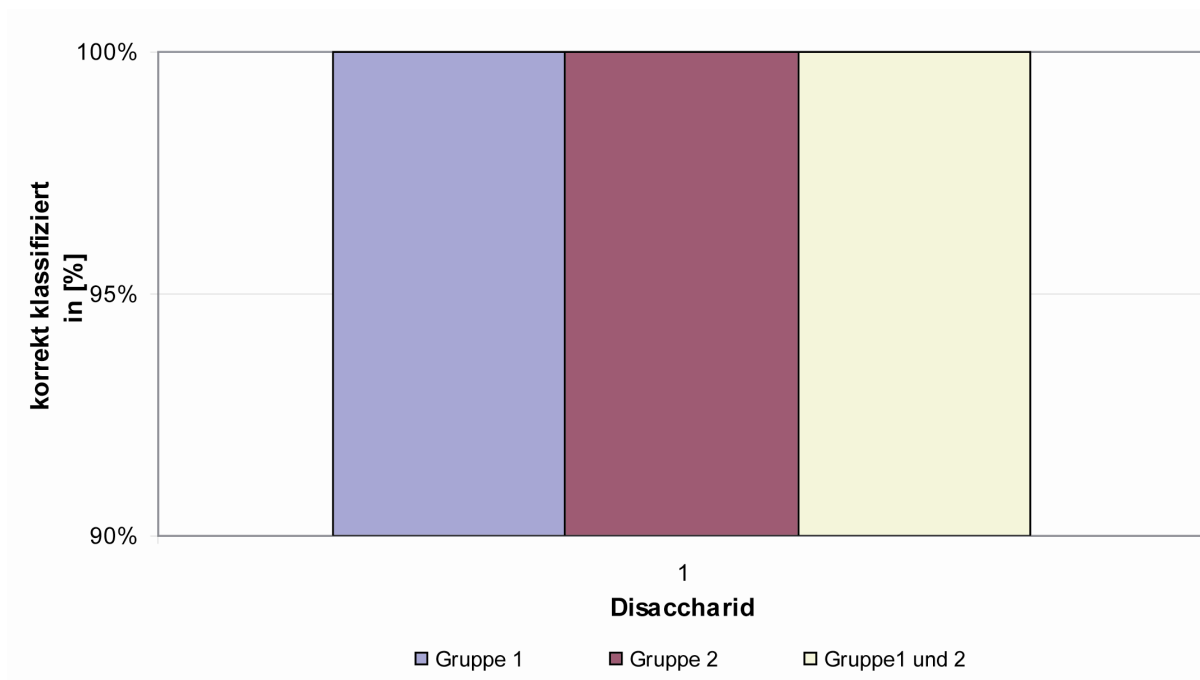
	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	β -D-GlcpNAc-1-2- α -D-Man	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
2	β -D-GlcpNAc-1-3- α -D-Glcp-OMe	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	100.0%	90.2%	90.2%
3	β -D-GlcpNAc-1-3- α -D-Galp-OMe	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	4.9%	75.6%	4.9%
4	β -D-GlcpNAc-1-2- α -D-Manp-OMe	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
5	β -D-GlcpNAc-1-3- α -D-Manp-OMe	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	36.6%	95.1%	36.6%
6	β -D-GlcpNAc-1-4- α -D-Manp-OMe	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	9.8%	100.0%	9.8%
7	β -D-GlcpNAc-1-6- α -D-Manp-OMe	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%
8	β -D-GlcpNAc-1-2- α -L-Rhap-1-9-O-(1-methoxy)-nonanoat	β -D-GlcpNAc-1R	wrong	92.7%	100.0%	92.7%
9	β -D-GlcpNAc-1-4- β -D-GlcpNAc	β -D-GlcpNAc-1R	β -D-GlcpNAc-OH-4R	2.4%	100.0%	2.44%
10	β -D-GlcpNAc-1-4- α -D-GlcpNAc	β -D-GlcpNAc-1R	α -D-GlcpNAc-OH-4R	31.7%	56.1%	31.7%

N-Acetyl Galactosamin (V248):**Abbildung 95.** Disaccharid-Test *N*-Acetyl Galactosamin positiv (comb)

Aus der Datenbank konnten nur drei Disaccharide mit *N*-Acetyl Galactosamin getestet werden. Auch hier haben die Netzwerke teilweise Probleme mit der Erkennung der beiden gesuchten Gruppen. Die beiden präsentierten Monosaccharid-Gruppen der Testsubstanzen 1 und 3 können nur von sehr wenigen Netzwerken korrekt klassifiziert werden. Dies erklärt tiefe durchschnittliche Erkennung für die Monosaccharid-Einheit *N*-Acetyl Galactosamin von nur 35.8%.

Tabelle 83. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) *N*-Acetyl Galactosamin

	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	α -D-GalpNAc-1-3- β -D-Galp-1-9-O-(1-methoxy)-nonanoat	α -D-GalpNAc-1R	wrong	17.50%	62.5%	15%
2	β -D-GalpNAc-1-6- β -D-GalpNAc	β -D-GalpNAc-1R	β -D-GalpNAc-OH-6R	62.5%	100.0%	62.5%
3	β -D-GalpNAc-1-6- α -D-GalpNAc	β -D-GalpNAc-1R	α -D-GalpNAc-OH-6R	30.0%	95.0%	30.0%

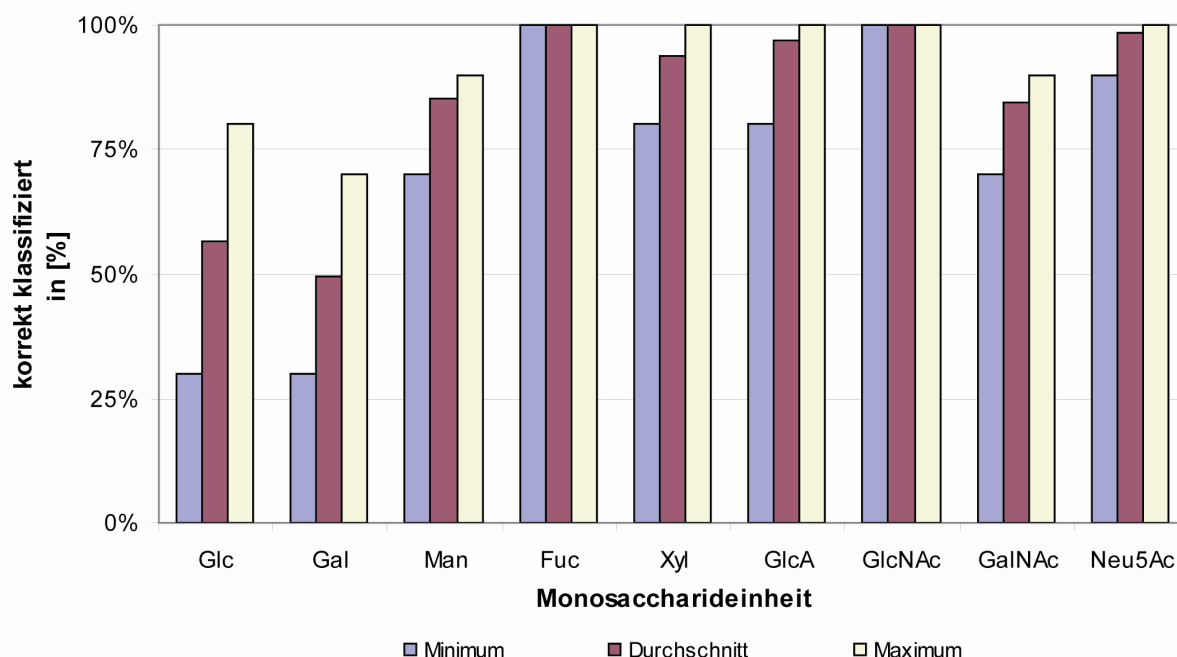
N-Acetyl Neuraminsäure (V356):**Abbildung 96.** Disaccharid-Test *N*-Acetyl Neuraminsäure positiv (comb)

Das einzige Disaccharid aus der Datenbank, das eine *N*-Acetyl Neuraminsäure enthält, wird ohne Probleme korrekt klassifiziert.

Tabelle 84. Detailauswertung Disaccharid-Test positiv (comb) *N*-Acetyl Neuraminsäure

	Substanz	Gruppe 1	Gruppe 2	korrekt klassifiziert in [%]		
				Gruppe 1	Gruppe 2	Gruppe 1 und 2
1	α -D-Neup5Ac-2-3- β -D-Galp-O-Ceramide	α -D-Neup5Ac-2R	wrong	100.0%	100.0%	100.0%

Die trainierten Netzwerke aller Monosaccharid-Einheiten haben zum Teil massive Probleme mit der Erkennung der präsentierten Disaccharide. Wiederum sind es die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen Gruppen (D-Glc, D-/L-Gal, D-Man und D-/L-Xyl), die am meisten Probleme mit der korrekten Klassifizierung haben.

Disaccharid-Test negativ (online):**Abbildung 97.** Disaccharid-Test Negativ (online)

Vor allem die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen Gruppen haben auch in diesem Test Probleme die Disaccharide korrekt als *wrong* zu klassifizieren. Die Netzwerke klassifizieren die Disaccharid-Gruppen deutlich schlechter als die Literaturbeispiele des Monosaccharidtests (online negativ). Die zusätzlichen chemischen Verschiebungen scheinen also nicht nur die Erkennung der eigenen antrainierten Monosaccharid-Einheit sondern auch die Erkennung der fremden Monosaccharid-Einheiten (*wrong Gruppen*) zu beeinflussen.

Tabelle 85. Zusammenfassung Disaccharid-Test Negativ (online)

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Disaccharide	korrekt klassifiziert in [%]		
				Average	Min	Max
Glc	V290	Versuch280_281.snn	10	56.3%	30.0%	80.0%
Gal	V264	Versuch252_254.snn	10	49.5%	30.0%	70.0%
Man	V314	Versuch306_307.snn	10	85.3%	70.0%	90.0%
Fuc	V234	Versuch217_226.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%
Xyl	V301	Versuch294_295.snn	10	93.8%	80.0%	100.0%
GlcA	V332	Versuch318_319.snn	10	96.8%	80.0%	100.0%
GlcNAc	V275	Versuch262_263.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%
GalNAc	V250	Versuch216_239.snn	10	84.5%	70.0%	90.0%
Neu5Ac	V338	Versuch320_321.snn	10	98.5%	90.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Disaccharid-Test negativ (comb)

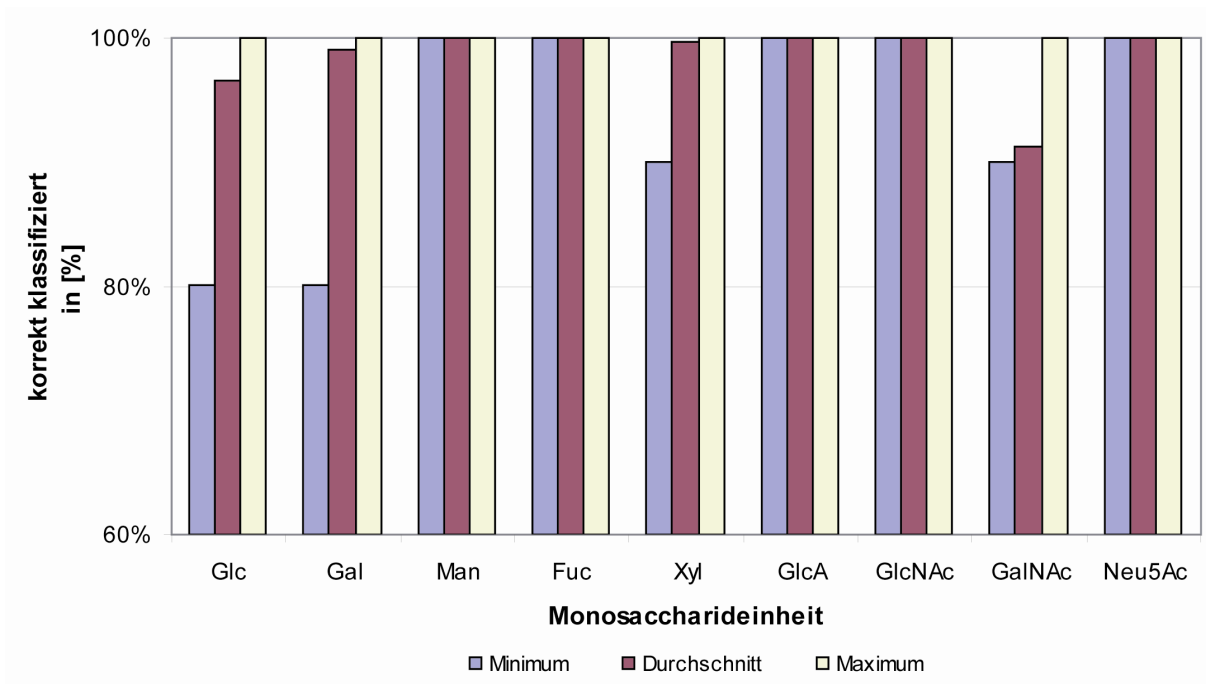


Abbildung 98. Disaccharid-Test Negativ (comb)

Die Kombinationen der Disaccharide können im Vergleich zum online-Test wiederum gut klassifiziert werden. Ohne den störenden Einfluss zusätzlicher chemischer Verschiebungen (vgl. online-Test) scheinen die Netzwerke weniger Probleme zu haben. Die Netzwerke des Monosaccharid-Ansatzes sind gegenüber störenden Einflüssen, wie zum Beispiel zusätzlichen Peaks oder leichten Verschiebungen (Literatur-Tests) zu wenig stabil.

Tabelle 86. Zusammenfassung Disaccharid-Test Negativ (comb)

	Versuch	Netzwerk	Anzahl Disaccharide	korrekt klassifiziert in [%]		
				<i>Average</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
Glc	V291	Versuch280_281.snn	10	96.5%	80.0%	100.0%
Gal	V265	Versuch252_254.snn	10	99.0%	80.0%	100.0%
Man	V315	Versuch306_307.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%
Fuc	V235	Versuch217_226.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%
Xyl	V303	Versuch294_295.snn	10	99.8%	90.0%	100.0%
GlcA	V333	Versuch318_319.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%
GlcNAc	V277	Versuch262_263.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%
GalNAc	V251	Versuch216_239.snn	10	91.3%	90.0%	100.0%
Neu5Ac	V357	Versuch320_321.snn	10	100.0%	100.0%	100.0%

Average: Mittelwert; *Min*: Minimum; *Max*: Maximum

7.4.4 Hindsgaul-Test

Der Hindsgaul-Test besteht aus einer Sammlung von sechs Oligosacchariden. Die chemischen Verschiebungen der *in-house* gemessenen Spektren wurden den Monosaccharid-Netzwerken in drei verschiedenen Arten präsentiert. In einem ersten Test wurden die chemischen Verschiebungen jedes Oligosaccharids den einzelnen Monosaccharid-Gruppen zugeordnet. Die für die entsprechenden Monosaccharid-Gruppen trainierten Netzwerke wurden anschliessend mit diesen Datensätzen getestet. In einem zweiten Test wurden allen Netzwerken die kompletten Datensätze jedes Oligosaccharids präsentiert. In einem letzten Test wurden wiederum allen Netzwerken die Kombinationen der chemischen Verschiebungen jedes Oligosaccharids der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert.

Hindsgaul-Test korrekte Peaks

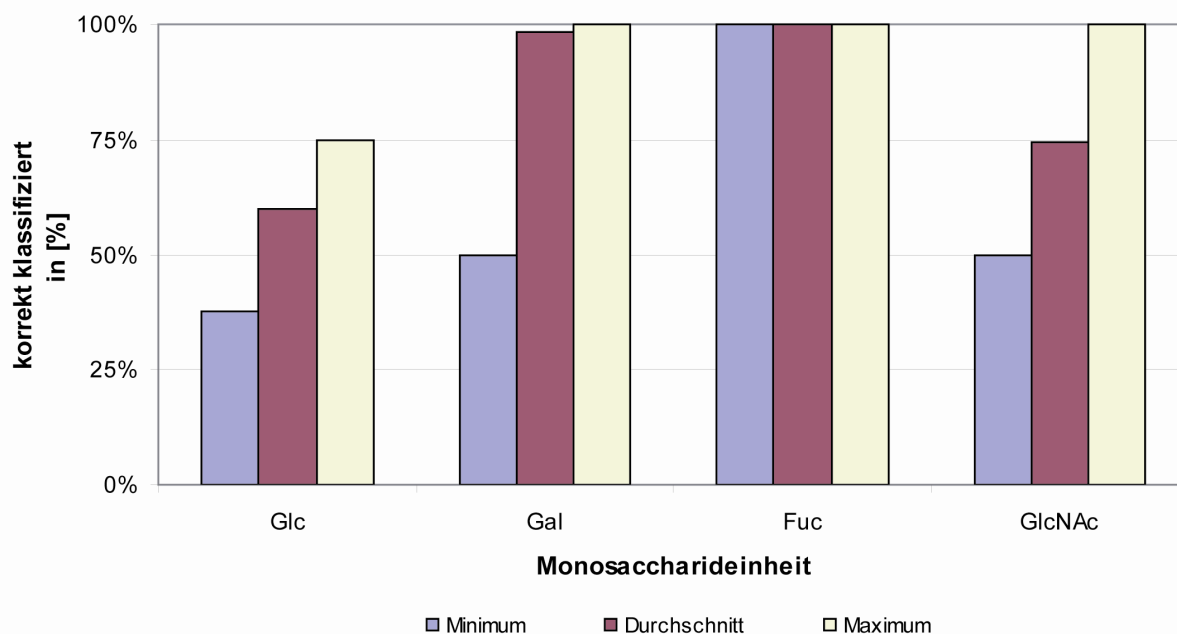


Abbildung 99. Hindsgaul-Test (korrekte Peaks)

Die Monosaccharid-Einheiten Mannose, Xylose, Glucuronsäure, *N*-Acetyl Galactosamin und *N*-Acetyl Neuraminsäure konnten nicht getestet werden, da keine entsprechenden Datensätze dieser Monosaccharid-Einheiten in der Hindsgaul-Datenreihe enthalten sind. Die angegebenen Prozentzahlen geben an, wie gut die Netzwerke die ihnen präsentierten Gruppen erkennen können. Bis auf Glucose konnte für alle Monosaccharid-Einheiten mindestens 1 Netzwerk alle präsentierten Gruppen korrekt erkennen. In der Hindsgaul-Datenreihe ist nur 1 Beispiel mit einer *N*-Acetyl Glucosamin-Gruppe vorhanden. Dadurch sinkt die Erkennung eines Netzwerkes schon bei nur einem Fehler auf 50.0%. Aus diesem Grund ist der Durchschnitt dieser Gruppe so tief.

Tabelle 87. Zusammenfassung Hindsgaul-Test (korrekte Peaks)

	Versuch	Netzwerk	korrekt klassifiziert in [%]		
			Average	Min	Max
Glc	V352	Versuch280_281.snn	59.7%	37.5%	75.0%
Gal	V353	Versuch252_254.snn	98.3%	50.0%	100.0%
Fuc	V357	Versuch217_226.snn	100.0%	100.0%	100.0%
GlcNAc	V354	Versuch262_263.snn	74.4%	50.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Hindsgaul-Test Online

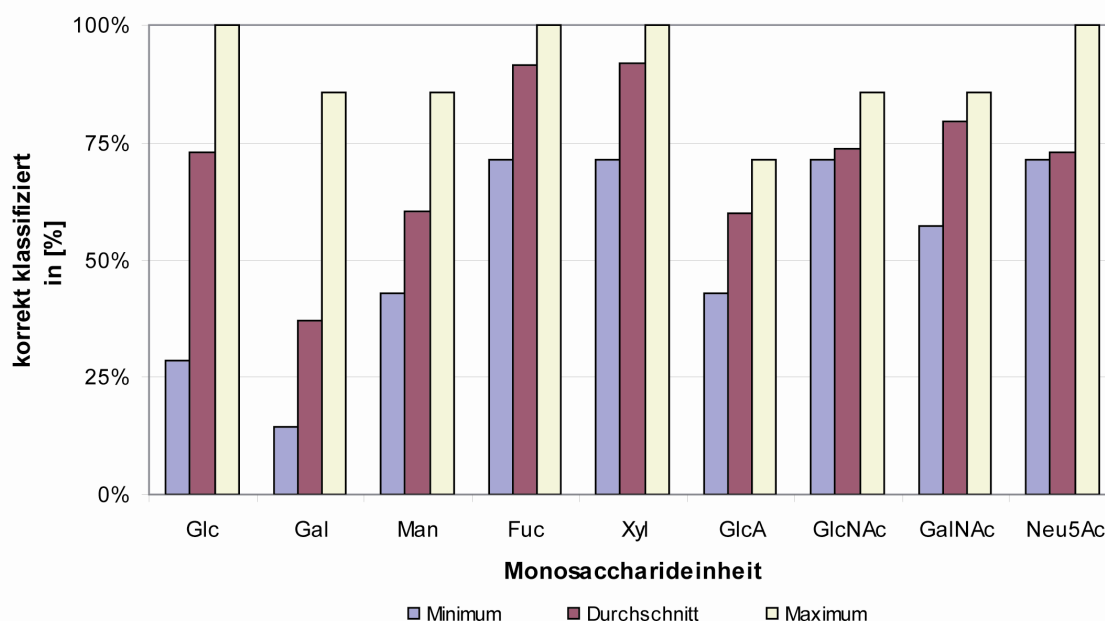


Abbildung 100. Hindsgaul-Test (online)

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken des Monosaccharid-Ansatzes die gesamten Peaks jedes Hindsgaul-Zuckers einzeln präsentiert. Die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten Mannose, Xylose, Glucuronsäure, *N*-Acetyl Galactosamin und *N*-Acetyl Neuraminsäure wurden nun ebenfalls mitgetestet. Die Resultate dieses Tests sind jedoch mit Vorsicht zu geniessen. Bei nur einer Ausgabe können nie die beiden gesuchten Aktivierungen für ein Disaccharid aktiviert werden. Richtig gewertet wurde, wenn eine der beiden korrekten Aktivierungen gefunden wurde.

Tabelle 88. Zusammenfassung Hindsgaul-Test (online)

	Versuch	Netzwerk	korrekt klassifiziert in [%]		
			Average	Min	Max
Glc	V292	Versuch280_281.snn	72.9%	28.6%	100.0%
Gal	V266	Versuch252_254.snn	36.9%	14.3%	85.7%
Man	V316	Versuch306_307.snn	60.4%	42.9%	85.7%
Fuc	V237	Versuch217_226.snn	91.4%	71.4%	100.0%
Xyl	V304	Versuch294_295.snn	91.8%	71.4%	100.0%
GlcA	V334	Versuch318_319.snn	60.0%	42.9%	71.4%
GlcNAc	V279	Versuch262_263.snn	73.9%	71.4%	85.7%
GalNAc	V249	Versuch216_239.snn	79.6%	57.1%	85.7%
Neu5Ac	V340	Versuch320_321.snn	72.9%	71.4%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

Hindsgaul-Test Kombinationen

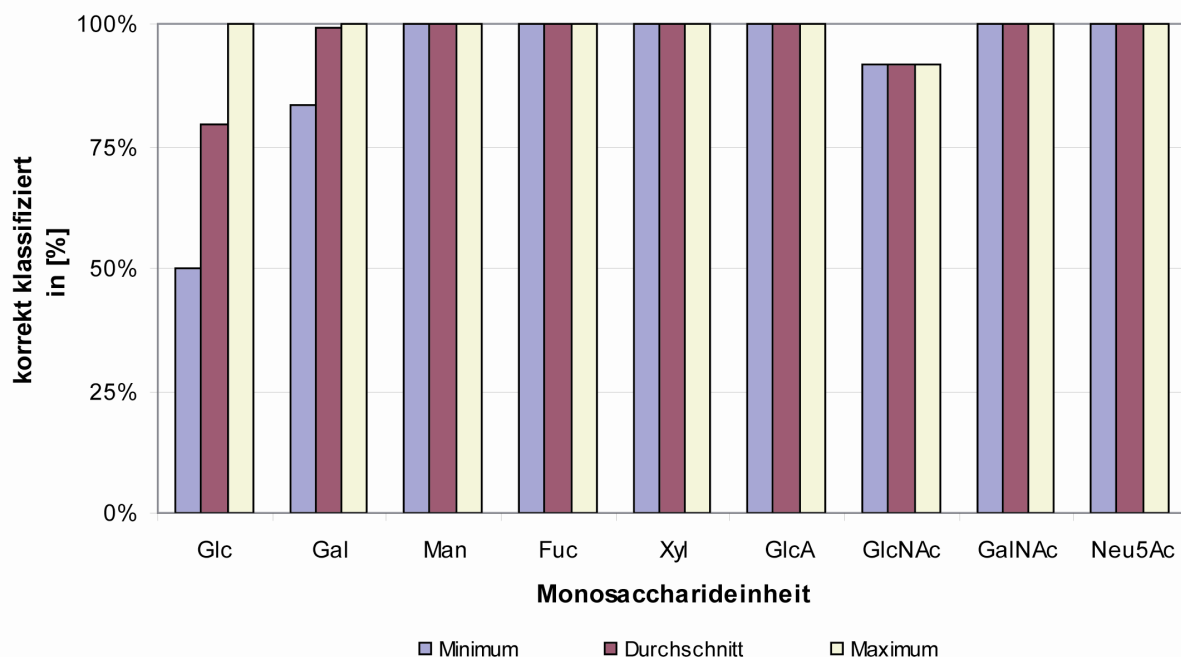


Abbildung 101. Hindsgaul-Test (comb)

Die Resultate des Kombinationstests sehen sehr gut aus. In den Werten wurden für jedes Netzwerk die Erkennung der antrainierten Monosaccharid-Einheiten und die Erkennung der *wrong* Gruppen kombiniert. Auch hier ist die Performance der Glucose-Netzwerke am tiefsten. Wiederum zeigt sich die noch mangelnde Stabilität der Methode gegenüber störenden Einflüssen (beispielsweise durch zusätzliche Peaks). Der direkte Vergleich zwischen Online-Test und Kombinationstest zeigt, dass die durchschnittliche Erkennung der gleichen Datensätze ohne die störenden Einflüsse deutlich höher ist.

Tabelle 89. Zusammenfassung Hindsgaul-Test (comb)

	Versuch	Netzwerk	korrekt klassifiziert in [%]		
			<i>Average</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
Glc	V293	Versuch280_281.snn	79.6%	50.0%	100.0%
Gal	V267	Versuch252_254.snn	99.2%	83.3%	100.0%
Man	V317	Versuch306_307.snn	100.0%	100.0%	100.0%
Fuc	V240	Versuch217_226.snn	100.0%	100.0%	100.0%
Xyl	V305	Versuch294_295.snn	100.0%	100.0%	100.0%
GlcA	V335	Versuch318_319.snn	100.0%	100.0%	100.0%
GlcNAc	V278	Versuch262_263.snn	91.7%	91.7%	91.7%

7. Resultate und Diskussion

GalNAc	V255	Versuch216_239.snn	100.0%	100.0%	100.0%
Neu5Ac	V341	Versuch320_321.snn	100.0%	100.0%	100.0%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

7.4.5 Stenutz-Ttest

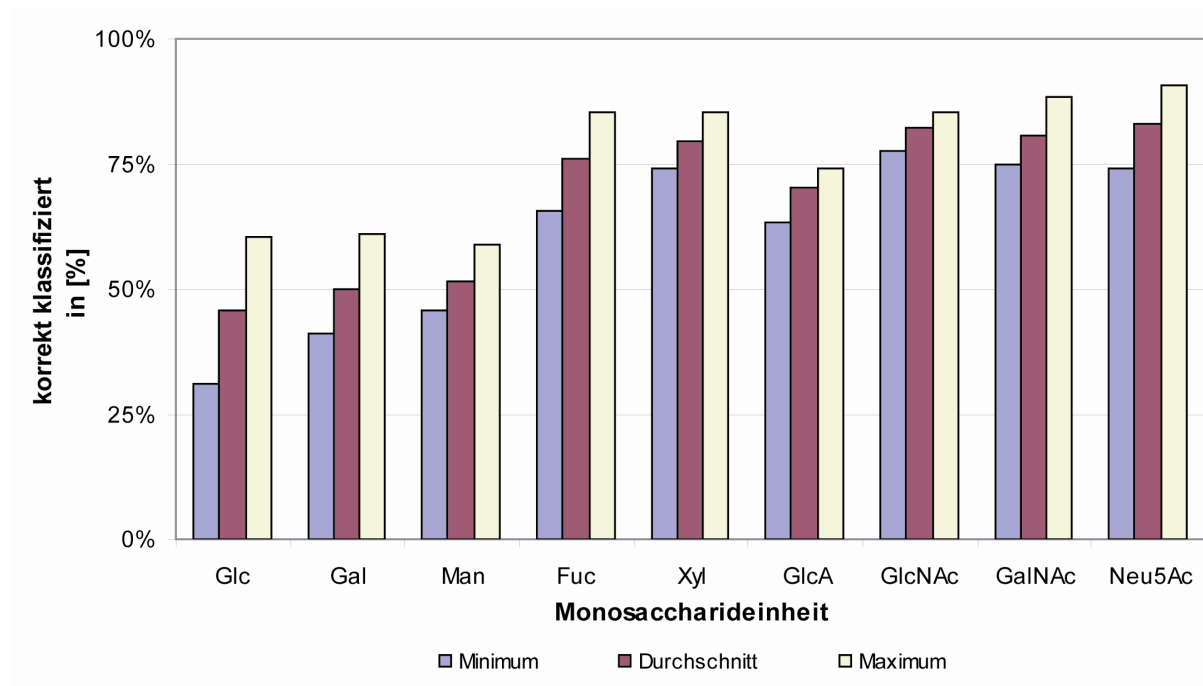


Abbildung 102. Stenutztest (online)

Die Stenutz-Datenreihe besteht aus 129 Datensätzen von ungeschützten, kleineren Oligosacchariden. Als korrekt wurde gewertet, wenn ein Ausgabeneuron einer der gesuchten Monosaccharid-Gruppen aktiviert war. Die Erkennung von *wrong* wurde wiederum in die Berechnung von Durchschnitt, Minimum und Maximum mit einbezogen.

Tabelle 90. Zusammenfassung Stenutz-Test (online)

	Netzwerk	korrekt klassifiziert in [%]		
		Average	Min	Max
Glc	Versuch280_281.snn	45.9%	31.0%	60.5%
Gal	Versuch252_254.snn	50.2%	41.1%	61.2%
Man	Versuch306_307.snn	51.5%	45.7%	58.9%
Fuc	Versuch217_226.snn	76.1%	65.9%	85.3%
Xyl	Versuch294_295.snn	79.7%	74.4%	85.3%

7. Resultate und Diskussion

GlcA	Versuch318_319.snn	70.4%	63.6%	74.4%
GlcNAc	Versuch262_263.snn	82.2%	77.5%	85.3%
GalNAc	Versuch216_239.snn	80.7%	75.2%	88.4%
Neu5Ac	Versuch320_321.snn	82.9%	74.4%	90.7%

Average: Mittelwert; Min: Minimum; Max: Maximum

7.4.6 Instituts-Test

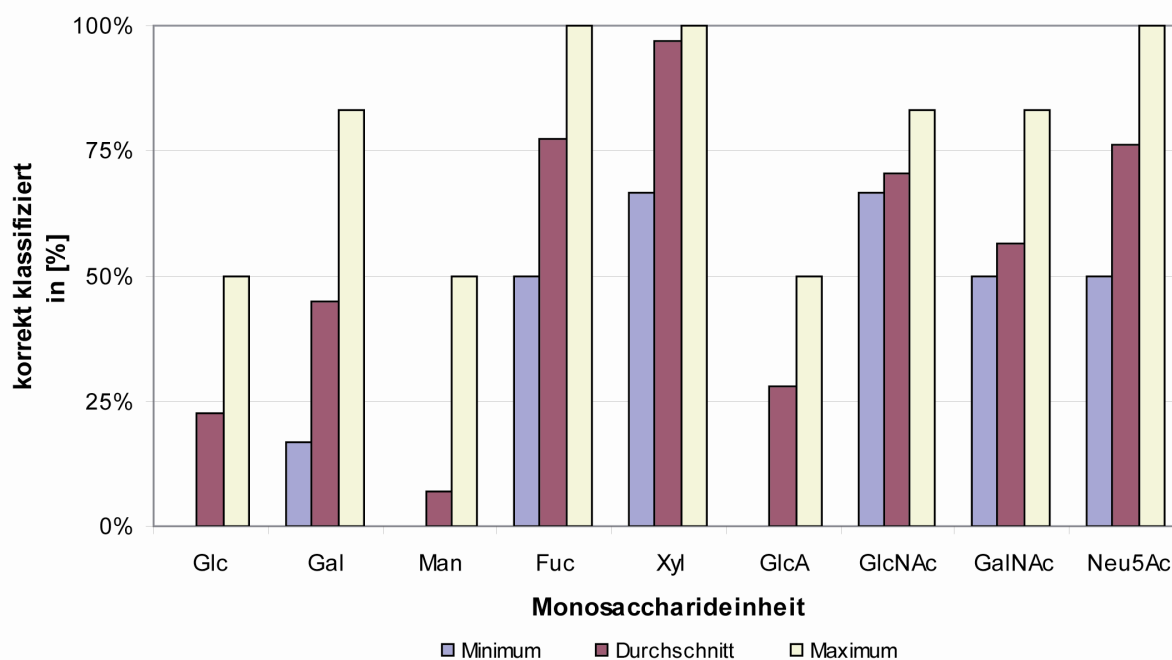


Abbildung 103. Instituts-Test (online)

Die sechs getesteten Oligosaccharide werden von allen Netzwerken nur schlecht klassifiziert. Substanzen 1 und 2, die als ungeschützte Oligosaccharide den antrainierten Monosaccharid-Einheiten sehr ähnlich sein sollten, werden genauso wenig erkannt, wie die per-acetylierten oder mit Schutzgruppen versehenen Verbindungen 3–6. Die Prozentzahlen kommen einzig und allein durch die Aktivierungen von *wrong* zu Stande. Daneben produzierten die Netzwerke viele falsch positive Ausgaben. Dass die Verbindungen 3–6 nicht oder nur sehr schlecht erkannt werden würden, war zu erwarten. Die chemischen Verschiebungen dieser Verbindungen werden durch die Acetylreste oder die Schutzgruppen sehr stark beeinflusst, so dass eine falsche Zuordnung zu erwarten ist. Dass jedoch auch die Verbindungen 1 und 2 nicht korrekt zugeordnet werden können, zeigt wiederum die mangelnde Robustheit der Methode gegenüber experimentellen Werten. Um die Generalisierungsfähigkeit erhöhen zu können, müssten die Netzwerke des Monosaccharid-Ansatzes noch weiter optimiert werden.

Tabelle 91. Zusammenfassung Instituts-Test (online)

	Netzwerk	korrekt klassifiziert in [%]		
		<i>Average</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
Glc	Versuch280_281.snn	22.5%	0.0%	50.0%
Gal	Versuch252_254.snn	44.7%	16.7%	83.3%
Man	Versuch306_307.snn	7.1%	0.0%	50.0%
Fuc	Versuch217_226.snn	77.5%	50%	100.0%
Xyl	Versuch294_295.snn	97.1%	66.7%	100.0%
GlcA	Versuch318_319.snn	27.9%	0.0%	50.0%
GlcNAc	Versuch262_263.snn	70.4%	66.7%	83.3%
GalNAc	Versuch216_239.snn	56.3%	50.0%	83.3%
Neu5Ac	Versuch320_321.snn	76.3%	50.0%	100.0%

Average: Mittelwert; *Min*: Minimum; *Max*: Maximum

7.5 Disaccharid-Ansatz

7.5.1 Auswertung der trainierten Netzwerke

Insgesamt wurden in zwei verschiedenen Versuchen (V220, V225) 20 verschiedene Netzwerke trainiert. In „Versuch 220“ wurden in einem grossen Bereich Netzwerke mit ein bis zwei versteckten Schichten verschiedener Grössen (50–300 Neuronen) getestet. Selektiert wurden in diesem Versuch durch den *Intelligent Problem Solver* allerdings nur sehr grosse Netzwerke mit 300 Neuronen in den versteckten Schichten. Drei dieser Netzwerke (v220_1, v220_2, v220_4) wurden wegen ihrer schlechten Performance (Test < 0.5) verworfen. In Versuch 225 wurde versucht, das Problem auch mit kleineren Netzwerken mit 70–90 Neuronen in nur einer versteckten Schicht zu lösen. Auch in diesem Versuch wurden Netzwerke mit sehr guter Performance gefunden. In Abbildung 104 ist die durchschnittliche Performance der trainierten Netzwerke aus den Versuchen 220 und 225 dargestellt:

7. Resultate und Diskussion

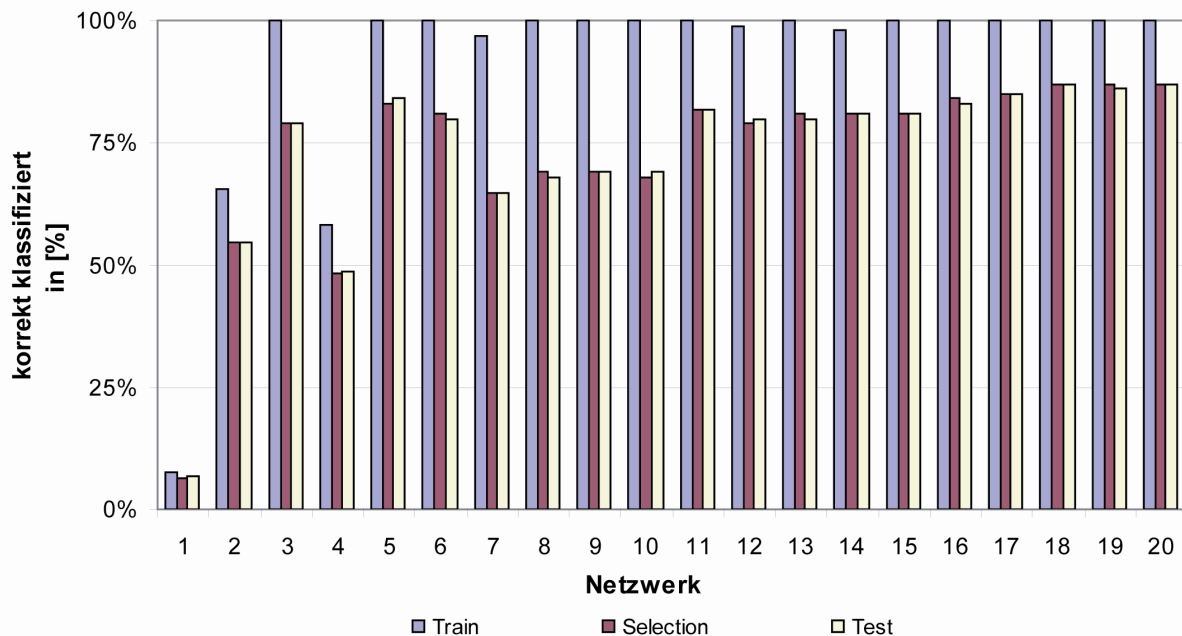


Abbildung 104. Netzwerkperformance Disaccharid-Ansatz

Die für Abbildung 104 verwendeten Werte sind in Tabelle 92 zu finden:

Tabelle 92. Wertetabelle Performance Disaccharid-Ansatz

No.	Netzwerk	Training	Selection	Test
1	V220_1	7.3%	6.3%	6.6%
2	V220_2	65.4%	54.5%	54.4%
3	V220_3	100%	79.0%	79.0%
4	V220_4	58.2%	48.0%	48.4%
5	V220_5	100.0%	83.0%	84.0%
6	V220_6	100.0%	81.0%	80.0%
7	V220_7	97.0%	65.0%	65.0%
8	V220_8	100.0%	69.0%	68.0%
9	V220_9	100.0%	69.0%	69.0%
10	V220_10	100.0%	68.0%	69.0%
11	V225_1	100.0%	82.0%	82.0%
12	V225_2	99.0%	79.0%	80.0%
13	V225_3	100.0%	81.0%	80.0%
14	V225_4	98.0%	81.0%	81.0%
15	V225_5	100.0%	81.0%	81.0%

7. Resultate und Diskussion

No.	Netzwerk	Training	Selection	Test
16	V225_6	100.0%	84.0%	83.0%
17	V225_7	100.0%	85.0%	85.0%
18	V225_8	100.0%	87.0%	87.0%
19	V225_9	100.0%	87.0%	86.0%
20	V225_10	100.0%	87.0%	87.0%

Während die Performance für das Trainingsdatensatz noch bei allen Netzwerken bei fast 100% liegt, zeigen sich vor allem bei den grossen Netzwerken (Versuch 220) Probleme bei der korrekten Klassifizierung der beiden weiteren *subsets* (*selection* und *test*). Die durchschnittliche Performance der kleineren Netzwerke aus Versuch 225, mit 70–90 Neuronen in der versteckten Schicht, liegt deutlich höher (S: 83.4%, T: 83.2%), als die der grösseren Netzwerke aus Versuch 220, mit 50–300 Neuronen in den versteckten Schichten (S: 73.4%, T: 73.4%).

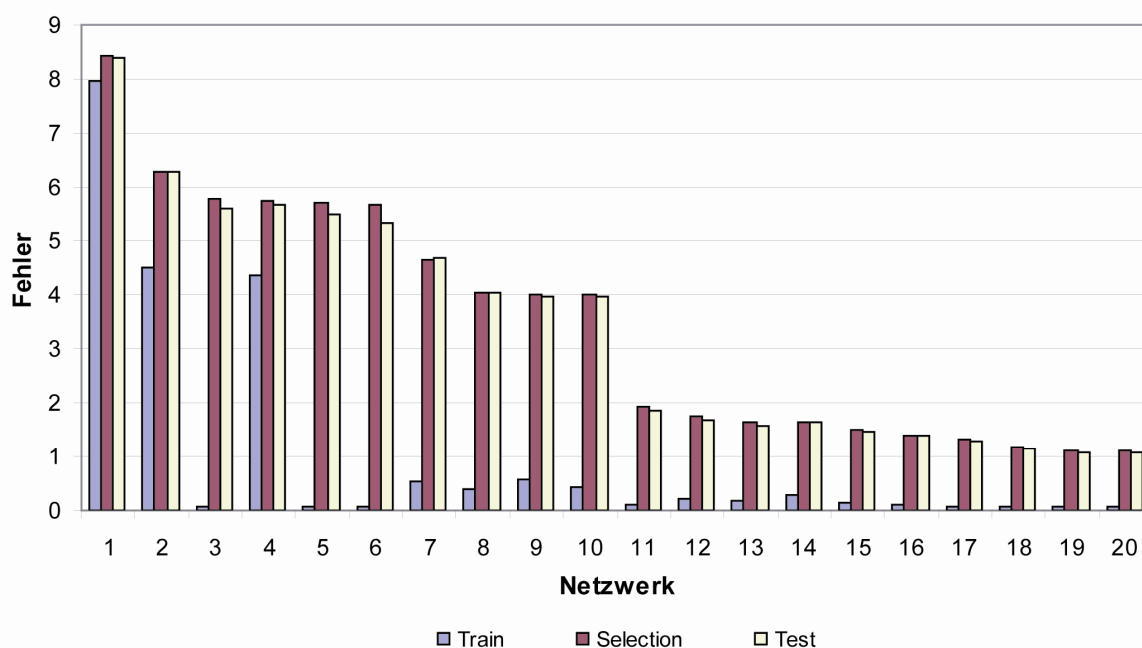


Abbildung 105. Netzwerkfehler Disaccharid-Ansatz

In Abbildung 105 sind die mittleren Fehler der einzelnen *subsets* jedes Netzwerkes gegeneinander aufgetragen. Hier zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen den grossen Netzwerken aus Versuch 220 und den eher kleineren Netzwerken aus Versuch 225. Das gestellte Problem lässt sich offenbar sehr gut auch mit kleineren Netzwerken lösen. Auch wenn die Netzwerke aus Versuch 220 deutlich mehr Probleme mit der korrekten Erkennung der präsentierten Datensätze hatten, wurden alle 17 Netzwerke für die weiterführenden Tests verwendet. Die für Abbildung 105 verwendeten Werte sind in Tabelle 93 zu finden:

Tabelle 93. Wertetabelle Netzwerkfehler Disaccharid-Ansatz

	Training	Selection	Test
V220_1	0.07	0.06	0.07
V220_2	0.65	0.54	0.54
V220_3	1	0.79	0.79
V220_4	0.58	0.48	0.48
V220_5	0.06	5.72	5.5
V220_6	0.06	5.68	5.33
V220_7	0.53	4.66	4.68
V220_8	0.38	4.05	4.05
V220_9	0.57	4.01	3.96
V220_10	0.44	4.01	3.98
V225_1	0.09	1.94	1.86
V225_2	0.23	1.75	1.68
V225_3	0.17	1.66	1.57
V225_4	0.28	1.64	1.66
V225_5	0.14	1.49	1.47
V225_6	0.11	1.38	1.39
V225_7	0.06	1.31	1.3
V225_8	0.08	1.18	1.13
V225_9	0.07	1.11	1.08
V225_10	0.07	1.09	1.08

Eine detaillierte Auswertung aller Netzwerke des Disaccharid-Ansatzes ist im Anhang zu finden (Kapitel 12.11).

7.5.2 Resultate Disaccharid-Test

Getestet wurden 260 Datensätze in Disaccharidgruppen eingeteilter Literaturdatensätze aus der NMR-Datenbank (NMR.fp5).

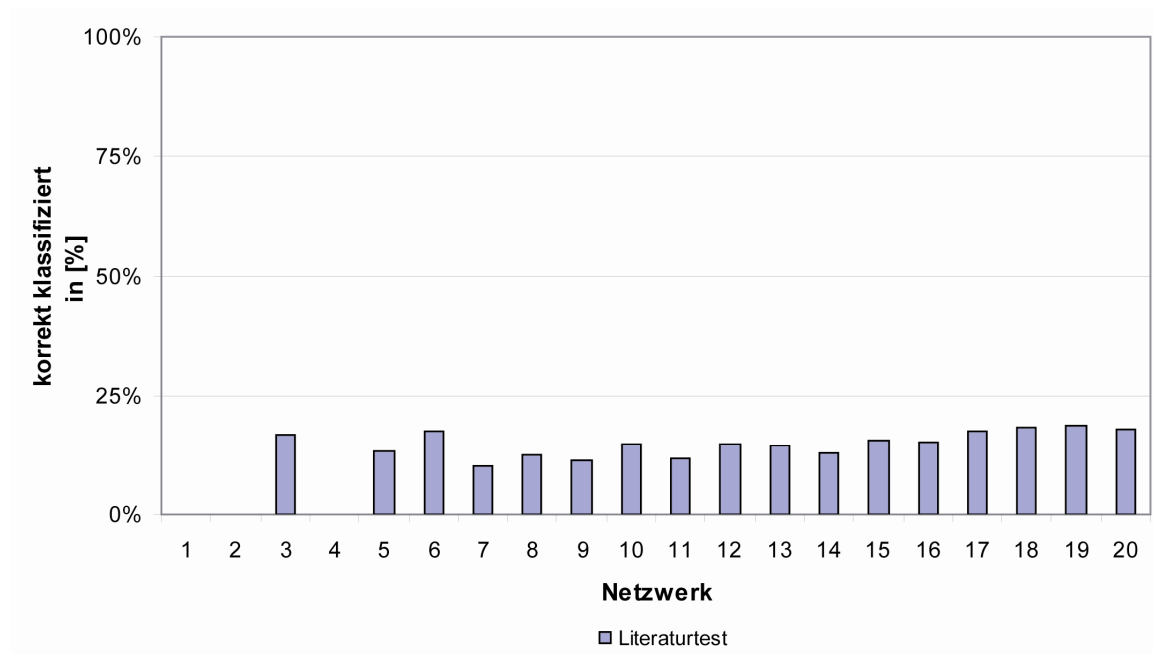


Abbildung 106. Literatur-Test Disaccharid-Ansatz

Trotz der guten Resultate des Trainings wurden die Literaturdatensätze nur ungenügend erkannt (10-18.9%). Zwischen den Netzwerken aus Versuch 220 und Versuch 225 zeigt sich erstaunlicherweise kein deutlicher Unterschied. Dieser Ansatz wurde schliesslich wegen der ungenügenden Resultate verworfen.

Tabelle 94. Zusammenfassung Literatur-Test Disaccharid-Ansatz

Netzwerk	korrekt klassifiziert		Netzwerk	korrekt klassifiziert	
	<i>absolut</i>	<i>relativ</i>		<i>absolut</i>	<i>relativ</i>
v220_1			v225_1	30	11.5%
v220_2			v225_2	38	14.6%
v220_3	44	16.9%	v225_3	37	14.2%
v220_4			v225_4	33	12.8%
v220_5	34	13.1%	v225_5	40	15.4%
v220_6	46	17.7%	v225_6	39	15.0%
v220_7	26	10.0%	v225_7	46	17.7%
v220_8	32	12.3%	v225_8	48	18.5%

7. Resultate und Diskussion

v220_9	29	11.2%
v220_10	38	14.6%

v225_9	49	18.9%
v225_10	47	18.1%
Durchschnitt	38.6	14.8%
Minimum	26	10%
Maximum	49	18.9%

8 Schlussfolgerungen und Ausblick

Substitutionsanalyse

Mit der Substitutionsanalyse konnte für die drei untersuchten Monosaccharid-Einheiten Glucose, Galactose und Mannose gezeigt werden, dass sich die chemischen Verschiebungen signifikant voneinander unterscheiden. Eine Diskriminierung ist sowohl zwischen α - und β -Konfiguration des anomeren C-Atoms, zwischen den einzelnen Substitutionsmustern, als auch zwischen den einzelnen Monosaccharid-Einheiten möglich. Die Resultate der Substitutionsanalyse weisen darauf hin, dass ein inkrementeller Ansatz möglich sein sollte.

Selbst-organisierende Netzwerke

In den Versuchen mit selbst-organisierenden Karten konnte die gewählte Gruppeneinteilung verifiziert werden. Ausserdem konnte mit den Versuchen gezeigt werden, dass die für die Aufteilung in die 98 Monosaccharid-Gruppen notwendige Information, trotz der sehr starken Komprimierung der Daten, bei der Umwandlung der Peaklisten in ein Patternfile durch den ANN PFG nicht verloren geht.

Nachbargruppen-Ansatz

Die nach dem Nachbargruppen-Ansatz trainierten Netzwerke konnten die ihnen präsentierten 812 Monosaccharide aus Literaturdatensätzen nur ungenügend erkennen. Dies trifft sowohl für die Netzwerke mit *mono-out* Ausgabe mit maximal 7.5%, wie auch für die Netzwerke mit *poly-out* Ausgabe mit maximal 6.8% korrekten Ausgaben zu. Ein Einfluss der Grösse der Variation (*shift* 0.1–0.5 ppm), der für das Training verwendeten Datensätze auf die Fähigkeit zur Voraussage unbekannter Datensätze konnte weder für *mono-out* noch für *poly-out* gezeigt werden. Die Grösse der verwendeten Schicht hatte ebenfalls keinen signifikanten Einfluss auf die Generalisierungsfähigkeit der Netzwerke. Angesichts dieser Resultate, scheint sich der Nachbargruppen-Ansatz für die Strukturaufklärung ungeschützter Oligosaccharide nicht zu eignen und wurde daher nicht mehr weiter verfolgt.

Monosaccharid-Ansatz

Für alle Monosaccharid-Einheiten konnten Netzwerke mit sehr guter Performance trainiert werden. Die Klassifizierung der antrainierten Mittelwerte funktioniert sehr gut (99.2–100%). Mit Ausnahme von *N*-Acetyl Galactosamin (nur 38/41) erkennen alle Netzwerke die ihnen präsentierten Mittelwerte zu 100%. Die Mittelwerte der antrainierten *wrong* Zucker werden ebenfalls sehr gut klassifiziert. Auch hier liegt die durchschnittliche Erkennung nahe an 100 % (99.4–100%). Die hervorragenden Resultate dieser Versuche sind dadurch zu erklären, dass die Mittelwerte immer schon im Trainingsdatensatz als erste Modifikation des MG enthalten sind. Diese Versuche stellen also eher als eine zusätzliche Validierung der Trainingsresultate dar.

Die trainierten Netzwerke des Monosaccharid-Ansatzes haben deutlich mehr Mühe, die aus der Datenbank exportierten Literaturdatensätze korrekt zu klassifizieren (46.9–95.5%). Vor allem die Netzwerke der Monosaccharid-Einheiten mit vielen antrainierten Gruppen, wie zum Beispiel Glucose, Galactose, Mannose oder Xylose, haben erhebliche Probleme die präsentierten Zucker noch korrekt zu klassifizieren (46.9–79.1%). Die unbefriedigenden Ergebnisse der Literatur-Tests weisen auf eine zu geringe Generalisierungsfähigkeit der trainierten Netzwerke hin. Der Grund dafür könnte in einem zu kleinen und deshalb nicht repräsentativen Trainingsdatensatz oder in einer falsch gewählten Netzwerkarchitektur mit zu vielen Neuronen in den versteckten Schichten haben. Beide möglichen Ursachen können zu einem *overfitting* des Netzwerkes, das heisst zu einem zu genauen Antrainieren der Datensätze und einer damit erniedrigten Generalisierungsfähigkeit führen. Der Datensatz wurde mit 150 Modifikationen, die für jede Gruppe antrainiert wurden, künstlich so stark vergrössert, dass diese Ursache ausgeschlossen ausgeschlossen werden kann. Durch den während der Trainings durchgeführten automatisierten Scan mit Hilfe von *Statistica's Intelligent Problem Solvers* in einem grossen Bereich möglicher Netzwerkarchitekturen, kann die zweite Ursache ebenfalls ausgeschlossen werden können.

Eine weitere Ursache für die geringe Generalisierungsfähigkeit könnte darin liegen, dass die durch die künstliche Vergrösserung die mit Hilfe des *Modification Generators* (MG) entstehenden Datenpunkte zu wenig gleichmässig gestreut sind, so dass gewisse Bereiche nie durch einen Datenpunkt repräsentiert werden. Dagegen spricht, dass die Zwischenräume zwischen zwei Datenpunkten bei 150 Modifikationen im Trainingsdatensatz und Standardabweichungen von 0.5–2.68 ppm durchschnittlich 0.0067–0.036 ppm betragen. In Hinsicht auf die ohnehin bestehende natürliche Variation der chemischen Verschiebung im ^{13}C -NMR Spektrum, dürfte dies eine hinreichend gute Repräsentation der Bereiche sein.

Eine letzte Möglichkeit für die geringe Generalisierungsfähigkeit könnte sein, dass die Netzwerke sich die präsentierten Datensätze gerade durch die künstliche Erweiterung der Datensätze mittels MG und die dadurch sehr feine Repräsentation zu genau antrainieren und deshalb die zum Teil leicht verschobenen Eingabemuster der Literatur-Tests nicht mehr korrekt klassifizieren können. Ohne die künstliche Erweiterung würde das Trainingsdatensatz bei der Verwendung von Mittelwerten nur aus wenigen Werten bestehen. Werden anstelle von Mittelwerten Literaturdatensätze für das Training verwendet, so sind einzelne Gruppen, wegen der sehr unterschiedlichen Häufigkeit in der Datenbank besser vertreten (wie z.B. α -D-Glcp-1R oder β -D-Glcp-1R) als andere, von denen nur einige wenige zu finden waren. Das vermehrte Vorkommen führt dazu, dass durch die häufigere Präsentation gewisser Eingabemuster einer Gruppe nicht alle Gruppen gleich gut antrainiert werden können. Sobald durch EuroCarbDB genügend Daten aller zu trainierenden Gruppen zugänglich sind, sollte unbedingt der Versuch unternommen werden, die Netzwerke anstatt wie bisher mit Mittelwerten auf der Basis von standardisierten Literaturdaten zu trainieren.

Die getesteten *wrong* Datensätze können durch die Netzwerke nur unzureichend klassifiziert werden, als die entsprechenden Mittelwerte (76.7–99.8%). Die Erkennung ist aber dennoch signifikant besser als die des Positiv-Literatur-Tests. In der *wrong* Gruppe sind alle Mittelwerte der Monosaccharid-Einheiten vertreten, die im Moment nicht antrainiert werden. Dass diese heterogene Gruppe dadurch sehr gut erkannt wird, erstaunt deshalb nicht.

Werden den Netzwerken Disaccharide mit mehr chemischen Verschiebungen präsentiert, als die antrainierten Monosaccharid-Einheiten enthalten, sinkt der Durchschnitt der korrekt klassifizierten Datensätze je nach Netzwerk auf 0–77.8%. Werden die Disaccharide als Kombinationen ihrer chemischen Verschiebungen präsentiert, ist die Erkennung etwas besser (28.6–100%). So lange nicht bekannt ist, welche chemischen Verschiebungen zu welcher Monosaccharid-Einheit des Oligosaccharides gehören, lässt sich dieses Problem im Moment nicht lösen.

Der Monosaccharid-Ansatz funktioniert nur so lange, als die Daten keine zu grosse Variation aufweisen und als Gruppen in der Grösse der antrainierten Monosaccharid-Einheiten präsentiert werden. Im direkten Vergleich zwischen Online-Test und Kombinations-Test treten in den Disaccharid-Tests immer wieder der störende Einfluss zusätzlicher Peaks und die mangelnde Stabilität der Netzwerke des Monosaccharid-Ansatzes gegenüber diesen Einflüssen auf.

Das grösste Problem des Monosaccharid-Ansatzes liegt aber darin, dass die Sequenz der identifizierten Monosaccharid-Einheiten bei grösseren Oligosacchariden mit mehr als drei Monosaccharid-Einheiten nicht mehr eindeutig bestimmt werden kann. Bei diesen Oligosacchariden kann die genaue Position der mittleren Monosaccharid-Einheiten nicht mehr eindeutig zugeordnet werden, da es zwei oder mehr Monosaccharid-Einheiten mit zwei Verknüpfungspunkten gibt, aber keine Information darüber, welches die benachbarten Monosaccharid-Einheiten sind. Da die für das Training verwendeten Datensätze ausschliesslich aus Literaturdaten stammen, gibt es keine Möglichkeit diese Information aus weiterführenden NMR-Experimenten, wie zum Beispiel einem 2D-Experiment zur Bestimmung der ^{13}C , ^{13}C -Kopplungen^[38], zu erhalten.

Die mit dem Monosaccharid-Ansatz identifizierten Monosaccharid-Einheiten könnten eventuell eindeutig einer Struktur zugeordnet werden, wenn aus der Gesamtheit der Strukturvorschläge, mit einem regel-basierten Expertensystem die in der Natur nicht vorkommenden Strukturen ausgeschlossen würden. Glücklicherweise gibt es nur eine endliche Zahl in der Natur vorkommender Verknüpfungsmuster und dadurch nur eine begrenzte Anzahl möglicher Oligosaccharidstrukturen. Je nach den verwendeten biologischen Expressionssystemen unterscheiden sich die produzierten Oligosaccharide in ihrer Struktur und Zusammensetzung. Im Weiteren unterscheiden sich *N*-Glykane und *O*-Glykane aufgrund ihrer Zusammensetzung. So können in gereiften *N*-Glykanen alle in Säugetieren vorkommenden Zucker ausser Glucose vorkommen, während bei gereiften *O*-Glykanen statt Glucose die Monosaccharid-Einheit Mannose fehlt. Dadurch kann bei einem Fehlen einer dieser beiden

Monosaccharid-Einheiten die Anzahl der möglichen Strukturen weiter eingeschränkt werden.

Disaccharid-Ansatz

Beim Erstellen und Trainieren der Netzwerke des Disaccharid-Ansatzes stiessen wir an die Grenzen der zur Verfügung stehenden Hardware. Aus den 265 Gruppen resultierten durch die künstliche Vergrösserung der Datenreihe mit Hilfe des MG (Kapitel 5.7.2.1) sehr grosse Pattern. Dafür wurden durch Statistica^[104] nur relativ grosse Netzwerke mit vielen Neuronen in den versteckten Schichten (50–300) und dementsprechend vielen Verknüpfungen und Gewichten gefunden. Nach langen Trainingszeiten von bis zu 98 Stunden (*Dell Precision Workstation, Dual Intel Xeon 3.4 GHz*) konnten dennoch Netzwerke mit akzeptabler Performance gefunden werden. Diese Netzwerke schnitten im Disaccharid-Literaturtest aber nur ungenügend ab (10–18.9%). Der Disaccharid-Ansatz wurde auf Grund der unzureichenden Resultate nicht mehr weiter entwickelt.

Schlussfolgerung

In der vorliegenden Arbeit wurde gezeigt, dass sowohl mit Kohonen-Netzwerken als auch mit Netzwerken, die mit dem Backpropagation Algorithmus trainiert wurden, 98 verschiedene mono- und disubstituierte Monosaccharid-Gruppen anhand ihrer chemischen Verschiebungen korrekt klassifiziert werden können. Im Hinblick auf eine spätere Anwendung als In-Prozess Kontrolle in der pharmazeutischen Produktion von rekombinanten Glykoproteinen wurde die Methode auf alle in Säugetieren vorkommenden Monosaccharid-Einheiten ausgebaut. Mit **NeuroCarb** steht damit erstmals eine einfache und schnelle Methode zur Aufklärung von ¹³C-NMR-Spektren ungeschützter Oligosaccharide zur Verfügung.

Ausblick

Weiterführende Arbeiten im Projekt sollten sich vor allem auf folgende Punkte konzentrieren:

- **Ausbau der Literaturdatenbank:** Die Literaturdatenbank sollte erweitert werden, so dass nur noch Literaturdaten mit überprüften standardisierten Literaturdatensätzen von guter Qualität gearbeitet werden kann.
- **Bessere Erkennung der Literaturdaten:** Die Robustheit des Monosaccharid-Ansatzes gegenüber störenden Einflüssen muss erhöht werden. Derzeit ist die Methode noch zu anfällig auf Störungen jeglicher Art.
- **Zuordnungsproblem:** In den zur Verfügung stehenden Peaklisten der Literaturdatensätze ist keine Information darüber enthalten, zu welchem Spinsystem (d.h. zu welcher Monosaccharid-Einheit) die einzelnen chemischen Verschiebungen gehört. Die für die Zuordnung notwendigen Daten aus homonuklearen ¹³C, ¹³C-Korrelations-Spektren (2D-TOCSY) fehlen aber

weitestgehend in der Literatur. Dies könnte sich aber eventuell durch den Aufbau der Datenbank EuroCarbDB (Kapitel 4.4) bereits in naher Zukunft ändern.

- **Sequenzproblem:** Für grössere Oligosaccharide mit mehr als drei Monosaccharid-Einheiten, kann die Sequenz des Oligosaccharids mit dem Monosaccharid-Ansatz nicht mehr eindeutig bestimmt werden. Der aus diesem Grund entwickelte Disaccharid-Ansatz konnte leider während dieser Arbeit nicht genügend weit entwickelt werden. Hier besteht aber noch Entwicklungspotenzial. Eine weitere Möglichkeit bietet wie bereits erwähnt, der Versuch ein regel-basiertes Expertensystem mit in die Analyse einzubeziehen.
- **Erkennung von Oligosaccharid-Gemischen:** Durch weitere Trainings sollte die Erkennung von Oligosaccharid-Gemischen ermöglicht werden. Dafür müssten jedoch alle Netzwerke neu trainiert werden. Dass dies möglich ist, wurde bereits früher gezeigt^[84].
- **Automatisierung der gesamten Analyse:** Bis heute müssen die Testdatensätze für jeden Test jeweils als Csv-File gespeichert und mit dem ANN PFG manuell in ein Pattern umgewandelt werden. Die trainierten Netzwerke müssen danach einzeln mit dem Patternfile getestet und manuell ausgewertet werden. Sobald einer der Ansätze so weit weiterentwickelt worden ist, dass die Struktur von Oligosacchariden auch aus Literaturdatensätzen zuverlässig aufgeklärt werden kann, sollte dieser ganze Ablauf automatisiert werden.

Im Weiteren könnten neben der ^{13}C -NMR-Spektrometrie auch noch andere Analysenmethoden Verwendung finden. Eine Möglichkeit bietet die Kombination mit Massenspektrometrie. Das grösste Problem wird aber auch hier wieder die Verfügbarkeit und die Qualität der Daten sein. Die Verfügbarkeit von überprüften und standardisierten MS-Spektren könnte sich in den nächsten Jahren durch den Aufbau einer zentralen Datenbank im Rahmen des Projektes EuroCarbDB (Kapitel 4.4) verbessern. Es ist zu hoffen, dass mit EuroCarbDB in naher Zukunft eine verbesserte Datenlage zur Verfügung stehen wird und es dadurch eventuell möglich wird, die präsentierten Lösungsansätze zu verfeinern, zu erweitern oder mit anderen Analysetechniken zu kombinieren

9 Referenzen

- [1] A. Zell, G. Mamier, M. Vogt, N. Mache, T. Sommer, R. Hübner, M. Schmalzl, T. Soyez, S. Döring, D. Posselt, K.-U. Herrmann, A. Hatzigeorgiou, Java Neural Network Simulator (JavaNNS), Version 1.1 ed., University of Tübingen, Tübingen, **2002**.
- [2] A. Zell, G. Mamier, M. Vogt, N. Mache, R. Hübner, S. Döring, K.-U. Herrmann, T. Soyez, M. Schmalzl, T. Sommer, A. Hatzigeorgiou, D. Posselt, T. Schreiner, B. Kett, G. Clemente, J. Wieland, J. Gatter, Stuttgart Neural Network Simulator (SNNS), University of Stuttgart and University of Tübingen, **2002**.
- [3] Wikipedia, Traveling Salesman Problem, <http://de.wikipedia.org/wiki/Traveling-Salesman-Problem>, **2006**.
- [4] Wikipedia, XOR-Problem, <http://de.wikipedia.org/wiki/XOR>, **2006**.
- [5] H. Schachter, *Front Mol Biol* **2000**, 30, 133.
- [6] S. Sell, *Hum Pathol* **1990**, 21, 1003.
- [7] K.J. Yarema, C.R. Bertozzi, *Genome Biol* **2001**, 2, REVIEWS0004.
- [8] V. Gomord, P. Chamberlain, R. Jefferis, L. Faye, *Trends Biotechnol* **2005**, 23, 559.
- [9] PhRMA, *Pharmaceutical Research and Manufacturers of America (PhRMA)* **2004**.
- [10] M.H. Goldman, D.C. James, M. Rendall, A.P. Ison, M. Hoare, A.T. Bull, *Biotechnol Bioeng* **1998**, 60, 596.
- [11] H. Meijer, H. Al Ulama, in Production of recombinant erythropoietin in animal cell culture, (Dubai Genetics Fz-Llc, United Arab Emirates). Application: EP, **2005**, p. 18 pp.
- [12] T.G. Warner, *Glycobiology* **1999**, 9, 841.
- [13] V. Gomord, C. Sourrouille, A.-C. Fichette, M. Bardor, S. Pagny, P. Lerouge, L. Faye, *Plant Biotechnology J* **2004**, 2, 83.
- [14] J.W. Dennis, M. Granovsky, C.E. Warren, *BioEssays* **1999**, 21, 412.
- [15] G. Durand, N. Seta, *Clin Chem* **2000**, 46, 795.
- [16] H. Chen, Z. Wang, Z. Sun, E.J. Kim, K.J. Yarema, *Mammalian Glycosylation: An Overview of Carbohydrate Biosynthesis*, CRC, **2005**.
- [17] C.M. Szymanski, R. Yao, C.P. Ewing, T.J. Trust, P. Guerry, *Mol Microbiol* **1999**, 32, 1022.
- [18] N.M. Young, J.-R. Brisson, J. Kelly, C. Watson David, L. Tessier, H. Lanthier Patricia, C. Jarrell Harold, N. Cadotte, F. St Michael, E. Aberg, M. Szymanski Christine, *J Biol Chem* **2002**, 277, 42530.
- [19] D. Linton, N. Dorrell, P.G. Hitchen, S. Amber, A.V. Karlyshev, H.R. Morris, A. Dell, M.A. Valvano, M. Aebi, B.W. Wren, *Mol Microbiol* **2005**, 55, 1695.
- [20] M. Wacker, D. Linton, G. Hitchen Paul, M. Nita-Lazar, M. Haslam Stuart, J. North Simon, M. Panico, R. Morris Howard, A. Dell, W. Wren Brendan, M. Aebi, *Science* **2002**, 298, 1790.
- [21] S. Wildt, U. Gerngross Tillman, *Nat Rev Microbiol* **2005**, 3, 119.
- [22] P. Bobrowicz, R.C. Davidson, H. Li, T.I. Potgieter, J.H. Nett, S.R. Hamilton, T.A. Stadheim, R.G. Miele, B. Bobrowicz, T. Mitchell, S. Rausch, E. Renfer, S. Wildt, *Glycobiology* **2004**, 14, 757.

9. Referenzen

- [23] S.R. Hamilton, P. Bobrowicz, B. Bobrowicz, R.C. Davidson, H. Li, T. Mitchell, J.H. Nett, S. Rausch, T.A. Stadheim, H. Wischniewski, S. Wildt, T.U. Gerngross, *Science (Washington, DC, U S)* **2003**, *301*, 1244.
- [24] J.F.G. Vliegthart, L. Dorland, H. Van Halbeek, *Adv Carbohydr Chem Biochem* **1983**, *41*, 209.
- [25] S. Doubet, P. Albersheim, *Glycobiology* **1992**, *2*, 505.
- [26] S. Doubet, K. Bock, D. Smith, A. Darvill, P. Albersheim, *Trends Biochem Sci* **1989**, *14*, 475.
- [27] J.A. Van Kuik, K. Hard, J.F.G. Vliegthart, *Carbohydr Res* **1992**, *235*, 53.
- [28] J.A. Van Kuik, J.F.G. Vliegthart, *Trends Glycosci Glyc* **1991**, *3*, 229.
- [29] G.M. Lipkind, A.S. Shashkov, N.E. Nifant'ev, N.K. Kochetkov, *Carbohydr Res* **1992**, *237*, 11.
- [30] G.M. Lipkind, A.S. Shashkov, N.K. Kochetkov, *Carbohydr Res* **1990**, *198*, 399.
- [31] G.M. Lipkind, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, E.V. Vinogradov, N.K. Kochetkov, *Carbohydr Res* **1988**, *175*, 59.
- [32] K. Hermansson, P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, F. Lindh, *Carbohydr Res* **1992**, *235*, 69.
- [33] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Anal Biochem* **1991**, *199*, 11.
- [34] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *J Chem Inf Comput Sci* **1991**, *31*, 508.
- [35] A. Dell, H.R. Morris, *Science* **2001**, *291*, 2351.
- [36] B. Lindberg, J. Lonngren, *Methods Enzymol* **1978**, *50*, 3.
- [37] T. Claridge, Editor, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, **2000**.
- [38] M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, 6. Auflage ed., Thieme Verlag, Stuttgart, New York, **2002**, pp. 188.
- [39] H.-O. Kalinowski, S. Berger, S. Braun, Thieme Verlag, Stuttgart/New York, **1984**, pp. 400.
- [40] K. Bock, C. Pedersen, *Adv Carbohydr Chem Biochem* **1983**, *41*, 27.
- [41] J.E. Lemieux, *Union Med Can* **1958**, *87*, 1447.
- [42] K. Bock, C. Pedersen, *J Chem Soc, Perkin Trans 2* **1974**, 293.
- [43] R.U. Lemieux, K. Bock, L.T.J. Delbaere, S. Koto, V.S. Rao, *Can J Chem* **1980**, *58*, 631.
- [44] E.V. Vinogradov, B.O. Petersen, J.E. Thomas-Oates, J. Duus, H. Brade, O. Holst, *J Biol Chem* **1998**, *273*, 28122.
- [45] A. Bax, M.F. Summers, *J Am Chem Soc* **1986**, *108*, 2093.
- [46] W. Willker, D. Leibfritz, R. Kerssebaum, W. Bermel, *Magn Reson Chem* **1993**, *31*, 287.
- [47] J. Ruiz-Cabello, G.W. Vuister, C.T.W. Moonen, P. Van Gelderen, J.S. Cohen, P.C.M. Van Zijl, *J Magn Reson* **1992**, *100*, 282.
- [48] A. Meissner, D. Moskau, N.C. Nielsen, O.W. Soerensen, *J Magn Reson* **1997**, *124*, 245.
- [49] J.O. Duus, C.H. Gotfredsen, K. Bock, *Chem Rev (Washington, DC, U S)* **2000**, *100*, 4589.
- [50] R.A. Laine, *Glycobiology* **1994**, *4*, 759.
- [51] M.E. Lacey, R. Subramanian, D.L. Olson, A.G. Webb, J.V. Sweedler, *Chem Rev (Washington, DC, U S)* **1999**, *99*, 3133.
- [52] W.S. McCulloch, W. Pitts, *Bull Math Biophys* **1943**, *5*, 115.
- [53] P.M. Milner, *Sci Am* **1993**, *268*, 124.
- [54] F. Rosenblatt, *Psychol Rev* **1958**, *65*, 386.
- [55] M. Minsky, S. Papert, *MIT Press, Cambridge, MA* **1969**.
- [56] J.J. Hopfield, D.W. Tank, *Biol Cybern* **1985**, *52*, 141.

9. Referenzen

- [57] D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams, *MIT Press, Cambridge, MA* **1986**, 318.
- [58] D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams, *Nature* **1986**, 323, 533.
- [59] T.J. Sejnowski, C.R. Rosenberg, *Cognitive Science* **1986**, 14, 179.
- [60] G. Thews, E. Mutschler, P. Vaupel, in *Anatomie Physiologie Pathophysiologie des Menschen*, 5 ed., Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart, **1999**, pp. 83.
- [61] T. Kohonen, *Biol Cybern* **1982**, 43, 59.
- [62] R.R. Trippi, E. Turban, *Neural Networks in Finance and Investing: Using Artificial Intelligence to Improve Real-World Performance*, 2nd ed., Irwin Professional Publishing, Columbus, OH, **1996**.
- [63] J.N.D. Gupta, K.A. Smith *Neural Networks in Business: Techniques and Applications*, IRM Press, Hershey, USA, **2003**.
- [64] G.P. Zhang, *Neural Networks in Business Forecasting*, IRM Press, Hershey, PA, USA, **2004**.
- [65] R.J. Kuo, P. Wu, C.P. Wang, *Neural networks : the official journal of the International Neural Network Society* **2002**, 15, 909.
- [66] P. Lajbcygier, *IEEE transactions on neural networks / a publication of the IEEE Neural Networks Council* **2004**, 15, 465.
- [67] Peltarion, Applications of Adaptive Systems, <http://www.peltarion.com/applications/industry.html>, **2006**.
- [68] L. Molnar, G.M. Keseru, A. Papp, Z. Lorincz, G. Ambrus, F. Darvas, *Bioorg Med Chem Lett* **2006**, 16, 1037.
- [69] W.J. Welsh, R. Zauhar, V. Kholodovych, K. Nagarajan, N. Ai, *Abstracts of Papers, 226th ACS National Meeting, New York, NY, United States, September 7-11, 2003* **2003**, TOXI.
- [70] V.K. Gombar, I.S. Silver, Z. Zhao, *Curr Top Med Chem (Sharjah, United Arab Emirates)* **2003**, 3, 1205.
- [71] S.R. Grey, S.S. Dlay, G.V. Sherbet, *Molecular and Cellular Pathology of Cancer Progression and Prognosis* **2006**, 199.
- [72] A. Narayanan, E. Nana, E. Keedwell, *Proceedings of the IEEE Symposium on Computational Intelligence in Bioinformatics and Computational Biology, La Jolla, CA, United States, Oct 7-8, 2004* **2004**, 9.
- [73] T. Ochi, K. Murase, T. Fujii, M. Kawamura, J. Ikezoe, *Int J Clin Oncol* **2002**, 7, 294.
- [74] M. Lundin, J. Lundin, H.B. Burke, S. Toikkanen, L. Pylkkanen, H. Joensuu, *Oncology* **1999**, 57, 281.
- [75] F. Sato, Y. Shimada, M. Selaru Florin, D. Shibata, M. Maeda, G. Watanabe, Y. Mori, A. Stass Sanford, M. Imamura, J. Meltzer Stephen, *Cancer* **2005**, 103, 1596.
- [76] S. Polak, A. Skowron, A. Mendyk, J. Brandys, *Stud Health Technol Inform* **2004**, 105, 241.
- [77] K. Estahbanati Hamid, N. Bouduhi, *Burns* **2002**, 28, 579.
- [78] F. Atienza, N. Martinez-Alzamora, J.A. De Velasco, S. Dreiseitl, L. Ohno-Machado, *Proceedings / AMIA Annual Symposium AMIA Symposium* **2000**, 32.
- [79] D.A. Buzatu, K.K. Taylor, D.C. Peret, J.A. Darsey, N.P. Lang, *J Surg Res* **2001**, 95, 61.
- [80] M. Filter, U. Rester, L.-H. Wang, P. Wrede, in Identification of lead structures for drug discovery, (Callistogen A.-G., Germany). Application: WO, **2002**, p. 22 pp.

9. Referenzen

- [81] H. Valafar, F. Valafar, *METMBS '01* **2001**, 61.
- [82] T. Lundstedt, P. Andersson, J. Wikberg, R. Muceniece, P. Prusis, in A process for identifying the active site in a biological target, (Melacure Therapeutics AB, Swed.; Pett, Christopher Phineas). Application: WO, **2001**, p. 101 pp.
- [83] F. Valafar, H. Valafar, *TrAC, Trends Anal Chem* **1999**, *18*, 508.
- [84] S.R. Amendolia, A. Doppiu, M.L. Ganadu, G. Lubinu, *Anal Chem* **1998**, *70*, 1249.
- [85] B. Meyer, T. Hansen, D. Nute, P. Albersheim, A. Darvill, W. York, J. Sellers, *Science* **1991**, *251*, 542.
- [86] B.J. Meyer, J.P. Sellers, J.U. Thomsen, in Neural network system using spectral analysis for identification of complex organic structures, (University of Georgia Research Foundation, Inc., USA). Application: WO, **1992**, p. 67 pp.
- [87] J.U. Thomsen, B. Meyer, *J Magn Reson* **1989**, *84*, 212.
- [88] R. Cherniak, H. Valafar, L.C. Morris, F. Valafar, *Clin Diagn Lab Immunol* **1998**, *5*, 146.
- [89] J.P. Radomski, H. van Halbeek, B. Meyer, *Nat Struct Biol* **1994**, *1*, 217.
- [90] D.L. Clouser, P.C. Jurs, *Carbohydr Res* **1995**, *271*, 65.
- [91] M.L. Astion, P. Wilding, *Clin Chem* **1992**, *38*, 34.
- [92] D.S.M. Bot, P. Cleij, H.A. Van 'T Klooster, H. Van Halbeek, G.A. Veldink, J.F.G. Vliegthart, *J Chemom* **1988**, *2*, 11.
- [93] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Acta Chem Scand* **1991**, *45*, 517.
- [94] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1987**, *168*, 67.
- [95] R. Stenutz, P.-E. Jansson, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1998**, *306*, 11.
- [96] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1989**, *188*, 169.
- [97] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Pure Appl Chem* **1989**, *61*, 1181.
- [98] K. Hermansson, P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, F. Lindh, *Carbohydr Res* **1992**, *235*, 69.
- [99] H. Baumann, P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1991**, *211*, 183.
- [100] R. Stenutz, B. Erbing, G. Widmalm, P.-E. Jansson, W. Nimmich, *Carbohydr Res* **1997**, *302*, 79.
- [101] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1989**, *193*, 322.
- [102] P.E. Jansson, J. Lindberg, G. Widmalm, *Acta Chem Scand* **1993**, *47*, 711.
- [103] M.D. Studer, University of Basel (Basel), **2005**.
- [104] StatSoft, STATISTICA (data analysis software system), Version 6 ed., StatSoft, **2004**.
- [105] J. Gasteiger, L. Terfloth, SONNIA - Self Organizing Neural Network for Information Analysis, 4.10 ed., Molecular Networks GmbH, Erlangen, **2002**.
- [106] FileMaker Inc., FileMaker 6.0 für MacOSX, **2002**.
- [107] Microsoft Corporation, Microsoft Office 2003, **2003**.
- [108] Microsoft Corporation, Microsoft Office vX, **2001**.
- [109] Thomson Scientific, EndNote 6.0 for Mac, **2001**.
- [110] Adobe, Adobe Photoshop 6.0 für Mac OSX.
- [111] Adobe, Adobe Illustrator 11.0 für Mac OSX.
- [112] Adobe, Adobe Acrobat Professional 6.0 für Mac OSX, **2003**.
- [113] The Mathworks, Matlab v.6.5.1.200223, **2003**.
- [114] A.B. Wagner, *JCIM* **2006**, *46*, 767.
- [115] Bruker, XWIN-NMR - Acquisition and Processing Software, **2005**.
- [116] P. Lampen, J. Lambert, R.J. Lancashire, R.S. McDonald, P.S. McIntyre, D.N. Rutledge, T. Frohlich, A.N. Davies, *Pure Appl Chem* **1999**, *71*, 1549.
- [117] A.N. Davies, P. Lampen, *Appl Spectrosc* **1993**, *47*, 1093.

- [118] R.S. McDonald, P.A. Wilks, Jr., *Appl Spectrosc* **1988**, *42*, 151.
- [119] H.E. Gottlieb, V. Kotlyar, A. Nudelman, *J Org Chem* **1997**, *62*, 7512.
- [120] M. Forsgren, P.-E. Jansson, L. Kenne, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1985**, 2383.
- [121] P.-E. Jansson, G. Widmalm, *J Chem Soc [Perkin 2]* **1992**, *7*, 1085.
- [122] H. Baumann, P.-E. Jansson, L. Kenne, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1988**, *2*, 209.
- [123] P.-E. Jansson, L. Kenne, E. Schweda, *J Chem Soc, Perkin Trans 1* **1987**, 377.
- [124] P.A.J. Gorin, M. Mazurek, *Can J Chem* **1975**, *53*, 1212.
- [125] P. Spangenberg, C. Andre, V. Langlois, M. Dion, C. Rabiller, *Carbohydr Res* **2002**, *337*, 221.
- [126] V. Kéry, S. Kucár, M. Matulová, J. Haplová, *Carbohydr Res* **1991**, *209*, 83.
- [127] H. Baumann, B. Erbing, P.-E. Jansson, L. Kenne, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1989**, *12*, 2153.
- [128] G. Grönberg, U. Nilsson, K. Bock, G. Magnusson, *Carbohydr Res* **1994**, *257*, 35.
- [129] K. Adelhorst, K. Bock, H. Pedersen, S. Refn, *Acta Chem Scand* **1988**, *Ser. B42*, 196.
- [130] K. Bock, C. Pedersen, H. Pedersen, *Adv Carbohydr Chem Biochem* **1984**, *42*, 193.
- [131] D.D. Cox, E.K. Metzner, L.W. Cary, E.J. Reist, *Carbohydr Res* **1978**, *67*, 23.
- [132] V. Chiffoleau-Giraud, P. Spangenberg, C. Rabiller, *Tetrahedron-Asymmetr* **1997**, *8*, 2017.
- [133] H. Baumann, P.-E. Jansson, L. Kenne, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1991**, *9*, 2229.
- [134] P. Fernández, J. Jiménez-Barbero, *J Carbohydr Chem* **1994**, *13*, 207.
- [135] I. Backman, B. Erbing, P.-E. Jansson, L. Kenne, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1988**, *4*, 889.
- [136] N.L. Bakh, E.M. Beier, N.V. Bovin, S.E. Zurabyan, G.Y. Vidershain, *Dokl Akad Nauk* **1980**, *255*, 996.
- [137] M. Bartelt, A.S. Shashkov, H. Kochanowski, B. Jann, K. Jann, *Carbohydr Res* **1994**, *254*, 203.
- [138] M. Bartelt, A.S. Shashkov, H. Kochanowski, B. Jann, K. Jann, *Carbohydr Res* **1993**, *248*, 233.
- [139] K. Ajisaka, H. Fujimoto, *Carbohydr Res* **1990**, *199*, 227.
- [140] F. Akiyama, R.L. Stevens, S. Hayashi, D.A. Swann, J.P. Binette, B. Caterson, K. Schmid, H. van Halbeek, J.H. Mutsaers, G.J. Gerwig, *Arch Biochem Biophys* **1987**, *252*, 574.
- [141] Y. Akiyama, S. Eda, K. Kato, H. Tanaka, *Carbohydr Res* **1984**, *133*, 289.
- [142] Y. Arakatsu, G. Ashwell, E.A. Kabat, *J Immunol* **1966**, *97*, 858.
- [143] L.V. Backinowsky, P.I. Abronina, A.S. Shashkov, A.A. Grachev, N.K. Kochetkov, S.A. Nepogodiev, J.F. Stoddart, *Chem Eur J* **2002**, *8*, 4412.
- [144] L.V. Backinowsky, A.R. Gomtsyan, N.E. Bairamova, N.K. Kochetkov, *Bioorg Khim* **1984**, *10*, 79.
- [145] W.H. Binder, H. Kählig, W. Schmid, *Tetrahedron* **1994**, *50*, 10407.
- [146] K. Bock, S. Josephson, D.R. Bundle, *J Chem Soc, Perkin Trans 2* **1982**, 59.
- [147] J.B. Bouwstra, J. Kerékgyártó, J.P. Kamerling, J.F.G. Vliegthart, *Carbohydr Res* **1989**, *186*, 39.
- [148] A.V. Bukharov, I.M. Skvortsov, V.V. Ignatov, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, J. Dabrowski, *Carbohydr Res* **1993**, *241*, 309.
- [149] P. Cescutti, R. Toffanin, B.J. Kvam, S. Paoletti, G.G. Dutton, *Eur J Biochem* **1993**, *213*, 445.
- [150] B.V. McCleary, F.R. Tavel, N.W.H. Cheetham, *Carbohydr Res* **1982**, *104*, 285.

9. Referenzen

- [151] S.M.T. D'Arcy, S.L. Carney, T.J. Howe, *Carbohydr Res* **1994**, 255, 41.
- [152] J.W. Date, *Dan Med Bull* **1966**, 13, 98.
- [153] A.H. de Bruin, H. Parolis, L.A.S. Parolis, *Carbohydr Res* **1992**, 235, 199.
- [154] M.-H. Du, U. Spohr, R.U. Lemieux, *Glycoconj J* **1994**, 11, 443.
- [155] J.O. Duus, N.E. Nifant'ev, A.S. Shashkov, E.A. Khatuntseva, K. Bock, *Carbohydr Res* **1996**, 288, 25.
- [156] P. Edebrink, P.-E. Jansson, G. Widmalm, W. Nimmich, *Carbohydr Res* **1994**, 257, 107.
- [157] H. Egge, H. von Nicolai, F. Zilliken, *FEBS Lett* **1974**, 39, 341.
- [158] P. Fernández, J. Jiménez-Barbero, *Carbohydr Res* **1993**, 248, 15.
- [159] P. Fernández, J. Jiménez-Barbero, M. Martín-Lomas, D. Solís, T. Díaz-Mauriño, *Carbohydr Res* **1994**, 256, 223.
- [160] W. Fischer, K. Winkler, *Hoppe Seylers Z Physiol Chem* **1969**, 350, 1137.
- [161] L.A. Flugge, J.T. Blank, P.A. Petillo, *J Am Chem Soc* **1999**, 121, 7228.
- [162] T. Fujiwara, T. Takeda, Y. Ogihara, *Carbohydr Res* **1985**, 141, 168.
- [163] P. Gellerfors, K. Axelsson, A. Helander, S. Johansson, L. Kenne, S. Lindqwist, B. Pavlu, A. Skottner, L. Fryklund, *J Biol Chem* **1989**, 264, 11444.
- [164] H.D. Grimmecke, Y.A. Knirel, B. Kiesel, M. Voges, E.T. Rietschel, *Carbohydr Res* **1994**, 259, 45.
- [165] L. Grimmonprez, G. Takerkart, M. Monsigny, J. Montreuil, *C R Seances Acad Sci D* **1967**, 265, 2124.
- [166] B. Jann, A.S. Shashkov, M. Hahne, H. Kochanowski, K. Jann, *Carbohydr Res* **1994**, 261, 215.
- [167] B. Jann, A.S. Shashkov, H. Kochanowski, K. Jann, *Carbohydr Res* **1993**, 248, 241.
- [168] M.R. Grue, H. Parolis, L.A.S. Parolis, *Carbohydr Res* **1994**, 262, 311.
- [169] M. Gruter, B. Didier, P. de Waard, J. Kuiper, J.P. Kamerling, J.F.G. Vliegthart, *J Carbohydr Chem* **1994**, 13, 363.
- [170] A. Gunnarsson, B. Svensson, B. Nilsson, S. Svensson, *Eur J Biochem* **1984**, 145, 463.
- [171] S.R. Haseley, L. Galbraith, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1994**, 258, 199.
- [172] D.L. Hendrix, Y.-a. Wei, *Carbohydr Res* **1994**, 253, 329.
- [173] O. Hindsgaul, D.P. Khare, M. Bach, R.U. Lemieux, *Can J Chem* **1985**, 63, 2653.
- [174] R.E. Hoffman, J.C. Christofides, D.B. Davies, C.J. Lawson, *Carbohydr Res* **1986**, 153, 1.
- [175] K. Ishikawa, I. Matsui, S. Kobayashi, H. Nakatani, K. Honda, *Biochemistry* **1993**, 32, 6259.
- [176] M. Iwamori, Y. Ohta, Y. Uchida, Y. Tsukada, *Glycoconj J* **1997**, 14, 67.
- [177] R.K. Jain, R.D. Locke, K.L. Matta, *Carbohydr Res* **1993**, 241, 165.
- [178] P.-E. Jansson, L. Kenne, I. Kolare, *Carbohydr Res* **1994**, 257, 163.
- [179] P.-E. Jansson, L. Kenne, H. Ottosson, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1990**, 7, 2011.
- [180] P.-E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1987**, 168, 67.
- [181] P.-E. Jansson, A. Kjellberg, T. Rundlöf, G. Widmalm, *J Chem Soc [Perkin 2]* **1996**, 1, 33.
- [182] P.-E. Jansson, B. Lindberg, *Carbohydr Res* **1980**, 82, 97.
- [183] P.-E. Jansson, B. Lindberg, J. Lönngrén, C. Ortega, *Carbohydr Res* **1984**, 131, 277.
- [184] C. Jones, B. Mulloy, A. Wilson, A. Dell, J.E. Oates, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1985**, 1665.

- [185] O. Karthaus, S.-i. Shoda, H. Takano, K. Obata, S. Kobayashi, *J Chem Soc [Perkin 1]* **1994**, 13, 1851.
- [186] J. Kerékgyártó, J.P. Kamerling, J.B. Bouwstra, J.F.G. Vliegthart, *Carbohydr Res* **1989**, 186, 51.
- [187] J. Kerékgyártó, Z. Szurmai, A. Lipták, *Carbohydr Res* **1993**, 245, 65.
- [188] A.O. Chizhov, A. Dell, H.R. Morris, S.M. Haslam, R.A. McDowell, A.S. Shashkov, N.E. Nifant'ev, E.A. Khatuntseva, A.I. Usov, *Carbohydr Res* **1999**, 320, 108.
- [189] L.L. Kiefer, W.S. York, P. Albersheim, A.G. Darvill, *Carbohydr Res* **1990**, 197, 139.
- [190] N.A. Kocharova, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, L.D. Varbanets, N.V. Moskalenko, *Carbohydr Res* **1994**, 259, 153.
- [191] A.S. Shashkov, N.A. Kocharova, Y.A. Knirel, L.D. Varbanets, N.V. Moskalenko, A.V. Zdokhliy, *Bioorganicheskaya Khimiya* **1993**, 19, 1089.
- [192] N.A. Kocharova, A. Maszewska, G.V. Zatonsky, A. Torzewska, O.V. Bystrova, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, A. Rozalski, *Carbohydr Res* **2004**, 339, 415.
- [193] N.A. Kocharova, M. Mieszala, G.V. Zatonsky, M. Staniszevska, A.S. Shashkov, A. Gamian, Y.A. Knirel, *Carbohydr Res* **2004**, 339, 321.
- [194] N.A. Kocharova, A. Torzewska, G.V. Zatonsky, A. Blaszczyk, O.V. Bystrova, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, A. Rozalski, *Carbohydr Res* **2004**, 339, 195.
- [195] G. Kogan, G. Haraguchi, S.I. Hull, R.A. Hull, A.S. Shashkov, B. Jann, K. Jann, *Eur J Biochem* **1993**, 214, 259.
- [196] G. Kogan, A.S. Shashkov, B. Jann, K. Jann, *Carbohydr Res* **1993**, 238, 261.
- [197] H. Kogelberg, T.J. Rutherford, *Glycobiology* **1994**, 4, 49.
- [198] V. Pavliak, P. Kovac, C.P.J. Glaudemans, *Carbohydr Res* **1992**, 229, 103.
- [199] Y. Kurokawa, T. Takeda, Y. Komura, Y. Ogihara, *Carbohydr Res* **1988**, 175, 144.
- [200] V.-M. Ló, M.G. Hahn, H. van Halbeek, *Carbohydr Res* **1994**, 255, 271.
- [201] N.H. Low, D.L. Nelson, P. Sporns, *J Apic Res* **1988**, 27, 245.
- [202] R. Madiyalakan, M.S. Chowdhary, S.S. Rana, K.L. Matta, *Carbohydr Res* **1986**, 152, 183.
- [203] J.L. Magnani, B. Nilsson, M. Brockhaus, D. Zopf, Z. Steplewski, H. Koprowski, V. Ginsburg, *J Biol Chem* **1982**, 257, 14365.
- [204] A. Maranduba, A. Veyrieres, *Carbohydr Res* **1986**, 151, 105.
- [205] J.-R. Marino-Albernas, S.L. Harris, V. Varma, B.M. Pinto, *Carbohydr Res* **1993**, 245, 245.
- [206] O.A. Nechaev, V.I. Torgov, V.N. Shibaev, *Bioorg Khim* **1988**, 14, 1224.
- [207] O.A. Nechaev, V.I. Torgov, V.N. Shibaev, S.S. Mamyán, *Bioorg Khim* **1988**, 14, 359.
- [208] A. Nixon Anderson, L.A.S. Parolis, H. Parolis, *Carbohydr Res* **1994**, 265, 41.
- [209] P. Odonmazig, A. Ebringerová, E. Machová, J. Alföldi, *Carbohydr Res* **1994**, 252, 317.
- [210] M. Asogawa, *Ismb* **1997**, 5, 48.
- [211] M. Okada, Y. Yamaguchi, K. Fukushima, *Neural Netw* **1997**, 10, 971.
- [212] E. Parra, J. Jiménez-Barbero, M. Bernabe, J.A. Leal, A. Prieto, B. Gómez-Miranda, *Carbohydr Res* **1994**, 257, 239.
- [213] E. Parra, J. Jiménez-Barbero, M. Bernabe, J.A. Leal, A. Prieto, B. Gómez-Miranda, *Carbohydr Res* **1994**, 251, 315.
- [214] S. Horito, J.P. Lorentzen, H. Paulsen, *Liebigs Ann Chem* **1986**, 1880.
- [215] J.H. Pazur, F.J. Miskiel, B. Liu, *Anal Biochem* **1988**, 174, 46.
- [216] M.B. Perry, L.A. Babiuk, *Can J Biochem Cell Biol* **1984**, 62, 108.

9. Referenzen

- [217] M.B. Perry, L.L. MacLean, J.-R. Brisson, *Carbohydr Res* **1993**, 248, 277.
- [218] D.E. Portlock, G.S. Lubey, B. Borah, *J Org Chem* **1989**, 54, 2327.
- [219] V. Pozsgay, J.-R. Brisson, H.J. Jennings, *Can J Chem* **1987**, 65, 2764.
- [220] V. Pozsgay, B. Coxon, *Carbohydr Res* **1994**, 257, 189.
- [221] S. Ratnayake, A. Weintraub, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1994**, 265, 113.
- [222] G.W. Robijn, R. Gutierrez Gallego, D.J.C. van den Berg, H. Haas, J.P. Kamerling, J.F.G. Vliegthart, *Carbohydr Res* **1996**, 288, 203.
- [223] G.W. Robijn, J.R. Thomas, H. Haas, D.J.C. van den Berg, J.P. Kamerling, J.F.G. Vliegthart, *Carbohydr Res* **1995**, 276, 137.
- [224] G.W. Robijn, D.J.C. van den Berg, H. Haas, J.P. Kamerling, J.F.G. Vliegthart, *Carbohydr Res* **1995**, 276, 117.
- [225] T.E.C.L. Ronnow, M. Meldal, K. Bock, *J Carbohydr Chem* **1995**, 14, 197.
- [226] T.E.C.L. Ronnow, M. Meldal, K. Bock, *Tetrahedron-Asymm* **1995**, 5, 2109.
- [227] T.J. Rutherford, C. Jones, D.B. Davies, A. Clare Elliott, *Carbohydr Res* **1994**, 265, 97.
- [228] T. Saito, K. Hayamizu, M. Yanagisawa, O. Yamamoto, in Spectral Database for Organic Compounds SDBS, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, **2001**.
- [229] D. Schwarzenbach, R.W. Jeanloz, *Carbohydr Res* **1981**, 90, 193.
- [230] W.B. Severn, J.C. Richards, *Carbohydr Res* **1993**, 240, 277.
- [231] A.S. Shashkov, N.E. Nifant'ev, V.Y. Amochaeva, N.K. Kochetkov, *Magn Reson Chem* **1993**, 31, 599.
- [232] A.S. Shashkov, E.V. Vinogradov, Y.A. Knirel, N.E. Nifant'ev, N.K. Kochetkov, J. Dabrowski, E.V. Kholodkova, E.S. Stanislavsky, *Carbohydr Res* **1993**, 241, 177.
- [233] A. Shimamuro, Y. Uezono, H. Tsumori, H. Mukasa, *Carbohydr Res* **1992**, 233, 237.
- [234] N. Shiomi, *J Plant Physiol* **1989**, 134, 151.
- [235] P. Söderman, P.-E. Jansson, G. Widmalm, *J Chem Soc [Perkin 2]* **1998**, 3, 639.
- [236] U. Spohr, O. Hindsgaul, R.U. Lemieux, *Can J Chem* **1985**, 63, 2644.
- [237] V.K. Srivastava, S.J. Sondheimer, C. Schuerch, *Carbohydr Res* **1980**, 86, 203.
- [238] O. Kol, J.M. Wieruszkeski, G. Strecker, B. Fournet, R. Zalisz, P. Smets, *Carbohydr Res* **1992**, 236, 339.
- [239] K. Takamiya, A. Yamamoto, K. Furukawa, J. Zhao, S. Fukumoto, S. Yamashiro, M. Okada, M. Haraguchi, M. Shin, M. Kishikawa, H. Shiku, S. Aizawa, K. Furukawa, *Proc Natl Acad Sci U S A* **1998**, 95, 12147.
- [240] T. Takeda, T. Kanemitsu, M. Ishiguro, Y. Ogihara, M. Matsubara, *Carbohydr Res* **1994**, 256, 59.
- [241] E. Tarelli, S.F. Wheeler, *Carbohydr Res* **1994**, 261, 25.
- [242] A. Temeriusz, B. Piekarska, J. Radomski, J. Stepinski, *Carbohydr Res* **1982**, 108, 298.
- [243] R. Toffanin, B.J. Kvam, A. Flaibani, M. Atzori, F. Biviano, S. Paoletti, *Carbohydr Res* **1993**, 245, 113.
- [244] T. Uchiyama, *Biochim Biophys Acta* **1975**, 397, 153.
- [245] T. Usui, S. Morimoto, Y. Hayakawa, M. Kawaguchi, T. Murata, Y. Matahira, *Carbohydr Res* **1996**, 285, 29.
- [246] T. Usui, T. Murata, Y. Yabuuchi, K. Ogawa, *Carbohydr Res* **1993**, 250, 57.
- [247] T. Usui, N. Yamaoka, K. Matsuda, K. Tuzimura, H. Sugiyama, S. Seto, *J Chem Soc, Perkin Trans 1* **1973**, 2425.

9. Referenzen

- [248] R.W. Veh, J.C. Michalski, A.P. Corfield, M. Sander-Wewer, D. Gies, R. Schauer, *J Chromatogr* **1981**, 212, 313.
- [249] H. von Nicolai, R. Drzeniek, F. Zilliken, *Z Naturforsch B* **1971**, 26, 1049.
- [250] T. Watanabe, M. Shida, T. Murayama, Y. Furuyama, T. Nakajima, K. Matsuda, K. Kainuma, *Carbohydr Res* **1984**, 129, 229.
- [251] A. Weintraub, K. Leontein, G. Widmalm, P.A. Vial, M.M. Levine, A.A. Lindberg, *Eur J Biochem* **1993**, 213, 859.
- [252] D.V. Whittaker, L.A.S. Parolis, H. Parolis, *Carbohydr Res* **1994**, 256, 289.
- [253] D.V. Whittaker, L.A.S. Parolis, H. Parolis, *Carbohydr Res* **1994**, 253, 247.
- [254] D.V. Whittaker, L.A.S. Parolis, H. Parolis, *Carbohydr Res* **1994**, 262, 323.
- [255] A.M. Winn, L. Galbraith, G.S. Temple, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1993**, 247, 249.
- [256] K. Yamashita, Y. Tachibana, A. Kobata, *Arch Biochem Biophys* **1977**, 182, 546.
- [257] K. Yamashita, Y. Tachibana, K. Mihara, S. Okada, H. Yabuuchi, A. Kobata, *J Biol Chem* **1980**, 155, 5126.
- [258] J.H. Yoon, G.H. Ryu, P. Finch, J.S. Rhee, *J Mol Catal B: Enzym* **2001**, 15, 191.
- [259] N.M. Young, I.B. Jocius, M.A. Leon, *Biochemistry* **1971**, 10, 3457.
- [260] T. Ziegler, H. Sutoris, C.P.J. Glaudemans, *Carbohydr Res* **1992**, 229, 271.
- [261] S.E. Zurabyan, V.A. Markin, V.V. Pimenova, B.V. Rozynov, V.L. Sadovskya, A.Y. Khorlin, *Bioorg Khim* **1978**, 4, 928.
- [262] H.M. Zuurmond, G.H. Veeneman, G.A. van der Marel, J.H. van Boom, *Carbohydr Res* **1993**, 241, 153.
- [263] P.E. Jansson, L. Kenne, G. Widmalm, *J Chem Inf Comput Sci* **1991**, 31, 508.
- [264] B.A. Dmitriev, A.V. Nikolaev, A.S. Shashkov, N.K. Kochetkov, *Carbohydr Res* **1982**, 100, 195.
- [265] M.T. Duenas-Chasco, M.A. Rodriguez-Carvajal, P. Tejero-Mateo, J.L. Espartero, A. Irastorza-Iribas, A.M. Gil-Serrano, *Carbohydr Res* **1998**, 307, 125.
- [266] G.G.S. Dutton, A.V.S. Lim, *Carbohydr Res* **1985**, 145, 67.
- [267] A. Adeyeye, P.E. Jansson, B. Lindberg, J. Henriksen, *Carbohydr Res* **1988**, 180, 295.
- [268] J.S. Andrews, B.M. Pinto, *J Chem Soc, Perkin Trans 1* **1990**, 1785.
- [269] T.L. Arsenault, D.W. Hughes, D.B. MacLean, W.A. Szarek, A.M.B. Kropinski, J.S. Lam, *Can J Chem* **1991**, 69, 1273.
- [270] L.V. Bakinovskii, A.R. Gomtsyan, N.E. Bairamova, N.K. Kochetkov, N.P. Yankina, *Bioorg Khim* **1985**, 11, 1562.
- [271] B. Bartodziejska, A.S. Shashkov, A. Torzewska, A.A. Grachev, A. Ziolkowski, N.A. Paramonov, A. Rozalski, Y.A. Knirel, *Eur J Biochem* **1999**, 259, 212.
- [272] J.H. Bradbury, J.G. Collins, G.A. Jenkins, E. Trifonoff, M. Messer, *Carbohydr Res* **1983**, 122, 327.
- [273] W.Y. Choy, B.C. Sanctuary, G. Zhu, *J Chem Inf Comput Sci* **1997**, 37, 1086.
- [274] R. Christian, G. Schulz, F.M. Unger, P. Messner, Z. Kuepcue, U.B. Sleytr, *Carbohydr Res* **1986**, 150, 265.
- [275] P. Colson, H.J. Jennings, I.C.P. Smith, *J Am Chem Soc* **1974**, 96, 8081.
- [276] J. Defaye, S. Kohlmunzer, K. Sodzawiczny, E. Wong, *Carbohydr Res* **1988**, 173, 316.
- [277] L. Galbraith, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1997**, 303, 245.
- [278] R.P. Gorshkova, E.L. Nazarenko, V.A. Zubkov, L.S. Stepanenko, V.V. Isakov, *Bioorg Khim* **1997**, 23, 134.

9. Referenzen

- [279] H.D. Grimmecke, Y.A. Knirel, A.S. Shashkov, B. Kiesel, W. Lauk, M. Voges, *Carbohydr Res* **1994**, 253, 277.
- [280] H.D. Grimmecke, U. Mamat, I. Kuehn, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, *Carbohydr Res* **1994**, 252, 309.
- [281] H.D. Grimmecke, M. Voges, Y.A. Knirel, A.S. Shashkov, W. Lauk, B. Kiesel, *Carbohydr Res* **1994**, 253, 283.
- [282] S.R. Haseley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1998**, 306, 257.
- [283] B. Jann, A.S. Shashkov, H. Kochanowski, K. Jann, *Carbohydr Res* **1995**, 277, 353.
- [284] J. Jimenez-Barbero, M. Bernabe, J.A. Leal, A. Prieto, B. Gomez-Miranda, *Carbohydr Res* **1993**, 250, 289.
- [285] S. Kalelkar, J. Glushka, H. Van Halbeek, L.C. Morris, R. Cherniak, *Carbohydr Res* **1997**, 299, 119.
- [286] E. Katzenellenbogen, E. Romanowska, D. Witkowska, A.S. Shashkov, *Carbohydr Res* **1992**, 231, 51.
- [287] R.U. Lemieux, D.R. Bundle, D.A. Baker, *J Am Chem Soc* **1975**, 97, 4076.
- [288] R.U. Lemieux, H. Driguez, *J Am Chem Soc* **1975**, 97, 4069.
- [289] R.U. Lemieux, H. Driguez, *J Am Chem Soc* **1975**, 97, 4063.
- [290] M.R. Leslie, H. Parolis, L.A.S. Parolis, *Carbohydr Res* **2000**, 323, 103.
- [291] M. Linnerborg, A. Weintraub, G. Widmalm, *Eur J Biochem* **1997**, 247, 567.
- [292] M.C. Manca, A. Weintraub, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1996**, 281, 155.
- [293] H. Masoud, J.C. Richards, *Carbohydr Res* **1994**, 252, 223.
- [294] B.V. McCleary, E. Nurthen, F.R. Tavel, J.P. Joseleau, *Carbohydr Res* **1983**, 118, 91.
- [295] E.L. Nazarenko, R.P. Gorshkova, Y.S. Ovodov, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, *Bioorg Khim* **1989**, 15, 1100.
- [296] E.L. Nazarenko, R.P. Gorshkova, V.A. Zubkov, A.S. Shashkov, E.P. Ivanova, Y.S. Ovodov, *Bioorg Khim* **1993**, 19, 733.
- [297] D. Oxley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1988**, 175, 111.
- [298] D. Oxley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1990**, 198, 168.
- [299] D. Oxley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1990**, 203, 247.
- [300] D. Oxley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1991**, 209, 319.
- [301] D. Oxley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1991**, 212, 187.
- [302] D. Oxley, S.G. Wilkinson, *Carbohydr Res* **1991**, 212, 213.
- [303] L.A.S. Parolis, H. Parolis, G.S. Dutton, *Carbohydr Res* **1986**, 155, 272.
- [304] A. Poveda, M. Santamaria, M. Bernabe, A. Prieto, M. Bruix, J. Corzo, J. Jimenez-Barbero, *Carbohydr Res* **1997**, 304, 209.
- [305] P. Sengupta, T. Bhattacharyya, A.S. Shashkov, H. Kochanowski, S. Basu, *Carbohydr Res* **1995**, 277, 283.
- [306] M. Staaf, F. Urbina, A. Weintraub, G. Widmalm, *Carbohydr Res* **1997**, 297, 297.
- [307] M. Staaf, F. Urbina, A. Weintraub, G. Widmalm, *Eur J Biochem* **1999**, 266, 241.
- [308] T. Sugawara, K. Igarashi, *Carbohydr Res* **1988**, 172, 195.
- [309] I.W. Sutherland, *Biochemistry* **1970**, 9, 2180.
- [310] Z. Szurmai, A. Liptak, G. Snatzke, *Carbohydr Res* **1990**, 200, 201.
- [311] F.V. Toukach, N.P. Arbatsky, A.S. Shashkov, Y.A. Knirel, K. Zych, Z. Sidorczyk, *Carbohydr Res* **1998**, 312, 97.
- [312] T. Wehler, N.I.A. Carlin, *Eur J Biochem* **1988**, 176, 471.
- [313] W.H.M. van Casteren, P. de Waard, C. Dijkema, H.A. Schols, A.G.J. Voragen, *Carbohydr Res* **2000**, 327, 411.

9. Referenzen

- [314] T. Urashima, W.A. Bubb, M. Messer, Y. Tsuji, Y. Taneda, *Carbohydr Res* **1994**, 262, 173.
- [315] V.A. Zubkov, E.L. Nazarenko, R.P. Gorshkova, Y.S. Ovodov, *Bioorg Khim* **1993**, 19, 729.
- [316] L. Yan, D. Kahne, *J Am Chem Soc* **1996**, 118, 9239.
- [317] T. Kohonen, *IEEE Transactions on Computers* **1972**, C-21, 353.
- [318] T.L. Gasteiger J., SONNIA - Self Organizing Neural Network for Information Analysis, 4.10 ed., Molecular Networks GmbH, Erlangen, **2002**.
- [319] A. Zell, *Simulation Neuronaler Netze*, Universität Tübingen, **1998**.
- [320] A. Zell, G. Mamier, M. Vogt, *SNNS: Stuttgart Neural Network Simulator User Manual*, University of Tübingen, Stuttgart, **2002**.

10 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1. O-glykosylierte Oligosaccharide	12
Abbildung 2. In Säugetieren vorkommende Monosaccharide	12
Abbildung 3. O-glykosyliertes Oligosaccharid (schematisch) mit entsprechender chemischer Formel	13
Abbildung 4. N-glykosylierte Oligosaccharide	13
Abbildung 5. N-glykosyliertes Oligosaccharid (schematisch) mit entsprechender chemischer Formel	14
Abbildung 6. Synthese eines N-Glykans im rER	15
Abbildung 7. Reifung eines N-Glykans im Golgi	15
Abbildung 8. Konfiguration am anomeren C-Atom: (a) α -D-Glcp-OH, (b) β -D-Glcp-OH	20
Abbildung 10. Publikationen über ANN (1987-2005)	23
Abbildung 11. Biologisches und künstliches Neuron im Vergleich	25
Abbildung 12. Gängige Aktivierungsfunktionen	26
Abbildung 13. Netzwerk mit einer versteckten Schicht	28
Abbildung 14. Feed-Forward Netzwerk (a) ohne und (b) mit <i>Shortcut-Connections</i> ..	29
Abbildung 15. Netzwerke mit (a) direkter, (b) indirekter und (c) lateraler Rückkopplung	29
Abbildung 16. Vollständig verbundenes Netzwerk	30
Abbildung 17. Training eines Kohonennetzwerkes	32
Abbildung 19. Nomenklatur Nachbargruppen-Ansatz	40
Abbildung 20. Gruppenvergleich β -D-Glcp-OMe-4R	43
Abbildung 21. Gruppeneinteilung Monosaccharid-Ansatz	44
Abbildung 22. Gruppeneinteilung Disaccharid-Ansatz	46
Abbildung 23. Hindsgaul-Datenreihe	51
Abbildung 24. ^{13}C -NMR Filemaker© Datenbank	54
Abbildung 25. Strukturschema Datenbank	56
Abbildung 26. Klassifizierung von α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-1-6-(α -L-Rhap-1-3)- β -D-Galp-OMe	56
Abbildung 27. Kohonen Netzwerk mit Eingabeschicht (1) und Ausgabeschicht (2) ..	61
Abbildung 28. <i>winner-map</i> mit neun Klassen	62
Abbildung 29. Counterpropagation Netzwerk mit (a) Eingabeschicht, (b) Kohonenschicht und (c) Grossbergschicht	63
Abbildung 30. Fehlerkorrektur im Backpropagation Lernverfahren	64
Abbildung 31. 3D Fehleroberfläche der Gewichte w_1 und w_2	65
Abbildung 32. Probleme des Backpropagation Lernverfahrens: (a) Steckenbleiben in lokalem Minimum, (b) Plateau, (c) Oszillation in engen Tälern, (d) Verfehlen eines Minimums	67
Abbildung 33. Gruppeneinteilung von α -D-Glcp-1-4- α -D-Galp-OMe	70
Abbildung 34. Glucose-Gruppen	73
Abbildung 35. Galactose-Gruppen	75
Abbildung 36. Mannose-Gruppen	77
Abbildung 37. Fucose-Gruppen	78
Abbildung 38. Xylose-Gruppen	80
Abbildung 39. Glucuronsäure-Gruppen	80
Abbildung 40. N-Acetyl Glucosamin-Gruppen	81
Abbildung 41. N-Acetyl Galactosamin-Gruppen	82
Abbildung 42. N-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen	83

Abbildung 43. Erstellen der Modifikationen am Beispiel Galactose	85
Abbildung 44. Graphische Oberfläche SNNS v4.2	86
Abbildung 45. Graphische Oberfläche JavaNNS v1.1	88
Abbildung 46. SONNIA v4.10	89
Abbildung 47. Bedienfeld ANN PFG v.0.9.58	90
Abbildung 48. Erstellen der Peakmaske ^[103]	93
Abbildung 49. Beispiel Schrittlänge = 8 ^[103]	94
Abbildung 52. Vergleich der Gruppen von α -D-Glcp-OH	109
Abbildung 53. Vergleich der Gruppen von α -D-Glcp-1R	110
Abbildung 54. Vergleich der Gruppen von β -D-Glcp-OH	111
Abbildung 55. Vergleich der Gruppen von β -D-Glcp-1R	112
Abbildung 56. Vergleich der Gruppen von α -D-Galp-OH	114
Abbildung 58. Vergleich der Gruppen von β -D-Galp-OH	116
Abbildung 59. Vergleich der Gruppen von β -D-Galp-1R	117
Abbildung 60. Vergleich der Gruppen von α -D-Manp-OH	118
Abbildung 61. Vergleich der Gruppen von α -D-Manp-1R	119
Abbildung 62. Vergleich der Gruppen von β -D-Manp-OH	120
Abbildung 63. Vergleich der Gruppen von β -D-Manp-1R	122
Abbildung 64. Trainingskurven selbst-organisierende Karten (1)	125
Abbildung 66. Kohonenkarten Monosaccharide	127
Abbildung 67. Testperformance Mono-out	128
Abbildung 68. Mittlerer Fehler Mono-out	130
Abbildung 69. Testperformance Poly-out	131
Abbildung 70. Mittlerer Fehler Poly-out	132
Abbildung 71. Durchschnittliche Performance Netzwerke Monosaccharid-Ansatz ..	136
Abbildung 73. Mittelwert-Test Monosaccharide (positiv)	138
Abbildung 74. Literatur-Test Monosaccharide (positiv)	139
Abbildung 75. Literatur-Test Monosaccharide Glucose (positiv)	141
Abbildung 76. Literatur-Test Monosaccharide Galactose (positiv)	143
Abbildung 77. Literatur-Test Monosaccharide Mannose (positiv)	144
Abbildung 78. Literatur-Test Monosaccharide Fucose (positiv)	146
Abbildung 79. Literatur-Test Monosaccharide Xylose (positiv)	147
Abbildung 80. Literatur-Test Monosaccharide Glucuronsäure (positiv)	148
Abbildung 81. Literatur-Test Monosaccharide N-Acetyl Glucosamin (positiv)	149
Abbildung 82. Literatur-Test Monosaccharide N-Acetyl Galactosamin (positiv)	150
Abbildung 83. Literatur-Test Monosaccharide N-Acetyl Neuraminsäure (positiv)	151
Abbildung 84. Mittelwert-Test Monosaccharide (negativ)	152
Abbildung 85. Literatur-Test Monosaccharide (negativ)	153
Abbildung 86. Disaccharid-Test Positiv (online)	155
Abbildung 87. Disaccharid-Test Positiv (comb)	156
Abbildung 88. Disaccharid-Test Glucose positiv (comb)	157
Abbildung 89. Disaccharid-Test Galactose positiv (comb)	158
Abbildung 90. Disaccharid-Test Mannose positiv (comb)	159
Abbildung 91. Disaccharid-Test Fucose positiv (comb)	160
Abbildung 92. Disaccharid-Test Xylose positiv (comb)	162
Abbildung 93. Disaccharid-Test Glucuronsäure positiv (comb)	163
Abbildung 94. Disaccharid-Test N-Acetyl Glucosamin positiv (comb)	164
Abbildung 95. Disaccharid-Test N-Acetyl Galactosamin positiv (comb)	165
Abbildung 96. Disaccharid-Test N-Acetyl Neuraminsäure positiv (comb)	166
Abbildung 97. Disaccharid-Test Negativ (online)	167
Abbildung 98. Disaccharid-Test Negativ (comb)	168

10. Abbildungsverzeichnis

Abbildung 99. Hindsgaul-Test (korrekte Peaks)	170
Abbildung 100. Hindsgaul-Test (online).....	171
Abbildung 101. Hindsgaul-Test (comb)	172
Abbildung 102. Stenutztest (online).....	173
Abbildung 103. Instituts-Test (online)	174
Abbildung 104. Netzwerkperformance Disaccharid-Ansatz	176
Abbildung 105. Netzwerkfehler Disaccharid-Ansatz	177
Abbildung 106. Literatur-Test Disaccharid-Ansatz.....	179

11 Danksagung

Ich danke allen, die mir bei der Durchführung dieser Arbeit behilflich waren, insbesondere:

- Meinem Doktorvater Prof. Dr. Beat Ernst, für die Bereitstellung dieses interessanten Themas, für die fachliche Unterstützung während der Dissertation und den grossen Freiraum bei dessen Bearbeitung. Danken möchte ich ihm im Speziellen für die Möglichkeit meine Dissertation in seiner multinationalen Gruppe durchführen zu können; es war eine sehr gute Erfahrung für mich.
- Prof. Dr. Angelo Vedani, für die Übernahme des Korreferats und die Korrektur dieses Skripts.
- Meinem langjährigen Kollegen und Freund Dr. Matthias Studer gilt mein spezieller Dank für die gute Freundschaft, die vielen zum Teil nächtlichen, anregenden, kritischen und konstruktiven Gespräche, während unserer Zusammenarbeit in den letzten 4 Jahren.
- Prof. Dr. Johann Gasteiger, für die fachliche Unterstützung unseres Projektes während des Aufenthalts am Computer-Chemie-Centrum der Universität Erlangen.
- Prof. Dr. Ole Hindsgaul, für die Bereitstellung der Testsubstanzen aus seiner Sammlung.
- Meinen Diplomanden Alexej Moor und Raphael Hösli, für ihre wertvollen Beiträge zu meiner Dissertation.
- Frau Beatrice Wagner, Dr. Oliver Schwardt und Dr. Brian Cutting, für die theoretische und praktische Unterstützung bei meinen NMR Experimenten.
- Allen Mitarbeitern des Instituts für molekulare Pharmazie der Universität Basel, für die gute Arbeitsatmosphäre, den Zusammenhalt und die unvergesslichen Erinnerungen innerhalb und ausserhalb des Institutsalltags.
- Für ihre Geduld, ihr Verständnis und viele kleine und grosse Hilfeleistungen danke ich meinen Freunden, meiner Familie, meinen Eltern und im Besonderen meiner Freundin Caroline Guggisberg.

12 Anhang

12.1 Berechnung Mittelwerte und Standardabweichungen

12.1.1 Monosaccharid-Ansatz

12.1.1.1 Glucose

Tabelle 95. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen Glucose
in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
163	α -D-Glcp-1R	98.29	73.89	72.69	72.19	70.19	61.39
164	α -D-Glcp-1R	98.29	73.89	72.69	72.19	70.19	61.39
795	α -D-Glcp-1R	98.29	73.88	72.69	72.19	70.19	61.39
796	α -D-Glcp-1R	98.29	73.89	72.69	72.19	70.18	61.39
176	α -D-Glcp-1R	98.29	73.59	72.09	72.09	70.19	61.39
871	α -D-Glcp-1R	98.29	73.59	72.09	72.09	70.19	61.39
872	α -D-Glcp-1R	98.29	73.59	72.09	72.08	70.17	61.38
401	α -D-Glcp-1R	98.34	73.50	72.69	72.07	70.35	61.27
152	α -D-Glcp-1R	98.39	73.79	72.49	72.49	70.49	61.39
788	α -D-Glcp-1R	98.39	73.79	72.49	72.49	70.49	61.39
12	α -D-Glcp-1R	98.43	73.56	72.41	72.11	70.29	61.25
80	α -D-Glcp-1R	98.57	73.84	72.41	72.34	70.12	61.21
81	α -D-Glcp-1R	98.57	73.84	72.41	72.34	70.12	61.21
76	α -D-Glcp-1R	98.59	72.89	71.59	71.59	70.09	60.59
621	α -D-Glcp-1R	98.64	73.44	72.24	71.84	69.94	60.94
685	α -D-Glcp-1R	98.64	73.74	72.64	71.94	70.24	61.24
946	α -D-Glcp-1R	98.69	73.79	73.29	72.19	70.49	61.49
935	α -D-Glcp-1R	98.69	73.69	72.39	71.99	70.09	61.09
1095	α -D-Glcp-1R	98.70	74.10	72.80	72.80	70.80	61.70
934	α -D-Glcp-1R	98.79	73.59	72.39	72.09	70.09	61.09
23	α -D-Glcp-1R	98.82	73.84	72.61	72.03	70.42	61.42
25	α -D-Glcp-1R	98.89	73.82	72.60	72.05	70.40	61.40
942	α -D-Glcp-1R	98.99	73.49	72.39	71.99	70.09	61.09

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
944	α -D-Glcp-1R	98.99	74.89	73.29	71.99	69.89	60.89
1120	α -D-Glcp-1R	99.00	74.30	72.80	72.80	70.90	62.10
1112	α -D-Glcp-1R	99.10	74.70	73.50	73.00	71.00	62.20
1113	α -D-Glcp-1R	99.10	74.70	73.50	73.00	71.00	62.20
947	α -D-Glcp-1R	99.19	73.29	73.19	72.19	70.49	61.49
954	α -D-Glcp-1R	99.19	73.99	72.89	72.39	70.59	61.59
851	α -D-Glcp-1R	99.29	74.09	72.89	72.29	70.59	61.59
852	α -D-Glcp-1R	99.29	74.09	72.89	72.29	70.59	61.59
953	α -D-Glcp-1R	99.49	73.99	72.89	72.39	70.59	61.59
1101	α -D-Glcp-1R	99.50	73.80	72.50	72.50	71.00	61.50
96	α -D-Glcp-1R	99.51	73.33	72.94	71.80	69.40	60.56
42	α -D-Glcp-1R	99.54	73.04	72.94	71.94	69.54	60.44
95	α -D-Glcp-1R	99.55	73.35	72.92	71.79	69.40	60.56
155	α -D-Glcp-1R	99.59	73.89	72.59	72.59	71.09	61.59
411	α -D-Glcp-1R	99.59	73.53	73.23	72.23	70.40	61.28
791	α -D-Glcp-1R	99.59	73.89	72.59	72.58	71.09	61.59
601	α -D-Glcp-1R	99.68	73.36	72.86	72.18	69.66	61.42
411	α -D-Glcp-1R	99.70	73.37	73.37	72.13	70.19	61.28
13	α -D-Glcp-1R	99.74	73.70	72.60	72.45	70.35	61.27
746	α -D-Glcp-1R	99.89	73.39	73.09	72.19	69.69	61.09
269	α -D-Glcp-1R	100.08	73.55	72.65	72.27	70.31	61.20
173	α -D-Glcp-1R	100.19	74.09	73.19	72.09	70.09	61.39
174	α -D-Glcp-1R	100.19	74.09	73.19	72.09	70.09	61.39
869	α -D-Glcp-1R	100.19	74.09	73.19	72.09	70.09	61.39
870	α -D-Glcp-1R	100.19	74.09	73.19	72.09	70.09	61.39
956	α -D-Glcp-1R	100.19	73.49	73.29	72.29	69.89	61.09
79	α -D-Glcp-1R	100.25	73.62	73.29	72.38	70.05	61.24
955	α -D-Glcp-1R	100.29	73.49	73.29	72.29	69.89	61.09
20	α -D-Glcp-1R	100.37	73.63	73.40	72.43	70.20	61.39
932	α -D-Glcp-1R	100.39	73.59	73.29	72.39	69.99	61.19
19	α -D-Glcp-1R	100.44	73.68	73.39	72.51	70.23	61.38
160	α -D-Glcp-1R	100.49	73.69	73.39	72.59	70.19	61.39
776	α -D-Glcp-1R	100.49	73.69	73.39	72.59	70.19	61.39

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
777	α -D-Glcp-1R	100.49	73.69	73.39	72.59	70.19	61.39
402	α -D-Glcp-1R	100.54	73.81	72.81	72.68	70.25	61.25
189	α -D-Glcp-1R	100.59	73.69	73.49	72.59	70.29	61.39
190	α -D-Glcp-1R	100.59	73.69	73.49	72.59	70.29	61.39
581	α -D-Glcp-1R	100.64	73.14	72.64	71.94	69.84	60.84
582	α -D-Glcp-1R	100.64	73.04	72.84	71.64	69.64	61.04
412	α -D-Glcp-1R	100.67	74.15	73.02	72.75	70.32	61.25
1106	α -D-Glcp-1R	100.70	74.30	74.00	73.10	70.70	62.20
52	α -D-Glcp-1R	102.00	74.20	73.60	73.00	71.00	62.00
444	α -D-Glcp-1R	99.89	73.79	72.19	71.89	70.19	61.19
265	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
275	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
280	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
300	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
397	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
417	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
433	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.46
443	α -D-Glcp-1R	99.98	73.89	72.31	72.02	70.47	61.36
200	α -D-Glcp-1R;2R	92.34	79.14	72.44	71.84	69.34	60.44
541	α -D-Glcp-1R;2R	97.30	76.80	72.50	72.10	70.40	61.40
423	α -D-Glcp-1R;2R	98.12	79.19	72.62	72.05	70.41	61.37
260	α -D-Glcp-1R;2R	99.45	81.02	72.78	72.07	70.31	61.40
15	α -D-Glcp-1R;2R	99.60	80.89	72.79	72.02	70.36	61.40
708	α -D-Glcp-1R;2R	99.79	81.49	73.09	72.29	71.09	61.99
203	α -D-Glcp-1R;3R	100.84	79.74	72.54	71.24	70.24	60.44
674	α -D-Glcp-1R;3R	101.19	79.59	72.69	72.49	70.59	0.00
17	α -D-Glcp-1R;3R	99.83	83.53	72.14	71.40	68.92	61.50
385	α -D-Glcp-1R;3R	99.92	81.44	72.37	72.29	68.99	61.45
289	α -D-Glcp-1R;3R	100.04	83.35	71.99	71.51	68.91	61.45
389	α -D-Glcp-1R;3R	100.06	80.93	72.37	72.31	68.93	61.40
13	α -D-Glcp-1R;3R	100.09	81.30	72.08	70.62	70.62	61.34
386	α -D-Glcp-1R;3R	100.11	81.27	72.07	70.71	70.71	61.27
390	α -D-Glcp-1R;3R	100.11	80.73	72.17	70.76	70.71	61.25

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
935	α -D-Glcp-1R;4R	92.49	77.79	73.49	71.49	71.39	60.79
932	α -D-Glcp-1R;4R	92.59	77.49	73.59	71.69	71.49	60.79
173	α -D-Glcp-1R;4R	98.39	77.89	73.69	72.39	70.69	61.39
174	α -D-Glcp-1R;4R	98.39	77.89	73.69	72.39	70.69	61.39
869	α -D-Glcp-1R;4R	98.39	77.89	73.69	72.39	70.69	61.39
870	α -D-Glcp-1R;4R	98.39	77.89	73.69	72.39	70.69	61.39
955	α -D-Glcp-1R;4R	98.69	77.39	73.69	71.59	71.39	61.09
95	α -D-Glcp-1R;4R	99.81	77.21	72.75	71.59	71.25	60.56
96	α -D-Glcp-1R;4R	99.82	76.96	72.76	71.51	71.27	60.56
42	α -D-Glcp-1R;4R	100.24	76.84	73.64	71.54	71.44	60.44
190	α -D-Glcp-1R;4R	100.29	78.19	73.99	72.39	72.09	61.39
189	α -D-Glcp-1R;4R	100.39	78.19	73.99	72.39	72.09	61.39
189	α -D-Glcp-1R;4R	100.39	78.19	73.99	72.39	72.09	61.39
190	α -D-Glcp-1R;4R	100.39	78.19	73.99	72.39	72.09	61.39
189	α -D-Glcp-1R;4R	100.39	78.29	73.99	72.39	72.09	61.39
190	α -D-Glcp-1R;4R	100.39	78.09	73.99	72.39	72.09	61.39
956	α -D-Glcp-1R;4R	100.89	77.09	73.89	72.19	71.39	61.09
95	α -D-Glcp-1R;4R	99.13	76.96	73.52	71.08	70.13	60.56
21	α -D-Glcp-1R;4R	99.71	79.67	72.38	71.77	70.95	60.86
267	α -D-Glcp-1R;4R	99.74	78.33	72.53	72.17	71.39	60.92
19	α -D-Glcp-1R;4R	99.78	78.23	74.14	71.81	70.91	61.38
763	α -D-Glcp-1R;6R	92.69	73.29	71.99	71.59	70.09	66.49
934	α -D-Glcp-1R;6R	92.69	73.49	71.89	71.49	69.89	66.19
672	α -D-Glcp-1R;6R	95.94	73.24	71.94	70.74	69.84	66.34
531	α -D-Glcp-1R;6R	96.55	73.55	71.55	70.55	70.05	66.35
677	α -D-Glcp-1R;6R	98.22	73.45	71.72	71.25	69.64	68.74
634	α -D-Glcp-1R;6R	98.24	73.04	71.94	70.94	69.44	68.04
621	α -D-Glcp-1R;6R	99.24	73.04	72.24	70.34	69.44	68.24
678	α -D-Glcp-1R;6R	99.25	73.25	72.29	70.53	69.39	68.11
176	α -D-Glcp-1R;6R	100.09	73.59	73.29	70.19	70.19	66.39
871	α -D-Glcp-1R;6R	100.09	73.59	73.29	70.19	70.19	66.39
872	α -D-Glcp-1R;6R	100.09	73.59	73.29	70.19	70.18	66.39
935	α -D-Glcp-1R;6R	100.49	73.69	72.29	71.89	69.99	66.49

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
680	α -D-Glcp-1R;6R	100.70	73.90	73.10	71.80	70.20	69.20
1120	α -D-Glcp-1R;6R	100.80	74.00	74.30	70.90	70.90	67.10
622	α -D-Glcp-1R;6R	100.84	73.24	71.84	71.54	70.24	67.14
681	α -D-Glcp-1R;6R	101.31	74.05	73.10	72.33	69.69	69.47
541	α -D-Glcp-1R;6R	96.50	74.00	72.10	71.40	70.40	66.70
685	α -D-Glcp-1R;6R	98.34	73.24	71.84	71.62	70.24	67.14
677	α -D-Glcp-1R;6R	99.88	73.58	72.04	70.96	70.10	66.30
24	α -D-Glcp-1R;6R	100.03	74.00	71.98	70.82	70.46	66.71
67	α -D-Glcp-1R;6R	100.04	74.06	71.86	70.65	70.16	66.24
68	α -D-Glcp-1R;6R	99.96	73.97	71.76	70.58	70.08	66.17
69	α -D-Glcp-1R;6R	100.00	74.03	71.83	70.63	70.15	66.18
70	α -D-Glcp-1R;6R	100.00	74.02	71.83	70.69	70.19	66.13
464	α -D-Glcp-OH	92.70	73.40	72.14	72.10	70.40	61.30
262	α -D-Glcp-OH	92.78	73.57	72.26	72.16	70.50	61.63
271	α -D-Glcp-OH	92.78	73.57	72.26	72.16	70.50	61.63
278	α -D-Glcp-OH	92.78	73.57	72.26	72.16	70.50	61.63
405	α -D-Glcp-OH	92.78	73.57	72.26	72.16	70.50	61.63
415	α -D-Glcp-OH	92.78	73.57	72.26	72.16	70.50	61.63
437	α -D-Glcp-OH	92.78	73.57	72.26	72.16	70.50	61.63
153	α -D-Glcp-OH-2R	92.19	81.19	72.29	71.59	70.19	61.49
789	α -D-Glcp-OH-2R	92.19	81.19	72.29	71.59	70.19	61.49
82	α -D-Glcp-OH-2R	92.32	81.24	72.27	71.61	70.01	61.04
1097	α -D-Glcp-OH-2R	92.80	81.80	72.90	72.20	70.80	62.10
183	α -D-Glcp-OH-3R	91.79	82.99	71.49	70.99	68.59	61.59
878	α -D-Glcp-OH-3R	91.79	82.99	71.49	70.99	68.59	61.59
157	α -D-Glcp-OH-3R	92.49	83.29	71.49	71.19	68.69	61.49
793	α -D-Glcp-OH-3R	92.49	83.29	71.49	71.19	68.69	61.49
1135	α -D-Glcp-OH-4R	92.39	79.49	72.09	71.99	70.69	60.79
86	α -D-Glcp-OH-4R	92.40	79.25	71.96	71.85	70.61	60.54
783	α -D-Glcp-OH-4R	92.49	79.39	71.99	71.79	0.00	60.59
916	α -D-Glcp-OH-4R	92.49	78.99	71.99	71.79	70.69	60.69
929	α -D-Glcp-OH-4R	92.49	78.99	71.99	71.79	70.79	60.69
1138	α -D-Glcp-OH-4R	92.49	79.29	71.89	71.89	70.69	60.59

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
1139	α -D-Glcp-OH-4R	92.49	79.19	71.99	71.99	70.79	60.69
776	α -D-Glcp-OH-4R	92.59	78.29	73.89	72.09	70.89	61.39
886	α -D-Glcp-OH-4R	92.66	79.68	72.28	72.08	70.86	60.74
161	α -D-Glcp-OH-4R	92.69	79.69	72.19	72.09	70.99	60.79
171	α -D-Glcp-OH-4R	92.69	79.59	72.19	72.09	70.99	60.79
189	α -D-Glcp-OH-4R	92.69	78.39	73.89	72.09	70.79	61.39
191	α -D-Glcp-OH-4R	92.69	79.89	72.19	72.19	71.19	60.99
774	α -D-Glcp-OH-4R	92.69	79.59	72.19	72.09	70.99	60.79
882	α -D-Glcp-OH-4R	92.69	79.89	72.19	72.19	71.19	60.99
1106	α -D-Glcp-OH-4R	92.90	78.20	74.30	72.70	71.30	62.20
1109	α -D-Glcp-OH-4R	92.90	79.80	72.60	72.60	71.30	61.50
911	α -D-Glcp-OH-4R	93.29	80.29	72.79	72.09	71.49	62.19
165	α -D-Glcp-OH-6R	92.29	73.49	71.89	70.79	70.09	69.19
797	α -D-Glcp-OH-6R	92.29	73.49	71.89	70.79	70.09	69.19
88	α -D-Glcp-OH-6R	92.58	73.21	71.93	70.84	69.94	69.06
163	α -D-Glcp-OH-6R	92.69	73.89	72.19	70.19	70.19	66.29
795	α -D-Glcp-OH-6R	92.69	73.89	72.19	70.19	70.18	66.29
905	α -D-Glcp-OH-6R	92.79	73.59	72.09	70.69	70.19	66.59
80	α -D-Glcp-OH-6R	92.87	73.79	72.19	70.63	70.20	66.32
173	α -D-Glcp-OH-6R	92.89	73.69	72.39	70.39	70.09	66.59
870	α -D-Glcp-OH-6R	92.89	73.69	72.39	70.39	70.09	66.59
1123	α -D-Glcp-OH-6R	93.10	74.00	72.80	70.90	70.90	69.80
990	α -D-Glcp-OH-6R	93.19	73.89	72.69	71.59	70.99	68.29
1112	α -D-Glcp-OH-6R	93.50	74.70	73.00	71.00	71.00	67.10
1096	β -D-Glcp-1R	98.70	73.90	72.70	72.70	71.00	61.60
805	β -D-Glcp-1R	100.29	77.19	76.69	73.59	70.59	61.69
1092	β -D-Glcp-1R	100.40	77.00	77.00	73.90	70.80	62.20
1092	β -D-Glcp-1R	100.40	77.00	77.00	73.90	70.80	62.20
430	β -D-Glcp-1R	100.76	76.68	76.45	73.85	70.31	61.42
951	β -D-Glcp-1R	100.89	76.69	76.49	73.79	70.39	61.59
32	β -D-Glcp-1R	100.97	76.89	76.66	74.06	70.52	61.63
431	β -D-Glcp-1R	101.14	76.71	76.39	73.66	70.34	61.47
414	β -D-Glcp-1R	101.35	76.58	76.31	73.72	70.21	61.50

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
33	β -D-Glcp-1R	101.35	76.92	76.60	73.87	70.55	61.68
414	β -D-Glcp-1R	102.16	76.82	76.44	74.02	70.35	61.55
430	β -D-Glcp-1R	102.32	76.64	76.26	73.45	70.21	61.36
412	β -D-Glcp-1R	102.35	77.09	76.34	74.15	70.40	61.52
108	β -D-Glcp-1R	102.35	75.83	75.27	72.70	69.23	60.35
117	β -D-Glcp-1R	102.45	76.67	76.23	73.44	70.28	61.43
32	β -D-Glcp-1R	102.53	76.85	76.47	73.66	70.42	61.57
182	β -D-Glcp-1R	102.59	76.89	76.09	0.00	70.09	60.79
875	β -D-Glcp-1R	102.59	76.89	76.09	0.00	70.09	60.89
165	β -D-Glcp-1R	102.79	76.09	76.09	73.49	70.09	61.49
166	β -D-Glcp-1R	102.79	76.09	76.09	73.49	70.09	61.49
797	β -D-Glcp-1R	102.79	76.09	76.09	73.49	70.09	61.49
798	β -D-Glcp-1R	102.79	76.09	76.09	73.49	70.09	61.49
950	β -D-Glcp-1R	102.89	76.69	76.49	73.79	70.69	61.59
831	β -D-Glcp-1R	102.99	76.09	75.69	73.59	69.69	60.89
86	β -D-Glcp-1R	102.99	76.49	74.89	74.77	70.07	61.21
87	β -D-Glcp-1R	102.99	76.49	74.89	74.77	70.07	61.20
157	β -D-Glcp-1R	102.99	76.19	76.19	73.89	70.29	61.49
158	β -D-Glcp-1R	102.99	76.19	76.19	73.89	70.59	61.49
793	β -D-Glcp-1R	102.99	76.19	76.19	73.89	70.29	61.49
794	β -D-Glcp-1R	102.99	76.19	76.19	73.89	70.29	61.49
831	β -D-Glcp-1R	102.99	76.09	75.69	73.29	69.69	60.89
88	β -D-Glcp-1R	103.03	76.26	76.17	73.56	70.10	61.25
429	β -D-Glcp-1R	103.05	76.66	76.62	74.26	70.41	61.48
89	β -D-Glcp-1R	103.07	76.30	76.17	73.56	70.10	61.25
21	β -D-Glcp-1R	103.08	76.67	76.37	73.92	70.30	61.44
218	β -D-Glcp-1R	103.10	76.20	76.10	74.10	70.60	61.10
219	β -D-Glcp-1R	103.10	76.20	76.00	74.10	70.50	61.10
100	β -D-Glcp-1R	103.15	76.25	75.94	73.80	69.94	61.09
22	β -D-Glcp-1R	103.15	76.69	76.39	73.93	70.32	61.46
100	β -D-Glcp-1R	103.15	76.25	75.94	73.48	69.94	61.09
1135	β -D-Glcp-1R	103.19	76.59	76.19	73.79	70.09	61.29
1136	β -D-Glcp-1R	103.19	76.59	76.19	73.79	70.09	61.29

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
1137	β -D-Glcp-1R	103.19	76.59	76.19	73.79	70.19	61.29
1138	β -D-Glcp-1R	103.19	76.59	76.19	73.79	70.19	61.29
1139	β -D-Glcp-1R	103.19	76.69	76.29	73.89	70.19	61.39
1146	β -D-Glcp-1R	103.19	76.69	76.29	73.89	70.19	61.39
194	β -D-Glcp-1R	103.19	76.69	76.69	74.19	70.29	61.49
883	β -D-Glcp-1R	103.19	76.69	76.68	74.19	70.29	61.49
31	β -D-Glcp-1R	103.26	76.87	76.83	74.47	70.62	61.69
183	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.49	74.09	70.49	61.49
184	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.49	74.09	70.49	61.49
877	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.19	73.89	69.99	60.79
878	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.19	73.89	69.99	60.79
191	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.19	74.11	69.99	60.79
192	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.19	74.11	69.99	60.79
882	β -D-Glcp-1R	103.29	76.79	76.49	74.09	70.49	61.49
29	β -D-Glcp-1R	103.34	76.62	76.58	73.84	70.53	61.68
85	β -D-Glcp-1R	103.35	76.57	76.29	74.47	70.24	61.37
27	β -D-Glcp-1R	103.36	76.60	76.55	73.88	70.53	61.68
161	β -D-Glcp-1R	103.39	76.79	76.39	74.09	70.39	61.49
162	β -D-Glcp-1R	103.39	76.79	76.39	74.09	70.39	61.49
949	β -D-Glcp-1R	103.39	76.69	76.49	73.79	70.39	61.59
171	β -D-Glcp-1R	103.39	76.79	76.39	73.99	70.29	61.49
172	β -D-Glcp-1R	103.39	76.79	76.39	73.99	70.29	61.49
773	β -D-Glcp-1R	103.39	76.79	76.39	73.99	70.29	61.49
774	β -D-Glcp-1R	103.39	76.79	76.39	73.99	70.29	61.49
186	β -D-Glcp-1R	103.39	76.89	76.39	73.99	70.29	61.49
1123	β -D-Glcp-1R	103.40	76.80	76.80	74.30	70.70	62.10
1124	β -D-Glcp-1R	103.40	76.80	76.80	74.30	70.70	62.10
18	β -D-Glcp-1R	103.43	76.71	76.36	74.19	70.36	61.51
30	β -D-Glcp-1R	103.43	76.57	76.51	73.81	70.46	61.62
42	β -D-Glcp-1R	103.44	76.24	75.74	73.54	69.44	60.64
84	β -D-Glcp-1R	103.44	76.57	76.29	74.47	70.24	61.37
17	β -D-Glcp-1R	103.46	76.68	76.39	74.21	70.37	61.43
1115	β -D-Glcp-1R	103.50	76.80	76.80	74.20	70.80	62.20

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
598	β -D-Glcp-1R	103.50	76.60	76.40	74.50	70.90	61.50
599	β -D-Glcp-1R	103.50	76.60	76.50	74.50	71.00	61.50
881	β -D-Glcp-1R	103.50	77.00	76.70	74.30	70.70	61.70
676	β -D-Glcp-1R	103.59	77.18	77.09	74.28	71.03	62.11
1105	β -D-Glcp-1R	103.60	76.80	76.80	74.50	70.90	62.10
1109	β -D-Glcp-1R	103.60	77.00	77.00	74.40	70.80	62.10
1110	β -D-Glcp-1R	103.60	77.00	77.00	74.40	70.80	62.10
404	β -D-Glcp-1R	103.62	76.76	76.49	74.27	70.27	61.49
583	β -D-Glcp-1R	103.64	76.14	76.14	73.84	70.04	61.24
591	β -D-Glcp-1R	103.74	76.44	75.84	73.94	69.84	60.64
200	β -D-Glcp-1R	103.74	76.34	75.44	73.74	69.74	60.44
800	β -D-Glcp-1R	103.79	77.09	76.39	73.98	70.59	61.59
270	β -D-Glcp-1R	103.81	76.62	76.56	74.64	70.39	61.55
118	β -D-Glcp-1R	103.95	76.61	76.19	74.15	70.25	61.42
908	β -D-Glcp-1R	103.99	77.39	76.89	74.49	70.99	61.79
909	β -D-Glcp-1R	103.99	77.39	76.89	74.49	70.99	61.79
429	β -D-Glcp-1R	104.05	76.65	76.57	74.04	70.32	61.57
578	β -D-Glcp-1R	104.14	76.14	76.14	73.94	69.94	61.24
153	β -D-Glcp-1R	104.19	76.29	76.29	73.99	70.19	61.49
789	β -D-Glcp-1R	104.19	76.29	76.29	73.99	70.19	61.49
976	β -D-Glcp-1R	104.19	76.99	76.99	74.89	70.59	61.69
977	β -D-Glcp-1R	104.19	76.99	76.79	74.89	70.59	61.69
996	β -D-Glcp-1R	104.19	76.69	76.19	73.89	69.99	61.19
121	β -D-Glcp-1R	104.22	76.51	76.41	74.13	70.30	61.43
31	β -D-Glcp-1R	104.26	76.86	76.78	74.25	70.53	61.78
814	β -D-Glcp-1R	104.29	76.19	75.99	73.89	69.89	61.39
82	β -D-Glcp-1R	104.33	76.21	76.21	73.86	70.01	61.37
15	β -D-Glcp-1R	104.38	76.55	76.44	74.04	70.36	61.62
973	β -D-Glcp-1R	104.39	76.79	76.49	74.29	70.29	61.49
890	β -D-Glcp-1R	104.39	76.79	76.78	74.89	70.49	61.59
122	β -D-Glcp-1R	104.41	76.59	76.59	74.48	70.45	61.59
710	β -D-Glcp-1R	104.49	77.09	77.00	74.99	70.79	61.89
822	β -D-Glcp-1R	104.49	77.09	77.08	74.99	70.79	61.89

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
995	β -D-Glcp-1R	104.69	76.49	76.29	74.09	70.09	61.29
862	β -D-Glcp-1R	104.70	77.10	77.10	75.10	70.80	62.10
708	β -D-Glcp-1R	104.79	76.89	76.89	74.19	71.09	61.99
1097	β -D-Glcp-1R	104.80	76.90	76.90	74.60	70.80	62.10
403	β -D-Glcp-1R	104.81	76.57	76.40	74.19	70.27	61.46
972	β -D-Glcp-1R	105.09	76.79	76.49	74.29	70.29	61.49
266	β -D-Glcp-1R	103.92	76.57	76.57	73.78	70.48	61.61
276	β -D-Glcp-1R	103.92	76.57	76.57	73.78	70.48	61.61
281	β -D-Glcp-1R	103.92	76.57	76.57	73.78	70.48	61.61
398	β -D-Glcp-1R	103.92	76.57	76.57	73.78	70.48	61.61
1128	β -D-Glcp-1R	104.20	77.00	77.00	74.30	70.90	62.10
471	β -D-Glcp-1R	104.30	76.90	76.90	74.20	70.80	61.90
261	β -D-Glcp-1R;2R	103.00	80.68	76.98	76.36	70.37	61.60
12	β -D-Glcp-1R;2R	104.43	78.46	76.36	75.20	70.65	61.63
1096	β -D-Glcp-1R;2R	104.70	78.70	76.80	75.50	70.50	62.20
677	β -D-Glcp-1R;3R	102.35	83.94	76.21	72.75	70.16	60.92
182	β -D-Glcp-1R;3R	102.59	87.59	76.39	71.99	68.39	60.99
875	β -D-Glcp-1R;3R	102.59	87.59	76.39	71.99	68.39	60.99
18	β -D-Glcp-1R;3R	103.65	85.74	76.23	73.30	69.02	61.59
44	β -D-Glcp-1R;3R	103.70	85.60	76.30	73.40	69.10	61.60
388	β -D-Glcp-1R;3R	103.98	85.10	76.27	72.58	68.91	61.43
1139	β -D-Glcp-1R;4R	96.39	74.99	74.79	79.19	75.49	60.69
259	β -D-Glcp-1R;4R	101.80	79.20	75.00	74.70	73.70	60.90
676	β -D-Glcp-1R;4R	102.70	78.33	76.72	74.77	74.95	62.33
183	β -D-Glcp-1R;4R	102.79	80.49	74.79	74.39	72.99	60.49
184	β -D-Glcp-1R;4R	102.79	80.49	74.79	74.39	72.99	60.49
877	β -D-Glcp-1R;4R	102.89	78.79	75.39	74.69	73.49	61.29
878	β -D-Glcp-1R;4R	102.89	78.79	75.39	74.69	73.49	61.29
883	β -D-Glcp-1R;4R	102.96	79.29	75.89	75.19	74.09	60.79
883	β -D-Glcp-1R;4R	102.97	79.29	75.87	75.19	74.09	60.77
883	β -D-Glcp-1R;4R	102.98	79.29	75.89	75.19	74.09	60.78
194	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.29	75.89	75.19	74.09	60.79
883	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.39	75.88	75.19	74.09	60.79

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
1137	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	73.59	74.69	79.09	75.49	60.59
1138	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	73.59	74.69	79.09	75.49	60.59
1146	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.09	75.49	74.79	73.59	60.69
194	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.29	75.89	75.19	74.09	60.79
1139	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	73.59	74.79	79.09	75.49	60.69
1146	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.09	75.49	74.79	73.59	60.69
194	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.29	75.89	75.19	74.09	60.79
194	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	79.29	75.89	75.19	74.09	60.79
881	β -D-Glcp-1R;4R	103.07	79.37	75.67	74.97	73.87	60.97
881	β -D-Glcp-1R;4R	103.08	79.38	75.68	74.98	73.88	60.98
882	β -D-Glcp-1R;4R	103.08	79.38	75.68	74.98	73.88	60.97
191	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
192	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
881	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
882	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.98
191	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
192	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
191	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
192	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.39	75.69	74.99	73.89	60.99
882	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	79.37	75.67	74.97	73.87	60.96
107	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.00	75.60	74.90	73.70	61.50
109	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.00	75.60	74.90	73.70	61.50
110	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.00	75.60	74.90	73.70	61.50
107	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.00	75.60	74.90	73.80	61.50
184	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.01	75.59	74.91	73.69	61.50
108	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.00	75.60	74.90	73.70	61.50
107	β -D-Glcp-1R;4R	103.10	79.10	75.50	74.90	73.70	61.50
183	β -D-Glcp-1R;4R	103.11	79.01	75.58	74.90	73.72	61.49
171	β -D-Glcp-1R;4R	103.19	79.29	75.69	74.89	73.79	60.79
172	β -D-Glcp-1R;4R	103.19	79.29	75.69	74.89	73.79	60.79
186	β -D-Glcp-1R;4R	103.19	79.29	75.69	74.89	73.79	60.79
773	β -D-Glcp-1R;4R	103.19	79.29	75.69	74.89	73.79	60.79
774	β -D-Glcp-1R;4R	103.19	79.29	75.69	74.89	73.79	60.79

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
186	β -D-Glcp-1R;4R	103.19	79.19	75.69	74.89	73.79	60.79
108	β -D-Glcp-1R;4R	103.20	79.00	75.60	74.90	73.70	61.50
9	β -D-Glcp-1R;4R	103.20	78.90	75.66	75.00	73.70	60.70
108	β -D-Glcp-1R;4R	103.20	79.00	75.60	74.90	73.70	61.50
109	β -D-Glcp-1R;4R	103.20	79.10	75.60	74.90	73.80	61.50
107	β -D-Glcp-1R;4R	103.20	79.00	75.60	74.80	73.70	61.50
668	β -D-Glcp-1R;4R	103.22	76.92	76.62	75.22	73.82	0.00
1062	β -D-Glcp-1R;4R	103.22	76.92	76.62	75.22	73.82	0.00
9	β -D-Glcp-1R;4R	103.50	79.30	75.57	75.00	73.70	60.70
877	β -D-Glcp-1R;4R	103.69	80.49	74.79	74.39	73.59	60.29
878	β -D-Glcp-1R;4R	103.69	80.49	74.79	74.39	73.59	60.29
10	β -D-Glcp-1R;4R	103.70	79.00	75.70	74.90	73.70	60.80
921	β -D-Glcp-1R;4R	103.99	80.39	76.79	75.79	73.99	61.79
922	β -D-Glcp-1R;4R	103.99	80.39	76.79	75.79	73.99	61.79
182	β -D-Glcp-1R;4R	103.99	80.59	74.89	74.69	73.69	60.59
875	β -D-Glcp-1R;4R	103.99	80.59	74.89	74.69	73.69	60.59
674	β -D-Glcp-1R;4R	102.89	79.19	75.09	74.49	73.59	0.00
678	β -D-Glcp-1R;4R	102.90	79.16	75.24	74.64	73.47	60.73
680	β -D-Glcp-1R;4R	103.33	80.00	76.21	75.57	74.37	61.57
681	β -D-Glcp-1R;4R	103.72	80.07	76.21	75.57	74.37	61.54
108	β -D-Glcp-1R;4R	102.87	78.28	74.59	74.06	72.97	59.75
110	β -D-Glcp-1R;4R	102.94	78.36	74.62	74.13	72.99	59.81
90	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	78.69	74.69	74.49	72.79	60.29
815	β -D-Glcp-1R;4R	102.99	78.69	74.69	74.49	72.79	60.29
247	β -D-Glcp-1R;4R	103.09	78.65	74.62	74.46	72.82	60.10
22	β -D-Glcp-1R;4R	103.11	78.39	74.71	74.07	73.08	59.91
246	β -D-Glcp-1R;4R	103.12	78.61	74.82	74.47	72.84	60.23
249	β -D-Glcp-1R;4R	103.20	79.16	74.83	74.38	72.99	60.22
195	β -D-Glcp-1R;4R	103.59	79.09	75.39	74.99	73.39	60.39
49	β -D-Glcp-1R;4R	103.69	77.59	76.79	75.19	73.59	61.39
50	β -D-Glcp-1R;4R	103.69	76.89	76.79	75.19	73.79	61.39
20	β -D-Glcp-1R;4R	103.78	78.09	76.84	75.35	73.63	61.56
47	β -D-Glcp-1R;4R	103.79	78.80	75.40	75.12	73.63	60.96

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
832	β -D-Glcp-1R;4R	103.99	78.79	75.49	75.19	72.89	60.79
45	β -D-Glcp-1R;4R	104.09	79.11	75.39	75.10	73.42	61.19
48	β -D-Glcp-1R;4R	104.09	79.11	75.60	75.09	73.42	61.19
6	β -D-Glcp-1R;4R	104.19	78.68	75.01	74.71	72.00	61.11
746	β -D-Glcp-1R;4R	104.19	78.49	77.59	75.89	74.39	62.09
188	β -D-Glcp-1R;6R	0.00	75.59	74.69	72.79	69.49	68.59
187	β -D-Glcp-1R;6R	102.39	75.39	74.69	72.79	69.39	68.59
879	β -D-Glcp-1R;6R	102.39	75.39	74.69	72.78	69.39	68.59
880	β -D-Glcp-1R;6R	102.39	75.39	74.69	72.78	69.39	68.59
187	β -D-Glcp-1R;6R	102.49	75.39	74.69	72.79	69.49	68.59
879	β -D-Glcp-1R;6R	102.49	75.39	74.69	72.79	69.49	68.59
880	β -D-Glcp-1R;6R	102.49	75.39	74.69	72.79	69.49	68.59
188	β -D-Glcp-1R;6R	102.49	75.59	74.69	72.79	69.39	68.59
179	β -D-Glcp-1R;6R	102.59	75.39	74.69	72.79	69.39	68.29
180	β -D-Glcp-1R;6R	102.59	75.39	74.69	72.79	69.39	68.29
873	β -D-Glcp-1R;6R	102.59	75.39	74.69	72.79	69.39	68.29
874	β -D-Glcp-1R;6R	102.59	75.39	74.69	72.79	69.39	68.29
862	β -D-Glcp-1R;6R	103.29	76.29	75.29	73.19	69.59	67.99
1123	β -D-Glcp-1R;6R	103.40	74.30	76.80	70.90	75.80	69.80
1124	β -D-Glcp-1R;6R	103.40	74.30	76.80	70.90	75.80	69.80
590	β -D-Glcp-1R;6R	103.90	76.90	75.50	74.40	70.50	67.00
35	β -D-Glcp-1R;6R	105.08	75.79	75.50	73.38	69.88	68.51
30	β -D-Glcp-1R;6R	103.97	76.51	75.63	73.72	70.38	69.31
196	β -D-Glcp-1R;6R	103.99	76.19	75.49	73.59	69.89	68.99
890	β -D-Glcp-1R;6R	104.19	76.99	75.89	74.09	70.39	69.39
9	β -D-Glcp-1R;6R	104.20	76.50	75.70	73.90	70.20	69.40
35	β -D-Glcp-1R;6R	104.46	76.81	75.79	73.77	70.20	69.41
805	β -D-GlcpN-1R	101.19	77.09	76.59	70.59	61.69	56.89
1024	β -D-GlcpN-1R	101.49	76.99	76.09	70.29	60.89	56.59
1023	β -D-GlcpN-1R	102.49	76.99	76.29	70.29	60.89	56.59
810	β -D-GlcpN-1R	103.99	77.29	76.29	70.59	61.69	57.39
716	β -D-GlcpN-1R;3R	104.29	86.49	76.19	68.79	61.39	56.19
1023	β -D-GlcpN-OH-4R	93.19	77.29	75.19	70.99	60.89	57.29

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
470	β -D-Glcp-OH	96.50	76.60	76.40	74.80	70.30	61.50
263	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
272	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
279	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
406	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
416	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
432	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
438	β -D-Glcp-OH	96.63	76.55	76.55	74.99	70.50	61.63
1126	β -D-Glcp-OH	96.80	77.00	77.00	75.30	70.80	62.10
284	β -D-Glcp-OH	96.84	76.76	76.76	75.20	70.71	61.84
152	β -D-Glcp-OH-2R	96.89	79.29	76.49	75.19	70.49	61.39
788	β -D-Glcp-OH-2R	96.89	79.29	76.49	75.19	70.49	61.39
1095	β -D-Glcp-OH-2R	97.20	79.60	76.80	75.50	70.80	61.70
158	β -D-Glcp-OH-3R	96.29	85.79	76.19	73.89	68.69	61.49
794	β -D-Glcp-OH-3R	96.29	85.79	76.19	73.89	68.69	61.49
85	β -D-Glcp-OH-3R	96.32	85.30	76.09	74.14	68.90	61.23
184	β -D-Glcp-OH-3R	96.39	86.00	76.49	73.29	68.59	61.59
877	β -D-Glcp-OH-3R	96.39	85.69	76.49	73.29	68.59	61.59
1105	β -D-Glcp-OH-3R	96.90	86.40	76.80	74.50	69.30	62.10
87	β -D-Glcp-OH-4R	96.33	79.25	76.17	75.36	74.57	60.68
782	β -D-Glcp-OH-4R	96.39	79.39	0.00	74.99	74.49	60.69
915	β -D-Glcp-OH-4R	96.39	78.79	75.39	74.99	74.49	60.89
1136	β -D-Glcp-OH-4R	96.39	79.29	75.39	74.89	74.59	60.89
1137	β -D-Glcp-OH-4R	96.39	79.29	75.49	74.89	74.59	60.59
1146	β -D-Glcp-OH-4R	96.39	79.19	75.49	74.99	74.79	60.69
928	β -D-Glcp-OH-4R	96.49	78.89	75.39	75.19	74.49	60.69
162	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.59	75.59	75.19	74.79	60.99
172	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.39	75.69	75.09	74.79	60.89
186	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.39	75.69	75.09	74.79	60.89
192	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.69	75.69	75.19	74.79	61.19
773	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.39	75.69	75.09	74.79	60.89
881	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.69	75.69	75.19	74.79	61.19
885	β -D-Glcp-OH-4R	96.59	79.82	75.58	75.22	74.73	60.92

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
166	β -D-Glcp-OH-6R	96.19	76.09	75.09	74.49	70.09	66.38
904	β -D-Glcp-OH-6R	96.39	76.49	74.99	74.69	70.09	66.49
89	β -D-Glcp-OH-6R	96.43	76.19	75.56	74.57	69.98	66.69
164	β -D-Glcp-OH-6R	96.59	75.99	74.79	74.79	70.19	66.29
796	β -D-Glcp-OH-6R	96.59	75.99	74.79	74.78	70.19	66.29
174	β -D-Glcp-OH-6R	96.79	76.79	74.89	74.89	70.09	66.59
869	β -D-Glcp-OH-6R	96.79	76.79	74.89	74.89	70.09	66.59
1115	β -D-Glcp-OH-6R	96.90	76.80	75.80	75.20	70.80	69.90
1124	β -D-Glcp-OH-6R	97.00	76.50	75.80	75.20	70.90	69.80
989	β -D-Glcp-OH-6R	97.19	76.99	75.89	75.29	70.99	68.09
81	β -D-Glcp-OH-6R	97.75	76.70	74.90	74.86	70.26	66.44

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.2 Galactose

Tabelle 96. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen Galactose
in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
662	α -D-Galp-1R	98.73	71.59	70.22	69.86	69.05	61.71
905	α -D-Galp-1R	98.79	71.59	70.09	69.79	69.09	61.69
98	α -D-Galp-1R	98.9	71.6	70.1	69.9	68.8	61.8
917	α -D-Galp-1R	98.99	71.59	69.99	69.89	69.09	61.69
918	α -D-Galp-1R	98.99	71.59	69.99	69.89	69.09	61.69
763	α -D-Galp-1R	99.09	71.59	70.09	69.79	69.09	61.69
920	α -D-Galp-1R	99.39	71.89	70.09	69.89	69.09	61.79
919	α -D-Galp-1R	99.49	71.89	70.09	69.89	69.09	61.79
996	α -D-Galp-1R	100.29	71.19	69.89	69.69	69.09	61.29
49	α -D-Galp-1R	100.49	72.39	69.89	69.79	69.39	61.79
832	α -D-Galp-1R	101.09	71.69	69.89	69.69	69.29	61.29
816	α -D-Galp-1R	101.19	71.69	69.79	69.69	69.09	61.29
807	α -D-Galp-1R	101.39	72.69	70.09	70.08	69.29	62.09
887	α -D-Galp-1R	101.89	71.99	69.99	69.98	69.49	61.99
454	α -D-Galp-1R	100.09	71.39	70.19	69.89	68.89	61.89
282	α -D-Galp-1R	100.14	71.33	70.25	69.98	68.96	61.85

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
299	α -D-Galp-1R	100.14	71.33	70.25	69.98	68.96	61.85
399	α -D-Galp-1R	100.14	71.33	70.25	69.98	68.96	61.85
483	α -D-Galp-1R	100.5	71.8	70.6	70.4	69.4	62.3
435	α -D-Galp-OH	92.97	71.09	70.07	69.92	69.14	61.83
482	α -D-Galp-OH	93.6	71.7	70.63	70.56	69.8	62.5
766	α -D-Galp-OH-3R	92.15	79.25	69.95	68.95	67.25	61.05
854	α -D-Galp-OH-3R	93.09	76.99	71.29	68.19	67.29	62.09
984	α -D-Galp-OH-3R	93.09	76.89	71.39	67.89	67.29	62.09
856	α -D-Galp-OH-3R	93.29	78.29	71.39	70.19	68.69	61.69
866	α -D-Galp-OH-3R	93.29	78.39	71.49	70.09	69.49	61.99
858	α -D-Galp-OH-3R	93.39	78.49	71.69	70.19	69.59	62.09
864	α -D-Galp-OH-3R	93.39	78.49	71.69	70.09	69.59	61.99
981	α -D-Galp-OH-3R	93.39	78.19	71.49	70.19	69.59	62.09
986	α -D-Galp-OH-4R	93.69	78.29	72.69	70.39	69.79	62.19
768	α -D-Galp-OH-6R	92.35	69.35	69.35	69.15	69.15	68.35
998	α -D-Galp-OH-6R	92.99	69.99	69.69	69.68	69.09	68.89
988	α -D-Galp-OH-6R	93.39	70.49	70.09	69.99	69.39	68.49
455	α -D-Galp-1R;2R	97.29	74.1	72.48	71.81	69.9	61.79
288	α -D-Galp-1R;2R	99.52	77.82	71.09	70.02	69.12	61.71
814	α -D-Galp-1R;3R	99.79	80.19	70.89	69.39	67.69	61.69
54	α -D-Galp-1R;3R	99.95	80.05	70.75	69.25	68.05	61.65
121	α -D-Galp-1R;3R	100.04	80.11	71.03	69.65	68	61.77
122	α -D-Galp-1R;4R	100.16	78.97	70.78	70.65	69.43	61.59
120	α -D-Galp-1R;4R	100.19	79.49	71.71	69.92	69.21	61.16
816	α -D-Galp-1R;4R	100.19	79.59	71.69	69.89	69.29	61.29
23	α -D-Galp-1R;6R	100.15	70.19	70.03	69.28	68.94	67.43
55	α -D-Galp-1R;6R	100.15	70.05	69.85	69.75	69.25	68.75
41	α -D-Galp-1R;6R	100.19	70.09	69.89	69.29	68.99	67.19
37	α -D-Galp-1R;6R	100.2	70.1	69.9	69.8	69.7	68.7
27	α -D-Galp-1R;6R	100.26	70.09	70.07	69.99	69.64	68.91
428	α -D-Galp-1R;6R	100.28	70.1	69.9	69.41	69.05	68.88
427	α -D-Galp-1R;6R	100.32	70.15	70.15	70.03	68.87	67.85
577	β -D_L-Galp-1R	102.64	75.44	73.34	71.84	68.94	61.04

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
725	β -D_L-Galp-1R	102.69	75.79	74.29	71.39	69.19	62.29
778	β -D_L-Galp-1R	102.79	75.19	72.39	70.89	68.39	60.89
779	β -D_L-Galp-1R	102.79	75.19	72.39	70.89	68.39	60.89
90	β -D_L-Galp-1R	102.89	75.29	72.79	70.99	68.69	60.99
638	β -D_L-Galp-1R	102.89	76.59	73.99	71.89	70.29	62.39
815	β -D_L-Galp-1R	102.89	75.29	72.79	70.99	68.69	60.99
248	β -D_L-Galp-1R	102.92	75.37	72.58	71	68.6	61.03
248	β -D_L-Galp-1R	102.92	75.37	72.58	71	68.6	61.03
247	β -D_L-Galp-1R	102.96	75.36	72.64	71.03	68.61	60.99
564	β -D_L-Galp-1R	103.04	75.44	73.14	71.94	69.04	61.04
576	β -D_L-Galp-1R	103.04	75.64	73.24	71.64	68.94	61.24
215	β -D_L-Galp-1R	103.09	76.39	72.99	71.59	69.39	61.99
564	β -D_L-Galp-1R	103.14	75.64	73.24	71.64	69.04	61.24
767	β -D_L-Galp-1R	103.15	75.15	72.65	70.85	68.65	61.05
768	β -D_L-Galp-1R	103.15	75.15	72.65	70.85	68.65	61.05
940	β -D_L-Galp-1R	103.19	75.79	73.49	71.49	69.49	61.89
589	β -D_L-Galp-1R	103.24	75.54	73.34	71.64	69.04	61.24
216	β -D_L-Galp-1R	103.29	76.39	73.89	72.49	69.69	62.09
10	β -D_L-Galp-1R	103.3	76.1	73.3	71.8	69.4	61.8
572	β -D_L-Galp-1R	103.34	75.64	73.14	71.24	68.94	61.24
726	β -D_L-Galp-1R	103.49	75.49	73.09	71.29	69.09	62.29
720	β -D_L-Galp-1R	103.59	75.99	73.19	71.59	69.19	61.59
195	β -D_L-Galp-1R	103.69	75.99	73.19	71.59	69.19	61.59
939	β -D_L-Galp-1R	103.69	75.79	73.49	71.49	69.49	61.89
60	β -D_L-Galp-1R	103.77	76.07	73.11	71.47	69.37	61.87
259	β -D_L-Galp-1R	103.8	75.6	73.36	71.8	69.4	61.9
7	β -D_L-Galp-1R	103.8	76.2	73.4	71.7	69.4	61.8
8	β -D_L-Galp-1R	103.8	76.1	73.5	71.7	69.4	60.6
9	β -D_L-Galp-1R	103.8	76.2	73.4	71.8	69.4	61.8
623	β -D_L-Galp-1R	103.82	75.82	73.22	71.52	69.32	61.62
1021	β -D_L-Galp-1R	103.89	76.39	73.69	72.09	69.69	62.09
1022	β -D_L-Galp-1R	103.89	76.89	73.69	72.09	69.69	62.09
99	β -D_L-Galp-1R	103.9	75.8	73.3	71.35	69.3	61.6

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$
55	β -D_L-Galp-1R	103.95	75.75	73.25	71.35	69.75	61.65
686	β -D_L-Galp-1R	104.04	75.14	73.44	71.44	68.64	61.24
105	β -D_L-Galp-1R	104.07	75.79	73.42	71.38	69.61	61.69
291	β -D_L-Galp-1R	104.09	75.92	73.31	71.44	69.24	61.6
719	β -D_L-Galp-1R	104.09	75.89	73.19	71.39	69.19	61.59
6	β -D_L-Galp-1R	104.09	76.01	73.18	71.62	69.28	61.21
741	β -D_L-Galp-1R	104.09	76.49	73.69	72.09	69.69	62.09
849	β -D_L-Galp-1R	104.09	76.49	73.69	72.09	69.69	62.09
1032	β -D_L-Galp-1R	104.09	75.99	73.79	72.19	69.79	62.09
1033	β -D_L-Galp-1R	104.09	75.99	73.79	72.19	69.79	62.19
1045	β -D_L-Galp-1R	104.09	76.39	73.69	72.09	69.69	62.09
44	β -D_L-Galp-1R	104.1	76.1	73.4	72	69.4	61.8
37	β -D_L-Galp-1R	104.1	75.8	73.2	71.2	69.4	61.8
106	β -D_L-Galp-1R	104.11	75.89	73.48	71.47	69.71	61.7
765	β -D_L-Galp-1R	104.15	74.95	72.45	70.95	68.45	60.85
766	β -D_L-Galp-1R	104.15	74.95	72.45	70.95	68.45	60.85
771	β -D_L-Galp-1R	104.15	76.35	73.85	71.95	69.55	62.05
772	β -D_L-Galp-1R	104.15	75.85	73.45	71.65	69.55	62.25
731	β -D_L-Galp-1R	104.19	75.39	72.89	71.49	68.89	61.39
45	β -D_L-Galp-1R	104.19	76.49	73.69	72.09	69.69	62.09
48	β -D_L-Galp-1R	104.19	76.49	73.69	72.09	69.69	62.09
589	β -D_L-Galp-1R	104.24	75.34	73.34	71.44	69.04	61.24
47	β -D_L-Galp-1R	104.29	75.69	73.3	71.88	69.15	61.61
71	β -D_L-Galp-1R	104.34	77.81	75	73.91	72	61.2
806	β -D_L-Galp-1R	104.39	76.29	73.89	71.79	69.39	61.99
744	β -D_L-Galp-1R	104.59	76.49	73.69	72.09	69.69	62.19
744	β -D_L-Galp-1R	104.59	76.49	73.69	72.09	69.69	62.19
850	β -D_L-Galp-1R	104.59	76.79	73.99	72.49	69.99	62.39
833	β -D_L-Galp-1R	104.69	76.29	73.59	72.29	69.09	61.69
995	β -D_L-Galp-1R	104.69	75.69	72.99	72.19	69.09	61.29
968	β -D_L-Galp-1R	104.69	76.19	73.79	72.69	69.59	61.89
969	β -D_L-Galp-1R	104.69	76.19	73.79	72.69	69.59	61.89
652	β -D_L-Galp-1R	104.8	76.2	73.7	72.1	69.4	61.3

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
583	β -D_L-Galp-1R	104.84	75.44	73.04	71.54	69.04	60.74
962	β -D_L-Galp-1R	104.89	75.99	73.49	71.99	69.49	61.99
928	β -D_L-Galp-1R	104.89	75.69	73.29	71.89	69.19	61.69
929	β -D_L-Galp-1R	104.89	75.69	73.29	71.89	69.19	61.69
72	β -D_L-Galp-1R	104.9	75.75	73.41	71.91	69.27	61.66
54	β -D_L-Galp-1R	104.95	75.75	73.25	71.55	69.85	61.55
915	β -D_L-Galp-1R	104.99	75.69	73.19	71.69	69.19	61.59
916	β -D_L-Galp-1R	104.99	75.69	73.19	71.69	69.19	61.59
56	β -D_L-Galp-1R	105.07	75.87	72.67	72.07	69.27	61.77
292	β -D_L-Galp-1R	105.07	75.62	73.34	71.43	69.32	61.64
964	β -D_L-Galp-1R	105.29	76.09	73.59	72.19	69.69	62.39
965	β -D_L-Galp-1R	105.29	76.09	73.59	72.19	69.69	62.39
903	β -D_L-Galp-1R	105.29	75.49	73.29	71.39	67.99	61.59
217	β -D_L-Galp-1R	105.29	76.29	73.79	72.09	69.79	62.19
764	β -D_L-Galp-1R	105.39	75.49	73.39	71.49	68.99	61.19
242	β -D_L-Galp-1R	105.6	76.3	73.8	72.3	69.9	62.2
961	β -D_L-Galp-1R	105.69	75.99	73.49	71.99	69.49	61.99
283	β -D_L-Galp-1R	104.51	75.71	73.58	71.43	69.41	61.63
301	β -D_L-Galp-1R	104.51	75.71	73.58	71.43	69.41	61.63
489	β -D_L-Galp-1R	104.9	76.2	73.9	71.8	69.8	62.1
295	β -D-Galp-OH	97.16	75.72	73.57	72.75	69.48	61.63
488	β -D-Galp-OH	97.7	76.3	74.2	73.3	70.1	62.3
765	β -D-Galp-OH-3R	96.05	82.35	74.65	70.85	68.45	60.85
855	β -D-Galp-OH-3R	97.29	81.59	75.99	72.19	69.49	61.69
862	β -D-Galp-OH-3R	97.29	81.59	76.39	72.49	69.59	61.89
982	β -D-Galp-OH-3R	97.29	81.59	76.09	72.29	68.69	61.89
983	β -D-Galp-OH-3R	97.29	80.19	75.89	72.09	66.69	61.99
853	β -D-Galp-OH-3R	97.39	80.29	75.89	71.99	66.69	61.89
857	β -D-Galp-OH-3R	97.39	81.79	76.19	72.29	68.69	61.99
865	β -D-Galp-OH-3R	97.39	81.69	76.39	72.29	68.89	61.99
242	β -D-Galp-OH-3R	97.4	83.7	76	70.5	69.9	62.2
863	β -D-Galp-OH-3R	97.49	81.59	76.39	72.39	67.89	61.99
907	β -D-Galp-OH-4R	97.69	78.39	76.09	72.89	72.88	61.19

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
985	β -D-Galp-OH-4R	97.79	81.69	76.19	71.49	69.09	61.99
767	β -D-Galp-OH-6R	96.45	73.85	72.65	71.85	68.85	68.65
997	β -D-Galp-OH-6R	97.19	73.99	73.39	72.49	69.39	67.49
987	β -D-Galp-OH-6R	97.59	74.49	73.89	72.99	69.79	67.99
817	β -D-Galp-1R;2R	102.99	79.09	75.69	73.39	69.39	61.49
833	β -D-Galp-1R;2R	103.19	78.79	75.69	73.19	69.29	61.39
97	β -D-Galp-1R;3R	104.46	78	75.2	72.6	70.1	61.04
290	β -D-Galp-1R;3R	104.51	82.81	75.31	70.46	69.02	61.57
72	β -D-Galp-1R;4R	104.36	75.6	73.5	71.4	69.1	61.16
71	β -D-Galp-1R;4R	105	75.78	73.42	71.3	69.25	61.61
219	β -D-Galp-1R;6R	104.1	73.4	72.9	70.9	70	69
98	β -D-Galp-1R;6R	104.4	73.5	73.4	71.3	69.3	66.9
25	β -D-Galp-1R;6R	104.44	73.67	73.54	71.4	69.51	67.29
29	β -D-Galp-1R;6R	104.47	74.44	73.49	71.37	69.49	69.49
463	β -D-Galp-1R;6R	104.49	76.6	74.2	73.6	69.39	64.49
99	β -D-Galp-1R;6R	104.5	74.4	73.3	71.35	69.5	69.3
598	β -D-Galp-1R;6R	104.5	73.8	73.3	71.3	70.4	69.4
105	β -D-Galp-1R;6R	104.55	74.47	73.33	71.38	69.61	69.34
106	β -D-Galp-1R;6R	104.67	74.61	73.48	71.47	69.53	69.42

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.3 Mannose**Tabelle 97.** Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen Mannose
in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
255	α -D-Manp-1R	99.64		71.24	70.64	67.34			
256	α -D-Manp-1R	99.64		71.44	71.04	67.84			
255	α -D-Manp-1R	99.84	73.34	71.34	70.64	67.44	61.54		
258	α -D-Manp-1R	99.94	73.44	71.34	70.74	67.44	61.74		
826	α -D-Manp-1R	100.09	73.39	71.29	70.59	67.49	61.59		
253	α -D-Manp-1R	100.14		71.44	70.84	67.64			
257	α -D-Manp-1R	100.14	73.44	71.44	70.84	67.64	61.74		
258	α -D-Manp-1R	100.14	73.44	71.34	70.74	67.44	61.74		

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
254	α -D-Manp-1R	100.24	73.24	71.24	70.64	67.44	61.74		
113	α -D-Manp-1R	100.28	73.44	71.43	70.74	67.55	61.71		
36	α -D-Manp-1R	100.3	73.6	71.5	70.8	67.7	61.5		
596	α -D-Manp-1R	100.4	73.5	71.4	70.7	67.5	61.7		
3	α -D-Manp-1R	100.49	73.82	70.81	70.58	67.3	61.11		
3	α -D-Manp-1R	100.49	73.2	71.78	71.52	68.31	61.52		
699	α -D-Manp-1R	100.54	74.04	70.84	70.84	67.14	61.54		
104	α -D-Manp-1R	100.59	73.89	71.79	71.09	67.99	62.09		
825	α -D-Manp-1R	100.79	73.79	71.19	70.49	67.69	61.09		
568	α -D-Manp-1R	101.24	74.24	70.94	70.94	67.24	61.74		
103	α -D-Manp-1R	101.29	74.29	71.69	70.99	67.89	61.59		
910	α -D-Manp-1R	101.49	73.39	70.79	70.78	67.49	61.99		
780	α -D-Manp-1R	101.5	74.2	71.3	71.1	67.4	62.4		
781	α -D-Manp-1R	101.5	74.2	71.3	71.1	67.4	62.4		
356	α -D-Manp-1R	101.6	74.8	71.8	70.9	68.2	62.3		
360	α -D-Manp-1R	101.6	74.7	71.6	71.3	68.1	62.3		
50	α -D-Manp-1R	101.89	74.29	70.89	70.89	67.19	61.49		
94	α -D-Manp-1R	102	73.9	71.9	71.6	67.5	61.9		
364	α -D-Manp-1R	102.1	74.8	71.6	71.4	67.9	62.4		
1042	α -D-Manp-1R	102.19	73.79	71.29	71.09	68.19	61.49		
978	α -D-Manp-1R	102.29	73.89	71.29	71.29	67.49	61.69		
855	α -D-Manp-1R	102.29	74.09	71.39	71.39	67.59	61.69		
856	α -D-Manp-1R	102.29	74.09	71.39	71.38	67.59	61.69		
888	α -D-Manp-1R	102.29	73.99	71.39	71.38	67.49	61.69		
810	α -D-Manp-1R	102.39	74.49	71.09	70.59	67.49	61.69		
93	α -D-Manp-1R	102.4	74.7	71.3	71.3	67.6	62.1		
853	α -D-Manp-1R	102.49	74.19	71.29	71.28	67.59	61.79		
854	α -D-Manp-1R	102.49	74.19	71.29	71.29	67.59	61.79		
51	α -D-Manp-1R	102.5	74.3	71.5	71.2	67.9	62.1		
256	α -D-Manp-1R	102.54	74.34	71.44	71.14	67.84	62.04		
256	α -D-Manp-1R	102.64	74.34	71.64	71.14	67.84	62.04		
255	α -D-Manp-1R	102.64	74.04	70.94	70.64	67.44	61.54		
1038	α -D-Manp-1R	102.69	73.89	70.99	70.59	67.59	61.69		

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
376	α -D-Manp-1R	102.7	74.6	71.8	71.7	68.2	62.3		
254	α -D-Manp-1R	102.74	73.84	71.04	70.64	67.44	61.54		
112	α -D-Manp-1R	102.76	73.93	71.16	70.76	67.59	61.6		
111	α -D-Manp-1R	102.78	73.92	71.12	70.66	67.66	61.82		
823	α -D-Manp-1R	102.79	73.89	71.49	71.49	67.59	61.59		
257	α -D-Manp-1R	102.84	74.04	71.24	70.84	67.64	61.74		
254	α -D-Manp-1R	102.84		71.04	70.64	67.44			
257	α -D-Manp-1R	102.84	74.04	71.24	70.84	67.64	61.74		
102	α -D-Manp-1R	102.89	73.89	70.89	70.59	67.29	61.39		
253	α -D-Manp-1R	102.94	74.04	71.24	70.94	67.64	61.84		
1037	α -D-Manp-1R	103	74.1	71.2	70.8	67.7	62		
53	α -D-Manp-1R	103	74.1	71.7	71.7	67.8	61.8		
258	α -D-Manp-1R	103.14	74.14	71.34	70.74	67.44	61.74		
91	α -D-Manp-1R	103.2	74.3	71.3	71.2	68.2	62.1		
92	α -D-Manp-1R	103.3	73.7	71.3	71	67.9	62		
1084	α -D-Manp-1R	101.24	73.04	71.14	70.54	67.34	61.44	55.24	
297	α -D-Manp-1R	101.54	73.24	71.35	70.64	67.58	61.71	55.29	
407	α -D-Manp-1R	101.54	73.24	71.35	70.64	67.58	61.71	55.34	
434	α -D-Manp-1R	101.54	73.24	71.35	70.64	67.58	61.71	55.34	
286	α -D-Manp-1R	101.75	73.45	71.56	70.85	67.79	61.92	55.55	
477	α -D-Manp-1R	101.9	73.7	71.8	71.2	68	62.1	55.9	
250	α -D-Manp-1R	101.9	73.6	71.7	71	67.9	62.1	56.2	
241	α -D-Manp-1R	102.1	73.6	71.9	71.2	68.1	62.3	55.9	
737	α -D-Manp-1R;2R	98.49	76.79	73.69	70.59	67.99	62.19		
236	α -D-Manp-1R;2R	99.3	76.2	74.3	71.2	68.3	62.3	56.2	
117	α -D-Manp-1R;2R	99.65	78.18	73.23	70.47	67.84	61.35	55.47	
823	α -D-Manp-1R;2R	99.89	79.09	73.19	70.59	67.59	61.69	55.49	
53	α -D-Manp-1R;2R	100.1	79.3	73.4	70.8	67.8	61.9	55.7	
111	α -D-Manp-1R;2R	100.13	78.88	73.31	71	67.8	61.74	55.5	
115	α -D-Manp-1R;2R	100.17	79.97	73.25	71.32	67.96	61.73	55.51	
91	α -D-Manp-1R;2R	100.3	79.4	73.5	71.3	67.9	62	55.8	
101	α -D-Manp-1R;2R	100.39	79.59	73.69	71.09	68.09	62.19	55.99	
824	α -D-Manp-1R;3R	101	78.5	73	69.8	66.4	61.1	55	

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
102	α -D-Manp-1R;3R	101.29	78.79	73.29	70.09	66.69	61.39	55.29	
112	α -D-Manp-1R;3R	101.48	78.95	73.42	70.23	66.84	61.72	55.49	
52	α -D-Manp-1R;3R	101.6	79.9	73.9	71	67.4	62.2	55.9	
92	α -D-Manp-1R;3R	101.7	79.2	74.3	70.5	67.1	61.8	55.7	
825	α -D-Manp-1R;4R	101.59	74.29	71.19	71.19	70.49	61.09	54.79	
93	α -D-Manp-1R;4R	101.6	75.2	72	72	71.3	61.9	55.7	
103	α -D-Manp-1R;4R	102.09	74.79	71.69	71.69	70.99	61.59	55.29	
94	α -D-Manp-1R;6R	100.4	71.7	71.6	70.9	67.7	66.6	55.9	
740	α -D-Manp-1R;6R	100.89	71.39	70.59	70.09	69.19	66.89	54.79	
826	α -D-Manp-1R;6R	101.59	71.39	71.29	70.59	67.19	66.29	55.49	
36	α -D-Manp-1R;6R	101.8	71.6	71.5	70.8	67.4	66.4	55.7	
104	α -D-Manp-1R;6R	102.09	71.89	71.79	71.09	67.69	66.79	55.99	
293	α -D-Manp-OH	94.73	73.13	71.48	71.04	67.73	61.78		
439	α -D-Manp-OH	94.73	73.13	71.48	71.04	67.73	61.78		
441	α -D-Manp-OH	94.73	73.13	71.48	71.04	67.73	61.78		
476	α -D-Manp-OH	95	73.4	71.7	71.3	68	62.1		
325	α -D-Manp-OH	95	73.4	71.7	71.3	68	62.1		
381	α -D-Manp-OH	95.3	73.7	72	71.5	68.2	62.3		
287	α -D-Manp-OH-2R	92.07	78.39	73.34	70.08	68.24	62.24		
418	α -D-Manp-OH-2R	92.28	77.63	73.37	70.41	67.59	61.41		
1045	α -D-Manp-OH-2R	92.29	78.59	73.19	70.49	68.59	62.69		
925	α -D-Manp-OH-2R	92.49	79.39	73.29	69.99	67.09	61.09		
930	α -D-Manp-OH-2R	92.49	79.49	73.29	70.09	67.09	61.09		
931	α -D-Manp-OH-2R	92.59	79.49	73.29	69.99	67.09	61.09		
912	α -D-Manp-OH-2R	92.69	79.19	73.39	70.09	67.09	61.19		
913	α -D-Manp-OH-4R	94.39	77.39	71.49	70.79	69.59	61.09		
917	α -D-Manp-OH-4R	94.39	77.89	71.39	70.69	69.59	61.19		
926	α -D-Manp-OH-4R	94.99	77.69	72.19	71.69	70.19	62.19		
909	α -D-Manp-OH-4R	95.09	78.29	72.39	71.69	70.39	61.99		
921	α -D-Manp-OH-4R	95.29	78.19	72.19	71.39	70.49	61.79		
741	α -D-Manp-OH-6R	95.19	73.39	71.79	71.49	70.29	67.99		
919	β -D-Manp-1R	100.49	77.09	73.49	71.19	67.29	61.59		
920	β -D-Manp-1R	100.59	77.09	73.49	71.19	67.29	61.59		

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
658	β -D-Manp-1R	100.59	76.89	73.39	71.29	67.79			
913	β -D-Manp-1R	100.79	76.99	73.49	71.19	67.29	61.69		
914	β -D-Manp-1R	100.79	76.99	73.49	71.19	67.29	61.69		
809	β -D-Manp-1R	100.99	77.39	73.79	71.39	67.59	61.99		
811	β -D-Manp-1R	101.09	77.39	73.69	71.49	67.69	61.99		
114	β -D-Manp-1R	101.27	76.97	73.76	71.07	67.67	61.83		
923	β -D-Manp-1R	101.29	77.69	74.09	71.79	68.19	62.19		
924	β -D-Manp-1R	101.29	77.69	74.09	71.79	68.19	62.19		
921	β -D-Manp-1R	101.39	76.79	73.99	71.79	67.89	62.19		
922	β -D-Manp-1R	101.39	76.79	73.99	71.79	67.89	62.19		
926	β -D-Manp-1R	101.39	77.69	74.09	71.69	67.99	61.79		
927	β -D-Manp-1R	101.39	77.69	74.09	71.69	67.99	61.79		
979	β -D-Manp-1R	101.59	77.29	74.09	71.59	67.79	61.99		
980	β -D-Manp-1R	101.59	77.29	74.09	71.59	67.79	61.99		
859	β -D-Manp-1R	101.59	77.29	74.19	71.69	67.99	62.19		
860	β -D-Manp-1R	101.59	77.29	74.19	71.69	67.99	62.19		
865	β -D-Manp-1R	101.59	76.99	74.09	71.49	67.99	61.97		
866	β -D-Manp-1R	101.59	77.19	74.09	71.49	67.99	62.09		
857	β -D-Manp-1R	101.69	77.29	74.19	71.69	67.89	62.09		
858	β -D-Manp-1R	101.69	77.29	74.19	71.69	67.89	62.09		
863	β -D-Manp-1R	101.69	77.29	74.19	71.59	67.89	61.97		
864	β -D-Manp-1R	101.69	77.29	74.19	71.59	67.89	61.97		
861	β -D-Manp-1R	101.79	77.29	74.29	71.59	67.89	61.99		
1083	β -D-Manp-1R	100.64	75.94	72.64	69.94	66.44	60.74	56.24	
408	β -D-Manp-1R	101.68	76.89	73.72	70.89	67.68	61.81	57.4	
116	β -D-Manp-1R;2R	100.92	78.59	77.14	73.1	68.33	61.84	57.41	
594	β -D-Manp-1R;2R	101.45	78.15	76.65	72.15	67.55	61.05	57.15	
118	β -D-Manp-1R;2R	101.86	79.02	77.12	72.83	68.16	61.66	57.57	
1086	β -D-Manp-1R;2R	101.9	78.66	77.1	72.57	67.99	61.53	57.58	
10	β -D-Manp-1R;4R	101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2	57.6	
549	β -D-ManpNAc-1R	174.54	99.44	75.34	73.44	72.94	60.74	53.64	22.24
440	β -D-Manp-OH	94.34	76.79	73.82	71.92	67.48	61.78		
442	β -D-Manp-OH	94.34	76.79	73.82	71.92	67.48	61.78		

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
480	β -D-Manp-OH	94.6	77.2	74.1	72.3	67.8	62.1		
326	β -D-Manp-OH	94.6	77.2	74.1	72.3	67.8	62.1		
421	β -D-Manp-OH-2R	93.58	81.65	77.03	73.78	67.88	61.74		
419	β -D-Manp-OH-2R	94.63	81.16	76.91	73.05	67.56	61.54		
914	β -D-Manp-OH-4R	94.29	77.09	75.39	72.29	71.19	61.09		
918	β -D-Manp-OH-4R	94.29	77.69	75.29	72.29	71.09	61.19		
927	β -D-Manp-OH-4R	94.99	77.69	76.29	72.79	71.69	62.19		
908	β -D-Manp-OH-4R	95.09	78.29	76.29	73.19	71.69	61.99		
922	β -D-Manp-OH-4R	95.09	78.19	75.79	73.39	71.79	62.19		
849	β -D-Manp-OH-6R	94.89	76.19	74.19	72.29	70.29	67.79		

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.4 Fucose

Tabelle 98. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen Fucose
in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
386	α -D-Fucp-1R	100.11	72.58	70.35	69.15	67.49	15.89
388	α -D-Fucp-1R	100.15	72.58	70.33	69.08	67.55	15.89
394	α -D-Fucp-1R	101.44	72.51	70.32	69.23	67.59	16.59
580	α -L-Fucp-1R	98.34	72.24	69.54	68.44	67.34	15.74
730	α -L-Fucp-1R	98.39	72.59	69.79	68.49	67.59	15.99
782	α -L-Fucp-1R	98.39	72.59	69.79	68.39	67.59	15.93
783	α -L-Fucp-1R	98.39	72.59	69.79	68.39	67.59	15.93
418	α -L-Fucp-1R	98.59	72.56	70.18	68.74	67.64	15.84
761	α -L-Fucp-1R	98.6	72.8	69.9	68.7	67.8	16.2
762	α -L-Fucp-1R	98.6	72.8	69.9	68.7	67.8	16.2
769	α -L-Fucp-1R	98.6	72.8	69.9	68.8	67.6	16.2
770	α -L-Fucp-1R	98.6	72.8	69.9	68.8	67.6	16.2
686	α -L-Fucp-1R	98.64	72.24	69.34	67.94	67.14	15.54
726	α -L-Fucp-1R	98.69	72.69	69.89	68.59	67.49	16.09
757	α -L-Fucp-1R	98.8	72.8	69.9	68.7	67.6	16.2
758	α -L-Fucp-1R	98.8	72.8	69.9	68.7	67.6	16.2
688	α -L-Fucp-1R	98.9	72.9	70.1	68.8	67.8	16.3

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$
728	α -L-Fucp-1R	98.99	72.69	70.39	68.49	67.39	15.99
570	α -L-Fucp-1R	99.04	72.24	69.94	68.44	67.24	15.54
724	α -L-Fucp-1R	99.19	72.69	70.19	68.49	67.29	16.09
237	α -L-Fucp-1R	99.2	73.2	71.4	69.4	68.3	16.4
705	α -L-Fucp-1R	99.38	72.75	70.02	68.53	67.48	16.16
775	α -L-Fucp-1R	99.38	72.75	70.02	68.53	67.48	16.16
729	α -L-Fucp-1R	99.39	72.79	70.09	68.59	67.49	16.09
725	α -L-Fucp-1R	99.39	72.79	70.09	68.59	67.49	16.09
611	α -L-Fucp-1R	99.44	72.14	69.84	68.44	67.04	15.24
427	α -L-Fucp-1R	99.61	72.51	70.41	68.81	67.37	15.84
575	α -L-Fucp-1R	99.64	72.24	69.94	68.54	67.34	15.54
611	α -L-Fucp-1R	99.64	72.04	69.84	68.54	67.34	15.24
733	α -L-Fucp-1R	99.79	72.79	70.09	69.49	67.39	15.69
584	α -L-Fucp-1R	99.84	72.14	69.14	68.54	66.84	15.44
425	α -L-Fucp-1R	99.86	72.54	70.38	68.99	67.31	15.85
697	α -L-Fucp-1R	99.86	72.18	69.99	68.74	67.28	15.76
718	α -L-Fucp-1R	99.89	72.59	70.29	68.99	67.39	16.09
693	α -L-Fucp-1R	99.89	72.29	70.19	68.59	67.39	15.89
1029	α -L-Fucp-1R	99.89	73.09	70.19	69.79	67.09	15.69
735	α -L-Fucp-1R	99.89	72.89	70.19	69.59	67.69	15.79
689	α -L-Fucp-1R	99.9	72.14	69.31	68.13	67.44	15.66
690	α -L-Fucp-1R	99.99	72.29	70.29	68.79	67.49	15.99
695	α -L-Fucp-1R	99.99	72.29	70.29	68.79	67.49	15.89
696	α -L-Fucp-1R	99.99	72.29	70.19	68.79	67.49	15.89
267	α -L-Fucp-1R	100.02	72.55	70.17	68.82	67.69	15.87
723	α -L-Fucp-1R	100.09	72.49	70.09	68.79	67.09	15.89
727	α -L-Fucp-1R	100.09	72.39	70.39	68.89	67.49	15.89
387	α -L-Fucp-1R	100.14	72.56	70.35	69.1	67.57	15.9
717	α -L-Fucp-1R	100.19	72.49	70.09	68.69	67.69	15.89
729	α -L-Fucp-1R	100.19	72.39	70.49	68.09	67.49	16.19
730	α -L-Fucp-1R	100.19	72.59	70.09	68.89	66.79	15.89
782	α -L-Fucp-1R	100.19	72.59	71.39	68.89	66.89	16.99
783	α -L-Fucp-1R	100.19	72.59	71.39	68.89	66.89	15.99

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
209	α -L-Fucp-1R	100.2	72.6	70.4	69.2	67.6	16.2
385	α -L-Fucp-1R	100.21	72.57	70.38	69.12	67.49	15.87
585	α -L-Fucp-1R	100.3	72.6	70.5	69.1	67.7	16.1
759	α -L-Fucp-1R	100.3	72.7	70.3	68.9	67.3	16.1
760	α -L-Fucp-1R	100.3	72.7	70.3	68.9	67.3	16.1
207	α -L-Fucp-1R	100.4	72.7	70.3	69	67.3	16
761	α -L-Fucp-1R	100.4	72.8	70.3	69.1	67.1	16.2
762	α -L-Fucp-1R	100.4	72.8	70.3	69.1	67.1	16.2
610	α -L-Fucp-1R	100.54	72.14	70.34	69.04	67.14	15.54
615	α -L-Fucp-1R	100.54	72.24	70.24	69.04	67.14	15.54
261	α -L-Fucp-1R	100.57	72.59	70.41	69.18	67.48	15.78
212	α -L-Fucp-1R	100.7	72.5	70.3	69.1	67.5	15.8
1031	α -L-Fucp-1R	101.19	73.09	70.59	68.59	67.29	16.59
391	α -L-Fucp-1R	101.31	71.5	70.3	69.19	67.69	16.15
733	α -L-Fucp-1R	101.59	72.79	70.09	69.79	68.89	15.89
734	α -L-Fucp-1R	101.69	72.79	70.09	69.79	68.89	15.89
1041	α -L-Fucp-1R	101.69	72.69	70.09	69.89	68.89	15.99
260	α -L-Fucp-1R	101.94	72.44	70.24	69.06	67.8	16.1
419	α -L-Fucp-1R	101.94	72.56	70.32	69.42	67.91	15.92
264	α -L-Fucp-OH	92.91	72.58	70.08	68.88	66.89	16.12
273	α -L-Fucp-OH	92.91	72.58	70.08	68.88	66.89	16.12
395	α -L-Fucp-OH	92.91	72.58	70.08	68.88	66.89	16.12
422	α -L-Fucp-1R;2R	97.63	73.93	72.59	68.81	66.92	15.91
614	β -L-Fucp-1R	102.04	73.14	71.64	71.54	71.14	15.74
567	β -L-Fucp-1R	102.54	73.14	71.94	71.44	70.54	15.94
423	β -L-Fucp-1R	102.57	73.62	71.93	71.69	71.08	15.98
612	β -L-Fucp-1R	102.64	73.14	71.54	71.54	70.94	15.64
565	β -L-Fucp-1R	103.14	73.14	71.84	71.44	70.94	15.74
213	β -L-Fucp-1R	103.2	73.6	72.1	71.7	71.6	16.2
210	β -L-Fucp-1R	103.2	73.8	72.5	71.7	71.8	16.1
426	β -L-Fucp-1R	103.35	73.69	72.01	71.5	71.27	15.97
569	β -L-Fucp-1R	103.44	73.44	72.04	71.84	70.84	16.04
610	β -L-Fucp-1R	103.44	73.34	71.64	71.44	71.44	15.44

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
428	β -L-Fucp-1R	103.49	73.71	72.02	71.5	71.19	16
579	β -L-Fucp-1R	103.64	73.24	71.64	71.34	71.04	15.74
424	β -L-Fucp-1R	103.85	73.6	71.93	71.7	71.67	15.95
274	β -L-Fucp-OH	96.94	73.72	72.52	72.14	71.43	16.12
384	β -L-Fucp-OH	97.3	74	72.8	72.5	71.9	16.7

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.5 Xylose

Tabelle 99. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen Xylose
in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5
670	α -D-Xylf-1R	102.44	78.64	77.84	75.24	60.74
1004	α -D-Xylp-1R	97.59	73.99	72.49	70.49	62.49
1003	α -D-Xylp-1R	98.79	73.99	72.49	70.49	62.49
834	α -D-Xylp-1R	98.89	73.99	72.49	70.49	62.39
1081	α -D-Xylp-1R	99.44	73.64	72.14	70.24	62.04
1071	α -D-Xylp-1R	99.45	73.65	72.25	70.35	62.05
590	α -D-Xylp-1R	99.6	74.3	72.7	70.5	62.4
1007	α -D-Xylp-1R	99.79	74.09	72.59	70.89	62.49
1008	α -D-Xylp-1R	99.79	74.09	72.59	70.89	62.49
835	α -D-Xylp-1R	99.89	74.09	72.69	70.79	62.49
840	α -D-Xylp-1R	99.89	74.09	72.59	70.69	62.49
1072	α -D-Xylp-1R	100.85	73.75	72.35	70.05	62.25
1011	α -D-Xylp-1R	101.19	73.99	72.69	70.39	62.59
1012	α -D-Xylp-1R	101.19	73.99	72.69	70.39	62.59
836	α -D-Xylp-1R	101.29	74.19	72.79	70.49	62.69
467	α -D-Xylp-1R	100.6	74.3	72.3	70.4	62
466	α -D-Xylp-OH	93.3	73.9	72.5	70.4	62.1
1006	α -D-Xylp-OH-2R	92.89	81.69	72.79	70.19	61.49
1010	α -D-Xylp-OH-3R	93.09	82.69	71.89	68.69	61.89
1012	α -D-Xylp-OH-4R	91.99	78.09	71.69	71.19	60.09

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	\bar{d}_1	\bar{d}_2	\bar{d}_3	\bar{d}_4	\bar{d}_5
1014	α -D-Xylp-OH-4R	92.59	77.29	72.09	71.69	59.59
1016	α -D-Xylp-OH-4R	92.59	76.99	71.99	71.59	59.49
1018	α -D-Xylp-OH-4R	92.59	76.99	71.99	71.59	59.49
1020	α -D-Xylp-OH-4R	92.59	76.99	71.99	71.59	59.49
1082	β -D-Xylp-1R	101.85	75.95	72.95	69.75	65.65
843	β -D-Xylp-1R	102.19	76.39	73.29	70.19	66.09
712	β -D-Xylp-1R	102.29	76.39	73.39	70.19	66.09
1019	β -D-Xylp-1R	102.29	76.19	73.29	69.79	65.89
1020	β -D-Xylp-1R	102.29	76.19	73.29	69.79	65.89
1064	β -D-Xylp-1R	102.45	76.25	73.35	69.75	65.85
1075	β -D-Xylp-1R	102.45	76.25	73.35	69.75	65.85
1065	β -D-Xylp-1R	102.45	76.25	73.35	69.75	65.85
1080	β -D-Xylp-1R	102.45	76.25	73.35	69.75	65.85
1066	β -D-Xylp-1R	102.45	76.25	73.45	69.75	65.85
1068	β -D-Xylp-1R	102.45	76.25	73.35	69.85	65.85
1013	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.49	69.89	65.89
1014	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.49	69.089	65.89
1140	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.49	69.89	65.89
1141	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.49	69.89	65.89
1015	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.39	69.79	65.89
1016	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.39	69.79	65.89
1150	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.39	69.79	65.89
1151	β -D-Xylp-1R	102.49	76.29	73.39	69.79	65.89
1017	β -D-Xylp-1R	102.49	76.19	73.29	69.79	65.89
1018	β -D-Xylp-1R	102.49	76.19	73.29	69.79	65.89
1144	β -D-Xylp-1R	102.49	76.19	73.29	69.79	65.89
1147	β -D-Xylp-1R	102.49	76.19	73.29	69.79	65.89
1148	β -D-Xylp-1R	102.49	76.19	73.29	69.79	65.89
1149	β -D-Xylp-1R	102.49	76.19	73.29	69.79	65.89
714	β -D-Xylp-1R	102.69	76.59	73.79	70.19	66.29
839	β -D-Xylp-1R	102.89	76.69	73.79	70.19	66.29
711	β -D-Xylp-1R	102.89	76.69	73.79	70.19	66.29

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$
713	β -D-Xylp-1R	102.89	76.69	73.89	70.19	66.29
715	β -D-Xylp-1R	102.89	76.69	73.79	70.29	66.29
1076	β -D-Xylp-1R	102.95	76.55	73.75	70.15	66.15
1073	β -D-Xylp-1R	103.05	76.15	74.05	69.75	65.65
1076	β -D-Xylp-1R	103.25	76.55	74.15	70.15	66.15
1082	β -D-Xylp-1R	103.35	75.95	73.45	69.75	65.65
712	β -D-Xylp-1R	103.79	76.39	73.89	70.19	66.09
843	β -D-Xylp-1R	103.99	76.39	73.99	70.19	66.09
1074	β -D-Xylp-1R	104.15	76.25	73.95	69.75	65.75
1079	β -D-Xylp-1R	104.15	76.35	74.05	69.85	65.85
594	β -D-Xylp-1R	104.25	75.65	73.45	69.45	65.35
1086	β -D-Xylp-1R	104.67	76.09	73.91	69.87	65.77
1088	β -D-Xylp-1R	104.82	76.07	73.9	69.86	65.76
1077	β -D-Xylp-1R	104.85	76.15	74.45	69.95	65.85
596	β -D-Xylp-1R	105	76.3	74.1	70.1	65.9
597	β -D-Xylp-1R	105.24	75.64	73.44	69.44	65.14
1006	β -D-Xylp-1R	105.69	76.49	74.09	70.19	65.99
473	β -D-Xylp-1R	105.1	76.9	74	70.4	66.3
834	β -D-Xylp-1R;2R	105.19	78.29	75.29	70.49	65.89
835	β -D-Xylp-1R;3R	105.09	82.69	72.49	70.39	65.99
259	β -D-Xylp-1R;4R	104.6	76.2	74.7	73.42	63.7
714	β -D-Xylp-1R;4R	104.79	77.39	74.69	73.79	63.99
711	β -D-Xylp-1R;4R	104.89	77.49	74.79	73.89	63.89
712	β -D-Xylp-1R;4R	104.89	77.29	74.79	73.89	63.79
713	β -D-Xylp-1R;4R	104.89	77.39	74.79	73.89	63.99
839	β -D-Xylp-1R;4R	104.89	77.49	74.79	73.79	63.89
840	β -D-Xylp-1R;4R	104.89	77.59	74.89	73.89	63.99
836	β -D-Xylp-1R;4R	104.99	77.59	74.79	73.89	63.99
715	β -D-Xylp-1R;4R	105.09	77.49	74.79	73.79	63.99
472	β -D-Xylp-OH	97.6	76.9	75.1	70.3	66.3
1003	β -D-Xylp-OH-2R	97.99	79.19	75.39	69.79	65.99

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5
1009	β -D-Xylp-OH-3R	97.39	85.09	74.69	68.69	65.29
1013	β -D-Xylp-OH-4R	97.09	77.09	74.69	74.69	63.69
1015	β -D-Xylp-OH-4R	97.09	76.99	74.59	74.59	63.59
1017	β -D-Xylp-OH-4R	97.09	76.99	74.49	74.49	63.59
1019	β -D-Xylp-OH-4R	97.09	76.99	74.49	74.49	63.59
1011	β -D-Xylp-OH-4R	97.49	77.19	74.89	74.59	63.39

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.6 Glucuronsäure

Tabelle 100. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen Glucuronsäure in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
31	β -D-GlcpA-1R	176.12	103.62	76.37	75.96	73.36	72.35
1132	β -D-GlcpA-1R	176.12	103.62	76.37	75.96	73.36	72.35
1134	β -D-GlcpA-1R	176.13	103.61	76.38	75.96	73.36	72.35
1129	β -D-GlcpA-1R	176.14	103.39	76.41	75.99	73.34	72.34
1130	β -D-GlcpA-1R	176.18	103.53	76.41	75.99	73.34	72.34
637	β -D-GlcpA-1R	176.49	104.19	77.69	76.59	74.29	73.09
616	β -D-GlcpA-1R	176.50	104.40	77.00	76.20	74.00	72.60
639	β -D-GlcpA-1R	176.79	104.89	77.39	76.69	74.49	73.09
673	β -D-GlcpA-1R;2R	173.89	104.49	77.59	77.29	75.69	72.79
678	β -D-GlcpA-1R;4R	174.70	102.76	80.90	76.45	74.82	73.17
1132	β -D-GlcpA-1R;4R	174.79	103.73	80.65	77.03	74.29	73.11
1134	β -D-GlcpA-1R;4R	174.79	103.30	80.58	76.65	74.29	73.36
1131	β -D-GlcpA-1R;4R	174.83	103.62	80.65	77.03	74.29	73.11
681	β -D-GlcpA-1R;4R	176.12	103.85	81.86	77.06	75.75	74.05
680	β -D-GlcpA-1R;4R	176.20	103.60	81.50	77.20	75.70	74.00

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.7 N-Acetyl Glucosamin

Tabelle 101. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen N-Acetyl Glucosamin in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
735	α -D-GlcpNAc-1R		98.29	72.49	71.29	70.79	60.69	54.49	
736	α -D-GlcpNAc-1R		98.39	72.49	71.29	70.99	60.69	54.49	
732	α -D-GlcpNAc-1R		98.39	72.49	71.39	70.79	60.59	54.59	
734	α -D-GlcpNAc-1R		98.69	72.49	71.19	70.99	60.59	54.49	
736	α -D-GlcpNAc-1R		98.69	72.49	71.39	70.99	60.69	54.49	
1131	α -D-GlcpNAc-OH-3R	175.19	91.71	80.65	71.93	69.18	61.19	53.6	22.64
647	α -D-GlcpNAc-OH-3R		91.8	80	72.3	70.3	61.3	53.4	
1129	α -D-GlcpNAc-OH-3R	175.19	91.65	81.11	71.91	69.3	61.18	53.49	22.64
1022	α -D-GlcpNAc-OH-4R		91.39	79.89	70.59	70.39	61.09	54.89	
1026	α -D-GlcpNAc-OH-4R		91.59	81.09	71.19	70.49	61.29	54.79	
1033	α -D-GlcpNAc-OH-4R		91.79	80.99	71.19	70.49	61.29	54.79	
1031	α -D-GlcpNAc-OH-4R		91.89	80.49	70.59	70.59	61.39	55.29	
1034	α -D-GlcpNAc-OH-4R	175.19	91.19	81.59	70.69	69.99	60.89	54.09	22.69
891	β -D-GlcpNAc-1R		103.29	76.39	74.29	70.39	61.29	56.49	
895	β -D-GlcpNAc-1R		103.29	76.39	74.39	70.49	61.39	56.49	
898	β -D-GlcpNAc-1R		103.29	76.39	74.29	70.59	61.29	56.49	
664	β -D-GlcpNAc-1R	175.14	102.84	75.84	74.44	70.54	61.64	56.04	22.84
287	β -D-GlcpNAc-1R	175.24	100.53	76.58	74.15	70.76	61.46	56.2	22.98
743	β -D-GlcpNAc-1R		102.59	75.89	73.89	70.09	60.79	55.69	
621	β -D-GlcpNAc-1R		103.34	76.04	74.35	70.94	61.04	56.04	
618	β -D-GlcpNAc-1R		103.4	74.9	74.7	70.8	61.9	56.9	
618	β -D-GlcpNAc-1R		103.6	74.9	74.7	70.8	61.7	56.8	
678	β -D-GlcpNAc-1R	174.7	103.34	76.31	74.4	71.06	61.88	56.23	22.64
249	β -D-GlcpNAc-1R	174.79	102.9	75.83	73.65	70.04	60.7	55.83	22.28
246	β -D-GlcpNAc-1R	174.96	102.76	75.75	73.68	70.08	60.64	55.77	22.25

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
289	β -D-GlcpNAc-1R	175.24	102.35	76.53	74.5	70.75	61.51	56.57	22.93
290	β -D-GlcpNAc-1R	175.45	103.03	76.44	74.41	70.64	61.42	56.54	22.9
739	β -D-GlcpNAc-1R		101.59	75.99	73.59	69.89	60.49	55.69	
742	β -D-GlcpNAc-1R		101.69	75.99	73.49	69.79	60.79	55.69	
650	β -D-GlcpNAc-1R		101.7	77.2	74.3	71.2	61.8	57	
651	β -D-GlcpNAc-1R		101.7	77.2	74.3	71.2	61.8	57	
1025	β -D-GlcpNAc-1R		102.69	77.09	74.69	70.89	61.79	56.79	
1026	β -D-GlcpNAc-1R		102.69	77.09	74.69	70.89	61.79	56.79	
689	β -D-GlcpNAc-1R		101.6	76.01	74.14	70.09	60.98	55.61	22.47
740	β -D-GlcpNAc-1R		101.69	75.89	73.89	69.89	60.89	55.69	
249	β -D-GlcpNAc-1R	175.16		76.02	74.02	70.04		55.65	22.5
885	β -D-GlcpNAc-1R	175.53	101.92	76.71	74.4	70.73	61.55	54.37	23.19
886	β -D-GlcpNAc-1R	175.53	101.92	76.71	74.4	70.73	61.55	54.37	23.19
302	β -D-GlcpNAc-1R	175.14	102.55	76.58	74.69	70.85	61.61	57.53	22.85
291	β -D-GlcpNAc-1R;3R	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
691	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.29	102.59	76.89	75.99	73.09	60.89	57.79	22.79
692	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.29	102.59	76.89	75.99	73.09	60.89	57.79	22.79
693	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.29	102.59	76.79	75.99	73.09	60.79	57.79	22.79
694	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.29	102.59	76.79	75.99	73.09	60.79	57.79	22.79
695	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.29	102.59	76.89	75.99	73.09	60.79	57.79	22.79
696	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.29	102.49	77.49	75.89	72.99	60.89	57.79	22.79
585	β -D-GlcpNAc-1R;4R	175.4	102.7	77.3	76.1	73.2	61.1	57.9	23
296	β -D-GlcpNAc-OH	175.28	95.64	76.61	74.6	70.85	61.64	57.65	22.89
1130	β -D-GlcpNAc-OH-3R	175.46	95.33	83.59	76.11	69.3	61.34	56.14	22.88
1132	β -D-GlcpNAc-OH-3R	175.46	95.4	83.03	76.12	69.22	61.35	56.23	22.88
648	β -D-GlcpNAc-OH-3R		95.6	82.4	76.5	70.3	61.5	56	
1021	β -D-GlcpNAc-OH-4R		95.99	79.49	75.89	74.69	61.09	57.39	
1025	β -D-GlcpNAc-OH-4R		95.99	80.69	75.69	73.39	61.29	57.29	

12. Anhang

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
1032	β -D-Glc p NAc-OH-4R		96.09	80.59	75.79	73.39	61.29	57.39	
1030	β -D-Glc p NAc-OH-4R		96.29	80.49	76.49	74.89	61.39	57.69	

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.8 N-Acetyl Galactosamin**Tabelle 102.** Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen *N*-Acetyl Galactosamin in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
728	α -D-GalpNAc-1R		92.09	71.79	69.19	68.59	61.99	50.09	
703	α -D-GalpNAc-1R		94.49	71.59	69.09	68.29	61.69	50.29	
722	α -D-GalpNAc-1R		94.49	71.59	69.09	68.29	61.69	50.29	
630	α -D-GalpNAc-1R	175.29	94.09	71.89	68.89	68.29	61.49	49.99	22.59
656	α -D-GalpNAc-1R	175.5	94.4	72.1	69.1	68.5	61.7	50.2	22.8
657	α -D-GalpNAc-1R	175.5	94.6	72.1	69.1	68.5	61.7	50.2	22.8
303	α -D-GalpNAc-1R	175.09	98.9	71.36	69.27	68.59	61.89	50.61	22.61
621	α -D-GalpNAc-1R;3R		97.64	77.24	70.94	68.84	61.54	48.84	
292	α -D-GalpNAc-1R;3R	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
1028	α -D-GalpNAc-OH-6R		91.99	70.09	69.49	68.79	68.29	51.29	
1027	β -D-GalpNAc-1R		103.09	76.09	71.99	68.79	61.99	53.39	
1028	β -D-GalpNAc-1R		103.09	76.09	71.99	68.79	61.99	53.39	
653	β -D-GalpNAc-1R	176	104.2	75.8	71.7	69.7	60.7	53.4	23.1
655	β -D-GalpNAc-1R	176	104.1	75.8	71.6	68.6	61.8	53.4	23.1
1027	β -D-GalpNAc-OH-6R		96.39	74.89	71.99	68.79	68.78	54.79	
1041	D-GalNAc-ol-OH-3R		75.09	69.89	69.39	63.19	60.89	51.99	
731	D-GalNAc-ol-OH-3R		76.79	69.69	69.59	68.19	60.99	51.79	
732	D-GalNAc-ol-OH-3R		76.89	69.99	69.59	68.19	61.09	51.89	

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.1.9 N-Acetyl Neuraminsäure

Tabelle 103. Chemische Verschiebungen für Mittelwerte und Standardabweichungen N-Acetyl Neuraminsäure in [ppm]

Rec. No.	Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}
903	α -D-Neup5Ac-2R		173.98	101.19	73.29	72.39	68.99	68.98	63.39	52.59	41.19	
751	α -D-Neup5Ac-2R		174.1	101	73.3	72.5	69.1	69.1	63.4	52.7	40.9	
752	α -D-Neup5Ac-2R		174.1	101	73.3	72.5	69.1	69.1	63.4	52.7	40.9	
169	α -D-Neup5Ac-2R		174.1	101.5	73.5	72.5	69.1	69.1	63.5	52.9	41.6	
1034	α -D-Neup5Ac-2R		174.19	100.79	73.19	72.39	69.09	68.79	63.29	52.49	40.69	
749	α -D-Neup5Ac-2R		174.2	101	73.3	72.5	69.1	69.1	63.4	52.7	40.9	
750	α -D-Neup5Ac-2R		174.2	101	73.3	72.5	69.1	69.1	63.4	52.7	40.9	
1036	α -D-Neup5Ac-2R		174.3	100.9	73.2	72.5	69.3	69	63.5	52.7	40.9	
901	α -D-Neup5Ac-2R		174.59	100.39	73.59	72.29	68.89	68.69	63.39	52.69	40.59	
751	α -D-Neup5Ac-2R		174.6	100.4	73.6	72.6	69.1	68.9	63.3	52.5	40.6	
752	α -D-Neup5Ac-2R		174.6	100.4	73.6	72.6	69.1	68.9	63.3	52.5	40.6	
1035	α -D-Neup5Ac-2R		174.6	100.5	73.6	72.6	69.2	68.9	63.3	52.5	40.6	
168	α -D-Neup5Ac-2R		174.6	100.9	74	72.7	69.4	69.2	63.8	53	40.8	
902	α -D-Neup5Ac-2R		174.69	100.49	73.59	72.49	68.99	68.98	63.39	52.69	40.49	
769	α -D-Neup5Ac-2R		174.7	100.2	73.6	72.7	69.2	68.9	63.2	52.5	40.8	
770	α -D-Neup5Ac-2R		174.7	100.2	73.6	72.7	69.2	68.9	63.2	52.5	40.8	
1040	α -D-Neup5Ac-2R		174.7	100.7	73.7	72.6	69.2	69	63.4	52.5	40.5	
162	α -D-Neup5Ac-2R		174.7	102.6	73.9	72.5	69.2	69.2	63.9	52.8	37.8	
1165	α -D-Neup5Ac-2R	175.87	174.16	101.04	73.37	72.55	69.23	69.11	63.34	52.75	40.96	22.88
1166	α -D-Neup5Ac-2R	176.3	174.6	101.9	73.3	72.9	69.5	69.5	63.9	53.2	41.3	23.3
1046	α -D-Neup5Ac-2R			101.3	73.7		69.2	69	63.5	52.6	41.1	
1046	α -D-Neup5Ac-2R			100.7	73.8	72.6	69.2	69	63.5	52.6	40.7	
603	α -D-Neup5Ac-2R;7R		172.34	101.02	77.44	71.64	71.04	68.22	62.24	52.74	36.52	
903	α -D-Neup5Ac-2R;8R		173.99	101.79	77.49	73.29	68.99	68.98	62.19	51.99	39.19	
169	α -D-Neup5Ac-2R;8R		174.1	101.5	77.1	73.7	69.1	69.1	62.5	52.2	40	

Rec.No.: Interne Nummerierung FM-DB

12.1.2 Disaccharid-Ansatz

Tabelle 104. Mittelwerte (\bar{x}) und Standardabweichungen (σ_{n-1}) der Disaccharidgruppen in [ppm]

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
1	x	98.41	75.96	71.79	70.92	69.51	61.75			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±1.58	±2.63	±0.98	±1.27	±0.55	±0.06			0	0	0	0	0	0	0	0
2	x	98.41	75.96	71.79	70.92	69.51	61.75			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	±1.58	±2.63	±0.98	±1.27	±0.55	±0.06			±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73		
3	x	99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
4	x	99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54			100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29		
	σ_{n-1}	±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30			±0.03	±0.03	±0.08	±0.09	±0.15	±0.24		
5	x	99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9			99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30			±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
6	x	99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9			92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54		
	σ_{n-1}	±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30			±0.21	±0.71	±0.07	±0.20	±0.47	±0.65		
7	x	99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9			99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30			±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
8	x	99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9			95.19	73.39	71.79	71.49	70.29	67.99		
	σ_{n-1}	±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30			0	0	0	0	0	0		
9	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44		
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07		
10	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			175.19	91.72	80.59	72.05	69.59	61.22	53.5	22.64
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			0	±0.08	±0.56	±0.22	±0.61	±0.07	±0.10	0
11	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31		
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37		
12	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			0	0	0	0	0	0	0	0
13	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			0	±0.29	±0.65	±0.31	±0.23	±0.20	±0.43	0
14	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09
15	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.8
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			0	±0.14	±0.56	±0.36	±0.81	±0.13	±0.17	0

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
16	x	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44			104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07			±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
17	x	101.53	78.61	77	72.66	68.01	61.52			175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
	σ_{n-1}	±0.46	±0.36	±0.24	±0.40	±0.34	±0.34			0	0	0	0	0	0	0	0
18	x	105.19	78.29	75.29	70.49	65.89				104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0				±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
19	x	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7			101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06			±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42		
20	x	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7			175.82	103.04	80.96	75.39	68.54	61.34	52.53	22.92
	σ_{n-1}	±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06			±0.28	±0.31	±0.50	±0.13	±0.15	±0.21	±0.41	±0.13
21	x	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7			104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06			±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32		
22	x	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73	97.63	73.93	72.59	68.81	66.92	15.91		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
23	x	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	x	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	x	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73	101.76	74.76	71.63	71.63	70.93	61.53		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.29	±0.46	±0.41	±0.41	±0.41	±0.41		
26	x	100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38			100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38		
	σ_{n-1}	±0.11	±1.15	±0.15	±0.72	±0.93	±0.10			±0.11	±1.15	±0.15	±0.72	±0.93	±0.10		
27	x	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94	101.53	78.61	77	72.66	68.01	61.52		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.46	±0.36	±0.24	±0.40	±0.34	±0.34		
28	x	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94	100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.02	±0.33	±0.53	±0.43	±0.11	±0.22		
29	x	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94	174.84	99.61	78.01	72.54	67.57	60.81	50.47	22.34
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.31	±0.72	±0.26	±0.15	±0.46	±0.32	0	
30	x	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64			99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42			±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
31	x	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64			101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42			±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42		

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
32	x	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
33	x	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64			101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59		
	σ_{n-1}	±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42			±0.69	±0.21	±0.46	±0.38	±0.79	±0.25		
34	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37		
35	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			175.82	103.04	80.96	75.39	68.54	61.34	52.53	22.92
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.28	±0.31	±0.50	±0.13	±0.15	±0.21	±0.41	±0.13
36	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.02	±0.33	±0.53	±0.43	±0.11	±0.22		
37	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
38	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
39	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09
40	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.8
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			0	±0.14	±0.56	±0.36	±0.81	±0.13	±0.17	0
41	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
42	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.20	±0.31	±0.15	±0.19	±0.20	±0.18		
43	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			175.24	101.94	75.54	74.74	70.44	69.54	56.34	23.14
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			0	0	0	0	0	0	0	0
44	x	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31			101.43	75.98	73.98	71.42	68.89	66.76		
	σ_{n-1}	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37			±0.34	±0.68	±0.34	±0.23	±1.36	±2.16		
45	x	103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54			175.82	103.04	80.96	75.39	68.54	61.34	52.53	22.92
	σ_{n-1}	±0.18	±0.34	±0.04	±0.45	±0.10	±0.10			±0.28	±0.31	±0.50	±0.13	±0.15	±0.21	±0.41	±0.13
46	x	103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.18	±0.34	±0.04	±0.45	±0.10	±0.10			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
47	x	103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.18	±0.34	±0.04	±0.45	±0.10	±0.10			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
48	x	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
49	x	175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09
50	x	102.65	76.98	73.45	71.45	67.68	62.18			175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
	σ_{n-1}	±2.00	±3.60	±2.68	±0.61	±1.25	±0.73			0	±0.29	±0.65	±0.31	±0.23	±0.20	±0.43	0
51	x	102.65	76.98	73.45	71.45	67.68	62.18			175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.8
	σ_{n-1}	±2.00	±3.60	±2.68	±0.61	±1.25	±0.73			0	±0.14	±0.56	±0.36	±0.81	±0.13	±0.17	0
52	x	102.65	76.98	73.45	71.45	67.68	62.18			101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2		
	σ_{n-1}	±2.00	±3.60	±2.68	±0.61	±1.25	±0.73			0	0	0	0	0	0		
53	x	105.09	82.69	72.49	70.39	65.99				104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0				±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
54	x	100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35			104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	±0.02	±0.33	±0.53	±0.43	±0.11	±0.22			±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32		
55	x	174.84	99.61	78.01	72.54	67.57	60.81	50.47	22.34	102.65	76.98	73.45	71.45	67.68	62.18		
	σ_{n-1}	0	±0.31	±0.72	±0.26	±0.15	±0.46	±0.32	0	±2.00	±3.60	±2.68	±0.61	±1.25	±0.73		
56	x	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93			99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93		
	σ_{n-1}	±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34			±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34		
57	x	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
58	x	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
59	x	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
60	x	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34			±0.35	±0.37	±0.36	±0.39	±0.39	±1.38		
61	x	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34			±0.43	±0.36	±0.45	±0.26	±0.37	±1.39		
62	x	101.76	74.76	71.63	71.63	70.93	61.53			99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±0.29	±0.46	±0.41	±0.41	±0.41	±0.41			±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
63	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39			175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
	σ_{n-1}	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32			0	0	0	0	0	0	0	0

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
64	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32			0	0	0	0	0	0	0	0
65	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39			104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32			±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32		
66	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39			175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
	σ_{n-1}	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32			±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09
67	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32			±0.35	±0.37	±0.36	±0.39	±0.39	±1.38		
68	x	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32			±0.43	±0.36	±0.45	±0.26	±0.37	±1.39		
69	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			0	0	0	0	0	0	0	0
70	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			92.14	83.14	71.49	71.09	68.64	61.54		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.40	±0.17	0	±0.12	±0.06	±0.06		
71	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			96.43	85.83	76.38	73.83	68.79	61.58		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.23	±0.36	±0.27	±0.48	±0.27	±0.29		
72	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
73	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.42	±0.37	±0.46	±0.48	±0.43	±0.49		
74	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
75	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
76	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			0	0	0	0	0	0		
77	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.42	±0.48	±0.48	±0.50	±0.32	±0.55		
78	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
79	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.03	±0.03	±0.08	±0.09	±0.15	±0.24		

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
80	x	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7			104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3		
	σ_{n-1}	±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68			±0.20	±0.31	±0.15	±0.19	±0.20	±0.18		
81	x	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82	99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09	±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
82	x	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82	92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54		
	σ_{n-1}	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09	±0.21	±0.71	±0.07	±0.20	±0.47	±0.65		
83	x	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82	175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
	σ_{n-1}	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09	0	±0.29	±0.65	±0.31	±0.23	±0.20	±0.43	0
84	x	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82	175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.8
	σ_{n-1}	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09	0	±0.14	±0.56	±0.36	±0.81	±0.13	±0.17	0
85	x	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82	95.19	73.39	71.79	71.49	70.29	67.99		
	σ_{n-1}	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09	0	0	0	0	0	0		
86	x	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82	94.89	76.19	74.19	72.29	70.29	67.79		
	σ_{n-1}	±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09	0	0	0	0	0	0		
87	x	101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0			0	0	0	0	0	0	0	0
88	x	101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96	0	
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
89	x	101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2			94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0			±0.42	±0.37	±0.46	±0.48	±0.43	±0.49		
90	x	101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
91	x	101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2			94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0			±0.42	±0.48	±0.48	±0.50	±0.32	±0.55		
92	x	104.88	77.32	74.78	73.8	63.91				92.47	77.27	71.95	71.53	59.63			
	σ_{n-1}	±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11				±0.27	±0.48	±0.15	±0.19	±0.26			
93	x	104.88	77.32	74.78	73.8	63.91				104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11				±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
94	x	104.88	77.32	74.78	73.8	63.91				97.17	77.05	74.63	74.57	63.57			
	σ_{n-1}	±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11				±0.18	±0.09	±0.17	±0.08	±0.11			
95	x	100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24			100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29		
	σ_{n-1}	±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73			±0.03	±0.03	±0.08	±0.09	±0.15	±0.24		

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
96	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			98.41	75.96	71.79	70.92	69.51	61.75		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 1.58	± 2.63	± 0.98	± 1.27	± 0.55	± 0.06		
97	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 0.31	± 1.11	± 0.84	± 0.46	± 0.52	± 0.34		
98	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 0.31	± 0.62	± 0.78	± 0.35	± 0.34	± 0.55		
99	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 0.45	± 0.13	± 0.06	± 0.07	± 0.11	± 0.32		
100	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 0.11	± 0.29	± 0.21	± 0.14	± 0.13	± 0.18		
101	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 0.35	± 0.37	± 0.36	± 0.39	± 0.39	± 1.38		
102	x	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	± 0.03	± 0.03	± 0.08	± 0.09	± 0.15	± 0.24			± 0.43	± 0.36	± 0.45	± 0.26	± 0.37	± 1.39		
103	x	101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59			101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59		
	σ_{n-1}	± 0.69	± 0.21	± 0.46	± 0.38	± 0.79	± 0.25			± 0.69	± 0.21	± 0.46	± 0.38	± 0.79	± 0.25		
104	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73			0	0	0	0	0	0	0	0
105	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29			175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
	σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73			0	± 0.29	± 0.65	± 0.31	± 0.23	± 0.20	± 0.43	0
106	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73			± 0.31	± 0.62	± 0.78	± 0.35	± 0.34	± 0.55		
107	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29			175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
	σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73			± 0.04	± 0.06	± 0.28	± 0.06	± 0.06	± 0.11	± 0.04	± 0.09
108	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73			± 0.11	± 0.29	± 0.21	± 0.14	± 0.13	± 0.18		
109	x	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29			104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73			± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73		
110	x	104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	± 0.20	± 0.31	± 0.15	± 0.19	± 0.20	± 0.18			± 0.35	± 0.37	± 0.36	± 0.39	± 0.39	± 1.38		
111	x	104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3			104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3		
	σ_{n-1}	± 0.20	± 0.31	± 0.15	± 0.19	± 0.20	± 0.18			± 0.20	± 0.31	± 0.15	± 0.19	± 0.20	± 0.18		

12. Anhang

No.		\bar{d}_1	\bar{d}_2	\bar{d}_3	\bar{d}_4	\bar{d}_5	\bar{d}_6	\bar{d}_7	\bar{d}_8	\bar{d}_9	\bar{d}_{10}	\bar{d}_{11}	\bar{d}_{12}	\bar{d}_{13}	\bar{d}_{14}	\bar{d}_{15}	\bar{d}_{16}
112	x	104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	±0.20	±0.31	±0.15	±0.19	±0.20	±0.18			±0.43	±0.36	±0.45	±0.26	±0.37	±1.39		
113	x	175.24	101.94	75.54	74.74	70.44	69.54	56.34	23.14	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	0	0	0	0	0	0	0	0	±0.15	±0.97	±0.34	±0.78	±0.35	±1.73		
114	x	101.43	75.98	73.98	71.42	68.89	66.76			94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65		
	σ_{n-1}	±0.34	±0.68	±0.34	±0.23	±1.36	±2.16			±0.42	±0.37	±0.46	±0.48	±0.43	±0.49		
115	x	101.43	75.98	73.98	71.42	68.89	66.76			94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73		
	σ_{n-1}	±0.34	±0.68	±0.34	±0.23	±1.36	±2.16			±0.42	±0.48	±0.48	±0.50	±0.32	±0.55		
116	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
117	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.11	±1.15	±0.15	±0.72	±0.93	±0.10		
118	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.18	±0.34	±0.04	±0.45	±0.10	±0.10		
119	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
120	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			0	0	0	0	0	0	0	0
121	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.02	±0.33	±0.53	±0.43	±0.11	±0.22		
122	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
123	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32		
124	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
125	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73		
126	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.03	±0.03	±0.08	±0.09	±0.15	±0.24		
127	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.35	±0.37	±0.36	±0.39	±0.39	±1.38		

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
128	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.15	±0.97	±0.34	±0.78	±0.35	±1.73		
129	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.43	±0.36	±0.45	±0.26	±0.37	±1.39		
130	x	100.05	71.61	70.16	69.95	69.09	61.82			101.43	75.98	73.98	71.42	68.89	66.76		
	σ_{n-1}	±0.67	±0.12	±0.03	±0.06	±0.03	±0.03			±0.34	±0.68	±0.34	±0.23	±1.36	±2.16		
131	x	175.26	98.9	71.6	69.17	68.5	61.8	50.18	22.67	175.82	103.04	80.96	75.39	68.54	61.34	52.53	22.92
	σ_{n-1}	±0.12	±0.96	±0.23	±0.10	±0.14	±0.16	±0.12	±0.12	±0.28	±0.31	±0.50	±0.13	±0.15	±0.21	±0.41	±0.13
132	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
133	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			92.38	81.36	72.44	71.75	70.3	61.53		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.29	±0.30	±0.31	±0.30	±0.35	±0.44		
134	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07		
135	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.91	±1.22	±0.32	±0.60	±0.14	±0.34		
136	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			96.99	79.39	76.59	75.29	70.59	61.49		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.18	±0.18	±0.18	±0.18	±0.18	±0.18		
137	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.11	±1.15	±0.15	±0.72	±0.93	±0.10		
138	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			92.14	83.14	71.49	71.09	68.64	61.54		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.40	±0.17	0	±0.12	±0.06	±0.06		
139	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42		
140	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			96.43	85.83	76.38	73.83	68.79	61.58		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.23	±0.36	±0.27	±0.48	±0.27	±0.29		
141	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34		
142	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
143	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
144	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
145	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73		
146	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.03	±0.03	±0.08	±0.09	±0.15	±0.24		
147	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.35	±0.37	±0.36	±0.39	±0.39	±1.38		
148	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.15	±0.97	±0.34	±0.78	±0.35	±1.73		
149	x	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	±0.87	±0.37	±0.45	±0.33	±0.38	±0.35			±0.43	±0.36	±0.45	±0.26	±0.37	±1.39		
150	x	175.22	98.49	72.49	71.31	70.91	60.65	54.51	22.8	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	0	±0.19	0	±0.08	±0.11	±0.05	±0.04	0	±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32		
151	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
152	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
153	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.21	±0.71	±0.07	±0.20	±0.47	±0.65		
154	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.91	±1.22	±0.32	±0.60	±0.14	±0.34		
155	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42		
156	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37		
157	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			102.65	76.98	73.45	71.45	67.68	62.18		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			0	0	0	0	0	0		
158	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
159	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			101.76	74.76	71.63	71.63	70.93	61.53		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.29	±0.46	±0.41	±0.41	±0.41	±0.41		

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
160	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
161	x	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.8			101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59		
	σ_{n-1}	±1.06	±0.43	±0.27	±0.32	±0.27	±0.29			±0.69	±0.21	±0.46	±0.38	±0.79	±0.25		
162	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				92.89	81.69	72.79	70.19	61.49			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				0	0	0	0	0			
163	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				105.19	78.29	75.29	70.49	65.89			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				0	0	0	0	0			
164	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				97.99	79.19	75.39	69.79	65.99			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				0	0	0	0	0			
165	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				93.09	82.69	71.89	68.69	61.89			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				0	0	0	0	0			
166	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				105.09	82.69	72.49	70.39	65.99			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				0	0	0	0	0			
167	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				97.39	85.09	74.69	68.69	65.29			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				0	0	0	0	0			
168	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				92.47	77.27	71.95	71.53	59.63			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				±0.27	±0.48	±0.15	±0.19	±0.26			
169	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
170	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				97.17	77.05	74.63	74.57	63.57			
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				±0.18	±0.09	±0.17	±0.08	±0.11			
171	x	100.22	74.14	72.42	70.46	62.21				104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3		
	σ_{n-1}	±1.05	±0.19	±0.19	±0.24	±0.19				±0.20	±0.31	±0.15	±0.19	±0.20	±0.18		
172	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
173	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
174	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.21	±0.71	±0.07	±0.20	±0.47	±0.65		
175	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			97.63	73.93	72.59	68.81	66.92	15.91		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			0	0	0	0	0	0		

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
176	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07		
177	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.91	±1.22	±0.32	±0.60	±0.14	±0.34		
178	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			94.11	81.41	76.97	73.42	67.72	61.64		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.74	±0.35	±0.08	±0.52	±0.23	±0.14		
179	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42		
180	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			0	0	0	0	0	0	0	0
181	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34		
182	x	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	±0.91	±0.28	±0.38	±0.40	±0.40	±0.29			±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73		
183	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
184	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07		
185	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.91	±1.22	±0.32	±0.60	±0.14	±0.34		
186	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
187	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			0	0	0	0	0	0	0	0
188	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			93.14	78.12	71.3	69.47	68.6	61.89		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.42	±0.80	±0.56	±0.98	±1.13	±0.36		
189	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.19	91.72	80.59	72.05	69.59	61.22	53.5	22.64
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			0	±0.08	±0.56	±0.22	±0.61	±0.07	±0.10	0
190	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37		
191	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.82	103.04	80.96	75.39	68.54	61.34	52.53	22.92
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.28	±0.31	±0.50	±0.13	±0.15	±0.21	±0.41	±0.13

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
192	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			97.23	81.64	75.99	71.94	68.5	61.84		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.42	±0.98	±0.51	±0.68	±1.12	±0.37		
193	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.18	±0.34	±0.04	±0.45	±0.10	±0.10		
194	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.19	102.3	83.45	76.13	69.57	61.6	57.59	22.94
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			0	0	0	0	0	0	0	0
195	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.46	95.44	83.01	76.24	69.61	61.4	56.12	22.88
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			0	0	±0.14	±0.60	±0.22	±0.60	±0.09	±0.12
196	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			0	±0.29	±0.65	±0.31	±0.23	±0.20	±0.43	0
197	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.31	±0.62	±0.78	±0.35	±0.34	±0.55		
198	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.45	±0.13	±0.06	±0.07	±0.11	±0.32		
199	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
200	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.04	±0.06	±0.28	±0.06	±0.06	±0.11	±0.04	±0.09
201	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.8
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			0	±0.14	±0.56	±0.36	±0.81	±0.13	±0.17	0
202	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
203	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73		
204	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			92.91	69.94	69.71	69.61	69.21	68.58		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.52	±0.57	±0.37	±0.42	±0.16	±0.28		
205	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.15	±0.97	±0.34	±0.78	±0.35	±1.73		
206	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			97.08	74.11	73.31	72.44	69.34	68.04		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.58	±0.34	±0.62	±0.57	±0.47	±0.58		
207	x	104.35	75.88	73.52	71.64	69.42	61.72			104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3		
	σ_{n-1}	±0.50	±0.38	±0.31	±0.36	±0.37	±0.37			±0.20	±0.31	±0.15	±0.19	±0.20	±0.18		

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
208	x	176	103.62	75.95	71.82	68.97	61.62	53.4	23.1	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	0	±0.61	±0.17	±0.20	±0.49	±0.62	±0.01	0	±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
209	x	176	103.62	75.95	71.82	68.97	61.62	53.4	23.1	175.13	91.99	70.09	69.49	68.79	68.29	51.29	22.72
	σ_{n-1}	0	±0.61	±0.17	±0.20	±0.49	±0.62	±0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0
210	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
211	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			92.38	81.36	72.44	71.75	70.3	61.53		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.29	±0.30	±0.31	±0.30	±0.35	±0.44		
212	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.60	±0.57	±0.35	±0.33	±0.20	±0.30		
213	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07		
214	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.91	±1.22	±0.32	±0.60	±0.14	±0.34		
215	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			101.53	78.61	77	72.66	68.01	61.52		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.46	±0.36	±0.24	±0.40	±0.34	±0.34		
216	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.13	±0.07	±0.14	±0.20	±0.20	±0.06		
217	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.11	±1.15	±0.15	±0.72	±0.93	±0.10		
218	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			92.14	83.14	71.49	71.09	68.64	61.54		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.40	±0.17	0	±0.12	±0.06	±0.06		
219	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.28	±0.53	±0.52	±0.45	±0.38	±0.42		
220	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.18	±0.34	±0.04	±0.45	±0.10	±0.10		
221	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			96.43	85.83	76.38	73.83	68.79	61.58		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.23	±0.36	±0.27	±0.48	±0.27	±0.29		
222	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.02	±0.33	±0.53	±0.43	±0.11	±0.22		
223	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93		
	σ_{n-1}	±1.03	±0.40	±0.52	±0.41	±0.33	±0.36			±0.31	±1.11	±0.84	±0.46	±0.52	±0.34		

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
224	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.31	± 0.62	± 0.78	± 0.35	± 0.34	± 0.55		
225	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.42	± 0.37	± 0.46	± 0.48	± 0.43	± 0.49		
226	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.48	± 0.57	± 0.94	± 0.51	± 0.53	± 0.68		
227	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.11	± 0.29	± 0.21	± 0.14	± 0.13	± 0.18		
228	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.42	± 0.48	± 0.48	± 0.50	± 0.32	± 0.55		
229	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.07	± 0.05	± 0.11	± 0.32	± 0.34	± 0.73		
230	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.35	± 0.37	± 0.36	± 0.39	± 0.39	± 1.38		
231	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.69	± 0.21	± 0.46	± 0.38	± 0.79	± 0.25		
232	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.15	± 0.97	± 0.34	± 0.78	± 0.35	± 1.73		
233	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.20	± 0.31	± 0.15	± 0.19	± 0.20	± 0.18		
234	x	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6			96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23		
	σ_{n-1}	± 1.03	± 0.40	± 0.52	± 0.41	± 0.33	± 0.36			± 0.43	± 0.36	± 0.45	± 0.26	± 0.37	± 1.39		
235	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	99.82	79.2	73.51	70.93	67.92	61.9		
	σ_{n-1}	± 0.29	± 0.80	± 0.60	± 0.36	± 0.43	± 0.44	± 0.70	± 0.34	± 0.60	± 0.57	± 0.35	± 0.33	± 0.20	± 0.30		
236	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54		
	σ_{n-1}	± 0.29	± 0.80	± 0.60	± 0.36	± 0.43	± 0.44	± 0.70	± 0.34	± 0.21	± 0.71	± 0.07	± 0.20	± 0.47	± 0.65		
237	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7		
	σ_{n-1}	± 0.29	± 0.80	± 0.60	± 0.36	± 0.43	± 0.44	± 0.70	± 0.34	± 0.13	± 0.07	± 0.14	± 0.20	± 0.20	± 0.06		
238	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38		
	σ_{n-1}	± 0.29	± 0.80	± 0.60	± 0.36	± 0.43	± 0.44	± 0.70	± 0.34	± 0.11	± 1.15	± 0.15	± 0.72	± 0.93	± 0.10		
239	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64		
	σ_{n-1}	± 0.29	± 0.80	± 0.60	± 0.36	± 0.43	± 0.44	± 0.70	± 0.34	± 0.28	± 0.53	± 0.52	± 0.45	± 0.38	± 0.42		

12. Anhang

No.		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}	δ_{15}	δ_{16}
240	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31		
	σ_{n-1}	±0.29	±0.80	±0.60	±0.36	±0.43	±0.44	±0.70	±0.34	±0.04	±3.40	±0.08	±1.51	±0.76	±0.37		
241	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
	σ_{n-1}	±0.29	±0.80	±0.60	±0.36	±0.43	±0.44	±0.70	±0.34	0	±0.29	±0.65	±0.31	±0.23	±0.20	±0.43	0
242	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	101.76	74.76	71.63	71.63	70.93	61.53		
	σ_{n-1}	±0.29	±0.80	±0.60	±0.36	±0.43	±0.44	±0.70	±0.34	±0.29	±0.46	±0.41	±0.41	±0.41	±0.41		
243	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.8
	σ_{n-1}	±0.29	±0.80	±0.60	±0.36	±0.43	±0.44	±0.70	±0.34	0	±0.14	±0.56	±0.36	±0.81	±0.13	±0.17	0
244	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59		
	σ_{n-1}	±0.29	±0.80	±0.60	±0.36	±0.43	±0.44	±0.70	±0.34	±0.69	±0.21	±0.46	±0.38	±0.79	±0.25		
245	x	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.8	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29		
	σ_{n-1}	±0.29	±0.80	±0.60	±0.36	±0.43	±0.44	±0.70	±0.34	±0.15	±0.97	±0.34	±0.78	±0.35	±1.73		
246	x	101.3	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92			94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65		
	σ_{n-1}	±0.41	±0.36	±0.37	±0.39	±0.37	±0.30			±0.42	±0.37	±0.46	±0.48	±0.43	±0.49		
247	x	101.3	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92			103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7		
	σ_{n-1}	±0.41	±0.36	±0.37	±0.39	±0.37	±0.30			±0.48	±0.57	±0.94	±0.51	±0.53	±0.68		
248	x	101.3	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92			96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86		
	σ_{n-1}	±0.41	±0.36	±0.37	±0.39	±0.37	±0.30			±0.11	±0.29	±0.21	±0.14	±0.13	±0.18		
249	x	101.3	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92			101.7	77.5	75.8	72.5	70.6	61.2		
	σ_{n-1}	±0.41	±0.36	±0.37	±0.39	±0.37	±0.30			0	0	0	0	0	0		
250	x	101.3	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92			94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73		
	σ_{n-1}	±0.41	±0.36	±0.37	±0.39	±0.37	±0.30			±0.42	±0.48	±0.48	±0.50	±0.32	±0.55		
251	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				92.89	81.69	72.79	70.19	61.49			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				0	0	0	0	0			
252	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				101.53	78.61	77	72.66	68.01	61.52		
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				±0.46	±0.36	±0.24	±0.40	±0.34	±0.34		
253	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				105.19	78.29	75.29	70.49	65.89			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				0	0	0	0	0			
254	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				97.99	79.19	75.39	69.79	65.99			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				0	0	0	0	0			
255	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				93.09	82.69	71.89	68.69	61.89			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				0	0	0	0	0			

12. Anhang

No.		$\bar{\delta}_1$	$\bar{\delta}_2$	$\bar{\delta}_3$	$\bar{\delta}_4$	$\bar{\delta}_5$	$\bar{\delta}_6$	$\bar{\delta}_7$	$\bar{\delta}_8$	$\bar{\delta}_9$	$\bar{\delta}_{10}$	$\bar{\delta}_{11}$	$\bar{\delta}_{12}$	$\bar{\delta}_{13}$	$\bar{\delta}_{14}$	$\bar{\delta}_{15}$	$\bar{\delta}_{16}$
256	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				105.09	82.69	72.49	70.39	65.99			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				0	0	0	0	0			
257	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				97.39	85.09	74.69	68.69	65.29			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				0	0	0	0	0			
258	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				92.47	77.27	71.95	71.53	59.63			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				±0.27	±0.48	±0.15	±0.19	±0.26			
259	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				104.88	77.32	74.78	73.8	63.91			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				±0.13	±0.43	±0.06	±0.15	±0.11			
260	x	104.08	76.59	73.79	70.14	66.1				97.17	77.05	74.63	74.57	63.57			
	σ_{n-1}	±0.96	±0.22	±0.33	±0.24	±0.22				±0.18	±0.09	±0.17	±0.08	±0.11			
261	x	103.96	73.77	72.15	71.73	71.35	16.19			99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54		
	σ_{n-1}	±0.52	±0.25	±0.26	±0.15	±0.36	±0.21			±0.76	±1.01	±0.20	±0.12	±0.37	±0.30		
262	x	103.96	73.77	72.15	71.73	71.35	16.19			103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44		
	σ_{n-1}	±0.52	±0.25	±0.26	±0.15	±0.36	±0.21			±0.14	±0.21	0	±0.14	±0.07	±0.07		
263	x	103.96	73.77	72.15	71.73	71.35	16.19			104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81		
	σ_{n-1}	±0.52	±0.25	±0.26	±0.15	±0.36	±0.21			±0.91	±1.22	±0.32	±0.60	±0.14	±0.34		
264	x	103.96	73.77	72.15	71.73	71.35	16.19			94.11	81.41	76.97	73.42	67.72	61.64		
	σ_{n-1}	±0.52	±0.25	±0.26	±0.15	±0.36	±0.21			±0.74	±0.35	±0.08	±0.52	±0.23	±0.14		
265	x	103.96	73.77	72.15	71.73	71.35	16.19			100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24		
	σ_{n-1}	±0.52	±0.25	±0.26	±0.15	±0.36	±0.21			±0.07	±0.05	±0.11	±0.32	±0.34	±0.73		

Die Gruppennamen sind zu finden in Kapitel 5.4.3

12.2 Hindsgaul-Datenreihe

Tabelle 105. Chemische Verschiebungen Hindsgaul-Datenreihe in [ppm]

No	Name	Chemische Verschiebungen
1	β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-OMe	103.7; 103.56; 78.98; 75.98; 75.39; 75.01; 73.41; 73.13; 71.57; 69.16; 61.64; 60.67; 57.83
2	α -L-Fucp-1-2- β -D-Galp-OMe	103.09; 100.46; 78.58; 75.29; 73.63; 72.3; 69.97; 69.15; 68.82; 67.26; 61.33; 57.49; 15.58
3	α -L-Fucp-1-3- β -D-GlcpNAc-OMe	175.4; 102.4; 100.63; 81.15; 76.52; 72.47; 70.18; 69.29; 68.6; 67.55; 61.4; 57.77; 55.78; 22.85; 15.82
4	α -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp-OMe	103.69; 100.15; 77.28; 76.85; 75.15; 73.59; 73.53; 73.3; 72.25; 69.92; 61.32; 61.07; 57.79
5	α -D-Glcp-1-4- α -D-Glcp-OMe	100.23; 99.7; 77.38; 74.17; 73.46; 73.28; 72.34; 71.65; 70.69; 69.93; 61.13; 61.06; 55.66
6	α -D-Glcp-1-6- α -D-Glcp-OMe	100; 98.48; 73.99; 73.68; 72.43; 72.1; 71.78; 70.67; 70.12; 70.01; 66.06; 61.06; 55.78

12.3 Stenutz-Datenreihe

Tabelle 106. Chemische Verschiebungen Stenutz-Datenreihe in [ppm]

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
1	93	71.73	72.32	79.92	70.7	60.72	103.79	71.5	73.14	69.16
	74.66	69.69	104.03	71.5	73.31	69.33	75.77	61.67		
2	101.14	69.29	69.82	69.7	71.68	61.27	100.14	69.11	71.68	79.57
	69.9	61.27	55.86							
3	101.04	69.28	69.84	69.69	71.65	61.26	103.73	71.56	76.08	78.1
	73.55	61.02	103.96	72.93	75.17	79.5	75.47	60.79	57.82	
4	104.34	74.54	75.14	78.04	75.64	61.04	101.34	71.04	80.94	71.74
	69.84	17.34								
5	100.49	78.89	70.79	67.79	74.39	61.79	101.19	78.99	70.79	67.79
	73.89	61.79	101.19	78.99	70.79	67.79	73.89	61.79	101.19	79.19
	70.79	67.79	73.89	61.79	102.59	71.59	71.19	75.09	72.49	61.79
6	98.57	68.87	69.77	69.87	69.27	67.37	96.57	73.57	69.87	68.37
	71.37	61.67	96.77	71.77	73.77	70.27	70.77	66.57		
7	96.4	72	73.9	70.3	71.3	66.6	97.2	76.7	72	70.3
	72.4	61.3								

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
8	96.4	72	73.9	70.3	71.3	66.6	97.2	76.7	72	70.3
	72.4	61.3								
9	98.7	69.02	70.19	69.83	71.56	61.68	104.92	73.36	84.74	68.69
	74.44	66.24	102.46	52.21	80.42	68.6	75.44	61.68	175.6	22.98
10	103.33	73.83	75.33	79.33	75.63	61.23	103.83	71.73	74.23	79.63
	74.93	174.13	100.63	71.33	72.43	77.33	75.83	61.33		
11	100.41	72.21	74.01	77.91	71.91	61.31				
12	98.85	79.15	71.15	67.05	71.75	66.25	102.65	70.65	71.15	67.35
	73.85	61.65								
13	100.63	77.92	70.29	72.85	70.03	17.42	101.59	79.27	70.65	72.96
	70.14	17.42	98.93	71.64	80.57	72.42	73.24	17.42		
14	100.04	71.14	81.14	71.14	71.14	66.14	101.54	67.94	79.74	70.54
	71.14	174.94	101.84	70.54	79.94	66.34	73.64	61.54	98.94	69.04
	70.34	69.94	71.74	61.74	98.94	69.34	70.34	80.34	71.94	61.74
	104.64	72.84	82.94	70.34	76.14	61.14				
15	101.25	68.6	77.78	69.73	72.01	61.71	102.71	70.99	70.72	80.4
	68.43	17.57	101.01	71.06	81.48	66.72	76.63	61.6		
16	93.3	79.85	70.72	67.76	74	61.79	102.93	71.07	70.72	67.6
	73.22	61.72								
17	93.21	80.08	70.68	67.76	73.95	61.79	101.28	79.25	70.68	67.76
	73.95	61.79	102.96	71.07	70.68	67.6	73.17	61.79		
18	93.18	80.12	70.69	67.76	73.92	61.76	101.29	79.5	70.69	67.76
	73.92	61.76	101.29	79.27	70.69	67.76	73.92	61.76	102.93	71.04
	70.69	67.61	73.18	61.76						
19	93.2	80.14	70.67	67.75	73.95	61.72	101.27	79.51	70.67	67.75
	73.95	61.72	101.27	79.51	70.67	67.75	73.95	61.72	101.27	79.51
	70.67	67.75	73.95	61.72	101.27	79.24	70.67	67.75	73.95	61.72
	102.91	70.99	70.67	67.59	73.19	61.72				
20	92.78	71.78	83.18	68.98	72.08	61.58	103.18	73.98	74.98	79.38
	75.58	61.48	102.98	73.78	76.38	70.38	76.78	60.98		
21	96.25	74.65	85.65	69.05	75.65	61.65	103.25	74.05	75.05	79.45
	75.65	61.55	103.05	73.85	76.45	70.45	76.85	61.05		

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
22	99.84	71.14	80.95	70.54	72.24	61.25	100.54	71.14	81.04	70.45
	73.14	61.25	99.54	72.24	73.95	78.14	71.14	61.25		
23	96.44	71.94	73.54	72.54	72.24	175.74	102.54	67.74	76.64	71.14
	70.04	17.54	93.44	80.34	70.64	73.24	69.34	17.64		
24	96.28	67.08	75.68	69.13	67.23	15.88	96.28	67.08	75.68	69.13
	67.23	15.88	95.38	66.78	75.68	68.98	67.58	16.08	92.68	69.48
	73.18	68.48	66.88	15.88	95.73	68.48	70.58	72.38	67.58	16.18
	96.38	67.08	75.48	68.98	67.08	15.88				
25	101.09	79.11	70.33	68.79	71.89	61.72	100.67	70.97	82.73	66.36
	76.88	61.36	103.25	55.35	82.93	76.18	69.23	61.15	175.36	23.25
	101.46	51.6	80.96	68.64	75.6	61.36	175.36	23.03	104.55	73.38
	74.8	79.5	75.12	60.58	103.57	73.19	74.56	80.47	77.24	174.49
26	98.79	72.29	74.29	71.09	70.49	66.49				
27	175.19	174.99	98.99	97.79	78.09	72.29	71.79	71.09	70.49	67.89
	65.99	60.89	54.69	50.69	22.69	22.49				
28	96.71	69.35	69.93	79.61	71.85	61.02	102.67	67.75	76.53	71.24
	70.07	17.64	101.27	68.82	77.89	69.74	71.85	61.37		
29	99.33	49.51	77.68	69.14	71.16	61.35	22.98	174.98	100.67	72.67
	72.2	78.22	71.76	60.87	101.08	71.06	80.82	71.68	70.09	17.22
	103.95	53.49	71.16	76.72	75.7	60.96	22.78	175.8	105.39	71.55
	72.95	78.4	75.88	60.8						
30	104.49	52.59	77.99	69.39	75.69	62.19	96.69	69.39	70.29	77.79
	71.69	61.29	102.39	51.69	76.99	65.19	75.89	62.19	103.09	77.09
	74.69	69.79	73.99	69.09	100.19	69.29	70.69	72.89	67.79	16.29
	23.39	23.59	175.04	175.14						
31	99.39	50.19	68.29	76.79	70.79	172.69	22.49	175.09	101.49	79.69
	70.29	72.89	69.69	17.19	101.79	70.59	78.39	71.89	69.89	17.09
	103.29	55.39	81.79	71.09	75.99	60.99	22.89	175.29		
32	175.17	174.67	104.17	99.87	99.67	98.77	96.77	79.27	77.67	76.57
	76.57	76.57	75.07	73.67	73.07	72.77	72.77	72.57	71.37	71.37
	71.07	70.37	69.97	69.67	68.87	67.37	61.97	61.17	60.57	56.67
	52.77	23.07	23.07	17.87						

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
33	101.99	56.59	74.89	70.69	76.59	61.59	103.39	72.19	73.69	69.49
	75.59	61.69	103.79	52.29	80.39	68.49	75.29	61.79	102.79	79.69
	76.29	79.29	75.09	60.69	103.69	71.09	82.29	75.89	75.09	61.39
	23.59	22.89	175.19	174.99						
34	98.62	50.62	68.02	82.02	68.02	16.32	23.02	175.12	102.62	70.92
	81.12	71.72	70.42	17.42	103.52	56.52	79.62	69.42	76.42	61.52
	23.02	175.02								
35	174.69	102.19	101.59	101.09	100.19	82.39	81.39	77.99	76.79	76.79
	76.59	73.89	71.59	71.19	70.89	69.89	69.69	68.89	68.79	67.89
	61.99	61.79	61.09	56.39	22.89	17.59				
36	100.36	72.41	73.76	69.86	72.11	68.46	104.01	73.76	76.66	78.41
	75.06	172.96	105.26	72.46	73.36	69.66	73.96	70.86	103.96	72.36
	73.76	78.36	75.46	61.86	102.46	56.06	74.66	79.66	75.76	61.06
	23.36	175.56								
37	98.77	72.47	73.67	70.27	71.47	68.67	103.87	73.97	77.47	77.67
	77.22	175.67	104.97	72.27	73.57	69.47	74.47	70.32	103.67	72.17
	73.87	77.97	75.37	61.67	102.37	55.97	73.22	79.87	75.57	61.07
	23.17	175.37								
38	94.19	68.79	69.99	70.19	71.79	61.89	101.59	73.19	77.69	64.79
	74.79	61.49	95.59	49.89	73.19	68.79	71.29	61.79	22.69	175.19
	103.09	51.99	76.99	65.09	75.59	61.69	22.89	175.59	99.09	69.19
	69.59	82.29	67.19	15.89						
39	102.91	73.81	76.21	70.21	76.81	61.31	101.21	72.01	72.01	80.51
	71.61	174.41	96.81	71.61	82.31	72.01	71.51	16.21		
40	100.3	71.94	72.02	81.91	71.94	173.83	101.88	76.61	77.36	67.97
	77.24	62.28	101.93	70.82	72.4	79.13	75.61	61.46	101.52	56.53
	74.1	70.53	76.49	61.28	101.38	55.38	84.26	69.21	76.34	61.44
	23.21	23.07	175.01	174.8						
41	98.89	100.59	101.29	61.19	61.59	61.59	66.79	67.59	67.59	70.29
	70.59	71.19	73.89	73.89	76.69	77.69	79.19	80.89		
42	102.64	102.64	101.2	101.2	101.2	79.28	79.28	79.04	78.61	78.61
	73.99	73.99	73.99	73.86	73.86	70.68	70.68	70.68	70.26	70.26
	67.69	67.69	67.54	66.77	66.77	61.57	61.57	61.71	61.71	61.71

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
43	102.65	102.65	101.23	101.23	79.17	78.99	78.62	78.62	73.98	73.98
	73.98	73.98	70.69	70.69	70.27	70.27	67.7	67.57	66.77	66.77
	61.57	61.57	61.71	61.71						
44	94.25	70.8	69.35	77.5	70.1	67.35	100.4	71.05	73.5	67.3
	76.9	61.55	99.35	68.95	70.05	69.8	71.6	61.6		
45	104.59	103.99	98.59	95.79	94.29	79.19	76.89	76.59	76.39	76.19
	74.99	74.49	73.59	72.59	72.39	72.09	71.79	71.79	71.19	71.19
	70.39	70.19	68.99	68.09	61.59	61.49	61.19	60.79	17.49	
46	174.89	104.49	102.09	101.09	98.59	94.49	79.19	78.19	77.39	77.19
	76.39	76.19	75.29	74.99	74.49	73.59	72.79	72.59	72.39	72.09
	71.29	70.99	70.19	69.89	67.99	61.69	61.49	61.19	60.79	53.99
	22.59	17.39								
47	174.69	102.69	101.69	101.59	101.39	82.19	79.39	78.69	78.09	76.49
	73.09	72.99	72.29	71.29	70.79	70.59	69.79	69.69	69.69	69.29
	61.59	56.19	22.99	17.29	17.29	17.09				
48	100	54.2	73.5	74	75.9	61.3	22.8	175.1	98.7	54.5
	70	79.8	71.9	60.7	22.7	176.3				
49	104.19	102.59	101.29	101.09	82.79	79.69	79.29	78.89	76.29	74.09
	73.69	72.89	71.79	70.59	70.59	70.49	69.79	68.49	66.89	66.69
	61.89	61.79	61.49	61.29						
50	104.79	104.39	102.49	96.59	95.29	83.29	82.59	77.69	76.39	76.29
	75.69	75.09	74.39	73.99	73.09	72.49	71.19	70.89	70.69	70.59
	70.19	69.89	69.89	68.99	61.89	61.49	61.29	60.49	176.29	
51	104.79	104.39	102.49	96.59	95.29	83.29	82.59	77.69	76.39	76.29
	75.69	75.09	74.39	73.99	73.09	72.49	71.19	70.89	70.69	70.59
	70.19	69.89	69.89	68.99	61.89	61.49	61.29	60.49	176.29	
52	104.53	70.28	78.21	65.66	75.3	61.52	96.09	67.86	79.61	69.66
	71.16	61.56								
53	96.7	71.2	78.5	69.9	71.8	61.9	102.5	71.3	70.3	80.5
	68.9	18.8	105.3	71.6	81.2	69.9	76.4	62.1	100.5	80.9
	71.2	73.3	69.7	17.4	104.2	74.6	75.8	80.3	77.3	175.7
	96.9	69.3	70.2	69.9	71.6	62.1				

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
54	100.07	68.88	70.27	72.55	67.08	15.91	100.9	77.23	74.3	69.82
	75.78	61.55	103.67	55.63	78.36	69.25	76.08	61.71	22.96	174.59
	103.6	70.83	82.41	69.11	75.47	61.42	96.45	74.64	75.05	79.35
	75.47	61.05								
55	98.6	68.62	69.94	72.65	67.38	16.01	103.25	71.35	73.25	69.04
	75.45	61.57	102.82	56.6	76.79	73.08	76.11	60.69	23.05	175.18
	103.56	70.67	82.65	68.93	75.5	62.12	96.44	74.62	75.07	79.41
	75.45	61.04								
56	92.67	72.09	72.29	79.69	70.88	60.75	103.88	71.7	73.24	69.12
	74.67	69.32	101.93	56.38	74.41	70.74	76.72	61.56	23.2	175.54
57	96.57	76.67	72.27	70.27	70.77	66.27	97.27	71.97	73.57	70.27
	72.57	61.27	98.27	71.97	73.77	70.27	71.07	66.27		
58	100.46	72.36	72.06	79.26	70.46	68.16	102.86	73.76	79.56	75.46
	61.16	103.06	73.66	75.16	79.66	75.46	61.16	103.86	71.76	73.06
	78.26	76.06	60.96	103.66	71.86	73.46	69.36	75.96	61.66	
59	103.38	73.98	85.08	68.88	76.38	61.48				
60	98.52	68.52	69.82	74.32	66.92	16.12	100.32	69.02	70.12	72.92
	67.72	16.02	101.32	77.22	75.42	69.52	75.52	62.32	103.42	56.32
	72.72	76.12	60.32	22.92	174.52	57.92				
61	100.45	71.05	73.5	67.3	76.9	61.55	99.35	68.95	70.05	69.8
	71.6	61.6	94.25	70.8	69.35	77.5	70.1	67.35		
62	100.45	71.05	73.5	67.3	76.9	61.55	99.35	68.95	70.05	69.8
	71.6	61.6	94.25	70.8	69.35	77.5	70.1	67.35		
63	100.63	70.98	73.43	67.28	76.83	61.53	100.43	70.53	72.03	76.93
	75.58	61.08	99.33	68.93	70.03	69.78	71.63	61.58	94.28	70.78
	69.33	77.48	70.13	67.28						
64	93.12	70.96	78.03	68.48	69.83	61.84	102.73	71.18	69.96	82.07
	68.88	17.71	102.13	71.25	71.25	67.43	73.92	61.57		
65	175.19	104.89	103.59	103.29	101.59	92.39	82.19	79.49	79.49	75.99
	75.69	75.39	74.49	74.19	73.19	73.19	72.09	71.89	71.69	71.69
	70.69	70.69	69.19	69.19	69.19	69.19	61.59	61.59	60.79	60.79
	55.69	23.09								

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
66	175.33	105.03	103.43	101.83	92.83	82.33	79.63	76.63	75.83	74.43
	73.33	72.23	72.03	71.83	71.03	70.83	70.63	69.33	69.33	69.23
	61.73	61.53	60.73	56.33	23.13					
67	175.09	104.89	104.59	103.49	103.29	101.69	96.39	82.59	82.09	79.49
	79.19	75.99	75.69	75.39	75.39	74.99	74.49	74.19	73.19	73.19
	71.69	71.59	70.89	70.69	69.19	69.19	69.19	69.19	68.99	61.59
	61.59	61.59	60.69	55.69	23.09					
68	175.19	104.89	103.59	103.29	101.59	96.39	82.19	79.49	79.19	75.99
	75.69	75.39	75.39	74.99	74.49	74.49	74.19	73.19	73.19	71.69
	71.69	70.69	69.19	69.19	69.19	69.19	61.59	60.79	60.79	55.69
	23.09									
69	175.37	105.07	103.47	101.87	96.57	82.37	79.57	76.67	75.87	75.57
	75.17	74.67	74.67	74.47	73.37	71.87	70.87	70.67	69.37	69.37
	69.27	61.77	61.57	60.87	56.37	23.17				
70	103.69	73.39	75.59	79.49	75.09	60.99	103.09	73.79	76.69	70.39
	76.39	61.59	58.09							
71	103.39	73.59	74.69	80.69	77.49	98.19	50.49	68.29	69.29	70.49
	69.69	23.39	175.09	102.09	56.49	74.39	70.49	74.99	66.59	23.09
	174.79	101.29	54.79	83.79	69.69	76.19	61.69	22.89	174.59	
72	104.86	73.56	75.16	79.86	75.56	61.16	102.86	52.56	81.06	68.96
	75.56	61.66	103.46	54.06	72.86	75.76	75.06	61.96	103.96	72.06
	73.76	77.36	75.56	61.76	23.26	23.46	175.76	175.86		
73	94.99	50.59	68.99	76.49	72.59	61.39	101.59	51.59	76.29	64.89
	76.09	61.99	103.19	54.29	80.79	77.09	75.39	61.99	104.49	74.19
	74.99	71.69	77.09	174.79	22.99	23.29	23.49	175.99	175.49	175.29
74	102.9	102.66	101.48	78.76	78.76	78.43	72.82	72.26	71.93	70.5
	70.5	70.01	69.82	69.82	17.28	17.28	17.28			
75	102.6	70.7	78.5	72.3	69.9	17.3	102.5	70.7	78.5	72.1
	69.9	17.3	101.4	78.7	70.6	73.1	70.1	17.4		
76	102.63	56.23	82.33	69.33	76.43	61.53	102.33	70.43	80.53	71.63
	70.03	17.33	101.43	78.33	70.83	73.03	69.73	17.13	101.83	71.33
	78.23	72.23	69.73	17.43	22.93	174.93				

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
77	102.57	70.77	78.97	71.97	69.97	17.17	102.27	70.57	78.27	71.87
	70.37	17.17	100.17	51.07	67.97	79.07	72.47	61.57	22.57	175.07
78	102.57	70.77	78.47	72.07	69.87	17.27	102.47	70.77	78.57	72.27
	69.87	17.27	101.37	78.67	70.77	73.07	69.87	17.27	101.47	78.67
	70.67	73.07	70.07	17.27						
79	102.69	66.79	74.89	70.99	69.79	17.39	96.89	70.69	79.19	66.49
	73.39	61.39	101.29	68.69	77.69	69.79	72.19	61.89		
80	101.37	71.37	73.87	67.57	76.97	61.77	102.97	70.92	71.57	80.37
	68.62	17.67	93.07	69.87	78.17	69.27	71.37	61.77		
81	101.52	71.37	74.07	67.67	77.07	61.77	103.07	71.07	71.47	80.32
	68.57	17.76	104.07	71.07	81.37	69.27	75.87	61.56	101.37	71.37
	74.07	67.67	76.17	69.27	94.77	72.07	71.47	80.32	67.67	18.06
82	101.73	70.95	80.99	71.31	69.65	17.07	102.67	56.22	82.38	68.72
	76.36	61.11	175.09	22.83						
83	100.06	72.16	73.26	79.25	71.82	61.19	99.9	54.03	72.1	74.75
	75.74	60.75	176.16	22.77						
84	101.4	78.94	70.72	72.94	69.8	17.39	100.1	76.88	70.2	72.79
	70.13	17.39	96.9	53.8	79.94	69.06	73.01	61.22	101.6	71.3
	78.21	72.29	69.7	17.16						
85	96.33	72.5	72.5	78.1	71.65	60.81	101.28	68.05	76.57	71.1
	70.09	17.51								
86	96.35	72.5	72.5	78.08	71.65	60.81	101.27	68.06	76.62	71.09
	70.07	17.51								
87	99.03	71.27	80.98	66.85	76.85	61.36	100.69	77.8	70.44	67.7
	74.07	61.69	101.39	79.25	70.76	67.7	74.07	61.69		
88	103.34	102.84	99.54	95.04	79.24	78.04	76.04	72.54	71.84	71.64
	71.34	71.04	70.44	70.44	70.04	70.04	69.94	69.14	67.54	61.94
	61.04	55.54	54.34	22.64	17.54	17.44				
89	101.64	79.4	70.62	73.1	69.83	17.27	101.37	78.84	70.73	72.99
	69.74	17.35	101.64	71.26	78.07	72.24	69.67	17.15	102.82	56.18
	82.03	69.19	75	66.76	22.99	174.67	98.86	72.24	73.9	70.45
	72.63	61.44								

12. Anhang

No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
90	101.37	79.11	70.72	73.13	69.9	17.09	101.13	75.2	74.8	71.34
	69.72	17.54	101.67	71.25	77.98	72.29	69.66	17.29	102.48	56.25
	82.14	69.36	76.58	61.72	22.99	174.61	95.56	71.9	73.78	70.45
	72.47	61.42								
91	101.79	74.89	74.71	71.57	70.12	17.08	101.24	79.01	70.69	73
	69.69	17.37	101.74	71.26	78.01	72.28	69.67	17.44	102.16	56.03
	82.32	69.27	76.68	61.59	23.23	174.37	95.37	72.08	73.89	70.38
	72.17	61.22								
92	101.51	79.3	70.52	73.06	69.76	17.06	101.3	78.66	70.72	72.93
	69.65	17.29	101.63	71.21	78.05	72.2	69.65	17.21	102.66	56.15
	82.1	69.21	76.45	61.49	22.93	174.63				
93	101.56	79.7	72.56	73.11	69.74	17.33	101.17	78.67	70.74	73.02
	69.74	17.63	100.12	71.39	77.29	72.44	70.46	17.44	103.17	55.63
	81.84	70.46	76.32	62.02	174.82	23.19	93.44	75.66	71.89	70.32
	73.26	61.39	96.63	72.1	73.71	70.32	72.56	61.32		
94	101.73	79.4	70.46	72.98	69.82	17.35	101.5	78.79	70.7	72.84
	69.02	17.35	101.91	71.29	77.98	72.33	69.69	17.1	102.83	56.34
	82.17	69.82	76.56	61.44						
95	101.53	70.53	78.73	72.13	69.33	17.43	55.43	102.43	67.63	76.53
	71.13	69.83	17.33	96.33	72.13	73.73	70.33	72.53	61.33	
96	101.64	70.74	78.24	70.94	69.39	17.44	55.64	101.64	74.54	75.74
	70.94	70.04	17.44	96.24	72.04	73.74	70.44	72.64	61.34	102.54
	70.39	70.94	72.94	70.09	17.64					
97	100.25	74.45	75.35	71.15	69.15	17.25	101.45	79.25	70.55	73.05
	69.85	17.45	55.55	95.35	71.85	73.75	70.25	72.35	61.15	103.05
	56.55	73.45	70.75	76.5	61.55	22.95	175.35			
98	17.17	17.07	22.97	56.57	61.67	69.37	69.77	69.97	70.37	70.67
	70.72	70.77	71.87	72.47	72.77	74.57	76.47	76.97	78.27	80.17
	100.27	101.67	102.27	103.07	175.37					
99	92.34	78.14	70.04	71.94	69.34	17.44	98.44	71.94	72.04	79.44
	71.04	61.14	100.04	54.04	72.74	67.34	77.24	60.54	22.84	176.14
100	103.19	73.79	85.49	68.99	76.39	61.49				

12. Anhang

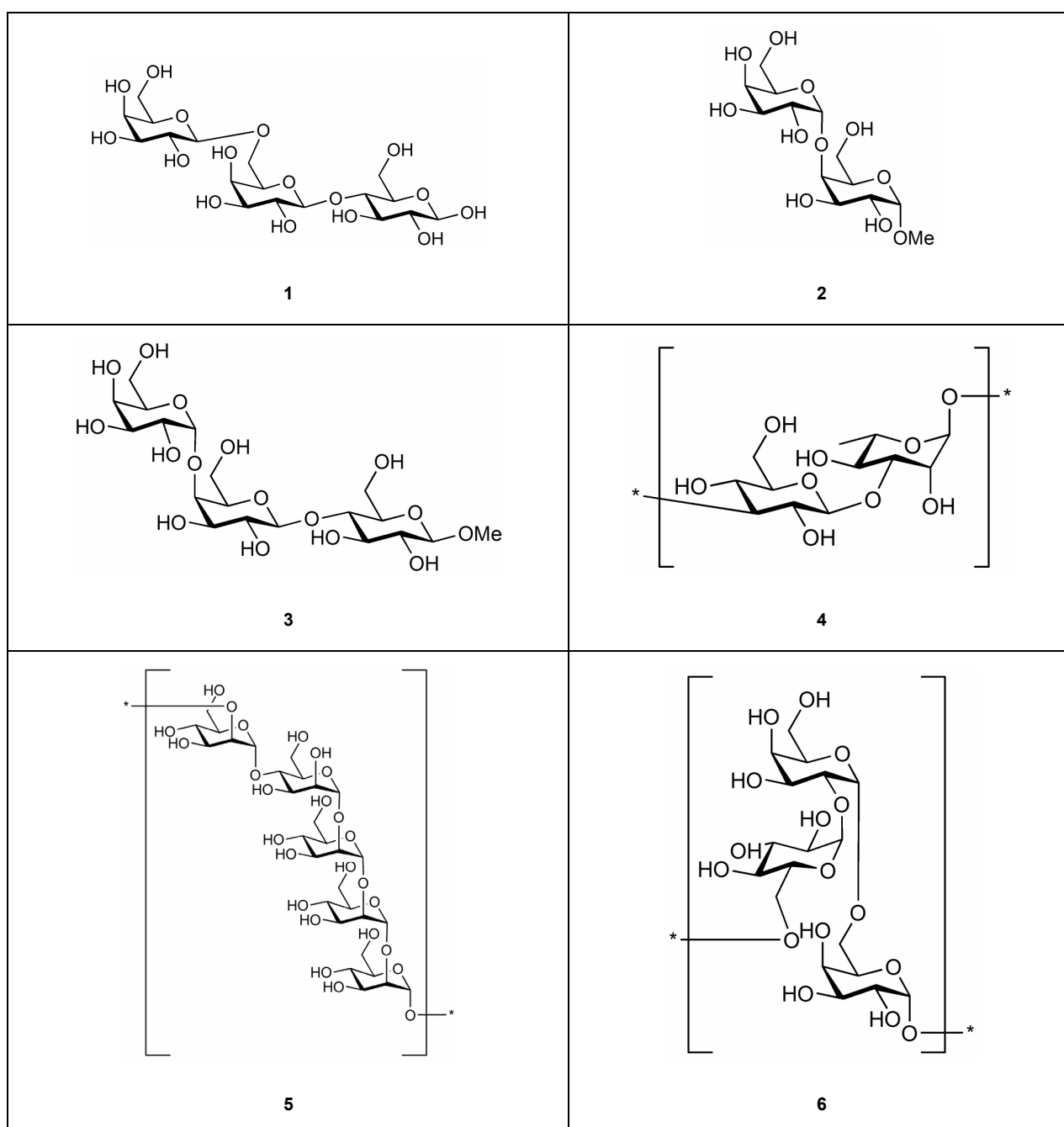
No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
101	16.32	22.77	23.11	48.44	50.08	54.17	61.37	61.88	67.76	67.76
	68.54	66.76	69.5	71.2	72.68	73.63	77.26	92.03	96.18	99.81
	174.53	176.33	22.94	175.43						
102	103.04	73.09	87	68.87	76.73	60.97	103.04	73.01	86.79	68.74
	76.73	61.11	103.04	73.01	86.43	68.74	76.47	68.74	103.04	74.02
	76.95	70.52	75.16	61.2						
103	102.04	78.84	70.64	73.34	70.14	17.44	101.24	76.24	78.64	72.94
	70.04	17.24	102.64	70.64	78.64	72.14	70.14	17.44	102.74	70.64
	78.84	72.24	70.04	17.44	103.54	56.54	73.84	70.64	76.74	61.34
	23.14	174.84								
104	101.4	79	70.6	72.9	69.9	17.3	102.7	70.6	78.8	72.3
	69.9	17.3	102.7	70.6	78.5	72	69.9	17.3	102.7	70.6
	78.5	72	69.9	17.3						
105	105.11	71.51	80.91	69.31	75.71	61.71	98.41	67.91	79.81	77.71
	71.51	173.61	100.31	77.01	70.21	72.71	69.91	17.21	101.41	79.11
	70.71	72.81	69.81	17.21	102.71	70.71	78.41	72.31	69.81	17.21
106	102.33	69.9	69.36	83.04	67.87	16.84	96.14	67.53	78.07	72.08
	67.19	15.44	100.68	67.69	78.07	70.47	72.59	17.14		
107	98.29	71.89	81.39	72.19	73.19	17.79	102.99	68.79	78.79	71.49
	70.19	17.79	102.99	70.99	79.29	72.29	69.79	17.79		
108	94.25	70.8	69.35	77.5	70.1	67.35	100.4	71.05	73.5	67.3
	76.9	61.55	99.35	68.95	70.05	69.8	71.6	61.6		
109	94.28	70.78	69.33	77.48	70.13	67.28	100.33	70.53	72.03	76.93
	75.58	61.08	100.63	70.98	73.43	67.28	76.83	61.53	99.33	68.93
	70.03	69.78	71.63	61.58						
110	94.4	70.85	69.55	77.75	71.45	61.2	100.8	71.05	73.55	67.35
	75.2	67.1	99	69.1	70.05	69.9	71.45	61.7		
111	94.26	70.86	69.41	77.26	71.51	61.11	100.46	70.46	72.01	77.21
	75.46	61.06	100.56	70.41	71.86	77.16	73.91	67.11	100.61	70.96
	73.41	67.26	76.91	61.51	99.31	68.96	69.96	69.76	71.66	61.61
112	91.42	53.22	80.62	69.12	71.52	60.72	103.72	71.12	72.92	68.92
	75.52	61.02	174.92	22.52						

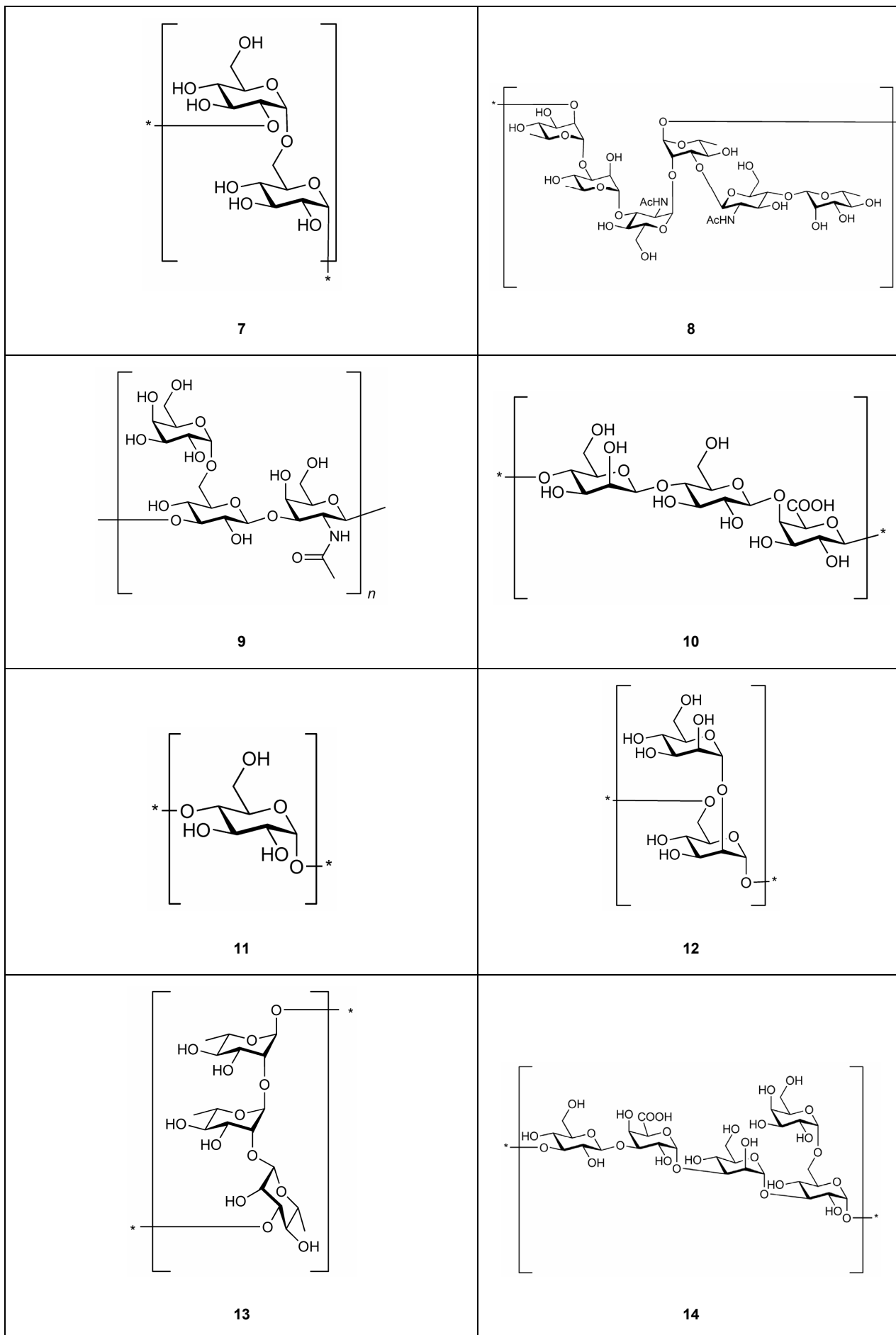
12. Anhang

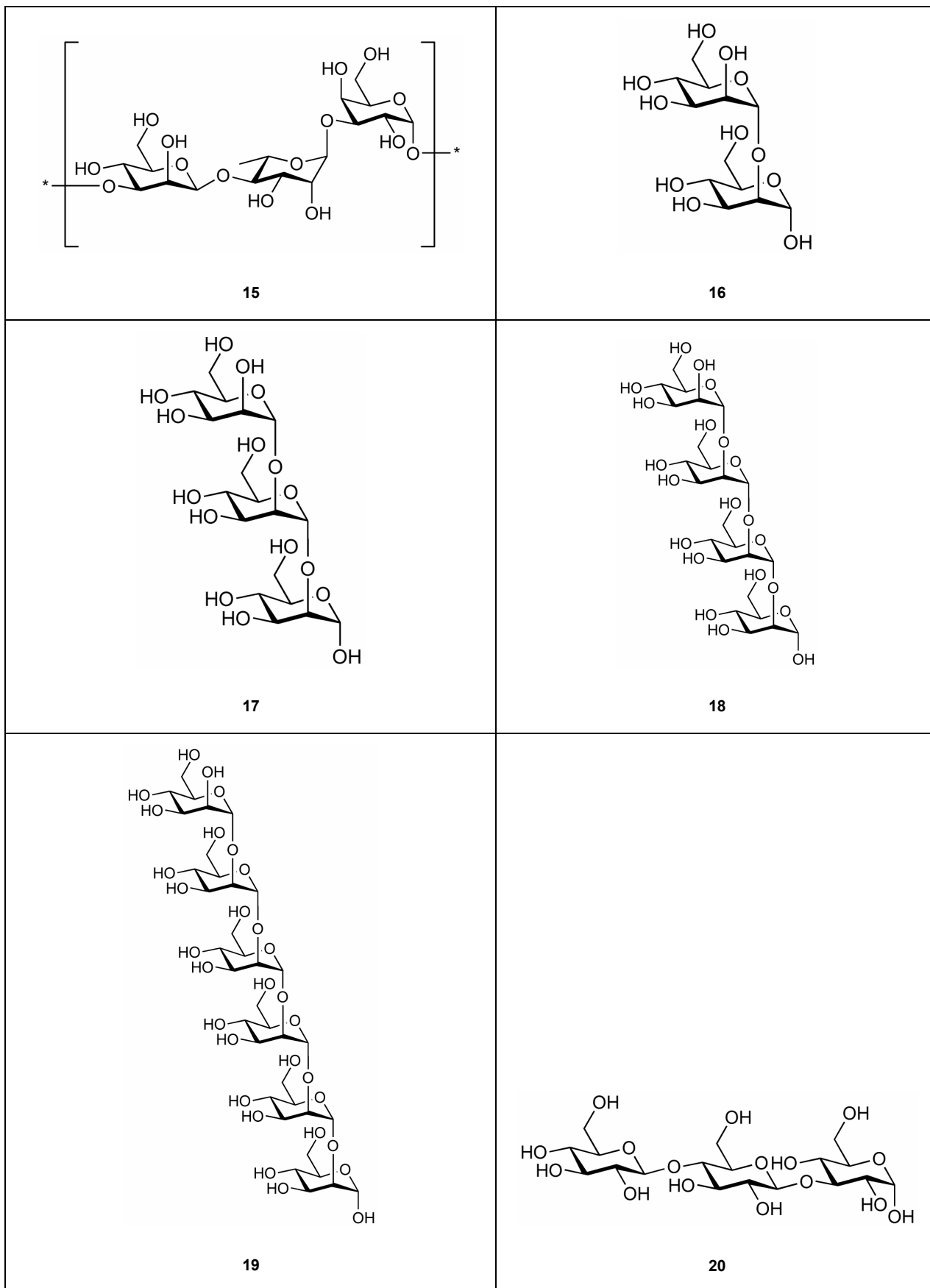
No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
113	100.79	71.19	73.44	67.29	76.99	61.64	94.39	70.79	69.59	77.39
	71.49	61.09								
114	96.04	71.64	78.14	65.64	75.64	61.54	97.04	69.94	69.94	68.94
	71.64	61.64								
115	99.89	79.09	70.59	67.59	73.19	61.69	102.79	71.49	71.49	67.59
	73.89	61.59	55.49							
116	101.45	70.25	78.95	66.85	73.45	61.55	103.05	70.75	71.05	67.45
	74.05	61.55	55.45							
117	92.59	78.39	69.09	70.09	70.79	61.79	101.89	72.49	69.09	70.09
	67.89	15.89								
118	101.78	56.78	73.38	78.28	75.88	60.78	174.98	22.98	100.28	72.68
	68.88	70.18	67.68	15.98						
119	94.21	71.11	72.11	77.16	73.81	67.21	100.46	71.06	73.51	67.31
	76.91	61.56	99.31	68.96	70.06	69.81	71.61	61.61		
120	94.23	71.13	72.03	77.13	73.83	67.18	100.43	70.53	72.03	76.93
	75.58	61.08	100.63	70.98	73.43	67.28	76.83	61.53	99.28	68.93
	70.03	69.78	71.63	61.58						
121	94.24	71.14	72.24	77.44	75.29	61.19	100.79	71.04	73.54	67.34
	75.19	67.09	98.99	69.09	70.04	69.89	71.44	61.69		
122	94.1	71.2	72.1	77.25	75.25	61.1	100.45	70.45	72	77.2
	75.45	61.05	100.55	70.4	71.85	77.15	73.9	67.1	100.6	70.95
	73.4	67.25	76.9	61.5	99.3	68.95	69.95	69.75	71.65	61.6
123	95.56	56.56	83.56	69.46	75.26	61.26	104.26	71.66	73.46	69.46
	76.06	61.56	175.46	23.06						
124	95.52	57.62	76.92	76.22	75.42	60.52	103.62	71.32	73.12	69.02
	73.12	62.32	98.82	72.72	68.62	69.62	67.52	16.12	175.02	22.92
125	100.79	71.19	73.44	67.29	76.99	61.64	94.39	70.79	69.59	77.39
	71.49	61.09								
126	94.44	70.74	69.49	77.64	70.04	67.19	100.49	71.14	73.44	67.29
	77.09	61.59	99.44	69.04	70.09	69.84	71.89	61.79		
127	94.44	70.74	69.49	77.64	70.04	67.19	100.49	71.14	73.44	67.29
	77.09	61.59	99.44	69.04	70.09	69.84	71.89	61.79		

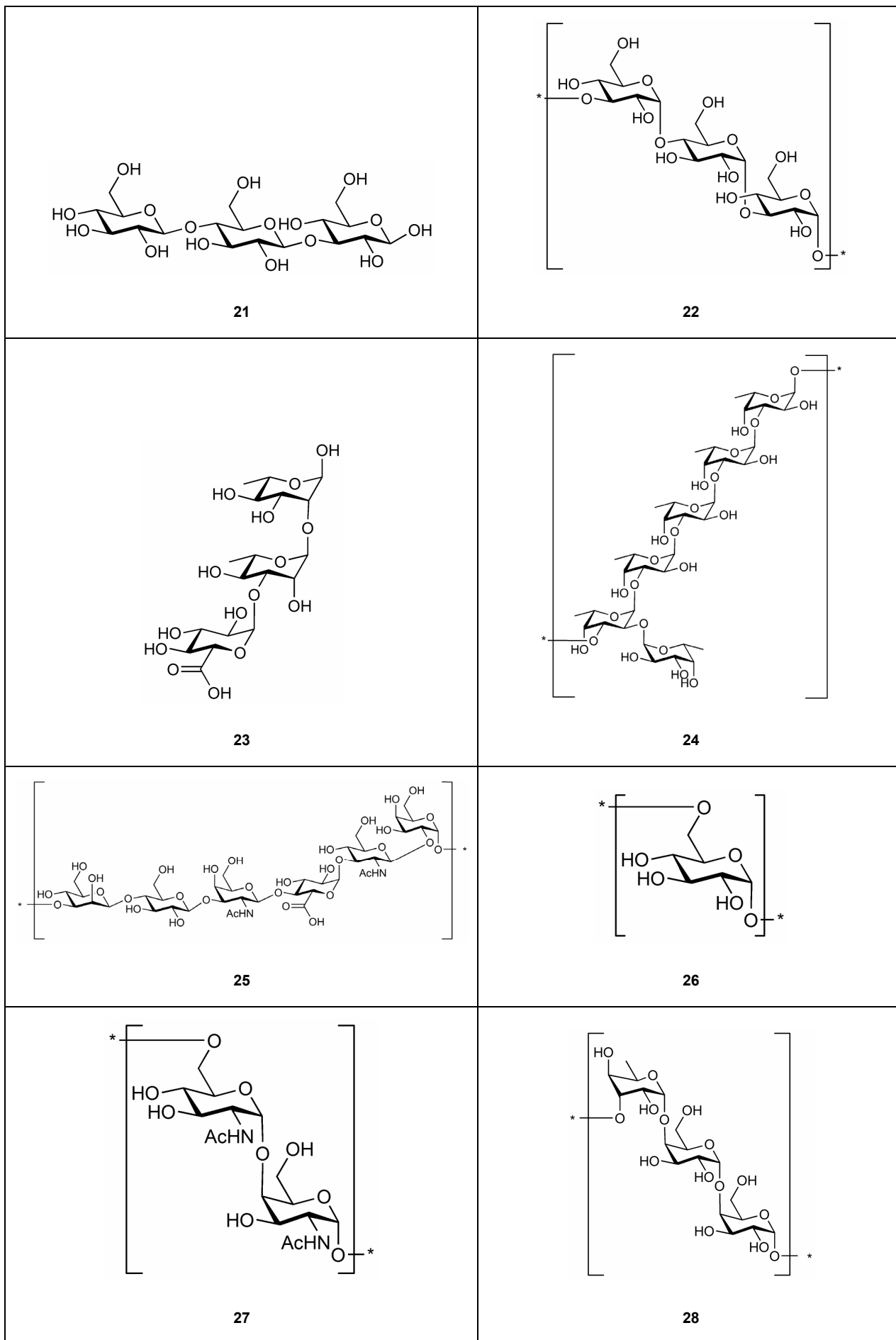
No.	Chemische Verschiebungen (δ_{1-38})									
128	91.79	53.19	80.39	68.89	71.09	68.89	103.79	71.09	72.89	68.99
	75.59	61.29	99.79	72.19	68.19	69.89	66.99	15.69	174.89	175.09
	22.69	22.39								
129	95.44	56.34	83.24	68.94	75.24	68.94	104.14	71.44	73.24	69.34
	75.94	61.64	100.14	72.54	68.54	70.24	67.34	16.04	175.24	175.44
	23.04	22.74								

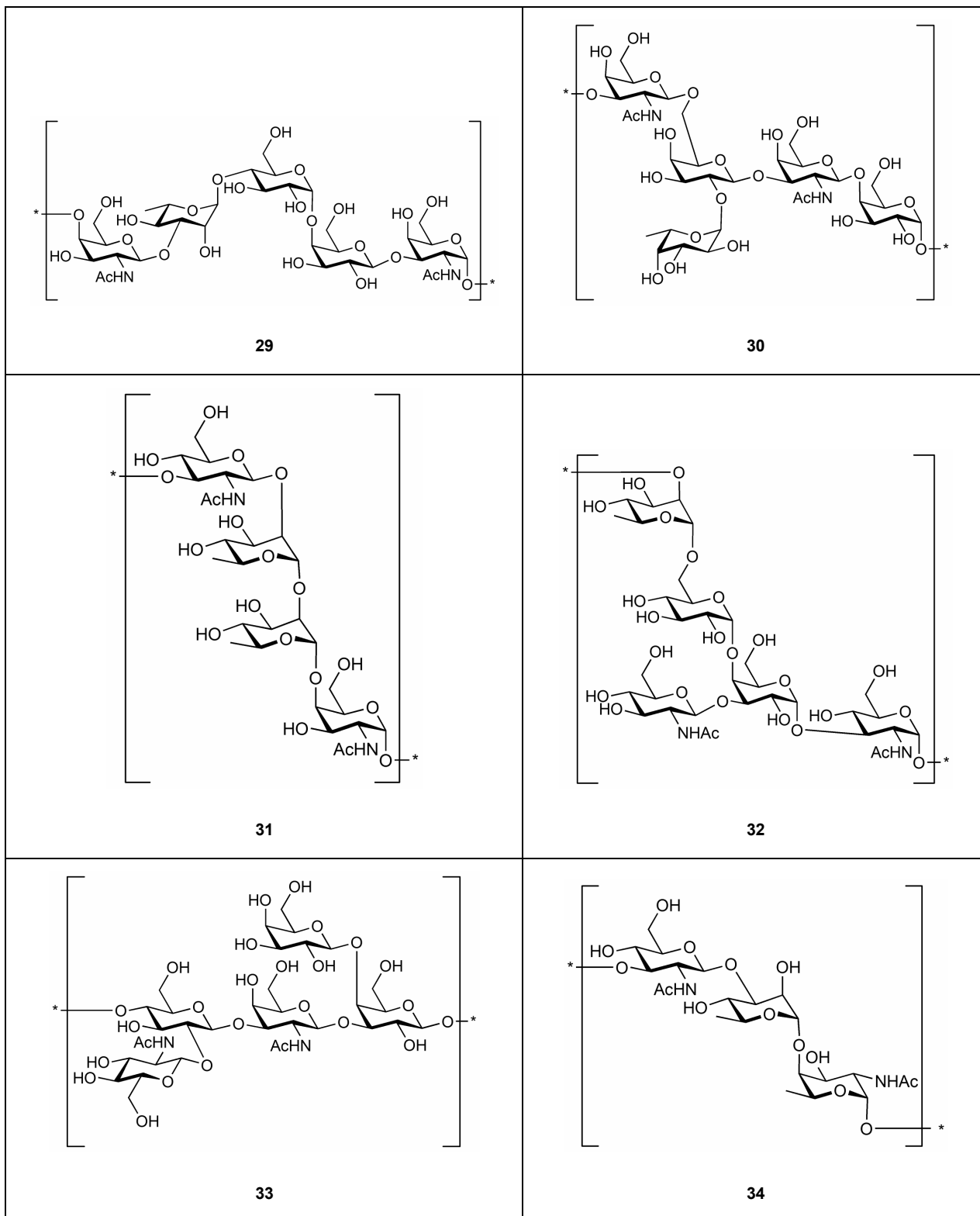
Tabelle 107. Strukturen Stenutz-Datenreihe



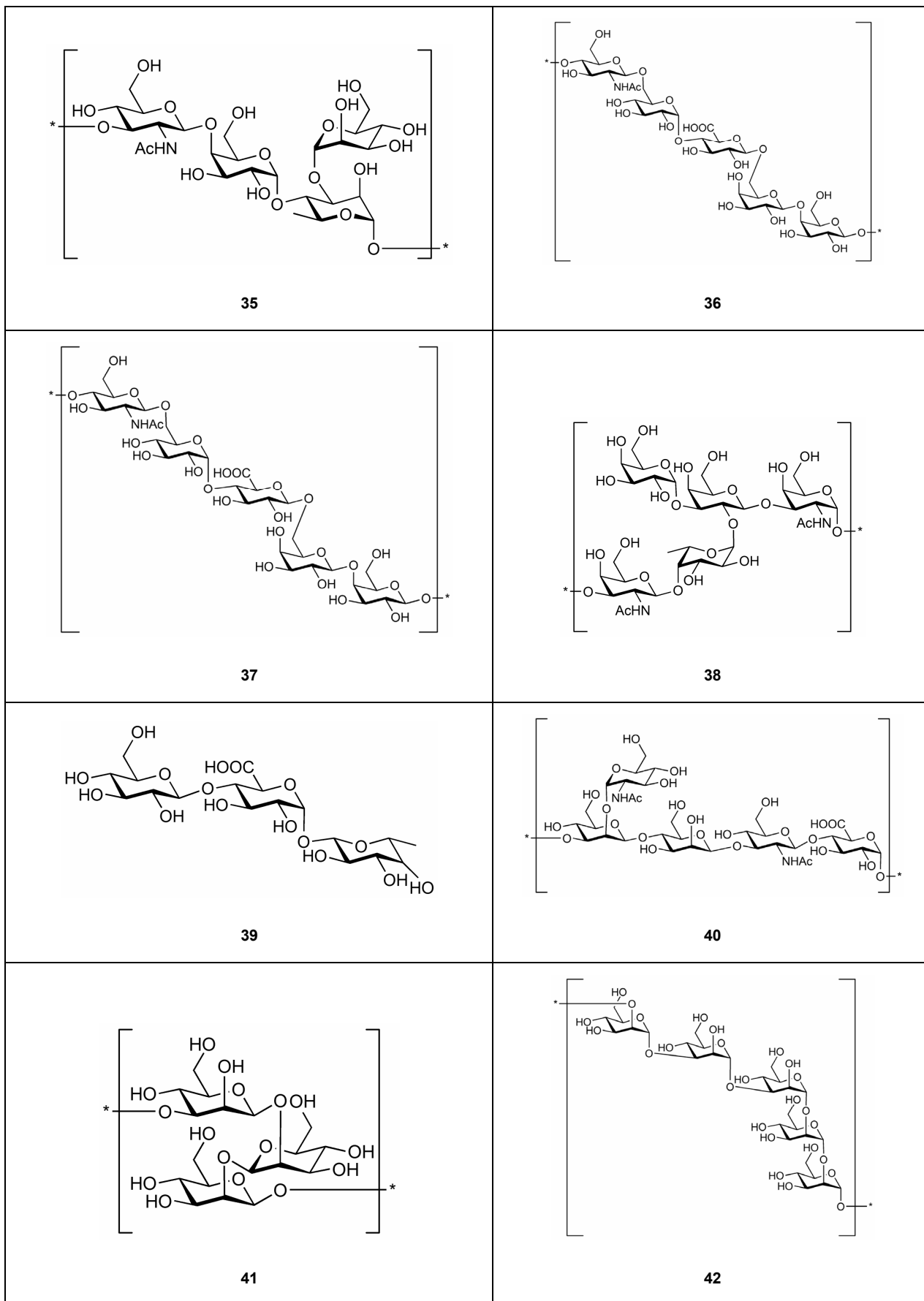


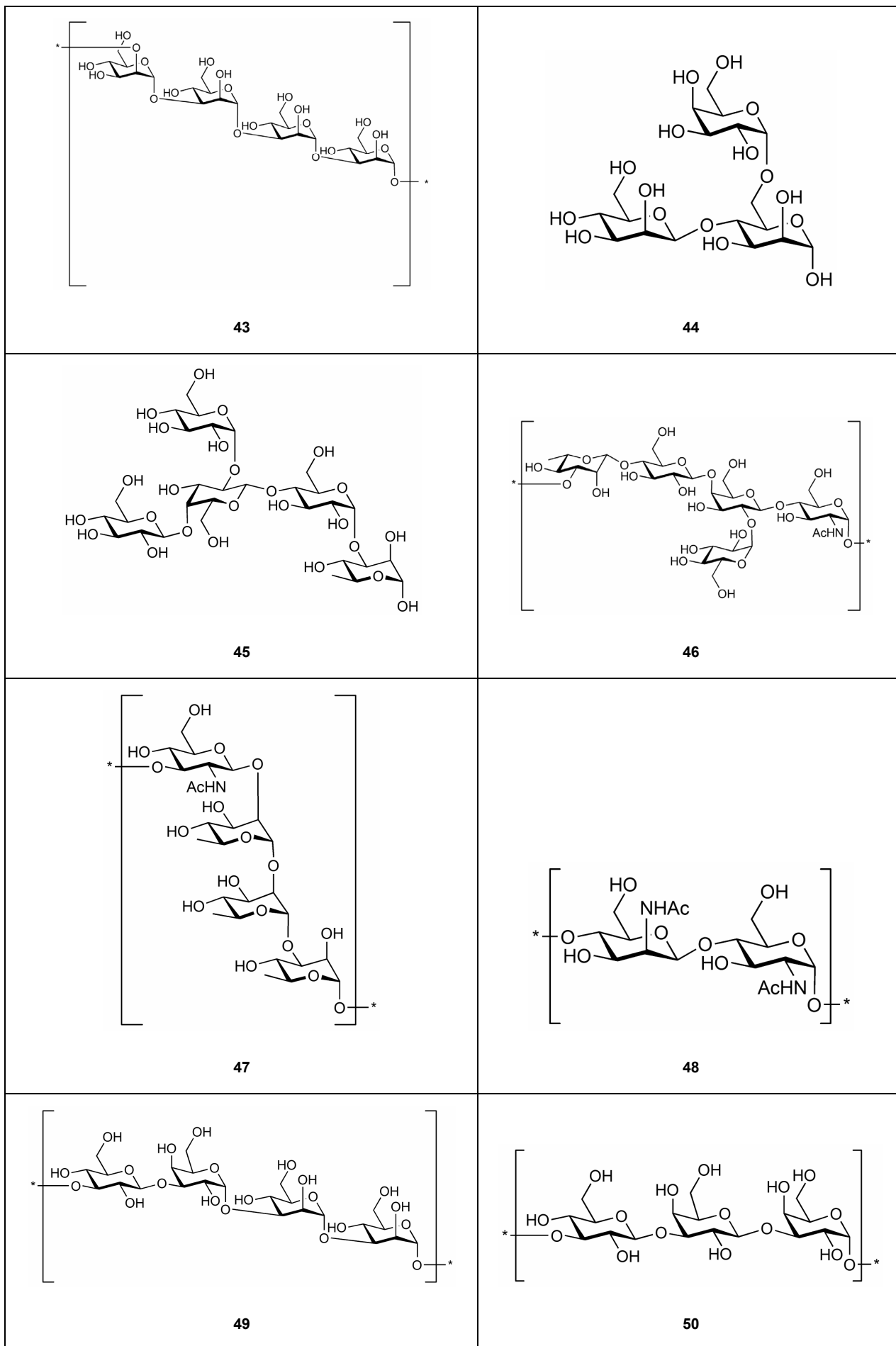


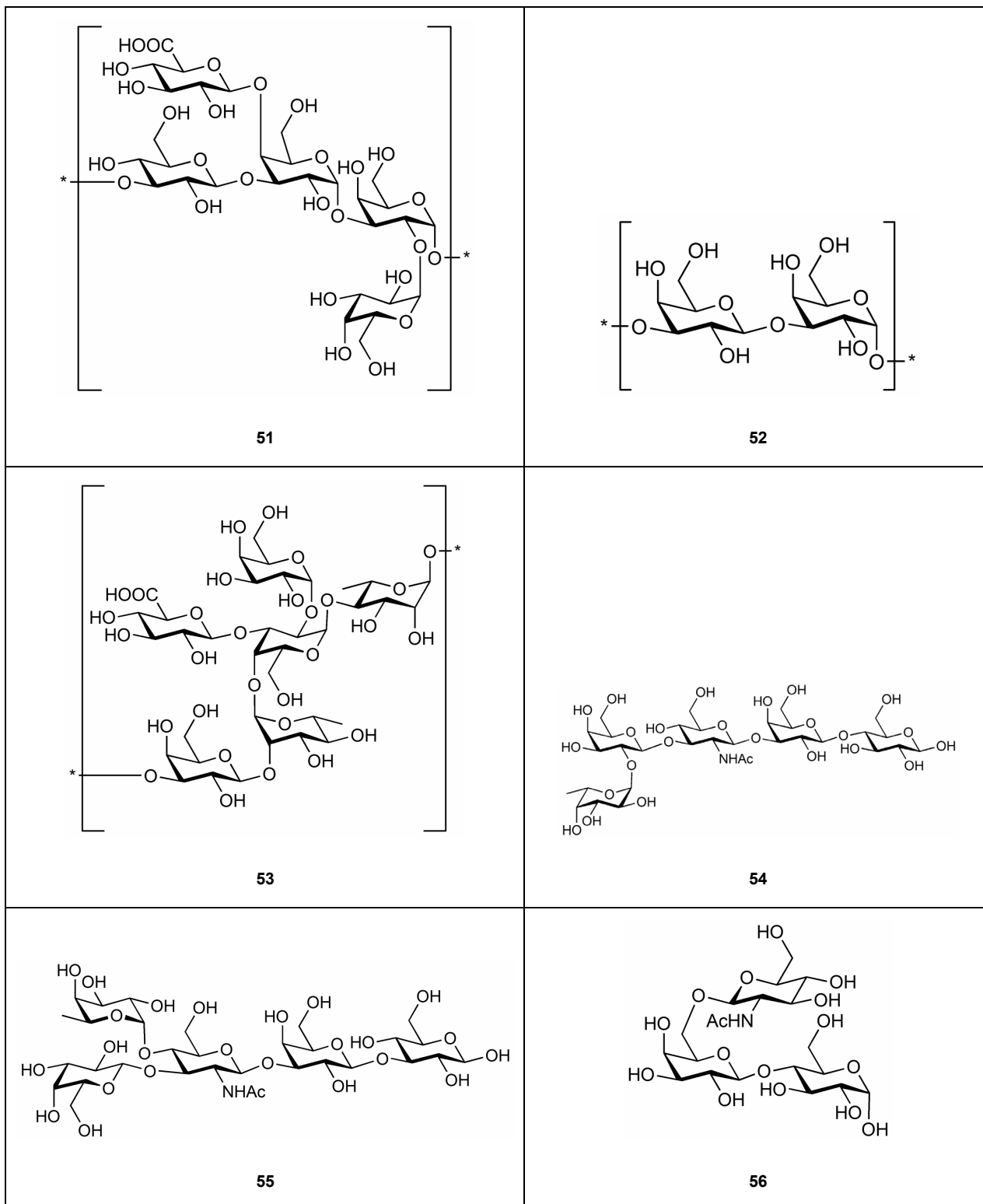


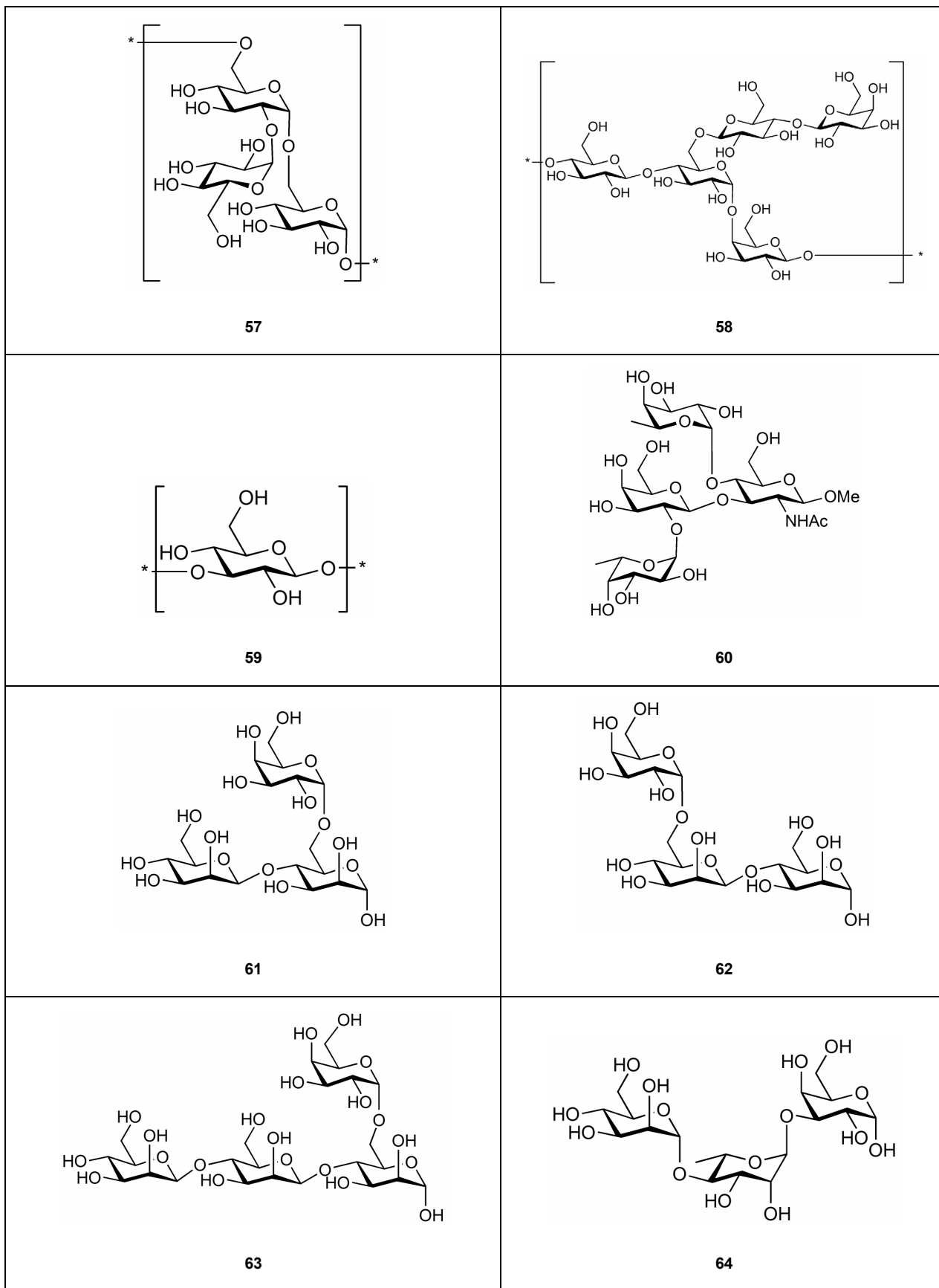


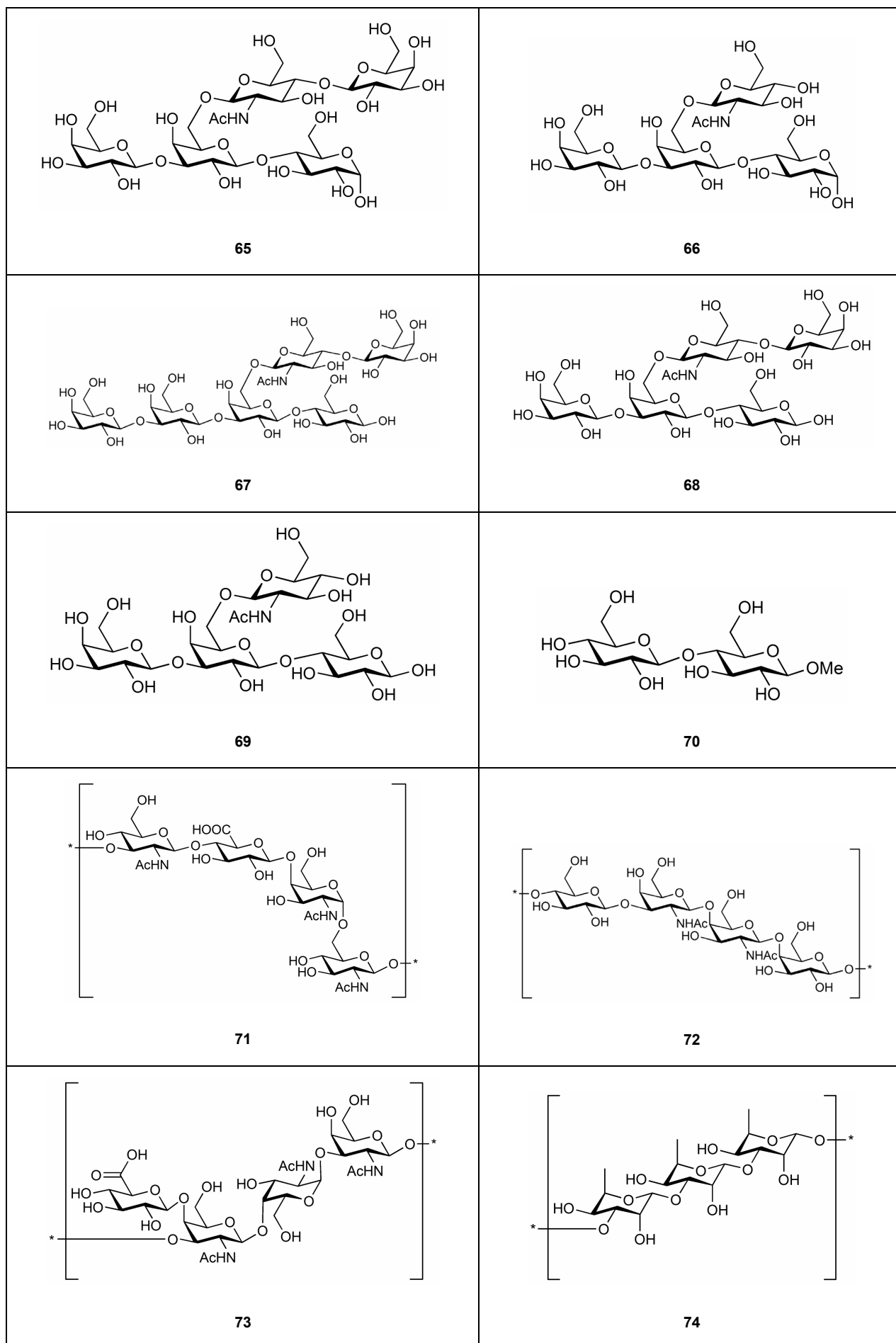
12. Anhang

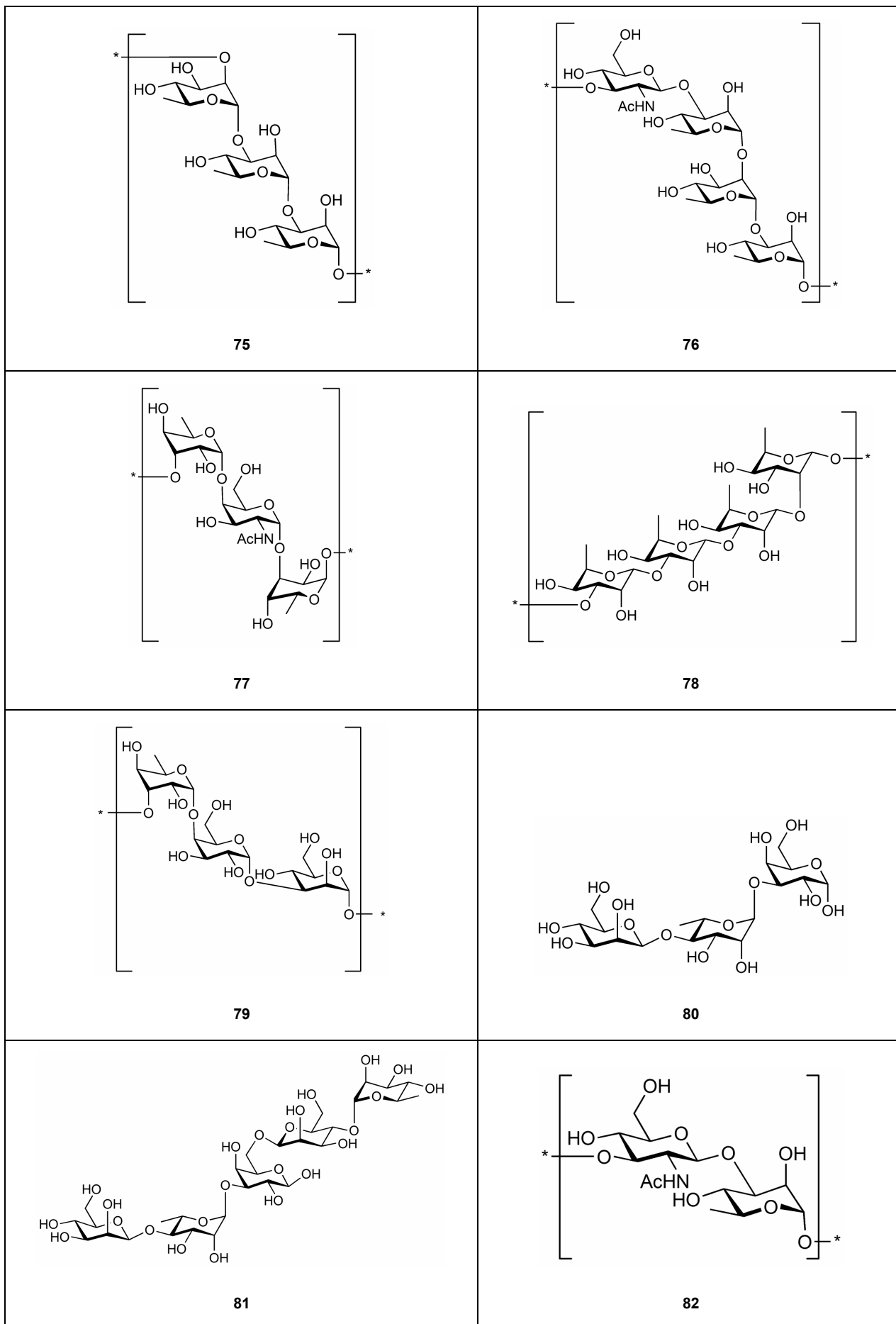


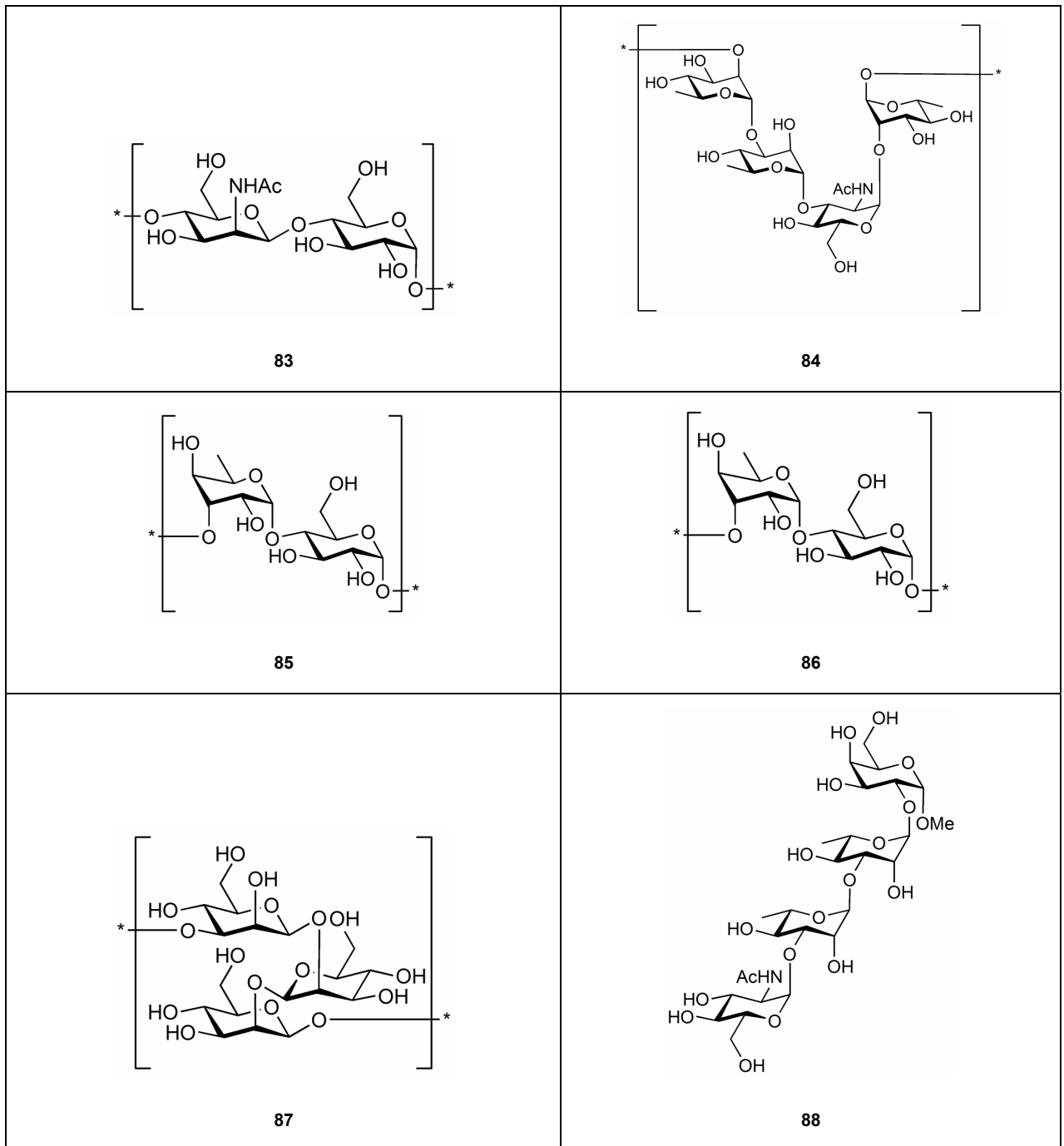


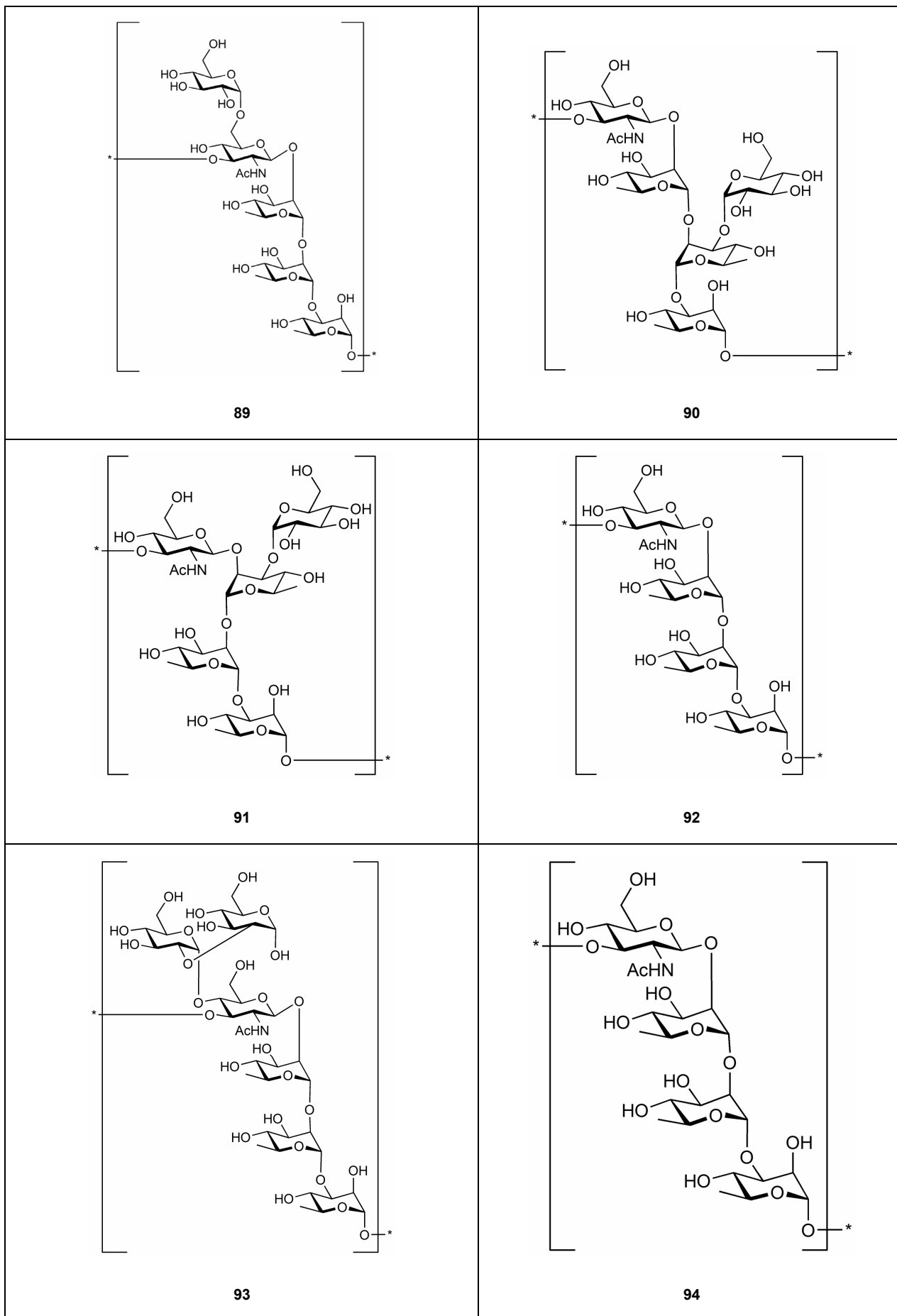


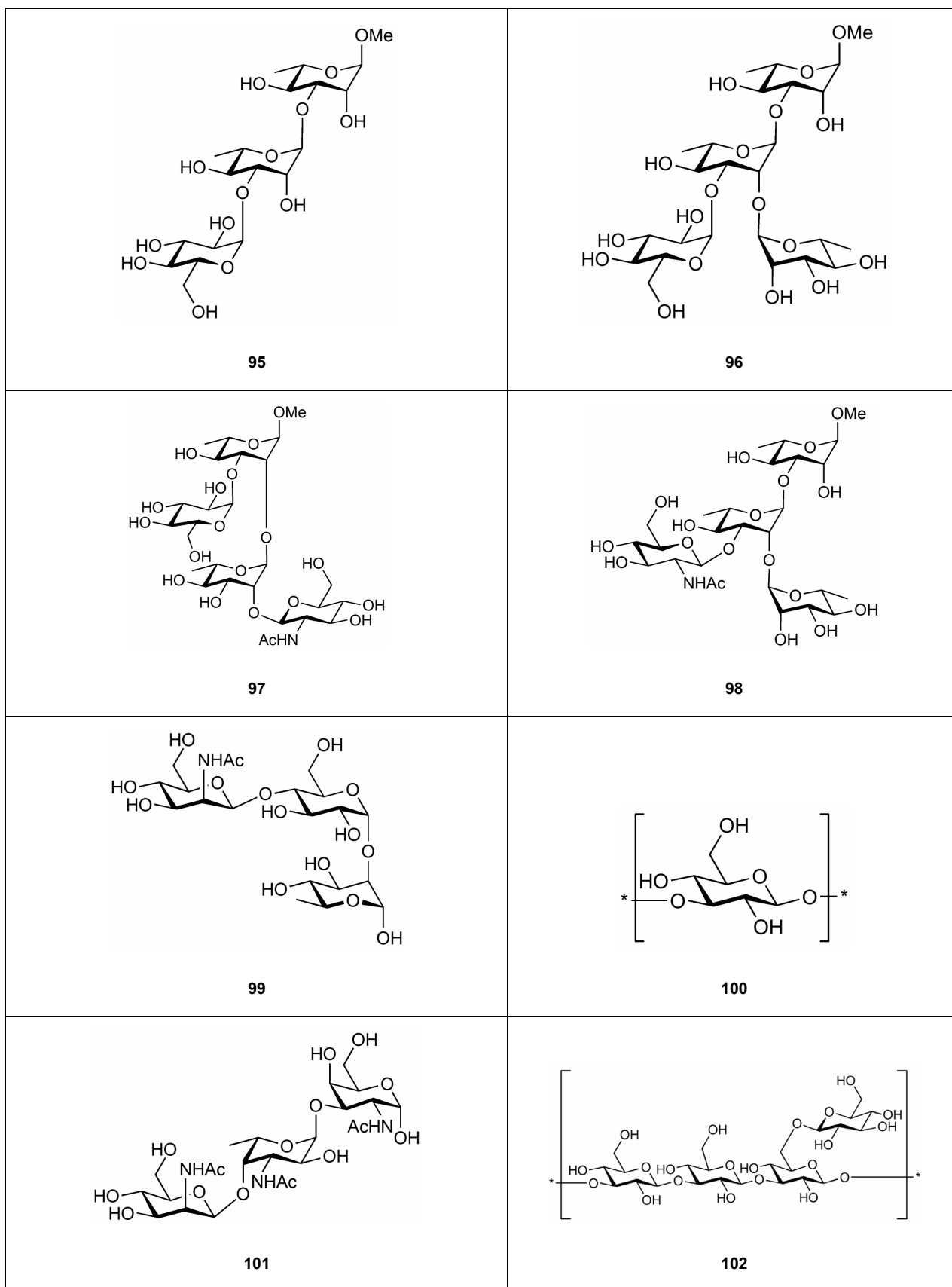


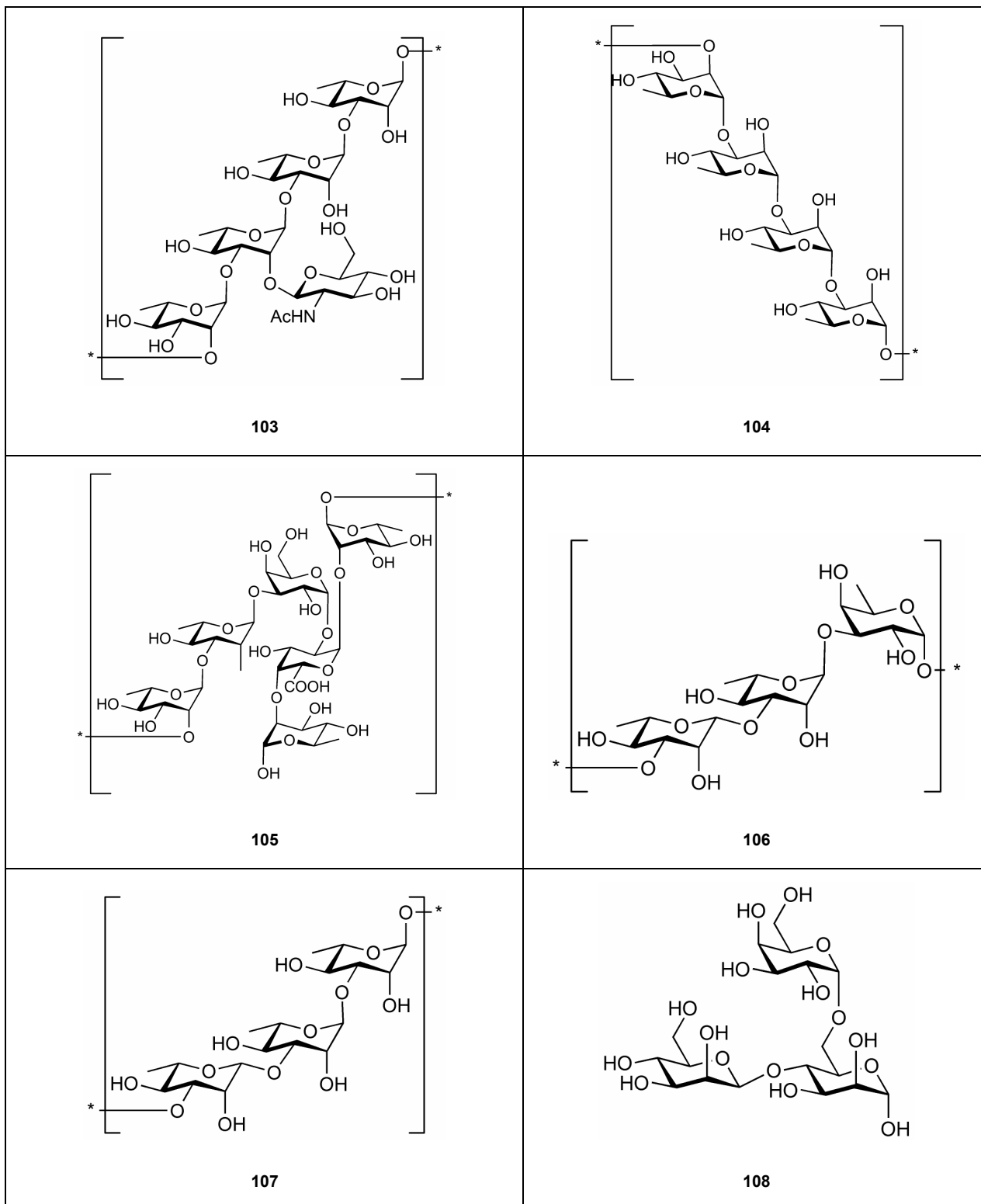


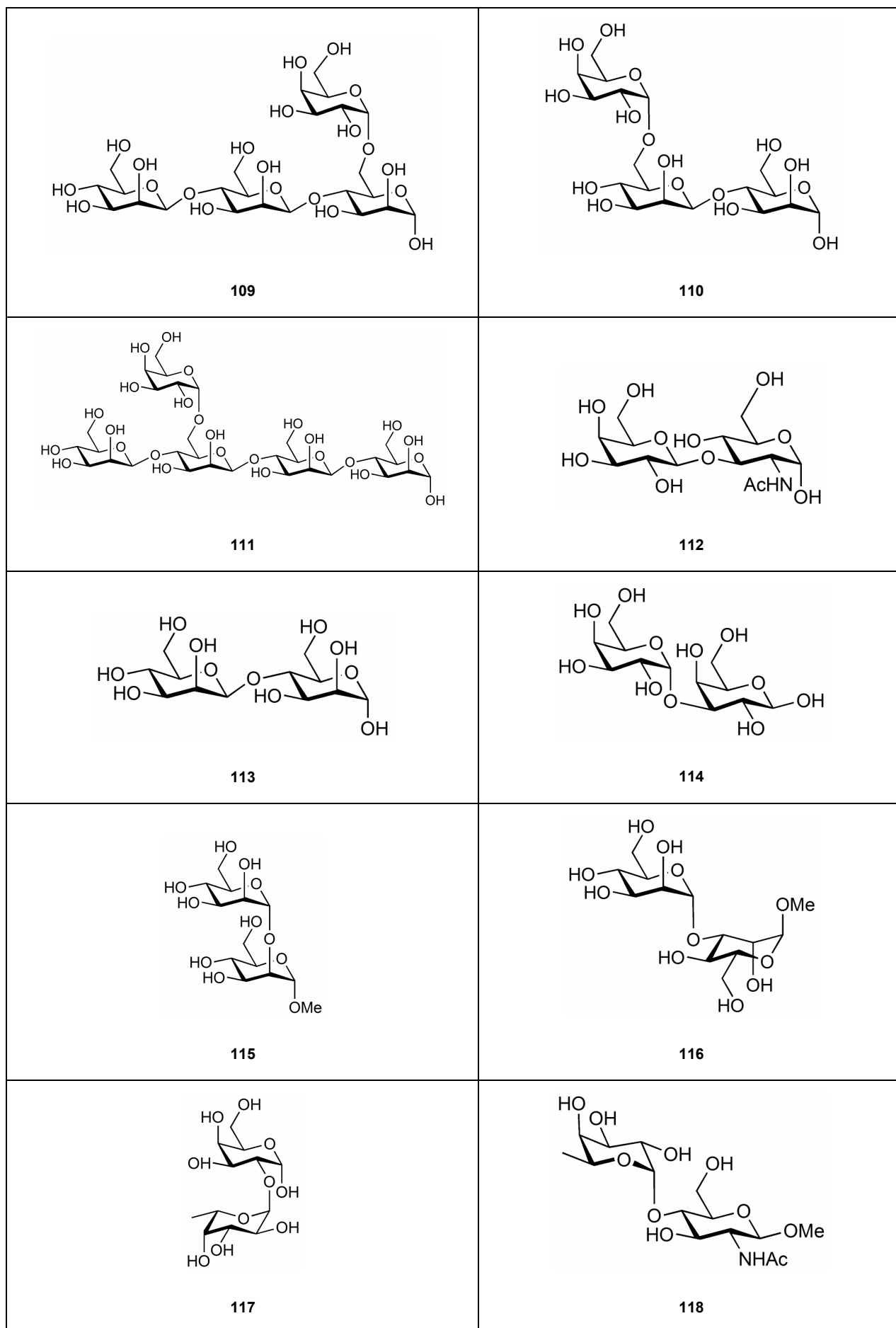


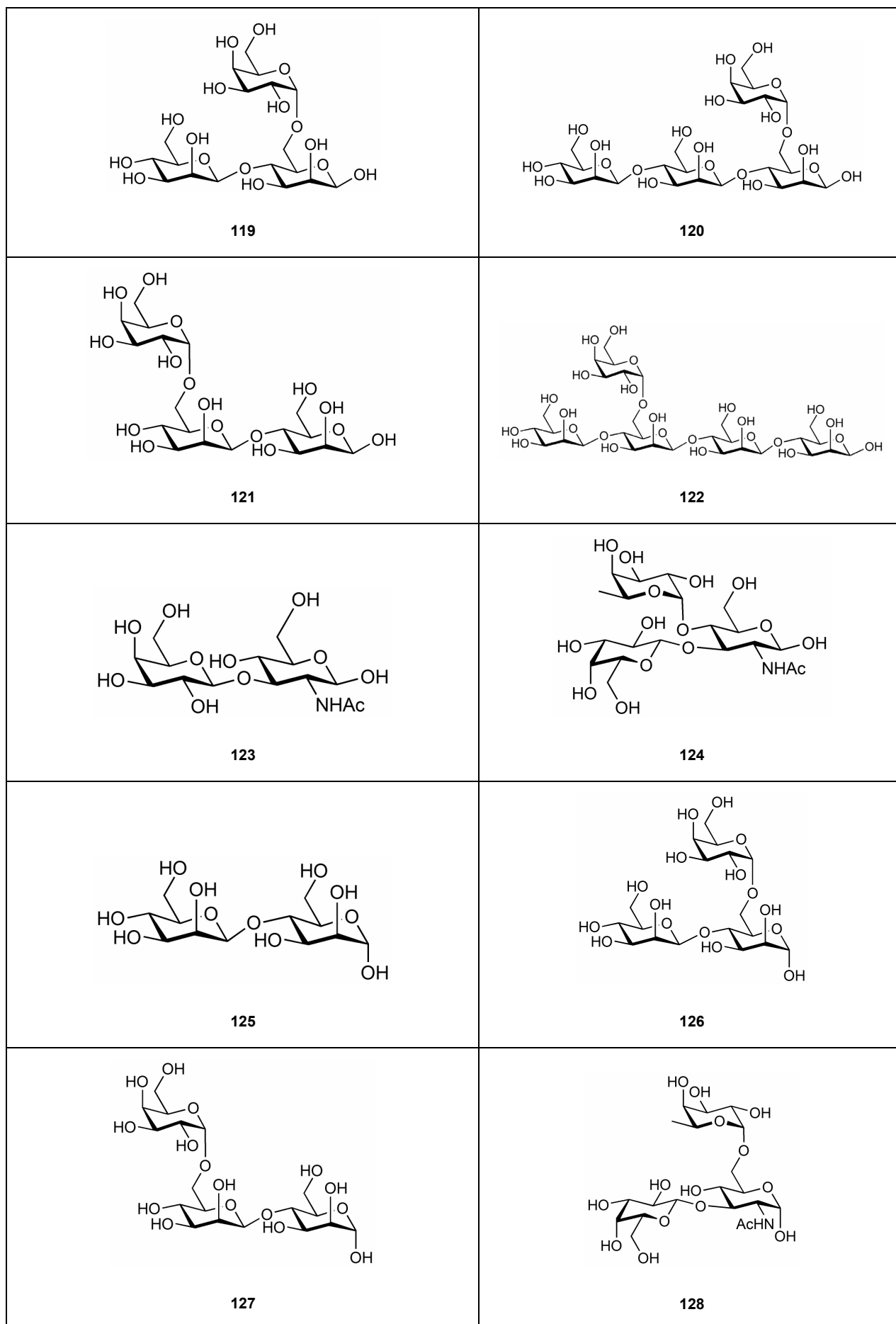


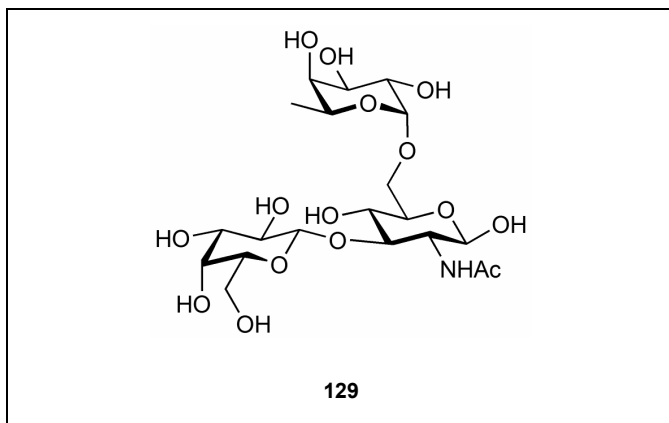












12.4 Institutseigene Datenreihe

Tabelle 108. Chemische Verschiebungen Institutseigene Datenreihe in [ppm]

No.	Name	Chemische Verschiebungen
1	α -D-Glcp-1-5- α -D-Fruf	103.4427; 94.0617; 93.6612; 92.8129; 92.5938; 92.3941; 91.9929; 91.8775; 91.4769; 91.2416; 91.0562; 81.686; 81.2003; 80.6157; 80.3568; 76.3008; 76.2414; 76.0023; 75.837; 75.4003; 74.4052; 74.2981; 74.0413; 73.4548; 72.8166; 72.6554; 72.4101; 72.2189; 72.1502; 71.9715; 71.6326; 71.3765; 71.1512; 71.1129; 70.8124; 70.5138; 70.3194; 70.0747; 69.7326; 69.391; 69.271; 69.0747; 68.8819; 68.6786; 68.2041; 63.1878; 62.6336; 62.1466; 61.7039; 61.5225; 61.2838; 61.093; 60.8833; 60.6676; 60.4437; 60.3656; 60.0615; 59.8912; 59.3547; 58.7332
2	Anomerengemisch von β -D-Galp-1-4-D-Glcp	114.9756; 113.8898; 102.7202; 95.5904; 91.6362; 78.2474; 78.1116; 75.1593; 74.6048; 74.1957; 73.646; 72.3556; 71.2359; 70.9892; 70.7803; 68.3855; 60.8539; 59.8878; 59.7585; 48.0006; 47.8249; 47.6563
3	Octaacetyl- β -D-Glcp-1-4- β -D-Glcp	170.3545; 170.1036; 169.7872; 169.5374; 169.1861; 168.9673; 168.7946; 117.1301; 116.2911; 113.3778; 100.8242; 88.8141; 77.1642; 76.9104; 76.6572; 72.8181; 71.8623; 71.4865; 70.5997; 69.1733; 67.5909; 61.4091; 61.175; 20.8076; 20.7063; 20.5378; 20.4513; 20.4115; 20.359
4	Octaacetyl- β -D-Galp-1-4- β -D-Glcp-Derivat	170.2131; 170.009; 169.9364; 169.805; 169.4853; 169.0061; 168.8022; 113.604; 101.0699; 88.821; 77.1759; 76.9248; 76.6707; 75.6622; 72.4789; 70.5619; 70.3523; 69.4526; 69.2681; 68.9761; 66.4429; 61.3115; 60.6439; 20.8115; 20.7041; 20.5144; 20.3653
5	β -D-Glcp-Derivat	177.9107; 177.2339; 176.4096; 153.3718; 133.6769; 127.1522; 124.4897; 122.581; 121.7806; 119.5824; 113.7436; 112.0002; 105.3198; 100.3525; 77.1433; 76.6356; 72.5652; 72.0344; 71.6325; 68.2073; 61.8775; 55.9576; 38.6151; 27.0544; 26.9827; 26.9105; 26.8412; 26.8084; 26.7713
6	α -D-Neup5Ac-1-3- β -D-Galp-Derivat	170.4831; 170.4222; 170.3657; 170.1659; 170.0948; 169.6802; 169.496; 167.2868; 165.6853; 134.6199; 133.0947; 131.2733; 129.612; 128.7164; 128.5126; 120.8222; 117.3834; 113.5975; 107.033; 96.6381; 83.6306; 77.1628; 76.9089; 76.6546; 73.9949; 72.2777; 71.9602; 69.1089; 68.2627; 68.1185; 66.8619; 62.2434; 61.9542; 48.8063; 37.3854; 24.3859; 23.0298; 21.2765; 20.8569; 20.6506; 14.8915

12.5 Mittelwerte Selbst-Organisierende Karten

Tabelle 109. Mittelwerte Glucose-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
α -D-Glcp-1R	99.72	73.82	72.59	72.15	70.35	61.38
α -D-Glcp-OH	92.77	73.55	72.24	72.15	70.49	61.58
α -D-Glcp-OH-2R	92.38	81.36	72.44	71.75	70.3	61.53
α -D-Glcp-OH-3R	92.14	83.14	71.49	71.09	68.64	61.54
α -D-Glcp-OH-4R	92.6	79.27	72.42	72.02	70.9	60.96
α -D-Glcp-OH-6R	92.81	73.78	72.3	70.7	70.33	67.61
α -D-Glcp-1R_2R	99.24	80.65	72.82	72.11	70.54	61.54
α -D-Glcp-1R_3R	100.02	81.79	72.17	71.37	69.68	61.38
α -D-Glcp-1R_4R	99.59	78.3	73.14	71.71	70.85	60.93
α -D-Glcp-1R_6R	100.01	74.02	71.85	70.67	70.21	66.29
β -D-Glcp-1R	103.63	76.66	76.52	73.99	70.48	61.6
β -D-Glcp-OH	96.66	76.62	76.6	75.02	70.53	61.69
β -D-Glcp-OH-2R	96.99	79.39	76.59	75.29	70.59	61.49
β -D-Glcp-OH-3R	96.43	85.83	76.38	73.83	68.79	61.58
β -D-Glcp-OH-4R	96.49	79.36	75.61	75.1	74.68	60.86
β -D-Glcp-OH-6R	96.78	76.48	75.22	74.88	70.33	67.23
β -D-Glcp-1R_2R	104.04	79.28	76.71	75.69	70.51	61.81
β -D-Glcp-1R_3R	103.78	85.48	76.27	73.09	69.01	61.54
β -D-Glcp-1R_4R	103.52	78.53	75.44	74.8	73.19	60.7
β -D-Glcp-1R_6R	104.16	76.6	75.7	73.81	70.21	69.3

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 110. Mittelwerte Galactose-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
α -D-Galp-1R	99.99	71.69	70.09	69.9	69.12	61.75
α -D-Galp-OH	93.29	71.4	70.35	70.24	69.47	62.17
α -D-Galp-OH-3R	93.14	78.12	71.3	69.47	68.6	61.89
α -D-Galp-OH-4R	93.69	78.29	72.69	70.39	69.79	62.19
α -D-Galp-OH-6R	92.91	69.94	69.71	69.61	69.21	68.58
α -D-Galp-1R_2R	98.41	75.96	71.79	70.92	69.51	61.75

12. Anhang

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
α -D-Galp-1R_3R	99.93	80.12	70.89	69.43	67.91	61.7
α -D-Galp-1R_4R	100.18	79.35	71.39	70.15	69.31	61.35
α -D-Galp-1R_6R	100.22	70.11	69.97	69.65	69.21	68.24
β -D_L-Galp-1R	104.07	75.89	73.36	71.72	69.32	61.65
β -D-Galp-OH	97.43	76.01	73.89	73.03	69.79	61.97
β -D-Galp-OH-3R	97.23	81.64	75.99	71.94	68.5	61.84
β -D-Galp-OH-4R	97.74	80.04	76.14	72.19	70.99	61.59
β -D-Galp-OH-6R	97.08	74.11	73.31	72.44	69.34	68.04
β -D-Galp-1R_2R	103.09	78.94	75.69	73.29	69.34	61.44
β -D-Galp-1R_3R	104.49	80.41	75.26	71.53	69.56	61.31
β -D-Galp-1R_4R	104.68	75.69	73.46	71.35	69.18	61.39
β -D-Galp-1R_6R	104.46	74.32	73.44	71.56	69.64	68.29

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 111. Mittelwerte Mannose-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
α -D-Manp-1R	101.74	73.91	71.35	70.96	67.65	61.80	0.00	0
α -D-Manp-OH	94.92	73.32	71.64	71.20	67.90	61.97	0.00	0
α -D-Manp-OH-2R	92.41	78.88	73.31	70.16	67.37	61.54	0.00	0
α -D-Manp-OH-4R	94.83	77.89	71.93	71.25	70.05	61.65	0.00	0
α -D-Manp-OH-6R	95.19	73.39	71.79	71.49	70.29	67.99	0.00	0
α -D-Manp-1R_2R	99.82	79.20	73.51	70.93	67.92	61.90	0.00	0
α -D-Manp-1R_3R	101.41	79.07	73.58	70.32	66.89	61.64	0.00	0
α -D-Manp-1R_4R	101.76	74.76	71.63	71.63	70.93	61.53	0.00	0
α -D-Manp-1R_6R	101.35	71.59	71.35	70.69	67.83	66.59	0.00	0
β -D-Manp-1R	101.30	77.18	73.89	71.45	67.75	61.92	0.00	0
β -D-ManpNAc-1R	174.54	99.44	75.34	73.44	72.94	60.74	53.64	22.24
β -D-Manp-OH	94.47	77.00	73.96	72.11	67.64	61.94	0.00	0
β -D-Manp-OH-2R	94.11	81.41	76.97	73.42	67.72	61.64	0.00	0
β -D-Manp-OH-4R	94.75	77.79	75.81	72.79	71.49	61.73	0.00	0

12. Anhang

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
β -D-Manp-OH-6R	94.89	76.19	74.19	72.29	70.29	67.79	0.00	0
β -D-Manp-1R_2R	101.53	78.61	77.00	72.66	68.01	61.52	0.00	0
β -D-Manp-1R_4R	101.70	77.50	75.80	72.50	70.60	61.20	0.00	0

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 112. Mittelwerte Fucose-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
α -L_D-Fucp-1R	100.18	72.73	70.39	68.93	67.5	16.23
α -L-Fucp-OH	92.91	72.58	70.08	68.88	66.89	16.12
α -L-Fucp-1R_2R	97.63	73.93	72.59	68.81	66.92	15.91
β -L-Fucp-1R	103.96	73.77	72.15	71.73	71.35	16.19
β -L-Fucp-OH	97.12	73.86	72.66	72.32	71.67	16.41

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 113. Mittelwerte Xylose-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5
α -D-Xylf-1R	102.44	78.64	77.84	75.24	60.74
α -D-Xylp-1R	99.88	74.01	72.52	70.50	62.40
α -D-Xylp-OH	93.30	73.90	72.50	70.40	62.10
α -D-Xylp-OH-2R	92.89	81.69	72.79	70.19	61.49
α -D-Xylp-OH-3R	93.09	82.69	71.89	68.69	61.89
α -D-Xylp-OH-4R	92.47	77.27	71.95	71.53	59.63
β -D_L-Xylp-1R	103.11	76.29	73.59	69.89	65.91
β -D-Xylp-OH	97.60	76.90	75.10	70.30	66.30
β -D-Xylp-OH-2R	97.99	79.19	75.39	69.79	65.99
β -D-Xylp-OH-3R	97.39	85.09	74.69	68.69	65.29
β -D-Xylp-OH-4R	97.17	77.05	74.63	74.57	63.57
β -D-Xylp-1R_2R	105.19	78.29	75.29	70.49	65.89
β -D-Xylp-1R_3R	105.09	82.69	72.49	70.39	65.99
β -D-Xylp-1R_4R	104.88	77.32	74.78	73.80	63.91

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 114. Mittelwerte Glucuronsäure-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6
β -D-GlcpA-1R	176.31	103.91	76.75	76.17	73.69	72.56
β -D-GlcpA-1R_2R	173.89	104.49	77.59	77.29	75.69	72.79
β -D-GlcpA-1R_4R	175.24	103.48	81.02	76.9	74.86	73.47

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 115. Mittelwerte N-Acetyl Glucosamin-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
α -D-GlcpNAc-1R	175.22	98.49	72.49	71.31	70.91	60.65	54.51	22.80
α -D-GlcpNAc-OH-3R	175.19	91.72	80.59	72.05	69.59	61.22	53.50	22.64
α -D-GlcpNAc-OH-4R	175.19	91.57	80.81	70.85	70.39	61.19	54.77	22.69
β -D-GlcpNAc-1R	175.16	102.52	76.41	74.46	70.69	61.47	56.82	22.80
β -D-GlcpNAc-OH	175.28	95.64	76.61	74.60	70.85	61.64	57.65	22.89
β -D-GlcpNAc-OH-3R	175.46	95.44	83.01	76.24	69.61	61.40	56.12	22.88
β -D-GlcpNAc-OH-4R	175.22	96.09	80.32	75.97	74.09	61.27	57.44	22.80
β -D-GlcpNAc-1R_3R	175.19	102.30	83.45	76.13	69.57	61.60	57.59	22.94
β -D-GlcpNAc-1R_4R	175.31	102.59	77.01	75.99	73.09	60.88	57.81	22.82

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 116. Mittelwerte N-Acetyl Galactosamin-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8
α -D-GalpNAc-1R	175.26	98.9	71.6	69.17	68.5	61.8	50.18	22.67
α -D-GalpNAc-OH-6R	175.13	91.99	70.09	69.49	68.79	68.29	51.29	22.72
α -D-GalpNAc-1R_3R	175.11	99.03	77.94	71.06	69.32	61.85	49.28	22.73
β -D-GalpNAc-1R	176.00	103.62	75.95	71.82	68.97	61.62	53.4	23.1
β -D-GalpNAc-OH-6R	175.13	96.39	74.89	71.99	68.79	68.78	54.79	22.72
D-GalNAc-ol-OH-3R	175.13	76.26	69.86	69.52	66.52	60.99	51.89	22.72

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

Tabelle 117. Mittelwerte *N*-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen

Gruppe	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7	δ_8	δ_9	δ_{10}	δ_{11}
α -D-Neup5Ac-2R	176.09	174.42	100.91	73.52	72.55	69.16	69.02	63.44	52.67	40.71	23.09
α -D-Neup5Ac-2R_7R		172.34	101.02	77.44	71.64	71.04	68.22	62.24	52.74	36.52	23.09
α -D-Neup5Ac-2R_8R		174.05	101.65	77.30	73.50	69.05	69.04	62.35	52.10	39.60	23.09

δ : chemische Verschiebungen in [ppm]

12.6 Parameter Nachbargruppen-Ansatz

12.6.1 Parameter Monosaccharid-Test

Tabelle 118. Verwendete Files Monosaccharid-Test

	Filename
Csv-File	Monosaccharidtest.csv
Maskfile	single_av_shXX_mod40_step20.msk
Patternfile	single_av_shXX_mod40_step20_monotest.pat

XX = 01, 02, 03, 04, 05

12.7 Parameter Monosaccharid-Ansatz

12.7.1 Parameter Monosaccharid-Tests

Glucose

Mittelwert-Test Glucose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten Glucose-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V282
Csv-File:	glc_monotest_averages_v1.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_monotest_averages_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	23 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Literatur-Test Glucose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden in zwei verschiedenen Tests 504 respektive 336 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten Glucose-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V283, V284
Csv-File:	glc_monotest_literatur_v1.csv glc_monotest_literatur_v2.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_monotest_literatur_v1.pat glc_monotest_literatur_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	504 Literaturwerte 336 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V285
Csv-File:	glc_monotest_averages_negativ_v1.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_monotest_averages_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	76 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in zwei verschiedenen Tests 682 respektive 574 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V286, V287
Csv-File:	glc_monotest_literatur_negativ_v1.csv glc_monotest_literatur_negativ_v2.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_monotest_literatur_negativ_v1.pat glc_monotest_literatur_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	682 Literaturwerte 574 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Galactose

Mittelwert-Test Galactose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten Galactose-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V256
Csv-File:	gal_monotest_averages_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_monotest_averages_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	18 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Literatur-Test Galactose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 167 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten Galactose-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V257
Csv-File:	gal_monotest_literatur_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_monotest_literatur_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	167 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V258
Csv-File:	gal_monotest_averages_negativ_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_monotest_averages_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	82 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch252_255.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in zwei verschiedenen Tests 950 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V259
Csv-File:	gal_monotest_literatur_negativ_v2.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_monotest_literatur_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	950 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Mannose

Mittelwert-Test Mannose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten Mannose-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2 zu finden.

Versuchsnummer:	V308
Csv-File:	man_monotest_averages_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_monotest_averages_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	17 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Literatur-Test Mannose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 147 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten Mannose-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V309
Csv-File:	man_monotest_literatur_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	man_monotest_literatur_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	147 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V310
Csv-File:	man_monotest_averages_negativ_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_monotest_averages_negativ_v2.pat

Anzahl und Art der Datensätze: 81 Mittelwerte
Getestete Netzwerke: Versuch306_307.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in einem Test 1029 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer: V311
Csv-File: man_monotest_literatur_negativ_v2.csv
Mask-File: man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile: man_monotest_literatur_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 1029 Literaturwerte
Getestete Netzwerke: Versuch306_307.snn

Fucose

Mittelwert-Test Fucose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten Fucose-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer: V221 / V351
Csv-File: fuc_monotest_averages_v1.csv
Mask-File: fuc_sh_ind_mod150.msk
Patternfile: fuc_monotest_averages_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 5 Mittelwerte
Getestete Netzwerke: Versuch217_226.snn

Literatur-Test Fucose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 88 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten Fucose-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer: V222, V227
Csv-File: fuc_monotest_literatur_v1.csv
Mask-File: fuc_sh_ind_mod150.msk
Patternfile: fuc_monotest_literatur_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 88 Literaturwerte
Getestete Netzwerke: Versuch217_226.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V228
Csv-File:	fuc_monotest_averages_negativ.csv
Mask-File:	fuc_sh_ind_mod150.msk
Patternfile:	fuc_monotest_averages_negativ.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	95 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in drei verschiedenen Tests 134, 1862 respektive 1094 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V230, V231, V269
Csv-File:	fuc_monotest_literatur_negativ.csv fuc_monotest_literatur_negativ_v1.csv fuc_monotest_literatur_negativ_v2.csv
Mask-File:	fuc_sh_ind_mod150.msk
Patternfile:	fuc_monotest_literatur_negativ.pat fuc_monotest_literatur_negativ_v1.pat fuc_monotest_literatur_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	134 Literaturwerte 1862 Literaturwerte 1094 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Xylose**Mittelwert-Test Xylose (Positivtest):**

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten Xylose-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V296
Csv-File:	xyl_monotest_averages_v2.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_monotest_averages_v2.pat

Anzahl und Art der Datensätze: 14 Mittelwerte
Getestete Netzwerke: Versuch294_295.snn

Literatur-Test Xylose (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 82 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten Xylose-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer: V297
Csv-File: xyl_monotest_literatur_v2.csv
Mask-File: xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile: xyl_monotest_literatur_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 82 Literaturwerte
Getestete Netzwerke: Versuch294_295.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer: V298
Csv-File: xyl_monotest_averages_negativ_v2.csv
Mask-File: xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile: xyl_monotest_averages_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 85 Mittelwerte
Getestete Netzwerke: Versuch294_295.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in drei verschiedenen Tests 1105 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer: V299
Csv-File: xyl_monotest_literatur_negativ_v2.csv
Mask-File: xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile: xyl_monotest_literatur_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 1105 Literaturwerte
Getestete Netzwerke: Versuch294_295.snn

Glucuronsäure

Mittelwert-Test Glucuronsäure (Positivtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten Glucuronsäure-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V322
Csv-File:	glca_monotest_averages_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_monotest_averages_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	3 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Literatur-Test Glucuronsäure (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 15 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten Glucuronsäure-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V326
Csv-File:	glca_monotest_literatur_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_monotest_literatur_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	15 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V323
Csv-File:	glca_monotest_averages_negativ_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_monotest_averages_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	95 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in drei verschiedenen Tests 1172 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V327
Csv-File:	glca_monotest_literatur_negativ_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_monotest_literatur_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	1172 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

N-Acetyl Glucosamin

Mittelwert-Test N-Acetyl Glucosamin (Positivtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten N-Acetyl Glucosamin-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V270
Csv-File:	glcnac_monotest_averages_v2.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_monotest_averages_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	9 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Literatur-Test N-Acetyl Glucosamin (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 54 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten N-Acetyl Glucosamin-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V271
Csv-File:	glcnac_monotest_literatur.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_monotest_literatur_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	54 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V272
Csv-File:	glcnac_monotest_averages_negativ_v1.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_monotest_averages_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	90 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in drei verschiedenen Tests 1115 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V273
Csv-File:	glcnac_monotest_literatur_negativ_v1.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_monotest_literatur_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	1115 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

N*-Acetyl Galactosamin*Mittelwert-Test *N*-Acetyl Galactosamin (Positivtest):**

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten *N*-Acetyl Galactosamin-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V241, V243
Csv-File:	galnac_monotest_averages_v2.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_monotest_averages_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

Literatur-Test *N*-Acetyl Galactosamin (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 18 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *N*-Acetyl Galactosamin-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V242, V244
Csv-File:	galnac_monotest_literatur_v3.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_monotest_literatur_v3.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	18 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V245
Csv-File:	galnac_monotest_averages_negativ_v1.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_monotest_averages_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	94 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in drei verschiedenen Tests 1169 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V268
Csv-File:	galnac_monotest_literatur_negativ_v2.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_monotest_literatur_negativ_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	1169 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

N-Acetyl Neuraminsäure**Mittelwert-Test N-Acetyl Neuraminsäure (Positivtest):**

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller antrainierten N-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V324
Csv-File:	neunac_monotest_averages_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_monotest_averages_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	3 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

Literatur-Test N-Acetyl Neuraminsäure (Positivtest):

Den Netzwerken wurden 24 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten N-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V328
Csv-File:	neunac_monotest_literatur_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_monotest_literatur_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	24 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

Mittelwert-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden die unmodifizierten Mittelwerte aller *wrong Zucker*gruppen präsentiert. Eine Liste der Mittelwerte ist in Kapitel 5.7.2. zu finden.

Versuchsnummer:	V325
Csv-File:	neunac_monotest_averages_negativ_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_monotest_averages_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	95 Mittelwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

Literatur-Test *wrong Zucker* (Negativtest):

Den Netzwerken wurden in drei verschiedenen Tests 1169 Datensätze, bestehend aus Literaturdaten aller antrainierten *wrong Zucker*gruppen, präsentiert.

Versuchsnummer:	V329
Csv-File:	neunac_monotest_literatur_negativ_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_monotest_literatur_negativ_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	1163 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

12.7.2 Parameter Disaccharid-Tests**Glucose****Disaccharid-Test Glucose (online):**

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Glucose präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V288
Csv-File:	glc_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_ditest_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Disaccharid-Test Glucose (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Glucose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V289
Csv-File:	glc_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_ditest_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengröße Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Glucose präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V290
Csv-File:	glc_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_ditest_negativ_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Glucose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V291
Csv-File:	glc_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_ditest_negativ_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Galactose**Disaccharid-Test Galactose (online):**

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Galactose präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V260
Csv-File:	gal_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_ditest_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Disaccharid-Test Galactose (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Galactose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V261
Csv-File:	gal_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_ditest_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Galactose präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V264
Csv-File:	gal_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_ditest_negativ_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Galactose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V265
Csv-File:	gal_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_ditest_negativ_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Mannose**Disaccharid-Test Mannose (online):**

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Mannose präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V312
Csv-File:	man_ditest_online_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_ditest_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Disaccharid-Test Mannose (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Mannose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V313
Csv-File:	man_ditest_online_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_ditest_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengröße Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Mannose präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V314
Csv-File:	man_ditest_negativ_online_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_ditest_negativ_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker (comb)*:

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Mannose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V315
Csv-File:	man_ditest_negativ_online_v2.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_ditest_negativ_combXX_v2.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Fucose**Disaccharid-Test Fucose (online):**

Den Netzwerken wurden 24 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Fucose präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V232
Csv-File:	fuc_ditest_online.csv
Mask-File:	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	fuc_ditest_online.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	24 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Disaccharid-Test Fucose (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 24 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Fucose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V233
Csv-File:	fuc_ditest_online.csv
Mask-File:	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	fuc_ditest_combXX_v2.pat (XX= 1-24)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Fucose präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V234
Csv-File:	fuc_ditest_negativ_online.csv
Mask-File:	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	fuc_ditest_negativ_online.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Fucose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V235
Csv-File:	fuc_ditest_negativ_online.csv
Mask-File:	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	fuc_ditest_negativ_combXX_v2.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Xylose**Disaccharid-Test Xylose (online):**

Den Netzwerken wurden 11 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Xylose präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V300
Csv-File:	xyl_ditest_online_v2.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_ditest_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	11 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch294_295.snn

Disaccharid-Test Xylose (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 11 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Xylose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V302
Csv-File:	xyl_ditest_online_v2.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_ditest_combXX_v2.pat (XX= 1-11)
Gruppengrösse Kombinationen:	5 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch294_295.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Xylose präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V301
Csv-File:	xyl_ditest_negativ_online_v2.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_ditest_negativ_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch294_295.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Xylose präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V303
Csv-File:	xyl_ditest_negativ_online_v2.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_ditest_negativ_combXX_v2.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	5 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch294_295.snn

Glucuronsäure

Disaccharid-Test Glucuronsäure (online):

Den Netzwerken wurden 4 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Glucuronsäure präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V330
Csv-File:	glca_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_ditest_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	4 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Disaccharid-Test Glucuronsäure (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 4 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit Glucuronsäure präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V331
Csv-File:	glca_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_ditest_combXX_v1.pat (XX= 1-4)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Glucuronsäure präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V332
Csv-File:	glca_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_ditest_negativ_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne Glucuronsäure präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V333
Csv-File:	glca_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_ditest_negativ_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

N*-Acetyl Glucosamin*Disaccharid-Test *N*-Acetyl Glucosamin (online):**

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit *N*-Acetyl Glucosamin präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V274
Csv-File:	glcnac_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_ditest_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Disaccharid-Test *N*-Acetyl Glucosamin (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit *N*-Acetyl Glucosamin präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V276
Csv-File:	glcnac_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_ditest_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	9 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne *N*-Acetyl Glucosamin präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V275
Csv-File:	glcnac_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_ditest_negativ_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne *N*-Acetyl Glucosamin präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V277
Csv-File:	glcnac_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_ditest_negativ_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	9 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

N*-Acetyl Galactosamin*Disaccharid-Test *N*-Acetyl Galactosamin (online):**

Den Netzwerken wurden 3 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit *N*-Acetyl Galactosamin präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V247
Csv-File:	galnac_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_ditest_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	3 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

Disaccharid-Test *N*-Acetyl Galactosamin (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 3 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden mit *N*-Acetyl Galactosamin präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V248
Csv-File:	galnac_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_ditest_combXX_v2.pat (XX= 1-3)
Gruppengrösse Kombinationen:	9 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne *N*-Acetyl Galactosamin präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V250
Csv-File:	galnac_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_ditest_negativ_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne *N*-Acetyl Galactosamin präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V251
Csv-File:	galnac_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_ditest_negativ_combXX_v1.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	9 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch216_239.snn

N-Acetyl Neuraminsäure**Disaccharid-Test N-Acetyl Neuraminsäure (online):**

Den Netzwerken wurde 1 Datensatz bestehend aus Literaturdaten von einem Disaccharid mit N-Acetyl Neuraminsäure präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen des Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V336
Csv-File:	neunac_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_ditest_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	1 Literaturwert
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

Disaccharid-Test N-Acetyl Neuraminsäure (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 1 Datensatz bestehend aus Literaturdaten von einem Disaccharid mit N-Acetyl Neuraminsäure präsentiert. Der getestete Datensatz ist identisch mit dem des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V356
Csv-File:	neunac_ditest_online_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_ditest_comb1_v2.pat
Gruppengrösse Kombinationen:	9 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (online):

Den Netzwerken wurden 10 Datensätze bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne N-Acetyl Neuraminsäure präsentiert. Alle Peaks eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V338
Csv-File:	neunac_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_ditest_negativ_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	10 Literaturwerte
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

Disaccharid-Test *wrong Zucker* (comb):

Den Netzwerken wurden alle möglichen Kombinationen von 10 Datensätzen bestehend aus Literaturdaten von Disacchariden ohne *N*-Acetyl Neuraminsäure präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des vorherigen Tests.

Versuchsnummer:	V357
Csv-File:	neunac_ditest_negativ_online_v1.csv
Mask-File:	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	neunac_ditest_negativ_combXX_v2.pat (XX= 1-10)
Gruppengrösse Kombinationen:	9 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch320_321.snn

12.7.3 Parameter Hindsgaul-Test**Glucose****Monosaccharid-Test Glucose:**

Den Netzwerken wurden nur die Peaks der Hindsgaul-Zucker präsentiert, die von antrainierten Glucose-Gruppen stammen.

Versuchsnummer:	V352
Csv-File:	glc_Hindsgaul-Test_einzeln.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_Hindsgaul-Test_einzeln.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Disaccharid-Test Glucose (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V292
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_Hindsgaul-Test_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 <i>in-house</i> gemessen
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Kombinations-Test Glucose (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer:	V293
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	glc_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glc_Hindsgaul-Test_combXX_v1.pat (XX= 1-6)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch280_281.snn

Galactose**Monosaccharid-Test Galactose:**

Den Netzwerken wurden nur die Peaks der Hindsgaul-Zucker präsentiert, die von antrainierten Galactose-Gruppen stammen.

Versuchsnummer:	V353
Csv-File:	gal_Hindsgaul-Test_einzeln.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_Hindsgaul-Test_einzeln.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Disaccharid-Test Galactose (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V266
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_Hindsgaul-Test_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 <i>in-house</i> gemessen
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Kombinations-Test Galactose (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer:	V267
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	gal_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	gal_Hindsgaul-Test_combXX_v1.pat (XX= 1-6)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch252_254.snn

Mannose**Monosaccharid-Test Mannose:**

Dieser Test konnte nicht durchgeführt werden, da keine Mannosegruppen in den getesteten Hindsgaul-Zuckern vorhanden sind.

Disaccharid-Test Mannose (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V316
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_Hindsgaul-Test_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 <i>in-house</i> gemessen
Getestete Netzwerke:	Versuch306_307.snn

Kombinations-Test Mannose (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer:	V317
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	man_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	man_Hindsgaul-Test_combXX_v2.pat (XX= 1-6)

Gruppengrösse Kombinationen: 6 Peaks
 Getestete Netzwerke: Versuch306_307.snn

Fucose

Monosaccharid-Test Fucose:

Den Netzwerken wurden nur die Peaks der Hindsgaul-Zucker präsentiert, die von antrainierten Fucose-Gruppen stammen.

Versuchsnummer: V236
 Csv-File: fuc_Hindsgaul-Test_einzeln.csv
 Mask-File: fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
 Patternfile: fuc_Hindsgaul-Test3_v2.pat
 fuc_Hindsgaul-Test5_v2.pat
 Anzahl und Art der Datensätze: 6 Peaks
 Getestete Netzwerke: Versuch217_226.snn

Disaccharid-Test Fucose (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer: V237
 Csv-File: peakliste_hindsgaulzucker.csv
 Mask-File: fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
 Patternfile: fuc_Hindsgaul-Test_online_v2.pat
 Anzahl und Art der Datensätze: 6 *in-house* gemessen
 Getestete Netzwerke: Versuch217_226.snn

Kombinations-Test Fucose (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer: V240
 Csv-File: peakliste_hindsgaulzucker.csv
 Mask-File: fuc_sh_ind_mod150_v2.msk
 Patternfile: fuc_Hindsgaul-Test_combXX_v2.pat (XX= 1-6)

Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch217_226.snn

Xylose

Monosaccharid-Test Xylose:

Dieser Test konnte nicht durchgeführt werden, da keine Xylose-Gruppen in den getesteten Hindsgaul-Zuckern vorhanden sind.

Disaccharid-Test Xylose (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V304
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_Hindsgaul-Test_online_v2.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 <i>in-house</i> gemessen
Getestete Netzwerke:	Versuch294_295.snn

Kombinations-Test Xylose (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer:	V305
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk
Patternfile:	xyl_Hindsgaul-Test_combXX_v2.pat (XX= 1-6)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch294_295.snn

Glucuronsäure

Monosaccharid-Test Glucuronsäure:

Dieser Test konnte nicht durchgeführt werden, da keine Glucuronsäure-Gruppen in den getesteten Hindsgaul-Zuckern vorhanden sind.

Disaccharid-Test Glucuronsäure (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V334
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_Hindsgaul-Test_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 <i>in-house</i> gemessen
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

Kombinations-Test Glucuronsäure (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer:	V335
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	glca_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glca_Hindsgaul-Test_combXX_v1.pat (XX= 1-6)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch318_319.snn

N-Acetyl Glucosamin**Monosaccharid-Test N-Acetyl Glucosamin:**

Den Netzwerken wurden nur die Peaks der Hindsgaul-Zucker präsentiert, die von antrainierten *N*-Acetyl Glucosamingruppen stammen.

Versuchsnummer:	V354
Csv-File:	glcnac_Hindsgaul-Test_einzeln.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_Hindsgaul-Test_einzeln.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Disaccharid-Test N-Acetyl Glucosamin (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V279
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_Hindsgaul-Test_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze:	6 <i>in-house</i> gemessen
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

Kombinations-Test N-Acetyl Glucosamin (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer:	V278
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile:	glcnac_Hindsgaul-Test_combXX_v1.pat (XX= 1-6)
Gruppengrösse Kombinationen:	6 Peaks
Getestete Netzwerke:	Versuch262_263.snn

N-Acetyl Galactosamin**Monosaccharidtest N-Acetyl Galactosamin:**

Dieser Test konnte nicht durchgeführt werden, da keine N-Acetyl Galactosamingruppen in den getesteten Hindsgaulzuckern vorhanden sind.

Disaccharid-Test N-Acetyl Galactosamin (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken sechs Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer:	V249
Csv-File:	peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File:	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile:	galnac_Hindsgaul-Test_online_v1.pat

Anzahl und Art der Datensätze: 6 *in-house* gemessen
Getestete Netzwerke: Versuch216_239.snn

Kombinations-Test *N*-Acetyl Galactosamin (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer: V255
Csv-File: peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File: galnac_sh_ind_mod150_v2.msk
Patternfile: galnac_Hindsgaul-Test_combXX_v1.pat (XX= 1-6)
Gruppengrösse Kombinationen: 6 Peaks
Getestete Netzwerke: Versuch216_239.snn

***N*-Acetyl Neuraminsäure**

Monosaccharid-Test *N*-Acetyl Neuraminsäure:

Dieser Test konnte nicht durchgeführt werden, da keine *N*-Acetyl Neuraminsäure-Gruppen in den getesteten Hindsgaul-Zuckern vorhanden sind.

Disaccharid-Test *N*-Acetyl Neuraminsäure (online):

In einem zweiten Test wurden den Netzwerken sechs Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Alle chemischen Verschiebungen eines Disaccharides wurden gleichzeitig präsentiert.

Versuchsnummer: V340
Csv-File: peakliste_hindsgaulzucker.csv
Mask-File: neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
Patternfile: neunac_Hindsgaul-Test_online_v1.pat
Anzahl und Art der Datensätze: 6 *in-house* gemessen
Getestete Netzwerke: Versuch320_321.snn

Kombinations-Test N-Acetyl Neuraminsäure (comb):

In einem dritten Test wurden den Netzwerken alle möglichen Kombinationen der 6 Datensätze bestehend aus *in-house* gemessenen Disacchariden der Hindsgaul-Datenreihe präsentiert. Die getesteten Datensätze sind identisch mit denen des zweiten Tests.

Versuchsnummer: V341
 Csv-File: peakliste_hindsgaulzucker.csv
 Mask-File: neunac_sh_ind_mod150_v1.msk
 Patternfile: neunac_Hindsgaul-Test_combXX_v1.pat (XX= 1-6)
 Gruppengrösse Kombinationen: 6 Peaks
 Getestete Netzwerke: Versuch320_321.snn

12.7.4 Parameter Stenutz-Test**Online-Test (V358):**

Alle Patternfiles wurden mit dem ANN PFG v.0.9.58 aus Datensätze_Stenutz.csv erstellt:

Tabelle 119. Parameter Online-Test Stenutz-Datenreihe

	Maske	Patternfile	Getestete Netzwerke
Glc	glc_sh_ind_mod150_v1.msk	glc_stenutz_online.pat	Versuch280_281.snn
Gal	gal_sh_ind_mod150_v1.msk	gal_stenutz_online.pat	Versuch252_254.snn
Man	man_sh_ind_mod150_v2.msk	man_stenutz_online.pat	Versuch306_307.snn
Fuc	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk	fuc_stenutz_online.pat	Versuch217_226.snn
Xyl	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk	xyl_stenutz_online.pat	Versuch294_295.snn
GlcA	glca_sh_ind_mod150_v1.msk	glca_stenutz_online.pat	Versuch318_319.snn
GlcNAc	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk	glcnac_stenutz_online.pat	Versuch262_263.snn
GalNAc	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk	galnac_stenutz_online.pat	Versuch216_239.snn
Neu5Ac	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk	neunac_stenutz_online.pat	Versuch320_321.snn

12.7.5 Parameter Instituts-Test

Sämtliche Patternfiles wurden mit dem ANN PFG aus Institutstest.csv (Kapitel 5.5.1.2) erstellt:

Tabelle 120. Parameter Online-Test Instituts-Datenreihe (V359)

	Maske	Patternfile	Getestete Netzwerke
Glc	glc_sh_ind_mod150_v1.msk	glc_institut_online.pat	Versuch280_281.snn
Gal	gal_sh_ind_mod150_v1.msk	gal_institut_online.pat	Versuch252_254.snn
Man	man_sh_ind_mod150_v2.msk	man_institut_online.pat	Versuch306_307.snn
Fuc	fuc_sh_ind_mod150_v2.msk	fuc_institut_online.pat	Versuch217_226.snn
Xyl	xyl_sh_ind_mod150_v4.msk	xyl_institut_online.pat	Versuch294_295.snn
GlcA	glca_sh_ind_mod150_v1.msk	glca_institut_online.pat	Versuch318_319.snn
GlcNAc	glcnac_sh_ind_mod150_v1.msk	glcnac_institut_online.pat	Versuch262_263.snn
GalNAc	galnac_sh_ind_mod150_v2.msk	galnac_institut_online.pat	Versuch216_239.snn
Neu5Ac	neunac_sh_ind_mod150_v1.msk	neunac_institut_online.pat	Versuch320_321.snn

12.8 Parameter Disaccharid-Ansatz

12.8.1 Parameter Literatur-Test (online)

Versuchsnummer: V355

Csv-File: DS_littest_v1.csv

Mask-File: DS_sh_ind_mod40_v1_step15.msk

Patternfile: DS_littest_v1.pat

Getestete Netzwerke: Versuch220_225.snn

12.9 Auswertungen Netzwerke Nachbargruppen-Ansatz

Shift ± 0.1 ppm

Tabelle 121. Zusammenfassung Netzwerke Mono-out, Shift 0.1 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht
1	MLP 96:96-10-68:1	0.76	0.75	0.75	0.07	0.07	0.07	96	10
2	MLP 96:96-15-68:1	0.67	0.65	0.64	0.07	0.08	0.08	96	15
3	MLP 96:96-20-68:1	0.61	0.59	0.58	0.08	0.08	0.08	96	20
4	MLP 96:96-25-68:1	0.58	0.58	0.59	0.08	0.08	0.08	96	25
5	MLP 96:96-30-68:1	0.50	0.50	0.50	0.09	0.09	0.09	96	30
6	MLP 96:96-35-68:1	0.49	0.46	0.46	0.09	0.09	0.09	96	35
7	MLP 96:96-40-68:1	0.46	0.42	0.41	0.09	0.10	0.10	96	40
8	MLP 96:96-45-68:1	0.46	0.43	0.43	0.09	0.10	0.10	96	45
9	MLP 96:96-50-68:1	0.46	0.44	0.46	0.09	0.10	0.09	96	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Tabelle 122. Zusammenfassung Netzwerke Poly-out, Shift 0.1 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht
1	MLP 96:96-10-72:72	1.00	1.00	1.00	0.06	0.06	0.07	96	10
2	MLP 96:96-15-72:72	1.00	1.00	1.00	0.08	0.08	0.08	96	15
3	MLP 96:96-20-72:72	1.00	1.00	1.00	0.07	0.07	0.08	96	20
4	MLP 96:96-25-72:72	1.00	1.00	1.00	0.08	0.08	0.08	96	25
5	MLP 96:96-30-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	96	30
6	MLP 96:96-35-72:72	1.00	1.00	1.00	0.08	0.08	0.08	96	35
7	MLP 96:96-40-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.10	96	40
8	MLP 96:96-45-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	96	45
9	MLP 96:96-50-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	96	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Shift \pm 0.2 ppm:**Tabelle 123.** Zusammenfassung Netzwerke Mono-out, Shift 0.2 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 123:123-10-68:1	0.65	0.61	0.62	0.08	0.08	0.08	123	10
2	MLP 123:123-15-68:1	0.60	0.56	0.56	0.08	0.09	0.09	123	15
3	MLP 123:123-20-68:1	0.58	0.55	0.57	0.09	0.09	0.09	123	20
4	MLP 123:123-25-68:1	0.46	0.43	0.45	0.10	0.10	0.10	123	25
5	MLP 123:123-30-68:1	0.48	0.46	0.44	0.09	0.10	0.10	123	30
6	MLP 123:123-35-68:1	0.44	0.40	0.40	0.10	0.10	0.10	123	35
7	MLP 123:123-40-68:1	0.37	0.33	0.35	0.10	0.10	0.10	123	40
8	MLP 123:123-45-68:1	0.33	0.30	0.29	0.10	0.11	0.11	123	45
9	MLP 123:123-50-68:1	0.40	0.39	0.39	0.10	0.10	0.10	123	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Tabelle 124. Zusammenfassung Netzwerke Poly-out, Shift 0.2 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 123:123-10-72:72	1.00	1.00	1.00	0.08	0.08	0.08	123	10
2	MLP 123:123-15-72:72	1.00	1.00	1.00	0.07	0.08	0.08	123	15
3	MLP 123:123-20-72:72	0.98	0.99	0.99	0.09	0.09	0.09	123	20
4	MLP 123:123-25-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	123	25
5	MLP 123:123-30-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.10	0.10	123	30
6	MLP 123:123-35-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	123	35
7	MLP 123:123-40-72:72	0.98	0.99	0.99	0.10	0.10	0.10	123	40
8	MLP 123:123-45-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	123	45
9	MLP 123:123-50-72:72	0.98	0.99	0.99	0.10	0.10	0.10	123	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Shift \pm 0.3 ppm**Tabelle 125.** Zusammenfassung Netzwerke Mono-out, Shift 0.3 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 143:143-10-68:1	0.47	0.43	0.44	0.09	0.10	0.10	143	10
2	MLP 143:143-15-68:1	0.54	0.49	0.49	0.09	0.09	0.09	143	15
3	MLP 143:143-20-68:1	0.55	0.49	0.50	0.09	0.09	0.09	143	20
4	MLP 143:143-25-68:1	0.46	0.41	0.41	0.10	0.10	0.10	143	25
5	MLP 143:143-30-68:1	0.45	0.39	0.41	0.10	0.10	0.10	143	30
6	MLP 143:143-35-68:1	0.39	0.35	0.38	0.10	0.10	0.10	143	35
7	MLP 143:143-40-68:1	0.38	0.33	0.33	0.10	0.11	0.11	143	40
8	MLP 143:143-45-68:1	0.44	0.41	0.41	0.10	0.10	0.10	143	45
9	MLP 143:143-50-68:1	0.29	0.28	0.28	0.11	0.11	0.11	143	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Tabelle 126. Zusammenfassung Netzwerke Poly-out, Shift 0.3 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 143:143-10-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	143	10
2	MLP 143:143-15-72:72	1.00	1.00	1.00	0.08	0.09	0.09	143	15
3	MLP 143:143-20-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	143	20
4	MLP 143:143-25-72:72	0.99	0.98	0.98	0.09	0.09	0.09	143	25
5	MLP 143:143-30-72:72	0.98	0.99	0.99	0.10	0.10	0.10	143	30
6	MLP 143:143-35-72:72	0.98	0.99	0.99	0.10	0.10	0.10	143	35
7	MLP 143:143-40-72:72	0.99	0.98	0.99	0.10	0.10	0.10	143	40
8	MLP 143:143-45-72:72	0.99	0.98	0.98	0.10	0.10	0.11	143	45
9	MLP 143:143-50-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.11	0.11	143	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Shift \pm 0.4 ppm:**Tabelle 127.** Zusammenfassung Netzwerke Mono-out, Shift 0.4 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 169:169-10-68:1	0.46	0.41	0.43	0.10	0.10	0.10	169	10
2	MLP 169:169-15-68:1	0.45	0.40	0.38	0.10	0.10	0.10	169	15
3	MLP 169:169-20-68:1	0.52	0.46	0.46	0.09	0.09	0.10	169	20
4	MLP 169:169-25-68:1	0.44	0.38	0.39	0.10	0.10	0.10	169	25
5	MLP 169:169-30-68:1	0.43	0.37	0.39	0.10	0.10	0.10	169	30
6	MLP 169:169-35-68:1	0.37	0.32	0.33	0.10	0.11	0.11	169	35
7	MLP 169:169-40-68:1	0.40	0.36	0.37	0.10	0.10	0.10	169	40
8	MLP 169:169-45-68:1	0.30	0.26	0.28	0.11	0.11	0.11	169	45
9	MLP 169:169-50-68:1	0.38	0.35	0.36	0.10	0.10	0.10	169	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Tabelle 128. Zusammenfassung Netzwerke Poly-out, Shift 0.4 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 169:169-10-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	169	10
2	MLP 169:169-15-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	169	15
3	MLP 169:169-20-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	169	20
4	MLP 169:169-25-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	169	25
5	MLP 169:169-30-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.09	0.09	169	30
6	MLP 169:169-35-72:72	0.98	0.99	0.99	0.10	0.10	0.10	169	35
7	MLP 169:169-40-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	169	40
8	MLP 169:169-45-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	169	45
9	MLP 169:169-50-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	169	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Shift ± 0.5 ppm:**Tabelle 129.** Zusammenfassung Netzwerke Mono-out, Shift 0.5 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 186:186-10-68:1	0.42	0.37	0.35	0.10	0.10	0.10	186	10
2	MLP 186:186-15-68:1	0.46	0.40	0.41	0.10	0.10	0.10	186	15
3	MLP 186:186-20-68:1	0.45	0.39	0.39	0.10	0.10	0.10	186	20
4	MLP 186:186-25-68:1	0.47	0.42	0.41	0.10	0.10	0.10	186	25
5	MLP 186:186-30-68:1	0.41	0.35	0.36	0.10	0.10	0.10	186	30
6	MLP 186:186-35-68:1	0.29	0.26	0.27	0.11	0.11	0.11	186	35
7	MLP 186:186-40-68:1	0.29	0.25	0.22	0.11	0.11	0.11	186	40
8	MLP 186:186-45-68:1	0.34	0.30	0.33	0.11	0.11	0.11	186	45
9	MLP 186:186-50-68:1	0.31	0.29	0.29	0.11	0.11	0.11	186	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Tabelle 130. Zusammenfassung Netzwerke Poly-out, Shift 0.5 ppm

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht</i>
1	MLP 185:185-10-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	185	10
2	MLP 185:185-15-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.10	0.10	185	15
3	MLP 185:185-20-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.10	0.10	185	20
4	MLP 185:185-25-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	185	25
5	MLP 185:185-30-72:72	1.00	1.00	1.00	0.09	0.10	0.10	185	30
6	MLP 185:185-35-72:72	0.98	0.99	0.99	0.10	0.10	0.10	185	35
7	MLP 185:185-40-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	185	40
8	MLP 185:185-45-72:72	1.00	1.00	1.00	0.10	0.10	0.10	185	45
9	MLP 185:185-50-72:72	1.00	1.00	1.00	0.11	0.11	0.11	185	50

Tr: Training; S: Selection; T: Test

12.10 Auswertung Netzwerke Monosaccharid-Ansatz

Glucose: Versuch280_281.snn

Tabelle 131. Zusammenfassung Netzwerke Glucose

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 216:216-95-24:1	1.00	0.98	0.98	0.00	1.30	1.22	216	95	0
2	MLP 216:216-96-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.47	0.67	216	96	0
3	MLP 216:216-137-24:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.47	0.58	216	137	0
4	MLP 216:216-199-24:1	1.00	0.97	0.97	0.01	0.46	0.57	216	199	0
5	MLP 216:216-189-24:1	1.00	0.97	0.98	0.01	0.44	0.50	216	189	0
6	MLP 216:216-182-24:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.44	0.51	216	182	0
7	MLP 216:216-126-24:1	1.00	0.98	0.97	0.02	0.44	0.54	216	126	0
8	MLP 216:216-142-24:1	1.00	0.97	0.97	0.01	0.43	0.51	216	142	0
9	MLP 216:216-103-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.43	0.55	216	103	0
10	MLP 216:216-171-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.43	0.50	216	171	0
11	MLP 216:216-145-24:1	1.00	0.97	0.97	0.04	0.42	0.48	216	145	0
12	MLP 216:216-183-24:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.41	0.53	216	183	0
13	MLP 216:216-185-24:1	1.00	0.97	0.97	0.04	0.40	0.39	216	185	0
14	MLP 216:216-154-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.40	0.47	216	154	0
15	MLP 216:216-103-24:1	1.00	0.97	0.98	0.01	0.39	0.54	216	103	0
16	MLP 216:216-163-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.38	0.47	216	163	0
17	MLP 216:216-155-24:1	1.00	0.97	0.97	0.02	0.38	0.45	216	155	0
18	MLP 216:216-154-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.37	0.44	216	154	0
19	MLP 216:216-187-24:1	1.00	0.98	0.98	0.02	0.37	0.42	216	187	0
20	MLP 216:216-107-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.34	0.49	216	107	0
21	MLP 216:216-147-155-24:1	1.00	0.94	0.94	0.00	2.62	2.25	216	147	155
22	MLP 216:216-141-126-24:1	1.00	0.93	0.93	0.00	2.36	2.56	216	141	126
23	MLP 216:216-147-128-24:1	1.00	0.93	0.93	0.00	2.11	2.08	216	147	128
24	MLP 216:216-200-200-24:1	1.00	0.94	0.95	0.00	1.64	1.83	216	200	200
25	MLP 216:216-200-200-24:1	1.00	0.93	0.94	0.12	1.57	1.78	216	200	200
26	MLP 216:216-88-24:1	1.00	0.98	0.98	0.00	1.49	1.36	216	88	0

12. Anhang

27	MLP 216:216-200-200-24:1	1.00	0.93	0.92	0.08	1.12	1.09	216	200	200
28	MLP 216:216-200-186-24:1	1.00	0.96	0.96	0.00	1.00	1.02	216	200	186
29	MLP 216:216-200-197-24:1	1.00	0.95	0.95	0.00	0.94	0.99	216	200	197
30	MLP 216:216-199-181-24:1	1.00	0.95	0.94	0.00	0.87	0.93	216	199	181
31	MLP 216:216-94-24:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.59	0.65	216	94	0
32	MLP 216:216-200-24:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.52	0.53	216	200	0
33	MLP 216:216-95-24:1	1.00	0.97	0.97	0.01	0.52	0.69	216	95	0
34	MLP 216:216-162-24:1	1.00	0.96	0.96	0.09	0.50	0.52	216	162	0
35	MLP 216:216-112-24:1	1.00	0.97	0.97	0.01	0.49	0.63	216	112	0
36	MLP 216:216-200-24:1	1.00	0.97	0.97	0.01	0.44	0.52	216	200	0
37	MLP 216:216-184-24:1	1.00	0.97	0.96	0.05	0.43	0.48	216	184	0
38	MLP 216:216-175-24:1	1.00	0.98	0.97	0.02	0.40	0.42	216	175	0
39	MLP 216:216-166-24:1	1.00	0.98	0.98	0.02	0.39	0.42	216	166	0
40	MLP 216:216-165-24:1	1.00	0.97	0.97	0.03	0.36	0.45	216	165	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Galactose: Versuch252-254.snn

Tabelle 132. Zusammenfassung Netzwerke Galactose

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 188:188-93-19:1	1.00	0.94	0.93	0.00	1.54	1.89	188	93	0
2	MLP 188:188-97-19:1	1.00	0.93	0.93	0.02	0.94	1.03	188	97	0
3	MLP 188:188-103-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.85	0.95	188	103	0
4	MLP 188:188-109-19:1	1.00	0.94	0.94	0.06	0.77	0.89	188	109	0
5	MLP 188:188-162-19:1	1.00	0.94	0.94	0.02	0.76	0.85	188	162	0
6	MLP 188:188-145-19:1	1.00	0.93	0.94	0.06	0.76	0.76	188	145	0
7	MLP 188:188-164-19:1	1.00	0.93	0.93	0.05	0.76	0.82	188	164	0
8	MLP 188:188-156-19:1	1.00	0.94	0.94	0.03	0.74	0.82	188	156	0
9	MLP 188:188-131-19:1	1.00	0.93	0.93	0.08	0.74	0.81	188	131	0
10	MLP 188:188-152-19:1	1.00	0.93	0.93	0.11	0.73	0.84	188	152	0
11	MLP 188:188-178-19:1	1.00	0.93	0.93	0.05	0.73	0.78	188	178	0
12	MLP 188:188-190-19:1	1.00	0.92	0.93	0.05	0.73	0.82	188	190	0
13	MLP 188:188-188-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.72	0.80	188	188	0

12. Anhang

14	MLP 188:188-176-19:1	1.00	0.92	0.92	0.08	0.71	0.81	188	176	0
15	MLP 188:188-180-19:1	1.00	0.94	0.94	0.03	0.71	0.82	188	180	0
16	MLP 188:188-146-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.71	0.84	188	146	0
17	MLP 188:188-162-19:1	1.00	0.93	0.93	0.04	0.71	0.85	188	162	0
18	MLP 188:188-170-19:1	1.00	0.93	0.92	0.07	0.69	0.83	188	170	0
19	MLP 188:188-131-19:1	1.00	0.93	0.92	0.10	0.68	0.80	188	131	0
20	MLP 188:188-172-19:1	1.00	0.93	0.94	0.07	0.66	0.71	188	172	0
21	MLP 188:188-97-19:1	1.00	0.92	0.94	0.00	2.50	2.82	188	97	0
22	MLP 188:188-99-19:1	1.00	0.92	0.93	0.00	2.47	2.75	188	99	0
23	MLP 188:188-100-19:1	1.00	0.93	0.93	0.00	2.46	2.89	188	100	0
24	MLP 188:188-101-19:1	1.00	0.94	0.94	0.00	1.56	1.92	188	101	0
25	MLP 188:188-103-19:1	1.00	0.93	0.93	0.03	0.99	1.07	188	103	0
26	MLP 188:188-105-19:1	1.00	0.94	0.95	0.01	0.97	1.11	188	105	0
27	MLP 188:188-106-19:1	1.00	0.93	0.93	0.04	0.88	0.97	188	106	0
28	MLP 188:188-108-19:1	1.00	0.94	0.93	0.02	0.88	1.07	188	108	0
29	MLP 188:188-118-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.85	0.96	188	118	0
30	MLP 188:188-119-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.81	0.94	188	119	0
31	MLP 188:188-182-19:1	1.00	0.94	0.94	0.01	0.80	0.85	188	182	0
32	MLP 188:188-184-19:1	1.00	0.93	0.93	0.04	0.77	0.84	188	184	0
33	MLP 188:188-197-19:1	1.00	0.93	0.93	0.03	0.76	0.84	188	197	0
34	MLP 188:188-171-19:1	1.00	0.92	0.93	0.09	0.76	0.82	188	171	0
35	MLP 188:188-189-19:1	1.00	0.94	0.94	0.02	0.75	0.88	188	189	0
36	MLP 188:188-193-19:1	1.00	0.93	0.94	0.02	0.74	0.85	188	193	0
37	MLP 188:188-171-19:1	1.00	0.94	0.93	0.04	0.72	0.79	188	171	0
38	MLP 188:188-132-19:1	1.00	0.93	0.93	0.07	0.71	0.92	188	132	0
39	MLP 188:188-157-19:1	1.00	0.93	0.93	0.03	0.71	0.77	188	157	0
40	MLP 188:188-162-19:1	1.00	0.93	0.93	0.08	0.70	0.74	188	162	0
41	MLP 188:188-101-19:1	1.00	0.93	0.93	0.06	0.88	0.97	188	101	0
42	MLP 188:188-184-19:1	1.00	0.91	0.91	0.11	0.82	0.85	188	184	0
43	MLP 188:188-125-19:1	1.00	0.93	0.94	0.07	0.82	0.81	188	125	0
44	MLP 188:188-152-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.82	0.92	188	152	0
45	MLP 188:188-159-19:1	1.00	0.94	0.93	0.01	0.81	0.96	188	159	0
46	MLP 188:188-166-19:1	1.00	0.93	0.93	0.05	0.81	0.80	188	166	0
47	MLP 188:188-157-19:1	1.00	0.93	0.94	0.02	0.81	0.84	188	157	0

12. Anhang

48	MLP 188:188-194-19:1	1.00	0.93	0.94	0.02	0.79	0.78	188	194	0
49	MLP 188:188-170-19:1	1.00	0.93	0.94	0.04	0.79	0.90	188	170	0
50	MLP 188:188-200-19:1	1.00	0.92	0.92	0.03	0.78	0.84	188	200	0
51	MLP 188:188-192-19:1	1.00	0.93	0.93	0.02	0.76	0.83	188	192	0
52	MLP 188:188-155-19:1	1.00	0.92	0.92	0.12	0.76	0.79	188	155	0
53	MLP 188:188-167-19:1	1.00	0.93	0.94	0.03	0.75	0.83	188	167	0
54	MLP 188:188-137-19:1	1.00	0.94	0.94	0.02	0.75	0.86	188	137	0
55	MLP 188:188-187-19:1	1.00	0.92	0.93	0.04	0.74	0.73	188	187	0
56	MLP 188:188-157-19:1	1.00	0.93	0.93	0.04	0.73	0.81	188	157	0
57	MLP 188:188-137-19:1	1.00	0.93	0.93	0.06	0.72	0.77	188	137	0
58	MLP 188:188-165-19:1	1.00	0.93	0.93	0.06	0.71	0.76	188	165	0
59	MLP 188:188-175-19:1	1.00	0.94	0.94	0.04	0.66	0.73	188	175	0
60	MLP 188:188-179-19:1	1.00	0.94	0.94	0.04	0.66	0.72	188	179	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Mannose: Versuch306_307.snn

Tabelle 133. Zusammenfassung Netzwerke Mannose

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 177:177-111-18:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.68	1.17	177	111	0
2	MLP 177:177-120-18:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.40	0.76	177	120	0
3	MLP 177:177-121-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.35	0.44	177	121	0
4	MLP 177:177-128-18:1	1.00	0.98	0.98	0.02	0.34	0.49	177	128	0
5	MLP 177:177-170-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.34	0.42	177	170	0
6	MLP 177:177-198-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.33	0.46	177	198	0
7	MLP 177:177-214-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.33	0.39	177	214	0
8	MLP 177:177-186-18:1	1.00	0.98	0.98	0.02	0.33	0.38	177	186	0
9	MLP 177:177-175-18:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.33	0.36	177	175	0
10	MLP 177:177-182-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.32	0.38	177	182	0
11	MLP 177:177-171-18:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.32	0.52	177	171	0
12	MLP 177:177-207-18:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.32	0.37	177	207	0
13	MLP 177:177-190-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.32	0.44	177	190	0
14	MLP 177:177-224-18:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.31	0.39	177	224	0

12. Anhang

15	MLP 177:177-248-18:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.31	0.43	177	248	0
16	MLP 177:177-215-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.30	0.34	177	215	0
17	MLP 177:177-209-18:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.29	0.36	177	209	0
18	MLP 177:177-194-18:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.28	0.37	177	194	0
19	MLP 177:177-191-18:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.26	0.36	177	191	0
20	MLP 177:177-228-18:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.25	0.32	177	228	0
21	MLP 177:177-117-18:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.83	0.61	177	117	0
22	MLP 177:177-120-18:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.47	0.55	177	120	0
23	MLP 177:177-145-18:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.40	0.56	177	145	0
24	MLP 177:177-196-18:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.39	0.51	177	196	0
25	MLP 177:177-237-18:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.39	0.49	177	237	0
26	MLP 177:177-173-18:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.38	0.44	177	173	0
27	MLP 177:177-233-18:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.38	0.52	177	233	0
28	MLP 177:177-155-18:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.38	0.56	177	155	0
29	MLP 177:177-229-18:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.36	0.40	177	229	0
30	MLP 177:177-141-18:1	1.00	0.98	0.97	0.03	0.36	0.39	177	141	0
31	MLP 177:177-171-18:1	1.00	0.98	0.97	0.02	0.35	0.36	177	171	0
32	MLP 177:177-129-18:1	1.00	0.98	0.98	0.02	0.35	0.46	177	129	0
33	MLP 177:177-201-18:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.33	0.39	177	201	0
34	MLP 177:177-241-18:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.32	0.32	177	241	0
35	MLP 177:177-202-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.32	0.39	177	202	0
36	MLP 177:177-189-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.31	0.41	177	189	0
37	MLP 177:177-128-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.29	0.46	177	128	0
38	MLP 177:177-215-18:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.28	0.38	177	215	0
39	MLP 177:177-210-18:1	1.00	0.98	0.98	0.04	0.28	0.36	177	210	0
40	MLP 177:177-184-18:1	1.00	0.98	0.98	0.03	0.27	0.33	177	184	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Fucose: Versuch217_226.snn**Tabelle 134.** Zusammenfassung Netzwerke Fucose

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht 1</i>	<i>versteckte Schicht 2</i>
1	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.15	0.30	117	200	0
2	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.15	0.23	117	200	0
3	MLP 117:117-111-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.40	117	111	0
4	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.98	0.04	0.15	0.34	117	200	0
5	MLP 117:117-103-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.33	117	103	0
6	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.14	0.21	117	200	0
7	MLP 117:117-199-137-6:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.14	0.49	117	199	137
8	MLP 117:117-105-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.34	117	105	0
9	MLP 117:117-200-152-6:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.14	0.58	117	200	152
10	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.04	0.13	0.21	117	200	0
11	MLP 117:117-172-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.13	0.22	117	172	0
12	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.13	0.25	117	200	0
13	MLP 117:117-84-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.13	0.29	117	84	0
14	MLP 117:117-91-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.13	0.22	117	91	0
15	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.13	0.36	117	200	0
16	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.12	0.51	117	200	0
17	MLP 117:117-200-6:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.12	0.37	117	200	0
18	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.12	0.31	117	200	0
19	MLP 117:117-200-6:1	1.00	1.00	0.99	0.01	0.11	0.29	117	200	0
20	MLP 117:117-200-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.11	0.18	117	200	0
21	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.15	0.24	117	190	0
22	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.15	0.32	117	205	0
23	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.14	0.21	117	190	0
24	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.14	0.23	117	190	0
25	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.14	0.42	117	205	0
26	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.05	0.14	0.17	117	205	0
27	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.14	0.33	117	205	0
28	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.14	0.25	117	190	0
29	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.28	117	190	0

12. Anhang

30	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.28	117	190	0
31	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.13	0.25	117	205	0
32	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.13	0.29	117	190	0
33	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.12	0.19	117	190	0
34	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.03	0.12	0.25	117	205	0
35	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.12	0.24	117	190	0
36	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.11	0.22	117	190	0
37	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.11	0.30	117	205	0
38	MLP 117:117-190-6:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.11	0.44	117	190	0
39	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.11	0.21	117	205	0
40	MLP 117:117-205-6:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.09	0.37	117	205	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Xylose: Versuch294_295.snn

Tabelle 135. Zusammenfassung Netzwerke Xylose

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 211:211-105-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.38	0.35	211	105	0
2	MLP 211:211-116-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.36	0.47	211	116	0
3	MLP 211:211-120-15:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.34	0.51	211	120	0
4	MLP 211:211-129-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.30	0.52	211	129	0
5	MLP 211:211-236-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.29	0.29	211	236	0
6	MLP 211:211-247-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.29	0.32	211	247	0
7	MLP 211:211-216-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.28	0.27	211	216	0
8	MLP 211:211-250-15:1	1.00	0.98	0.99	0.03	0.28	0.29	211	250	0
9	MLP 211:211-186-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.28	0.28	211	186	0
10	MLP 211:211-148-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.28	0.38	211	148	0
11	MLP 211:211-205-15:1	1.00	0.98	0.99	0.02	0.28	0.32	211	205	0
12	MLP 211:211-183-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.28	0.31	211	183	0
13	MLP 211:211-235-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.28	0.25	211	235	0
14	MLP 211:211-179-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.26	0.23	211	179	0
15	MLP 211:211-220-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.26	0.22	211	220	0
16	MLP 211:211-237-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.26	0.29	211	237	0

12. Anhang

17	MLP 211:211-204-15:1	1.00	0.98	0.99	0.03	0.25	0.26	211	204	0
18	MLP 211:211-178-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.25	0.22	211	178	0
19	MLP 211:211-165-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.24	0.25	211	165	0
20	MLP 211:211-226-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.23	0.29	211	226	0
21	MLP 211:211-241-15:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.31	0.40	211	241	0
22	MLP 211:211-250-15:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.31	0.40	211	250	0
23	MLP 211:211-218-15:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.31	0.31	211	218	0
24	MLP 211:211-178-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.31	0.23	211	178	0
25	MLP 211:211-96-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.30	0.36	211	96	0
26	MLP 211:211-207-15:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.30	0.36	211	207	0
27	MLP 211:211-240-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.30	0.31	211	240	0
28	MLP 211:211-125-15:1	1.00	0.98	0.99	0.01	0.30	0.44	211	125	0
29	MLP 211:211-229-15:1	1.00	0.98	0.99	0.01	0.29	0.27	211	229	0
30	MLP 211:211-233-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.29	0.28	211	233	0
31	MLP 211:211-240-15:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.29	0.28	211	240	0
32	MLP 211:211-168-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.29	0.24	211	168	0
33	MLP 211:211-244-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.29	0.33	211	244	0
34	MLP 211:211-158-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.28	0.31	211	158	0
35	MLP 211:211-239-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.27	0.32	211	239	0
36	MLP 211:211-222-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.27	0.26	211	222	0
37	MLP 211:211-230-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.27	0.25	211	230	0
38	MLP 211:211-199-15:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.27	0.32	211	199	0
39	MLP 211:211-227-15:1	1.00	0.98	0.99	0.02	0.26	0.26	211	227	0
40	MLP 211:211-184-15:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.26	0.32	211	184	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Glucuronsäure: Versuch318_319.snn**Tabelle 136.** Zusammenfassung Netzwerke Glucuronsäure

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Tr</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>Eingabe</i>	<i>versteckte Schicht 1</i>	<i>versteckte Schicht 2</i>
1	MLP 83:83-99-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.39	0.46	83	99	0
2	MLP 83:83-109-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.33	0.44	83	109	0
3	MLP 83:83-110-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.31	0.35	83	110	0
4	MLP 83:83-112-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.23	0.43	83	112	0
5	MLP 83:83-141-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.21	0.37	83	141	0
6	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.06	0.21	0.25	83	250	0
7	MLP 83:83-135-4:1	1.00	0.98	0.98	0.03	0.20	0.26	83	135	0
8	MLP 83:83-120-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.20	0.41	83	120	0
9	MLP 83:83-184-4:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.20	0.39	83	184	0
10	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.99	0.05	0.20	0.24	83	250	0
11	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.99	0.05	0.20	0.29	83	250	0
12	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.20	0.33	83	250	0
13	MLP 83:83-133-4:1	1.00	0.98	0.99	0.01	0.20	0.29	83	133	0
14	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.03	0.20	0.33	83	250	0
15	MLP 83:83-119-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.20	0.34	83	119	0
16	MLP 83:83-143-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.19	0.32	83	143	0
17	MLP 83:83-131-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.19	0.28	83	131	0
18	MLP 83:83-126-4:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.19	0.32	83	126	0
19	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.07	0.18	0.28	83	250	0
20	MLP 83:83-147-4:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.18	0.30	83	147	0
21	MLP 83:83-104-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.39	0.54	83	104	0
22	MLP 83:83-109-4:1	1.00	0.98	0.99	0.00	0.23	0.33	83	109	0
23	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.03	0.22	0.31	83	250	0
24	MLP 83:83-145-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.22	0.40	83	145	0
25	MLP 83:83-151-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.22	0.37	83	151	0
26	MLP 83:83-111-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.22	0.30	83	111	0
27	MLP 83:83-143-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.22	0.38	83	143	0
28	MLP 83:83-123-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.22	0.32	83	123	0
29	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.22	0.39	83	250	0

12. Anhang

30	MLP 83:83-142-4:1	1.00	0.98	0.98	0.00	0.21	0.37	83	142	0
31	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.03	0.21	0.29	83	250	0
32	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.05	0.21	0.27	83	250	0
33	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.97	0.07	0.21	0.23	83	250	0
34	MLP 83:83-149-4:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.21	0.37	83	149	0
35	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.06	0.20	0.26	83	250	0
36	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.99	0.98	0.06	0.19	0.26	83	250	0
37	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.99	0.98	0.04	0.19	0.26	83	250	0
38	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.04	0.18	0.32	83	250	0
39	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.99	0.05	0.17	0.24	83	250	0
40	MLP 83:83-250-4:1	1.00	0.98	0.98	0.06	0.17	0.27	83	250	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

N-Acetyl Glucosamin: Versuch262_263.snn

Tabelle 137. Zusammenfassung Netzwerke N-Acetyl Glucosamin

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 180:180-200-10:1	1.00	0.95	0.95	0.00	1.10	1.17	180	200	0
2	MLP 180:180-81-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.21	0.32	180	81	0
3	MLP 180:180-86-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.19	0.37	180	86	0
4	MLP 180:180-90-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.17	0.59	180	90	0
5	MLP 180:180-92-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.17	0.58	180	92	0
6	MLP 180:180-176-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.17	0.41	180	176	0
7	MLP 180:180-109-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.16	0.45	180	109	0
8	MLP 180:180-147-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.37	180	147	0
9	MLP 180:180-115-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.36	180	115	0
10	MLP 180:180-106-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.43	180	106	0
11	MLP 180:180-144-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.29	180	144	0
12	MLP 180:180-135-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.15	0.25	180	135	0
13	MLP 180:180-107-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.14	0.33	180	107	0
14	MLP 180:180-120-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.14	0.35	180	120	0
15	MLP 180:180-100-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.33	180	100	0
16	MLP 180:180-93-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.36	180	93	0

12. Anhang

17	MLP 180:180-110-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.34	180	110	0
18	MLP 180:180-110-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.13	0.46	180	110	0
19	MLP 180:180-105-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.13	0.27	180	105	0
20	MLP 180:180-114-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.13	0.30	180	114	0
21	MLP 180:180-99-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.13	0.38	180	99	0
22	MLP 180:180-109-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.19	0.37	180	109	0
23	MLP 180:180-91-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.19	0.38	180	91	0
24	MLP 180:180-87-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.19	0.33	180	87	0
25	MLP 180:180-109-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.19	0.46	180	109	0
26	MLP 180:180-115-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.18	0.44	180	115	0
27	MLP 180:180-156-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.18	0.53	180	156	0
28	MLP 180:180-177-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.17	0.45	180	177	0
29	MLP 180:180-159-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.17	0.42	180	159	0
30	MLP 180:180-140-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.17	0.30	180	140	0
31	MLP 180:180-169-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.16	0.35	180	169	0
32	MLP 180:180-200-10:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.16	0.36	180	200	0
33	MLP 180:180-96-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.16	0.24	180	96	0
34	MLP 180:180-144-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.16	0.30	180	144	0
35	MLP 180:180-179-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.15	0.44	180	179	0
36	MLP 180:180-125-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.15	0.41	180	125	0
37	MLP 180:180-97-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.14	0.47	180	97	0
38	MLP 180:180-169-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.14	0.40	180	169	0
39	MLP 180:180-105-10:1	1.00	1.00	0.99	0.00	0.14	0.35	180	105	0
40	MLP 180:180-102-10:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.13	0.26	180	102	0
41	MLP 180:180-114-10:1	1.00	1.00	0.99	0.01	0.12	0.23	180	114	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

N-Acetyl Galactosamin: Versuch216_239.snn**Tabelle 138.** Zusammenfassung Netzwerke N-Acetyl Galactosamin

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 167:167-81-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.32	0.86	167	81	0
2	MLP 167:167-84-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.30	0.96	167	84	0
3	MLP 167:167-85-7:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.27	0.81	167	85	0
4	MLP 167:167-92-7:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.26	0.62	167	92	0
5	MLP 167:167-110-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.24	0.73	167	110	0
6	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.98	0.98	0.04	0.24	0.50	167	200	0
7	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.98	0.98	0.04	0.24	0.44	167	200	0
8	MLP 167:167-111-7:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.24	0.84	167	111	0
9	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.98	0.98	0.01	0.24	0.60	167	200	0
10	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.99	0.03	0.23	0.50	167	200	0
11	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.05	0.23	0.45	167	200	0
12	MLP 167:167-103-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.23	0.71	167	103	0
13	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.04	0.23	0.43	167	200	0
14	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.23	0.47	167	200	0
15	MLP 167:167-109-7:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.22	0.62	167	109	0
16	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.98	0.99	0.03	0.22	0.44	167	200	0
17	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.04	0.22	0.51	167	200	0
18	MLP 167:167-121-7:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.21	0.51	167	121	0
19	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.05	0.21	0.46	167	200	0
20	MLP 167:167-94-7:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.19	0.55	167	94	0
21	MLP 167:167-88-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.35	0.85	167	88	0
22	MLP 167:167-91-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.30	0.80	167	91	0
23	MLP 167:167-92-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.27	0.72	167	92	0
24	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.03	0.27	0.49	167	200	0
25	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.98	0.98	0.02	0.27	0.67	167	200	0
26	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.27	0.51	167	200	0
27	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.26	0.69	167	200	0
28	MLP 167:167-141-7:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.26	0.65	167	141	0
29	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.01	0.25	0.58	167	200	0

12. Anhang

30	MLP 167:167-96-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.25	0.96	167	96	0
31	MLP 167:167-108-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.25	0.75	167	108	0
32	MLP 167:167-106-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.25	0.62	167	106	0
33	MLP 167:167-100-7:1	1.00	0.99	0.98	0.00	0.24	0.76	167	100	0
34	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.24	0.53	167	200	0
35	MLP 167:167-107-7:1	1.00	0.99	0.99	0.02	0.24	0.48	167	107	0
36	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.03	0.23	0.45	167	200	0
37	MLP 167:167-102-7:1	1.00	0.99	0.99	0.00	0.23	0.71	167	102	0
38	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.98	0.02	0.22	0.72	167	200	0
39	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.98	0.98	0.03	0.22	0.45	167	200	0
40	MLP 167:167-200-7:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.21	0.63	167	200	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

N-Acetyl Neuraminsäure: Versuch320_321.snn

Tabelle 139. Zusammenfassung Netzwerke N-Acetyl Neuraminsäure

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 132:132-65-4:1	1.00	1.00	1.00	0.01	0.28	0.05	132	65	0
2	MLP 132:132-78-4:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.24	0.16	132	78	0
3	MLP 132:132-81-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.18	0.10	132	81	0
4	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.03	0.18	0.13	132	250	0
5	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	0.99	0.04	0.17	0.15	132	250	0
6	MLP 132:132-91-4:1	1.00	1.00	1.00	0.03	0.17	0.14	132	91	0
7	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.03	0.17	0.11	132	250	0
8	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.01	0.17	0.22	132	250	0
9	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.04	0.17	0.14	132	250	0
10	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	0.99	0.03	0.17	0.27	132	250	0
11	MLP 132:132-250-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.01	0.17	0.16	132	250	250
12	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	0.99	0.04	0.17	0.13	132	250	0
13	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.16	0.09	132	250	0
14	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.01	0.16	0.13	132	250	0
15	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.16	0.13	132	250	0
16	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	1.00	0.03	0.15	0.11	132	250	0

12. Anhang

17	MLP 132:132-91-4:1	1.00	1.00	1.00	0.01	0.15	0.09	132	91	0
18	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	1.00	0.02	0.14	0.17	132	250	0
19	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.13	0.11	132	250	0
20	MLP 132:132-96-4:1	1.00	1.00	1.00	0.01	0.12	0.11	132	96	0
21	MLP 132:132-45-4:1	1.00	1.00	1.00	0.03	0.28	0.14	132	45	0
22	MLP 132:132-60-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.16	0.16	132	60	0
23	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	0.99	0.04	0.16	0.15	132	250	0
24	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.04	0.15	0.17	132	250	0
25	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.15	0.10	132	250	0
26	MLP 132:132-91-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.15	0.16	132	91	0
27	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.15	0.12	132	250	0
28	MLP 132:132-250-4:1	1.00	0.99	1.00	0.03	0.15	0.16	132	250	0
29	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.15	0.15	132	250	0
30	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.01	0.15	0.15	132	250	0
31	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.14	0.08	132	250	0
32	MLP 132:132-250-250-4:1	1.00	1.00	0.98	0.03	0.14	0.38	132	250	250
33	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.14	0.14	132	250	0
34	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.04	0.13	0.14	132	250	0
35	MLP 132:132-250-250-4:1	1.00	0.99	0.99	0.01	0.13	0.19	132	250	250
36	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.13	0.10	132	250	0
37	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.12	0.09	132	250	0
38	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.03	0.11	0.10	132	250	0
39	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	0.99	0.02	0.10	0.21	132	250	0
40	MLP 132:132-250-4:1	1.00	1.00	1.00	0.02	0.08	0.15	132	250	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

12.11 Auswertungen Netzwerke Disaccharid-Ansatz

Tabelle 140. Zusammenfassung Netzwerke Disaccharid-Ansatz (V220)

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse		
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1	versteckte Schicht 2
1	MLP 490:490-300-300-265:1	0.07	0.06	0.07	7.97	8.44	8.39	490	300	300
2	MLP 490:490-300-300-265:1	0.65	0.54	0.54	4.49	6.30	6.27	490	300	300
3	MLP 490:490-300-300-265:1	1.00	0.79	0.79	0.06	5.79	5.60	490	300	300
4	MLP 490:490-300-300-265:1	0.58	0.48	0.48	4.35	5.75	5.68	490	300	300
5	MLP 490:490-200-265:1	1.00	0.83	0.84	0.06	5.72	5.50	490	200	0
6	MLP 490:490-300-300-265:1	1.00	0.81	0.80	0.06	5.68	5.33	490	300	300
7	MLP 490:490-300-265:1	0.97	0.65	0.65	0.53	4.66	4.68	490	300	0
8	MLP 490:490-300-265:1	1.00	0.69	0.68	0.38	4.05	4.05	490	300	0
9	MLP 490:490-300-265:1	1.00	0.69	0.69	0.57	4.01	3.96	490	300	0
10	MLP 490:490-300-265:1	1.00	0.68	0.69	0.44	4.01	3.98	490	300	0

Tr: Training; S: Selection; T: Test

Tabelle 141. Zusammenfassung Netzwerke Disaccharid-Ansatz (V225)

	Architektur	Performance			Fehler			Schichtgrösse	
		Tr	S	T	Tr	S	T	Eingabe	versteckte Schicht 1
1	MLP 490:490-70-265:1	1.00	0.82	0.82	0.09	1.94	1.86	490	70
2	MLP 490:490-90-265:1	0.99	0.79	0.80	0.23	1.75	1.68	490	90
3	MLP 490:490-72-265:1	1.00	0.81	0.80	0.17	1.66	1.57	490	72
4	MLP 490:490-90-265:1	0.98	0.81	0.81	0.28	1.64	1.66	490	90
5	MLP 490:490-74-265:1	1.00	0.81	0.81	0.14	1.49	1.47	490	74
6	MLP 490:490-80-265:1	1.00	0.84	0.83	0.11	1.38	1.39	490	80
7	MLP 490:490-90-265:1	1.00	0.85	0.85	0.06	1.31	1.30	490	90
8	MLP 490:490-83-265:1	1.00	0.87	0.87	0.08	1.18	1.13	490	83
9	MLP 490:490-88-265:1	1.00	0.87	0.86	0.07	1.11	1.08	490	88
10	MLP 490:490-90-265:1	1.00	0.87	0.87	0.07	1.09	1.08	490	90

Tr: Training; S: Selection; T: Test

12.12 Programmcode Modification Generator (MG)

```
Dim m As Integer
Dim n As Integer
Dim x As Integer
Dim y As Integer

Sub Modification_Generator()
'
' Modification_Generator Macro
' Macro recorded 26.3.2004 by Andreas Stoeckli
' Macro updated 15.02.2006 by Andreas Stoeckli
' Keyboard Shortcut: Cmd+I
'
Sheets("Sheet1").Select
m = UCase(InputBox("How many groups?"))
n = UCase(InputBox("How many modifications per subset? (20, 40, 60, 80, 100 or 150)"))

For y = 1 To m
Range("AC3").Select
ActiveCell.Offset((y - 1), 0).Range("A1:Q1").Select
Selection.Copy
Range("I3").Select
Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
    False, Transpose:=False

'Alte Zellen vom letzten Run löschen:
ActiveWindow.ScrollColumn = 6
    Range("I12:T461").Select
    Application.CutCopyMode = False
    Selection.ClearContents
    ActiveWindow.ScrollColumn = 6
If y = 1 Then
    Sheets("Sheet2").Select
    Range("A1").Select
    ActiveCell.Range("A1:P65536").Select
```

12. Anhang

```
Selection.ClearContents
```

```
Sheets("Sheet3").Select
```

```
Range("A1").Select
```

```
ActiveCell.Range("A1:P65536").Select
```

```
Selection.ClearContents
```

```
Sheets("Sheet1").Select
```

```
End If
```

```
Range("A3").Select
```

```
'Neue Zellen sortieren und zusammenkopieren:
```

```
ActiveCell.Range("A1:A10").Select
```

```
For x = 1 To (n * 3)
```

```
Selection.Copy
```

```
ActiveCell.Offset(9, 8).Range("A1").Select
```

```
Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
```

```
False, Transpose:=True
```

```
If x <= ((3 * n) - 1) Then
```

```
ActiveCell.Offset(2, -8).Range("A1:A10").Select
```

```
End If
```

```
Next x
```

```
If n = 20 Then
```

```
ActiveCell.Offset(-649, 0).Range("A1:J650").Select
```

```
ActiveWindow.ScrollRow = 1
```

```
Application.CutCopyMode = False
```

```
Selection.Sort Key1:=ActiveCell, Order1:=xlAscending, Header:=xlGuess, _
```

```
OrderCustom:=1, MatchCase:=False, Orientation:=xlTopToBottom
```

```
ActiveCell.Offset(0, -1).Range("A1").Select
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "average"
```

```
ActiveCell.Select
```

```
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A60"), Type:= _
```

```
xlFillDefault
```

```
ActiveCell.Range("A1:A60").Select
```

```
Selection.Insert Shift:=xlToRight
```

12. Anhang

```
ActiveCell.Offset(0, 3).Range("A1:A60").Select
```

```
Selection.Insert Shift:=xlToRight
```

```
' Beginn Kopieren der subset-Namen
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "train"
```

```
ActiveCell.Select
```

```
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A20"), Type:= _
```

```
xlFillDefault
```

```
ActiveCell.Offset(20, 0).Range("A1").Select
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "selection"
```

```
ActiveCell.Select
```

```
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A20"), Type:= _
```

```
xlFillDefault
```

```
ActiveCell.Offset(20, 0).Range("A1").Select
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "test"
```

```
ActiveCell.Select
```

```
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A20"), Type:= _
```

```
xlFillDefault
```

```
ActiveCell.Select
```

```
ActiveCell.Offset(-40, 0).Range("A1").Select
```

```
Range("I12").Select
```

```
ActiveCell.Range("A1:L60").Select
```

```
Selection.Copy
```

```
End If
```

```
If n = 40 Then
```

```
ActiveCell.Offset(-1309, 0).Range("A1:J1310").Select
```

```
ActiveWindow.ScrollRow = 1
```

```
Application.CutCopyMode = False
```

```
Selection.Sort Key1:=ActiveCell, Order1:=xlAscending, Header:=xlGuess, _
```

```
OrderCustom:=1, MatchCase:=False, Orientation:=xlTopToBottom
```

```
ActiveCell.Offset(0, -1).Range("A1").Select
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "average"
```

```
ActiveCell.Select
```

```
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A120"), Type:= _
```

```
xlFillDefault
```

12. Anhang

```
ActiveCell.Range("A1:A120").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight
ActiveCell.Offset(0, 3).Range("A1:A120").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight

' Beginn Kopieren der subset-Namen
ActiveCell.FormulaR1C1 = "train"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A40"), Type:= _
xlFillDefault
ActiveCell.Offset(40, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "selection"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A40"), Type:= _
xlFillDefault
ActiveCell.Offset(40, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "test"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A40"), Type:= _
xlFillDefault
ActiveCell.Select
ActiveCell.Offset(-80, 0).Range("A1").Select
Range("I12").Select
ActiveCell.Range("A1:L120").Select
Selection.Copy

End If

If n = 60 Then
ActiveCell.Offset(-1969, 0).Range("A1:J1970").Select
ActiveWindow.ScrollRow = 1
Application.CutCopyMode = False
Selection.Sort Key1:=ActiveCell, Order1:=xlAscending, Header:=xlGuess, _
OrderCustom:=1, MatchCase:=False, Orientation:=xlTopToBottom
ActiveCell.Offset(0, -1).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "average"
ActiveCell.Select
```


12. Anhang

```
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A180"), Type:= _
    xIFillDefault
ActiveCell.Range("A1:A180").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight
ActiveCell.Offset(0, 3).Range("A1:A180").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight

' Beginn Kopieren der subset-Namen
ActiveCell.FormulaR1C1 = "train"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A60"), Type:= _
    xIFillDefault
ActiveCell.Offset(60, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "selection"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A60"), Type:= _
    xIFillDefault
ActiveCell.Offset(60, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "test"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A60"), Type:= _
    xIFillDefault
ActiveCell.Select
ActiveCell.Offset(-120, 0).Range("A1").Select
Range("I12").Select
ActiveCell.Range("A1:L180").Select
Selection.Copy
```

End If

If n = 80 Then

```
ActiveCell.Offset(-2629, 0).Range("A1:J2630").Select
ActiveWindow.ScrollRow = 1
Application.CutCopyMode = False
Selection.Sort Key1:=ActiveCell, Order1:=xlAscending, Header:=xlGuess, _
    OrderCustom:=1, MatchCase:=False, Orientation:=xlTopToBottom
ActiveCell.Offset(0, -1).Range("A1").Select
```

12. Anhang

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "average"  
ActiveCell.Select  
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A240"), Type:= _  
    xIFillDefault  
ActiveCell.Range("A1:A240").Select  
Selection.Insert Shift:=xlToRight  
ActiveCell.Offset(0, 3).Range("A1:A240").Select  
Selection.Insert Shift:=xlToRight
```

' Beginn Kopieren der *subset*-Namen

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "train"  
ActiveCell.Select  
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A80"), Type:= _  
    xIFillDefault  
ActiveCell.Offset(80, 0).Range("A1").Select  
ActiveCell.FormulaR1C1 = "selection"  
ActiveCell.Select  
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A80"), Type:= _  
    xIFillDefault  
ActiveCell.Offset(80, 0).Range("A1").Select  
ActiveCell.FormulaR1C1 = "test"  
ActiveCell.Select  
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A80"), Type:= _  
    xIFillDefault  
ActiveCell.Select  
ActiveCell.Offset(-160, 0).Range("A1").Select  
Range("I12").Select  
ActiveCell.Range("A1:L240").Select  
Selection.Copy
```

End If

If n = 100 Then

```
ActiveCell.Offset(-3289, 0).Range("A1:J3290").Select  
ActiveWindow.ScrollRow = 1  
Application.CutCopyMode = False  
Selection.Sort Key1:=ActiveCell, Order1:=xlAscending, Header:=xlGuess, _
```

12. Anhang

```
        OrderCustom:=1, MatchCase:=False, Orientation:=xlTopToBottom
ActiveCell.Offset(0, -1).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "average"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A300"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Range("A1:A300").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight
ActiveCell.Offset(0, 3).Range("A1:A300").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight

' Beginn Kopieren der subset-Namen
ActiveCell.FormulaR1C1 = "train"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A100"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Offset(100, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "selection"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A100"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Offset(100, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "test"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A100"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Select
ActiveCell.Offset(-200, 0).Range("A1").Select
Range("I12").Select
ActiveCell.Range("A1:L300").Select
Selection.Copy
End If
```

12. Anhang

If n = 150 Then

```
ActiveCell.Offset(-4939, 0).Range("A1:J4940").Select
ActiveWindow.ScrollRow = 1
Application.CutCopyMode = False
Selection.Sort Key1:=ActiveCell, Order1:=xlAscending, Header:=xlGuess, _
    OrderCustom:=1, MatchCase:=False, Orientation:=xlTopToBottom
ActiveCell.Offset(0, -1).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "average"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A450"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Range("A1:A450").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight
ActiveCell.Offset(0, 3).Range("A1:A450").Select
Selection.Insert Shift:=xlToRight
```

' Beginn Kopieren der *subset*-Namen

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "train"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A150"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Offset(150, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "selection"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A150"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Offset(150, 0).Range("A1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "test"
ActiveCell.Select
Selection.AutoFill Destination:=ActiveCell.Range("A1:A150"), Type:= _
    xlFillDefault
ActiveCell.Select
ActiveCell.Offset(-300, 0).Range("A1").Select
Range("I12").Select
ActiveCell.Range("A1:L450").Select
```

12. Anhang

```
        Selection.Copy
    End If

    If y < 146 Then
        Sheets("Sheet2").Select
    Else
        Sheets("Sheet3").Select
    End If

    ActiveCell.Select
        Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
            False, Transpose:=False
        Selection.End(xlDown).Select
        ActiveCell.Offset(1, 0).Range("A1").Select
        Sheets("Sheet1").Select

' Löschen der überzähligen Kolonnen
    If n = 20 Then
        Range("AA12:AB71").Select
        Selection.Delete Shift:=xlToLeft
    End If

    If n = 40 Then
        Range("AA12:AB131").Select
        Selection.Delete Shift:=xlToLeft
    End If

    If n = 80 Then
        Range("AA12:AB251").Select
        Selection.Delete Shift:=xlToLeft
    End If

    If n = 100 Then
        Range("AA12:AB311").Select
        Selection.Delete Shift:=xlToLeft
    End If
```

12. Anhang

```
If n = 150 Then
    Range("AA12:AB461").Select
    Selection.Delete Shift:=xlToLeft
End If

Next y

'Speichern des neuen Patterns
    Sheets("Sheet2").Select
    ActiveCell.Cells.Select
    Range("A1:L65536").Activate
    Application.CutCopyMode = False
    Selection.Copy
    Workbooks.Add
    ActiveSheet.Paste
    Columns("D:L").Select
    Selection.NumberFormat = "0.00"
    Application.CutCopyMode = False
    ActiveCell.Cells.Select
If m > 145 Then
    Workbooks("CFG.xls").Activate
    Sheets("Sheet3").Select
    Range("A1:L65536").Activate
    Application.CutCopyMode = False
    Selection.Copy
    Workbooks.Add
    ActiveSheet.Paste
    Columns("D:L").Select
    Selection.NumberFormat = "0.00"
    Application.CutCopyMode = False
    ActiveCell.Cells.Select
End If
End Sub
```

13 Curriculum vitae

Geburtsdatum und Ort	24. Juni 1977, Lausanne
Nationalität	Schweizer
Ausbildungen	
2003-2006	Dissertation am Institut für Molekulare Pharmazie der Universität Basel
11. 2002	Diplom als eidg. dipl. Apotheker, Universität Basel
2000-2002	Fachstudium Pharmazie, Universität Basel
10. 2000	Diplom als Assistenz-Apotheker, Universität Lausanne
1999-2000	Praktikumsbegeleitende Kurse und Prüfungen an der Universität Lausanne.
1997-1999	Naturwissenschaftliches Grundfächerstudium in Pharmazie, Universität Basel
1991-1997	Deutsches Gymnasium, Biel-Bienne
Praktische Erfahrungen	
2000-2006	Vertretungen in Offizinapotheken (Seeland Apotheke Biel, Pharmacie de la Côte Neuenburg, Pharmacie de la Rosière Neuenburg)
1999-2000	Praktikumsjahr Pharmacie de la Côte, Neuenburg
Weitere Fähigkeiten	
Sprachen	Deutsch: Muttersprache Englisch: mündlich und schriftlich Französisch: mündlich und schriftlich
Computer:	Fortgeschrittene Kenntnisse von Mac OSX, Windows, Unix, Office Anwendungen, Datenbankprogrammen, Internet, HTML.