

4. Zusammenfassung und Ausblick

Die Wavelet-Transformation hat in den letzten Jahren eine stürmische Entwicklung erfahren. Dies gilt für die Wavelet-Theorie und die zugehörigen Algorithmen, aber insbesondere für praktische Anwendungen. Wavelets bieten neue Möglichkeiten zur Analyse, Glättung und Komprimierung von Signalen aller Art und werden daher in verschiedensten Bereichen verstärkt eingesetzt.

Im Gegensatz zur Fourier-Transformation ist die Wavelet-Analyse keine reine Frequenzanalyse, sondern erlaubt auch die zeitliche Lokalisierung der analysierten Frequenzanteile im Signal. Damit lassen sich Merkmale und Veränderungen des Signals, die an einer bestimmten Stelle auftreten, detektieren, was mit der Fourier-Transformierten nicht gelingt. Eine Transformation in den Waveletbereich ermöglicht es außerdem, die Signale gezielt, d.h. lokal, zu verändern.

Im Rahmen eines DFG-Projektes in Zusammenarbeit mit dem Institut für Angewandte Mathematik und Statistik der Universität Hohenheim in Stuttgart wurden in dieser Arbeit Anwendungsmöglichkeiten der Wavelet-Transformation im Bereich der modernen NIR-Spektrometrie untersucht. Ein Aspekt war hierbei die Vorbehandlung bzw. Filterung von NIR-Daten, wie z.B. die Glättung von NIR-Spektren. Im Vordergrund standen jedoch Untersuchungen zur direkten Verarbeitung der Wavelet-transformierten Spektren in Form der resultierenden Wavelet-Koeffizienten.

Den Schwerpunkt bildete die Entwicklung eines neuen Verfahrens zur Erstellung quantitativer Kalibrationen. Bei dem als WCR (*Wavelet Coefficient Regression*) bezeichneten Verfahren werden Kalibrationsmodelle auf der Basis von Wavelet-Koeffizienten erstellt. Aus der Vielzahl der Koeffizienten, die aus der Wavelet-Transformation der NIR-Spektren resultieren, werden jene herausgefiltert, die das optimale Kalibrationsmodell ergeben.

Dies geschieht in einem zweistufigen Prozeß. Zunächst werden Wavelet-Koeffizienten mittels einer Korrelationsrangfolge vorausgewählt. Anschließend wird die beste Kombination aus diesen Koeffizienten mit Hilfe eines Genetischen Algorithmus selektiert.

Das WCR-Verfahren zeichnet sich durch eine hohe Selektivität bezüglich jener Signalanteile bzw. spektraler Merkmale aus, die für die Kalibrierung einer Eigenschaft relevant sind. Der für die Selektion der Koeffizienten verwendete Genetische Algorithmus wurde im Rahmen des Projektes speziell für die gegebene Aufgabenstellung entwickelt.

Bezüglich der Vorhersagefehler für unabhängige Proben sind die WCR-Modelle von vergleichbarer und teilweise höherer Güte, als jene, die mit der Anwendung der klassischen faktoranalytischen Verfahren PCR und PLS auf die Originaldaten erzielt werden können. Bei letzteren Verfahren ist zusätzlich immer auch noch eine zeitaufwendige manuelle Optimierung der Datenvorbehandlung (*data pretreatment*) durchzuführen, die beim WCR-Verfahren vollkommen entfällt.

Wie weiter gezeigt werden konnte, lassen sich die Wavelet-transformierten Spektren auch direkt mit den Verfahren PCR und PLS verarbeiten, was zu Modellen hoher Güte führt. Auf diese Weise erübrigt sich ebenfalls eine Datenvorbehandlung.

Zudem lassen sich die Wavelet-Koeffizienten, die bei der WCR selektiert oder mittels PCR bzw. PLS gewichtet wurden, durch eine Rücktransformation spektroskopisch-chemisch interpretieren.

Mit dem selektiven WCR-Verfahren einerseits und der Verwendung aller Wavelet-Koeffizienten für PCR- und PLS-Modellierungen andererseits, bietet die Wavelet-Transformation interessante Möglichkeiten im Bezug auf eine automatische Erstellung multivariater Kalibrationsmodelle für die quantitative NIR-Spektrometrie.

Auch zur Klassifizierung und Identifizierung von Materialien mittels NIR-Spektrometrie konnten Wavelets erfolgreich eingesetzt werden. Um dies zu zeigen, wurden zwei Datensätze Wavelet-transformierter *on-line* NIR-Spektren von Kunststoffverpackungen herangezogen, die aus einer Sortieranlage für die im Hausmüll enthaltenen Wertstoffe stammen. Durch die Verarbeitung der Wavelet-Koeffizienten mit Hilfe eines einfachen Neuronalen Netzes konnten für die unterschiedlichen Kunststoffarten sehr gute Klassifizierungsergebnisse erreicht werden.

Anhand der relativ stark verrauschten Spektren der Kunststoffverpackungen wurde auch die Glättung und Komprimierung von NIR-Spektren demonstriert. Mit dem hierzu eingesetzten Verfahren (*thresholding* von Wavelet-Koeffizienten) werden Rausch- und Minoritätsanteile automatisch aus dem transformierten Signal eliminiert. Aufgrund der besonderen Eigenschaft der Wavelet-Transformation, die in einem Signal enthaltene Information in wenigen Koeffizienten zu kodieren, ist sichergestellt, daß relevante Signalanteile erhalten bleiben.

Mit der Eliminierung der Wavelet-Koeffizienten, die für die Darstellung der Spektren nicht relevant sind, wurden Komprimierungsraten zwischen 70 % und 95 % erreicht. Auf Basis der komprimierten Datensätze konnten weiterhin gleich gute Klassifizierungsergebnisse erzielt werden wie mit den Ausgangsdaten.

Durch eine Rücktransformation unter Einbeziehung der reduzierten Koeffizientensätze wurden geglättete Spektren erhalten. Dieses vielfach eingesetzte Verfahren der Rauschverminderung durch *thresholding* ergibt meist deutlich bessere Ergebnisse als klassische Glättungsmethoden.

Bei letzteren, wie der Methode des gleitenden Mittelwertes (*moving average*) oder dem Verfahren nach *Savitzky-Golay*, wird die Glättung in einem Fenster bestimmter Breite vorgenommen, das über das Spektrum geschoben wird. Die Wahl der Fensterbreite hat einen starken Einfluß auf das Ergebnis und wirkt sich auf unterschiedlich scharfe Banden unterschiedlich aus. Wie gezeigt werden konnte, werden mit dem Wavelet-Verfahren ohne manuelle Festlegung von Parametern und unabhängig von den unterschiedlichen Bandenkonturen innerhalb eines Spektrums optimale Ergebnisse erzielt.

Bei allen beschriebenen Anwendungen wurde ein neuer Typ von Wavelets, die Sturm-Liouville-Wavelets, eingesetzt, die speziell für Signale auf kompakten Intervallen konstruiert wurden. Bei der Verwendung dieser Wavelets ist das Auftreten von Randeffekten ausgeschlossen, die bei anderen Wavelet-Typen aufgrund der notwendigen Signalerweiterung auftreten können. Abgesehen von diesem Vorteil haben sich die Sturm-Liouville-Wavelets auch aufgrund ihrer sonstigen günstigen Eigenschaften bei der Verarbeitung von NIR-Spektren bewährt.

In der vorliegenden Arbeit konnte erfolgreich der Nachweis erbracht werden, daß die Wavelet-Transformation in vielfältiger Weise in der NIR-Spektrometrie und in der Chemometrie angewendet werden kann. Die Anwendungsmöglichkeiten umfassen die Erstellung von Kalibrationsmodellen, die Glättung und Vorbehandlung von Spektren, sowie die Komprimierung von Datensätzen. Die eingesetzten Wavelet-Methoden sind nicht nur effizient und schnell, sondern besitzen zudem noch ein hohes Automatisierungspotential.

Aus diesen Gründen werden Wavelet-Methoden insbesondere im Bereich der Chemometrie verstärkt Anwendung finden, wie die wachsende Zahl an Publikationen und erste Implementierungen in kommerzielle Programmpakete (z.B. SIMCA-P [193], NIRCAL [194]) zeigen.

Wie bereits in einem Ausblick von *W. Sweldens* [195] ausgeführt wurde, ist die Entwicklung der Wavelets ein fortlaufender Prozeß und keineswegs abgeschlossen. Daher sind auch in Zukunft interessante Weiterentwicklungen zu erwarten.

