

# Abbildungsverzeichnis

2.1. Anzahl von Publikationen über Anwendungen von Wavelets in der Chemie zwischen 1989 und 1997 . . . . .	8
2.2. Komprimierung von Bilddaten mit JPEG- und Wavelet-Verfahren . .	13
2.3. Ausdehnung der Zeit-Frequenz-Fenster bei Fourier- und Wavelet-Transformation . . . . .	17
2.4. Beispiele für die Fourier-Transformation von Signalen . . . . .	18
2.5. Basisfunktionen der gefensterten Fourier-Transformation . . . . .	19
2.6. Dilatation und Translation eines Wavelets . . . . .	21
2.7. Wavelet-Zerlegung eines simulierten Spektrums . . . . .	22
2.8. Wavelet-Funktionen . . . . .	24
2.9. Schema der Multiskalen-Analyse . . . . .	32
2.10. Multiskalen-Analyse eines simulierten Spektrums . . . . .	35
2.11. Signalerweiterungstechniken zur Minderung von Randeffekten . . . .	37
2.12. <i>Hard-</i> und <i>soft-thresholding</i> am Beispiel einer einfachen Funktion . .	41
2.13. Ablaufschema eines Genetischen Algorithmus . . . . .	45
2.14. Lernende Vektorquantisierung (LVQ): Schema der Netzstruktur . . .	48
2.15. Lernende Vektorquantisierung (LVQ): Klassifizierung mittels Gewich- tungsvektoren (Codebook-Vektoren) . . . . .	49
3.1. Beispiele für NIR-Spektren von Kunststoffverpackungen . . . . .	53
3.2. NIR-Spektren von Weizen . . . . .	54
3.3. Glättung verschiedener Arten von Spektren mit <i>thresholding</i> . . . . .	60
3.4. <i>Thresholding</i> von Wavelet-Koeffizienten . . . . .	61
3.5. <i>Denoising</i> und Komprimierung eines verrauschten NIR-Spektrums von Weizen . . . . .	62
3.6. <i>Denoising</i> und Komprimierung des NIR-Spektrums einer PE-Kunst- stoffverpackung . . . . .	63
3.7. <i>Denoising</i> und Komprimierung des NIR-Spektrums einer PS-Kunst- stoffverpackung . . . . .	64
3.8. Komprimierung eines NIR-Spektrums von Weizen durch <i>thresholding</i>	66
3.9. Darstellung der Hauptkomponentenanalyse der Datensätze IKS1 und IKS2 . . . . .	71

---

3.10. s-Wavelet Zerlegungen der NIR-Spektren von Kunststoffverpackungen nach <i>thresholding</i> . . . . .	75
3.11. Schema zur quantitativen NIR-Spektrometrie mit Wavelets . . . . .	77
3.12. Ablaufschema des WCR-Verfahrens . . . . .	80
3.13. Abhängigkeit der Parameterwerte von der Komplexität des Kalibrationsmodells . . . . .	83
3.14. Kalibration des Feuchtegehaltes von Weizen: GA-Optimierung mit dem SEE-Wert als Fitnessfunktion . . . . .	84
3.15. Kalibration des Feuchtegehaltes von Weizen: GA-Optimierung mit dem SEEP-Wert als Fitnessfunktion . . . . .	86
3.16. Kalibration des Feuchtegehaltes von Weizen: GA-Optimierung mit dem SEE-Wert als Fitnessfunktion für einen kombinierten Kalibrationsdatensatz . . . . .	88
3.17. Externe Validation der WCR-Kalibrationen des Feuchtegehaltes von Weizen . . . . .	93
3.18. Externe Validation der WCR-Kalibrationen des Proteingehaltes von Weizen . . . . .	94
3.19. WCR-Kalibration haar-Wavelet: Rekonstruktion des Spektrums mit selektierten Koeffizienten . . . . .	98
3.20. Kalibration des Feuchtegehaltes von Weizen mit rekonstruierten Spektren . . . . .	99
3.21. Validationsergebnisse der PCR- und PLS1-Kalibrationen des Feuchtegehaltes von Weizen mit Wavelet-Koeffizienten . . . . .	102
3.22. Validationsergebnisse der PCR- und PLS1-Kalibrationen des Proteingehaltes von Weizen mit Wavelet-Koeffizienten . . . . .	103
3.23. <i>Coefficient weighting</i> Spektren und deren Rekonstruktion von PCR-Kalibrationen mit db2-Wavelet-Koeffizienten . . . . .	106
3.24. Validationsergebnisse der PCR- und PLS1-Kalibrationen des Feuchtegehaltes von Weizen auf der Basis rekonstruierter Spektren mit nach $r^2$ -Koeffizienten selektierten Wavelet-Koeffizienten . . . . .	109
A.1. Verwendete Wavelet-Funktionen: Haar-Wavelet, Daubechies-Wavelets, Coiflets, Sturm-Liouville- und Tschebyscheff-Wavelet . . . . .	143
A.2. Verwendete Wavelet-Funktionen: Biorthogonale Wavelets . . . . .	144
A.3. Funktionsweise des <i>uniform crossover</i> -Operators im Genetischen Algorithmus . . . . .	146
A.4. Funktionsweise des <i>mutation</i> -Operators im Genetischen Algorithmus .	147