

# **"Auswerteverfahren für die intelligente Identifikation organischer Stoffe"**

Von der Fakultät für Maschinenwesen der Rheinisch-Westfälischen  
Technischen Hochschule Aachen zur Erlangung des akademischen Grades  
eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Diplom-Ingenieur

Bernt Andrassy

aus Heidelberg

Berichter: Universitätsprofessor Dr.-Ing. K.W. Pleßmann

Universitätsprofessor Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Walter Michaeli

Tag der mündlichen Prüfung: 10.11.2000

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Hochschulbibliothek online  
verfügbar





Diese Arbeit wurde durch die Deutsche  
Bundesstiftung Umwelt gefördert

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in den Jahren 1997 bis 2000 während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehr- und Forschungsgebiet für Verfahren der Prozeßdatenverarbeitung und Prozeßführung (pdv) der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen. Die Arbeit an der vorliegenden Dissertation war eingebettet in ein inspirierendes und unterstützendes Umfeld. In diesem Zusammenhang möchte ich ganz besonders Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. K. W. Pleßmann für seine kontinuierliche Unterstützung und sein Vertrauen danken. Desweiteren bin ich meinen Kollegen Martin Köllmann und Paul Laufens für die wunderbare Zusammenarbeit dankbar.

Weiterhin gilt mein Dank Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. W. Michaeli für das meiner Arbeit entgegengebrachte Interesse und die Übernahme des Koreferats.

Die vorliegende Dissertation steht in der Folge des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Forschungsprojekts MARECK (Materielles Recycling von unverstärkten thermoplastischen Kunststoffen). Die auf dieses Projekt zurückgehende 'interdisziplinäre' Unterstützung von Klaus Breyer (Institut für Kunststoffverarbeitung) und Tom Schultz (Institut für Aufbereitung) war mir eine große Hilfe.

Mein ganz besonderer Dank gilt schließlich der Deutschen Bundesstiftung Umwelt, die mich während drei Jahren nicht nur finanziell gefördert, sondern mir darüberhinaus durch nette Betreuung und viele interessante Veranstaltungen ein Gefühl der Eingebundenheit gegeben hat.

Bernt Andrassy

München, im April 2001

Bernt Andrassy



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Stand der Technik</b> .....	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Theoretische Grundlagen der Absorption von Infrarot-Licht</b> .....	<b>8</b>
3.1.1	Infrarot-Licht .....	8
3.1.2	Molekülschwingungen .....	9
3.1.3	Anregung von Molekülschwingungen .....	11
<b>4</b>	<b>Das Meßsystem</b> .....	<b>16</b>
4.1	NIR-Spektroskopie .....	16
4.1.1	Meßart .....	20
4.1.2	Meßparameter .....	22
4.2	Meßmethodik .....	23
<b>5</b>	<b>Rechnergestützte Verarbeitung der Spektrendaten</b> .....	<b>25</b>
5.1	Faktoranalyse .....	25
5.2	Anordnung von Spektren im n-dimensionalen Faktorraum .....	28
5.2.1	Gruppierung gleichartiger Spektren .....	28
5.2.2	Zuordnung von Spektren mit Hilfe der Mahalanobis-Distanz .....	29
<b>6</b>	<b>Das Auswertesystem IntellIdent</b> .....	<b>32</b>
6.1	Universaler Faktorraum .....	34
6.1.1	Referenzstoffe zur Bildung des universalen Faktorraums .....	38
6.2	Faktoranalyse .....	39
6.3	Faktorauswahl .....	39
6.3.1	Andrassy-Selektivität und Andrassy-Stair-Wert .....	41
6.3.2	Bestimmung der vier Erstfaktoren .....	51
6.3.3	Bestimmung des optimalen Faktortripels .....	52
6.4	Auswertung zu bestimmender Stoffe .....	53
6.5	Umsetzung des Auswertesystems IntellIdent .....	54
<b>7</b>	<b>Versuchsreihen</b> .....	<b>56</b>

7.1	Evaluierung des universalen Faktorraums mit Hilfe der Bestimmung von 15 Kunststoffen .....	56
7.2	Evaluierung des universalen Faktorraums mit Hilfe der Bestimmung von zehn Kunststoffen.....	65
7.3	Evaluierung des universalen Faktorraums mit Hilfe der Bestimmung von fünf Kunststoffen.....	68
7.4	Vergleich der Untersuchungen mit fünfzehn, zehn und fünf Kunststoffen.....	70
7.5	Überprüfung der Gültigkeitsdauer einer Konfiguration .....	74
7.6	Erprobung von IntellIdent.....	80
7.6.1	Bestimmung von vier Kunststoffen .....	81
7.6.2	Bestimmung unterschiedlicher Handelstypen einer Kunststoffsorte .....	82
7.6.3	Bestimmung eines Pulvergemisches aus Polypropylen und Polystyrol mit unterschiedlichen Zusammensetzungen .....	85
7.6.4	Bestimmung von drei Papiersorten.....	90
7.6.5	Bestimmung von mit Diesel verunreinigtem Sand.....	90
7.6.6	Bestimmung von fünf Hölzern .....	94
7.6.7	Bestimmung von drei Pflanzen anhand ihrer Blätter.....	95
7.7	Untersuchung der für die Darstellung eines Stoffs verwendeten Anzahl an Spektren.....	98
7.8	Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick auf weitere Forschungsschwerpunkte.....	102
<b>8</b>	<b>Schlußbetrachtung .....</b>	<b>104</b>
<b>9</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>106</b>
<b>10</b>	<b>Anhang .....</b>	<b>112</b>
10.1	Referenzstoffe zur Bildung des universalen Faktorraums.....	112
10.2	Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.....	117
10.2.1	Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.1.....	117
10.2.2	Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.2.....	128
10.2.3	Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.3.....	137

# 1 Einleitung

Die Sortierung organischer Stoffe ist sowohl in ökonomischer als auch in ökologischer Hinsicht im Sinne eines nachhaltigen Umgangs mit Rohstoffen wichtig. Die Sortierung organischer Stoffe ermöglicht zum einen deren Wiederverwertung, wie es das Beispiel des Rezyklierens von Kunststoffen zeigt. Zum anderen ist es im Sinne einer optimalen Entsorgung, wie zum Beispiel durch thermische Verwertung, wichtig, organische Stoffe zu sortieren. Darüber hinaus ist die Vereinzelnung organischer Kontaminationen, wie sie beispielsweise mit MKWs<sup>1</sup> verunreinigte Böden oder Wässer darstellen, in diesem Zusammenhang eine wichtige Aufgabe.

Die NIR-(Nah-Infrarot)-Spektroskopie ist für die Bestimmung organischer Substanzen besonders geeignet, da organische Verbindungen im Nahen Infrarot spezifische Absorptionsspektren aufweisen, das heißt Eigenschaften zeigen, die zum Beispiel im sichtbaren Bereich des Lichts verborgen bleiben. Zudem arbeitet die NIR-Spektroskopie kontaktlos und zerstörungsfrei. Sie hat daher seit den 70er Jahren Einzug in weite Bereiche der industriellen Anwendung, so zum Beispiel in der pharmazeutischen - und der Lebensmittelindustrie (vgl. /BCI92/) oder in der Aufbereitung von Hausmüll (vgl. /FWC97/) erhalten.

Die Auswertung von NIR-Spektren hinsichtlich einer Zugehörigkeit zu Stoffen ist aufgrund von im Nahen Infrarot auftretenden Überlappungen der Banden komplex und wird von rechnergestützten Auswerteverfahren geleistet, die auf Methoden der multivariaten Statistik zurückgreifen. All diesen Auswerteverfahren ist gemeinsam, daß sie für jeden Anwendungsfall neu kalibriert werden müssen. Die Kalibrationen sind zudem notwendigerweise geräteabhängig und werden in der Praxis meist mit zu wenigen Daten erstellt (vgl. /CAM00/). Dadurch entsteht ein zusätzlicher Bedarf nach der Erstellung von Kalibrationen (vgl. /ANK99/). Im allgemeinen ist das Erstellen von Kalibrationen aber zeit- und kostenintensiv (vgl. /ANK99/) und von geschulten Anwendern abhängig. Der Einsatz dieser Technik ist daher vergleichsweise unflexibel und bislang nur für statische Anwendungsfälle wie zum Beispiel große gleich bleibende

---

<sup>1</sup> MKW ist die Abkürzung für die mineralischen Kohlenwasserstoffe, zu denen unter anderem sämtliche Erdölprodukte zählen.

Stoffströme interessant, da dann ihre aufwendige Kalibration nur einmalig anfällt.

Vor diesem Hintergrund war es das Ziel der vorliegenden Arbeit, für das Sortieren von organischen Stoffen mit Hilfe der NIR-Spektroskopie ein Auswertesystem zu entwickeln, das sich den ihm gestellten Erkennungsaufgaben selbstständig anpaßt, sich selbst kalibriert. Es soll dadurch dem Benutzer ermöglicht werden, auch ohne spezifische Fachkenntnisse wechselnde Sortierungsaufgaben aus dem Bereich der organischen Stoffe zu lösen.

Das entwickelte Auswertesystem, im nachfolgenden 'IntellIdent' genannt, hat genau dies zum Ziel: Für die Unterscheidung einer definierten Menge organischer Stoffe soll es ausreichen, diese Stoffe dem System in Form von Kalibrationsspektren zur Verfügung zu stellen. IntellIdent soll dann anhand der Messungen selbstständig herausfinden, wie es die Stoffe am besten unterscheiden kann. Es soll sich sozusagen "intelligent" auf verschiedene Identifikationsaufgaben einrichten.

Dem System liegen die folgenden Hypothesen zu Grunde:

- Organische Stoffe, ob natürlicher Herkunft oder künstlich hergestellt, sind sich grundsätzlich chemisch sehr ähnlich. Sie haben damit auch ähnliche Spektren im Nahen Infrarot.
- Es ist mit Hilfe von statistischen Verfahren möglich, die Spektren ausgewählter organischer Stoffe so zu zerlegen, daß mit den entstehenden Bausteinen die Spektren möglichst vieler anderer organischer Stoffe so genau nachgebildet werden können, daß sie von wieder anderen organischen Stoffen unterschieden werden können.
- Organische Stoffe natürlicher Herkunft weisen einen Reichtum an Verbindungen auf. Sie sind deshalb besonders gut für die Rekonstruktion von organischen Stoffen künstlicher wie natürlicher Herkunft mit Hilfe von statistischen Verfahren geeignet.

Um diese Hypothesen zu verifizieren, wurde in einem ersten Schritt das Auswertesystem IntellIdent entwickelt und in eine Software umgesetzt. Ihr liegt das Verfahren der Faktoranalyse zugrunde. Ausgewählte organische Stoffe werden in Faktoren zerlegt, die einen universalen Faktorraum bilden, das heißt einen Faktorraum, in dem sich möglichst viele organische Stoffe spezifisch gruppieren lassen. Mittels eigens entwickelter Kennzahlen werden die für einen Anwendungsfall optimalen drei Faktoren ermittelt. Die betrachteten Stoffe werden anhand ihrer Anordnung in dem durch die drei Faktoren aufgespannten Faktorraum untersucht. Als Entfernungsmaß wird dabei die Mahalanobis-Distanz verwendet.



Mit dem entwickelten System wurden daraufhin folgende Untersuchungen durchgeführt: Anhand unterschiedlicher Kunststoffsorten, verschiedener Papiersorten, Hölzer und Pflanzen sollte getestet werden, inwieweit diese Stoffe bestimmt werden können. Des Weiteren sollte mit Diesel kontaminierter Sand von nicht kontaminiertem unterschieden werden.

Mit der Auswertung der Untersuchungsergebnisse, ließ sich überprüfen, inwiefern sich, wie angenommen, mit IntellIdent tatsächlich eine Vereinfachung bei der Sortierung organischer Stoffe mittels der NIR-Spektroskopie erreichen läßt. Die sich daraus ergebenden Einsatzmöglichkeiten von IntellIdent werden abschließend aufgeführt.

## 2 Stand der Technik

Die NIR-Technologie hat sich mittlerweile in vielen Bereichen der analytischen Chemie etabliert (vgl. /JOL86/, /BCI92/). Sie wurde in den vergangenen zwanzig Jahren intensiv eingesetzt um Stoffe wie Kunststoffe (vgl. /EHK95/, /EIN96/, /SIE96/, /HHM97/), Erzeugnisse der Lebensmittelindustrie (vgl. /OSF86/, /ELR88/) und der Futtermittelindustrie (vgl. /SZA87/), Produkte der petrochemischen Industrie (vgl. /LDL95/), Pharmazeutika (vgl. /JJJ94/, /CAM00/) oder organische Umweltgifte (vgl. /BCB94/, /ELL99/, /ESL99/) zu analysieren.

Die Vorteile der NIR-Technologie sind allerdings erst dann von Nutzen, wenn man die überlappenden breiten Banden, die in den Spektren zu beobachten sind, interpretieren kann. Dafür benötigt man die Verfahren der multivariaten Statistik (vgl. /ESL99/). Mit ihnen werden Modelle erstellt, mit denen eine Auswertung NIR-spektroskopischer Daten möglich ist. Das Erstellen solcher Kalibrationsmodelle ist in der Regel ein sehr komplexer Vorgang. Bereits die optimale Auswahl der Faktoren, die für eine Erkennungsaufgabe relevant sind, ist ein umfangreiches Spezialgebiet der Wissenschaft (vgl. /BAR98/, /VAM98/, /MCM99/).

Aufgrund dieser Komplexität ist die Vorgehensweise beim Erstellen der Kalibrationsmodelle wie folgt (vgl. hierzu den linken Teil von Abbildung 2.1): Anhand von ausgewählten Stoffspektren, den sogenannten Kalibrationsdaten, wird von geschulten Experten ein Modell gebildet, das die Basis des Auswertesystems bildet, mit dem eine Sortierungsaufgabe gelöst werden soll. Im allgemeinen ist die Erstellung von Kalibrationen daher zeit- und kostenintensiv (vgl. /ANK99/). Dieses Vorgehen ist den Produkten aller großen Anbieter in diesem Bereich zu eigen.<sup>2</sup> Auch in der Wissenschaft kommt dieser Modellbildung eine große Bedeutung zu: Zumeist wird auch hier beschrieben, wie für einen gegebenen Anwendungsfall ein Modell gebildet wird (vgl. beispielhaft

---

<sup>2</sup> vgl. die Homepages der folgenden Anbieter: ABB Bomem, Analytical Spectral Devices, Benke, Biorad, Bran + Luebbe, Bruker, Buck, Bühler, Chemical Concept Products, Clairet Scientific, Galactic, H-W Optical Instruments GmbH, J&M Analytische Meß- und Regeltechnik GmbH, LT Industries Inc., Nicolet, Perkin Elmer, Spectral Dimensions und Varian.

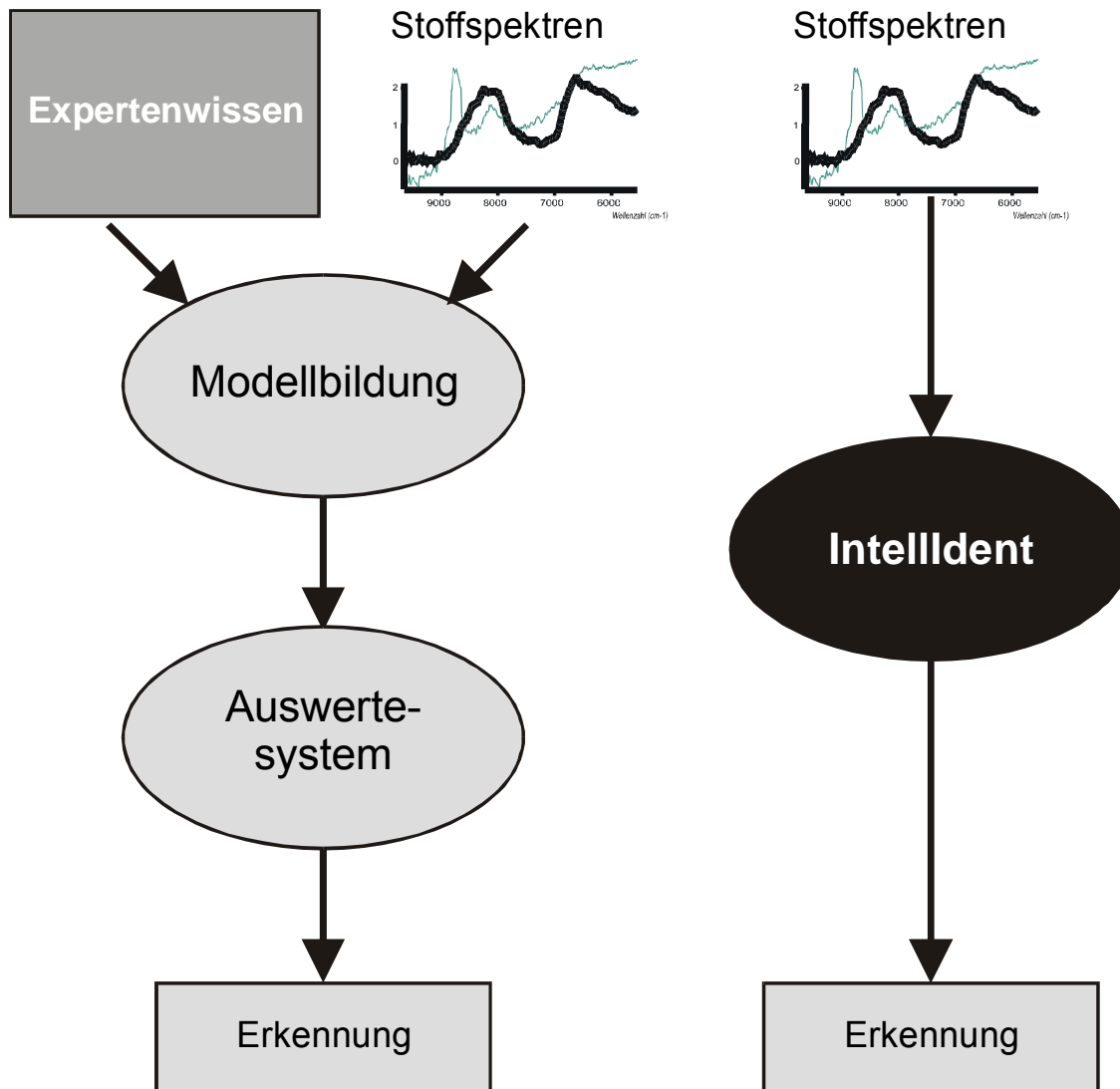
/HPS99/, /ESL99/, /ELL99/). Teilweise finden sich darüber hinaus allgemein gehaltene Vorschläge zu einer Vereinfachung der Modellbildung (vgl. /SWW99/), teils konkrete Versuche der ansatzweisen Standardisierung der Modellbildung, wie zum Beispiel im sogenannten Heisenberg-Modell (vgl. /HÖS98/). Zusätzlich richten sich viele wissenschaftliche Ansätze darauf, neue Methoden zu entwickeln, um die Eigenschaften von Modellen, wie z.B. ihre Robustheit, zu verbessern (vgl. /CMM98/).

Ein weiterer Schwerpunkt der Wissenschaft liegt darauf, bereits erstellte Modelle, die in der Praxis meist mit zu wenig Daten erstellt werden, zu erweitern (vgl. /CAM00/) oder von einem Spektrometer auf ein anderes zu übertragen (vgl. /ANK99/). Beide letztgenannten Ansätze zielen dabei darauf, das aufwendige Erstellen eines neuen Auswertemodells zu umgehen.

Das Ziel des in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Auswertesystems IntellIdent ist es hingegen, das Erstellen der Modelle für die Vorhersage von Stoffen zu automatisieren. Bei der Verwendung von IntellIdent entfällt damit der kosten- und zeitintensive Schritt der Modellbildung durch Experten. Das Auswertesystem selbst führt diesen Schritt durch; es benötigt dafür lediglich ausgewählte Spektren der Stoffe, die es zu bestimmen gilt (vgl. hierzu den rechten Teil von Abbildung 2.1).

Von der Einfachheit der Bedienung tritt IntellIdent in Konkurrenz zu den sogenannten Bibliothekssuchverfahren. Bei diesen wird ein vorliegendes Stoffspektrum in Vergleich zu den Daten in einer Referenzdatenbank gesetzt. Hierfür werden verschiedene Algorithmen verwendet, die die ähnlichsten Stoffe der Referenzdatenbank als Ergebnis liefern. Dieses Verfahren setzt jedoch im Unterschied zu IntellIdent voraus, daß eine für den vorliegenden Anwendungsfall passende Datenbank vorliegt und ist bei häufig wechselnden Anwendungsbereichen daher vergleichsweise unflexibel. Darüber hinaus kann sich IntellIdent auf Störungen, die sich im Datenmaterial niederschlagen, selbständig einstellen und ist somit geräteunabhängig. Bibliothekssuchverfahren sind dahingegen starr oder müssen durch eine Vorbehandlung der Daten auf störende Einflüsse angepaßt werden.

Eine Automatisierung bei der Erstellung von Vorhersagemodellen wurde bislang ebenfalls durch den Einsatz Neuronaler Netze in Teilen erreicht. Die Netze errechnen selbständig einen Zusammenhang zwischen den Spektren als Eingangsdaten und Eigenschaften der Spektren als Ausgangsdaten. Neben den sogenannten backpropagierenden Perzeptron-Netzen (vgl. z.B. /KOH94/, /KZB94/ oder /LAU97/) sind vor allem jene Netze zu nennen, die den FuzzyARTMAP-Algorithmus verwenden (vgl. z.B. /WBM95/, /WBS96/, /WBU96/ oder /FWC97/).



**Abbildung 2.1 Abgrenzung des Auswertesystems Intellident von bisher üblichen Methoden**

Das Problem bei beiden Vorgehensweise ist jedoch die aufwendige Datenvorbehandlung. Für die Perzeptron-Netze ist es beispielsweise sinnvoll, die Spektrendaten einer Faktoranalyse zu unterziehen, bevor sie dem Netz präsentiert werden (vgl. /LAU97/). Damit übernimmt das Netz aber nur einen Teil der Modellbildung, nämlich die Gruppierung der Stoffe in einem Faktorraum, der zuvor gebildet werden muß. Alternativ können Spektrendaten auch direkt dem Netz präsentiert werden. Im Sinne eines guten Ergebnisses empfehlen sich dabei aber eine Reihe von Datenvorbehandlungen, wie die Auswahl von für den Anwendungsfall besonders typischen Wellenlängen oder das einfache bzw. zweifache Differenzieren der Spektrendaten. Darüber hinaus müssen das Netz initialisiert und die Architektur des Netzes, die Anzahl der Knoten und Schichten, auf den Anwendungsfall abgestimmt werden.

Der Fuzzy-ARTMAP-Algorithmus ist für gute Ergebnisse ebenfalls auf eine geeignete Datenvorbehandlung angewiesen (vgl. /WBS96/). Des weiteren müssen Netzparameter ('initialisation, sizes of learning rates and vigilance parameters' /WBS96/) für den Anwendungsfall angepaßt werden.

Die sehr guten Ergebnisse, die sich gerade mit Neuronalen Netzen, die den Fuzzy-ARTMAP-Algorithmus verwenden, bei der Sortierung organischer Stoffe erzielen lassen, sind demnach ebenfalls bei der Modellbildung auf einen Eingriff seitens des Anwenders angewiesen, auf den IntellIdent verzichten kann.

Einzig die Software LOCAL der Firma FOSS NirSystems zielt in dieselbe Richtung wie IntellIdent. Sie basiert auf dem Verfahren der sogenannten lokalen Kalibration (vgl. /DBF88/, /NAI90/, /ASM93/ und /SDA94/): Für einen Anwendungsfall wird aus einer Datenbank eine zu bestimmende Anzahl von Spektren, die denen des Anwendungsfalls am nächsten liegen, ausgesucht. Mit diesen wird dann ein Vorhersagemodell errechnet. Im Fall der Software LOCAL ist dieses Vorgehen so verallgemeinert, daß der Anwender nicht in die Berechnung eines Vorhersagemodells eingreifen muß (vgl. /WLOCAL/).

Für eine möglichst gute Vorhersage mit Hilfe von lokalen Kalibrationen werden allerdings möglichst große Spektrendatenbanken gefordert (vgl. /SDA94/). Will man mit dieser Methode eine Allgemeingültigkeit erreichen, wie sie IntellIdent gewährleistet, muß die Spektrendatenbank eine Vielzahl verschiedener Stoffe umfassen. Es ist daher für einen Anwender dieses Verfahrens notwendig, eine sehr große Datenbank an sein System angeschlossen zu haben. Auf diese kann bei IntellIdent verzichtet werden. Des weiteren benötigen lokale Kalibrationen einen hohen Rechenaufwand, da alle Spektren in der Datenbank mit dem Anwendungsfall verglichen werden müssen.

Der Hauptunterschied zwischen IntellIdent und den Verfahren der lokalen Kalibration besteht jedoch darin, daß es das Ziel der lokalen Kalibrationen ist, einzelne Stoffe möglichst gut vorherzusagen, während IntellIdent zum Ziel hat, verschiedene Stoffe zu unterscheiden, sie zu sortieren. Es ist möglich, Stoffe schlecht zu erkennen und sie dennoch gut zu trennen. Diesen Umstand berücksichtigt IntellIdent und ist damit für Sortierungsaufgaben robuster als Verfahren, die auf der Methode der lokalen Kalibration beruhen.

## 3 Theoretische Grundlagen der Absorption von Infrarot-Licht

In dem vorliegenden Kapitel werden die physikalischen Zusammenhänge, die der Absorption von Infrarot-Licht zugrunde liegen, erläutert. Dafür wird auf die Eigenschaften von Infrarot-Licht und auf das Schwingungsverhalten von Molekülen eingegangen.<sup>3</sup>

### 3.1.1 Infrarot-Licht

Der sogenannte Welle-Teilchen-Dualismus von Licht weist diesem nach der Quantentheorie sowohl einen Wellen- als auch einen Teilchencharakter zu. Das Auftreten der Erscheinungen Interferenz, Beugung und Polarisierung bestimmen dabei den Wellencharakter.

Trifft Infrarot-Licht auf einen Stoff, dessen Moleküle sich bei Raumtemperatur ebenfalls in Schwingung befinden, interferiert es mit den schwingenden Teilchen. Dabei wird die Molekülschwingung angeregt, es geht Energie von dem Infrarot-Licht auf die Molekülschwingung über. Diese Wechselwirkung führt zur Absorption des Infrarot-Lichts. Jede Molekülschwingung hat dabei ein spezifisches Absorptionsverhalten, so daß von der Absorption des Infrarot-Lichts auf die Molekülschwingung und damit auf die chemische Verbindung geschlossen werden kann.

Nach der Maxwellschen Theorie ist das Licht ein kleiner Ausschnitt aus der Skala elektromagnetischer Schwingungen. Abbildung 3.1 zeigt, wie das Spektrum der elektromagnetischen Strahlung aufgeteilt wird. Das Infrarot-Licht belegt dabei den Wellenlängenbereich von  $0,75 \cdot 10^{-6}$  m bis  $10^{-3}$  m und ist unterteilt in das Ferne Infrarot (FIR), das Mittlere Infrarot (MIR) und das Nahe Infrarot (NIR).

---

<sup>3</sup> Für die weitergehende Diskussion empfiehlt sich /ATK87/.

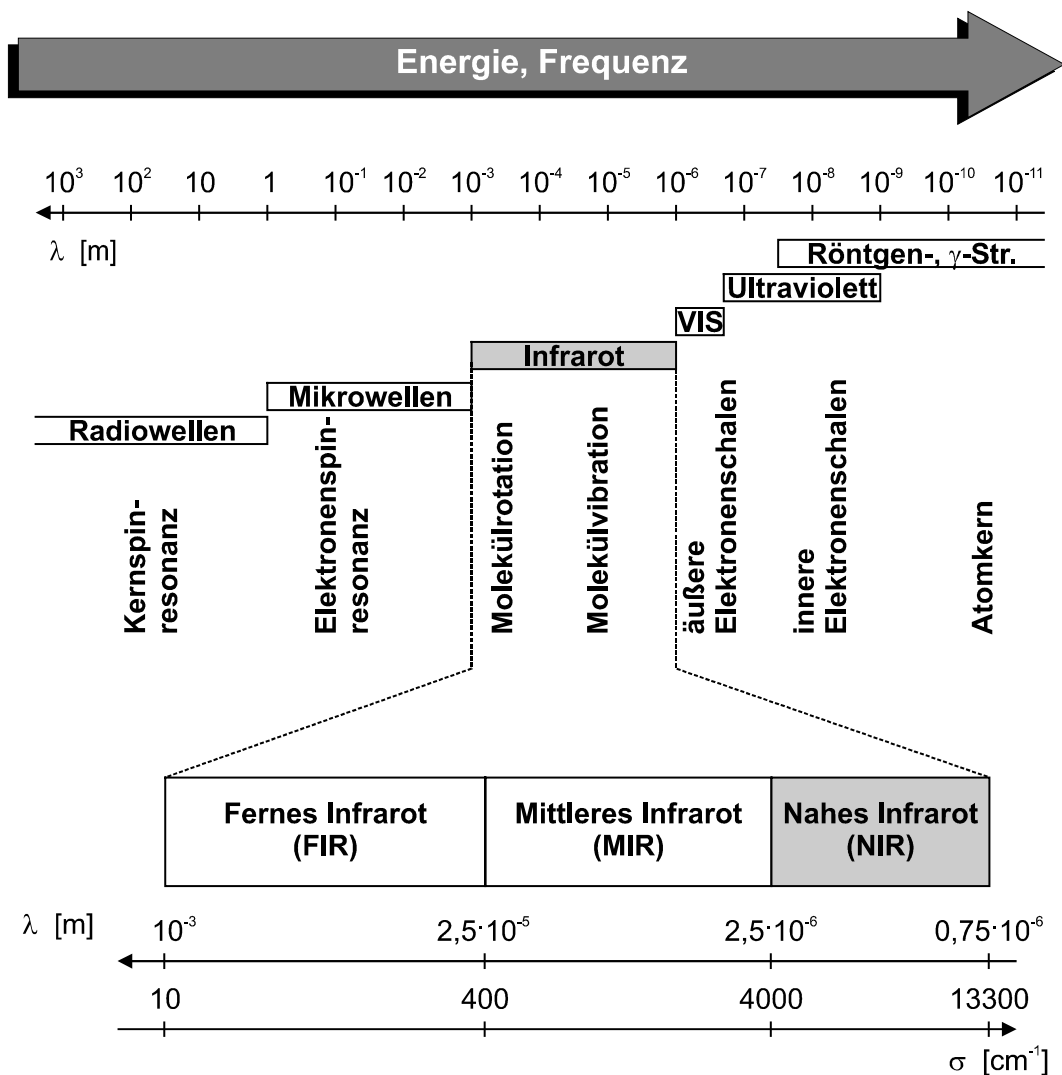


Abbildung 3.1 Bereiche der elektromagnetischen Strahlung

### 3.1.2 Molekülschwingungen

Ein Molekül ist aus  $N$  (mindestens zwei) Atomen aufgebaut, die eine oszillierende Bewegung ausführen. Zur Beschreibung dieser Schwingungen wird die Anzahl der Freiheitsgrade eines Moleküls bestimmt. Ein Freiheitsgrad beschreibt eine Bewegungsart eines Teilchens, die unabhängig von den anderen Bewegungsmöglichkeiten ist. Jedes Atom hat drei Freiheitsgrade gemäß den drei Koordinaten räumlicher Bewegung. Ein Molekül aus  $N$  Atomen hat demnach  $3 \cdot N$  Freiheitsgrade. Die Freiheitsgrade lassen sich aufteilen in die Bewegungen, die der Molekülschwerpunkt, das Molekül als Ganzes, vollführt, und in die Bewegungen, die die Atome relativ zueinander vollführen. Für erstere müssen drei Translationsfreiheitsgrade veranschlagt werden sowie zwei bzw.

drei Rotationsfreiheitsgrade, je nachdem ob das Molekül linear oder nicht-linear ist. Für ein lineares Molekül verbleiben demnach  $3 \cdot N - 5$  für ein nicht-lineares Molekül  $3 \cdot N - 6$  Freiheitsgrade für die Bewegungen der Atome zueinander. Interessant für den Infrarot-Bereich sind nur diese sogenannten Normalschwingungen der einzelnen Atome zueinander. Die Normalschwingungen können für Moleküle, die aus mehr als zwei Atomen aufgebaut sind, in Valenz- und Deformationsschwingungen unterteilt werden (vgl. Abbildung 3.2). Bei einer Valenzschwingung ändert sich die Länge einer Bindung während alle Bindungswinkel konstant bleiben. Bei den Deformationsschwingungen ändern sich Bindungswinkel während alle Bindungslängen gleich bleiben. Für zweiatomige Moleküle entfallen die Deformationsschwingungen.

Von den Normalschwingungen sind nur diejenigen infrarotaktiv, mit denen eine Änderung des Dipolmoments einhergeht. Mit anderen Worten: die Ladungsschwerpunkte, die sich durch Ladungsverschiebungen zwischen den Atomen eines Moleküls beim Ausbilden der intramolekularen Bindungen ergeben, müssen zueinander schwingen, damit infrarote Strahlung in Wechselwirkung mit dem Molekül treten kann.

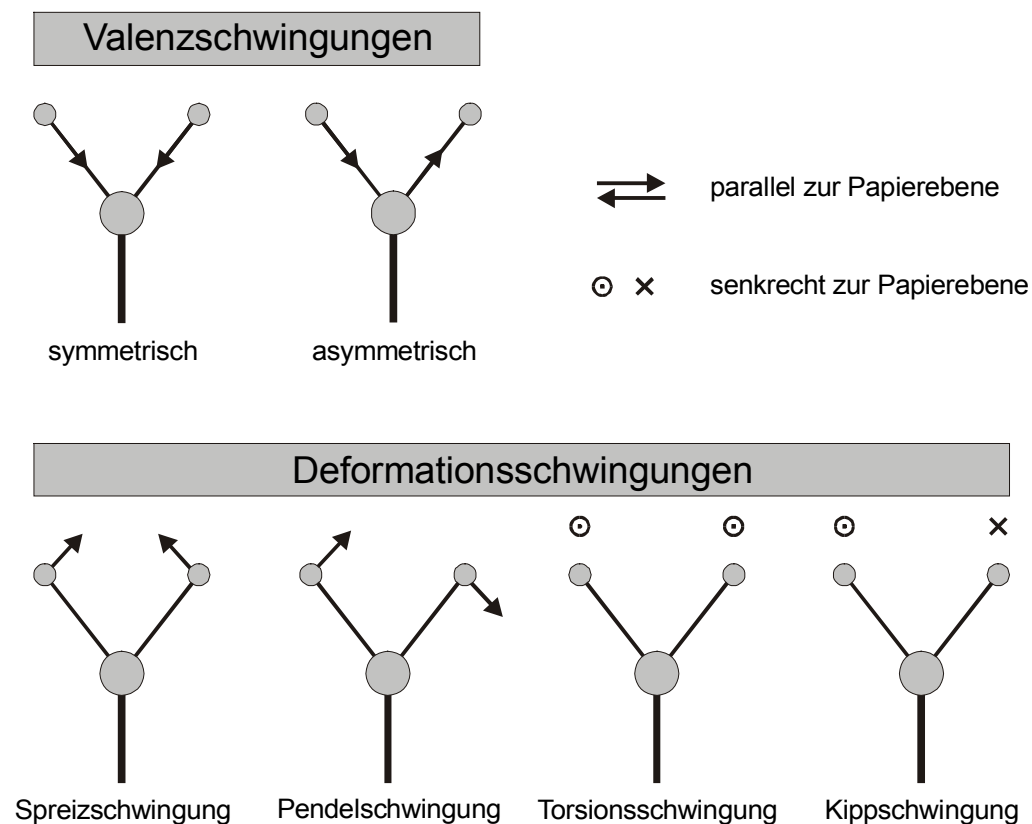
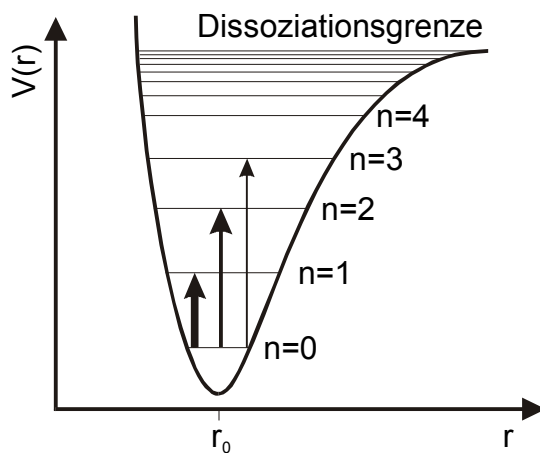


Abbildung 3.2 Schwingungsmodi von Molekülen



### 3.1.3 Anregung von Molekülschwingungen

Wird Infrarot-Licht von einer Molekülschwingung absorbiert, geht Energie von dem Infrarot-Licht auf die Molekülschwingung über. Eine Molekülschwingung nimmt dabei ein anderes Energieniveau an. Nach der Quantentheorie können Molekülschwingungen jedoch nicht beliebige Energieniveaus annehmen. Abbildung 3.3 stellt diesen Zusammenhang schematisch dar. Sie zeigt eine Näherung der Potentialkurve der Schwingung eines zweiatomigen Moleküls nach Morse. Das Potential  $V(r)$  ist über dem Atomabstand  $r$  aufgetragen. Die waagrechten Linien zeigen die möglichen Energieniveaus (Potentiale) an, die die Schwingung in Abhängigkeit von der Quantenzahl  $n$  einnehmen kann.



**Abbildung 3.3** Potentialkurven des anharmonischen Oszillators nach Morse

Eine Molekülschwingung kann durch Energieaufnahme dazu angeregt werden von einem niedrigeren Energieniveau auf ein höheres zu gelangen. Im Fall der Anregung einer Schwingung durch Licht, liefert das Licht die notwendige Energie  $\Delta V$ . Der Energieinhalt von Licht errechnet sich nach Gleichung 3.1.

$$E_{\text{Licht}} = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad (3.1)$$

$h$  = Plancksche Konstante

$c$  = Lichtgeschwindigkeit

$\lambda$  = Wellenlänge des Lichts

Nach Einsetzen des Potentialunterschieds  $\Delta V$  zwischen zwei Energieniveaus in Gleichung 3.1 ergibt sich nach Umstellen Gleichung 3.2.

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta V} \quad (3.2)$$

Mit Gleichung 3.2 läßt sich demnach die Wellenlänge desjenigen Lichts errechnen, das eine Schwingung anregen kann bzw. von einer Schwingung absorbiert wird.

In Abbildung 3.3 sind drei mögliche Übergänge von einem Potentialniveau auf ein anderes mit Pfeilen gekennzeichnet: Der Übergang von  $n = 0$  auf  $n = 1$  wird als Grundschiwingung bezeichnet, derjenige von Potentialniveau  $n = 0$  auf  $n = 2$  als erster Oberton und der von Potentialniveau  $n = 0$  auf  $n = 3$  als zweiter Oberton. Erster und zweiter Oberton werden auch als Oberschwingungen bezeichnet. Da die Energiequanten  $\Delta V$  der Oberschwingungen das zwei- bzw. dreifache des Energiequants der Grundschiwingung betragen, ergibt sich nach Gleichung 3.2, daß die Wellenlängen der beiden Oberschwingungen die Hälfte bzw. ein Drittel der Wellenlänge der Grundschiwingung betragen. Während die betrachteten Oberschwingungen im Nahen Infrarot liegen, liegen die dazugehörigen Grundschiwingungen demnach im Mittleren Infrarot.

Die Oberschwingungen treten seltener auf als die Grundschiwingungen und sind daher in ihrer gemessenen Intensität wesentlich schwächer. Es sind insgesamt nur solche Oberschwingungen im Nahen Infrarot meßbar, deren Grundschiwingungen im Bereich zwischen 2700nm und 5400nm (Mittleres Infrarot) liegen und starke Absorptionen zeigen. Im genannten Frequenzbereich lassen sich Grundschiwingungen der funktionellen Gruppen C-H, N-H, O-H und C=O anregen. Diese Struktureinheiten kommen in fast allen organischen Verbindungen vor, wie sie in der vorliegenden Arbeit vornehmlich betrachtet werden.<sup>4</sup>

Neben den Grund- und Oberschwingungen gibt es noch die sogenannten Kombinationsschwingungen, bei denen ein Lichtquant für die Anregung mehrerer Schwingungen gleichzeitig verwendet wird. Die Energiesumme der verschie-

---

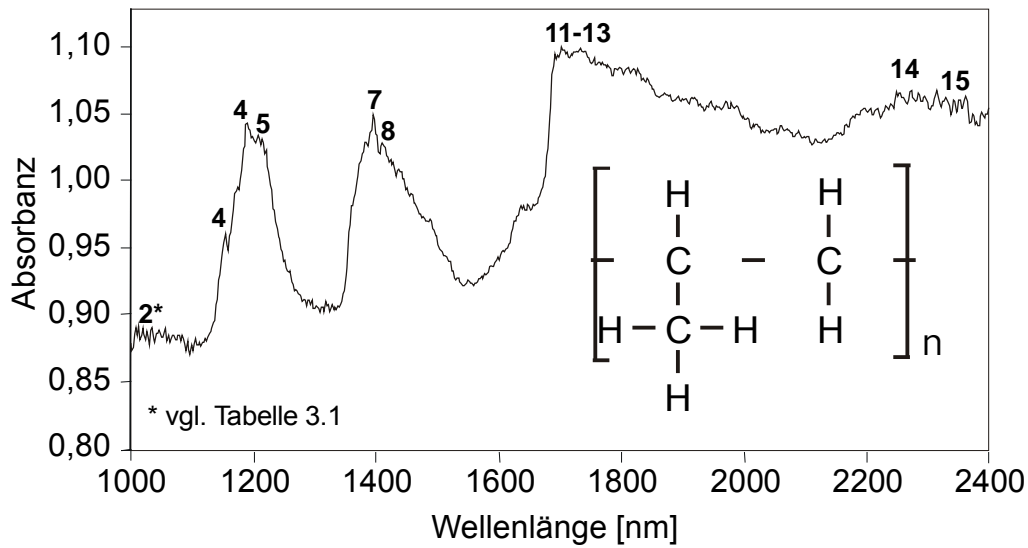
<sup>4</sup> Trotz der geringeren Intensität des Lichts wird in vorliegender Arbeit im Nahen Infrarot und nicht im Mittleren Infrarot gemessen, da das Nahe Infrarot gegenüber dem Mittleren Infrarot einige entscheidende Vorteile hat: Zum einen dringt NIR-Licht wegen der schwächeren Absorptionskoeffizienten tiefer in das gemessene Material ein als MIR-Licht und erfaßt somit einen repräsentativeren Teil des gemessenen Stoffs. Zum anderen erlaubt NIR-Licht wegen seiner gegenüber MIR-Licht viel geringeren Abschwächung in Glas die räumliche Trennung zwischen Spektrometer und Meßobjekt mittels eines Glasfaserkabels und vereinfacht auf diese Weise den Meßablaufs entscheidend (vgl. /SIP89/).

denen Anregungen entspricht dabei genau der Energie des Lichtquants (vgl. /FEL96/).

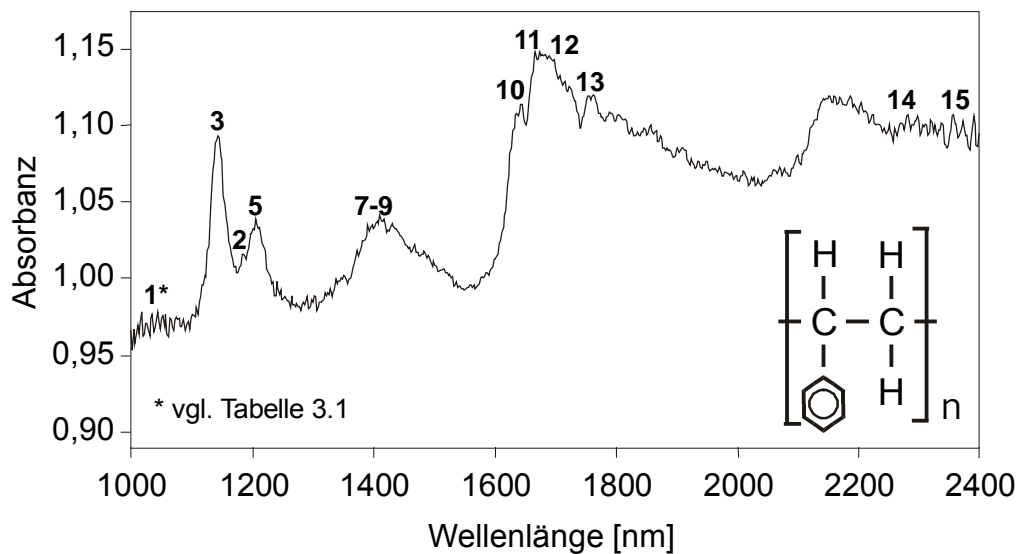
Jede chemische Verbindung absorbiert Licht einer spezifischen Wellenlänge. Von der Wellenlänge des absorbierten Lichts kann somit auf die Verbindung geschlossen werden. Die Verbindung kann dabei nicht isoliert betrachtet werden, da die Verbindungsumgebung, die die Verbindung umgebenden Atome, mit ihrem jeweiligen elektrischen Potential das Schwingungsverhalten der Verbindung und damit auch ihr Absorptionsverhalten beeinflusst. Der erste Oberton der C-H Valenzschwingung der CH<sub>3</sub>-Gruppe absorbiert beispielsweise Licht der Wellenlängen 1695 nm bis 1705 nm; der erste Oberton der C-H Valenzschwingung der CH<sub>2</sub>-Gruppe hingegen absorbiert Licht der Wellenlängen 1725 nm bis 1765 nm (vgl. /OSF86/).

Für ein Molekül ergibt sich auf diese Weise ein spezifisches Spektrum von Schwingungsabsorptionen. Abbildung 3.4 und Abbildung 3.5 zeigen beispielhaft zwei NIR-Absorptionsspektren, das eine von Polypropylen (PP), das andere von Polystyrol (PS). Ausgewählte Absorptionsbanden sind in den Abbildungen numeriert und werden über

den jeweiligen Schwingungen im Molekül zugeordnet. Aufgrund der großen Zahl von Ober- und Kombinationsschwingungen, die im Nahen Infrarot auftreten können, ist in diesem Bereich häufig eine Überlappung der einzelnen Banden zu beobachten. Spektren im Nahen Infrarot haben daher oft das Aussehen von Hügelzügen, aufgelöste Banden sind selten. Eine direkte Zuordnung der Banden zu den zugrundeliegenden Schwingungen ist daher mitunter schwierig.



**Abbildung 3.4** Strukturformel und NIR-Spektrum mit charakteristischen Absorptionsbanden von PP



**Abbildung 3.5** Strukturformel und NIR-Spektrum mit charakteristischen Absorptionsbanden von PS

Wellenlänge [nm]	Schwingungstyp VS: Valenzschwingung DS: Deformationsschwingung OT: Oberton	Struktur	Referenz
1015	C-H VS 1. OT + C-H DS 2. OT	CH <sub>3</sub>	1
1053	C-H VS 1. OT + C-H DS 1. OT + (CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>	CH <sub>2</sub>	2
1143	C-H VS 2. OT	Aromat	3
1152-1195	C-H VS 2. OT	CH <sub>3</sub>	4
1215	C-H VS 2. OT	CH <sub>2</sub>	5
1360	C-H VS 1. OT + C-H DS	CH <sub>3</sub>	6
1395-1415	C-H VS 1. OT + C-H DS	CH <sub>2</sub>	7
1417	C-H VS 1. OT + C-H DS	Aromat	8
1430-1483	N-H VS 1. OT	CONH <sub>2</sub>	9
1685	C-H VS 1. OT	Aromat	10
1695-1705	C-H VS 1. OT	CH <sub>3</sub>	11
1725-1765	C-H VS 1. OT	CH <sub>2</sub>	12
1900	C=O VS 2. OT	-COOH	13
2280	C-H VS + C-H DS	CH <sub>3</sub>	14
2310-2323	C-H VS + C-H DS	CH <sub>2</sub>	15

**Tabelle 3.1**      **Ausgewählte charakteristische Schwingungsbanden nach Osborne und Fearn /OSF86/**

## 4 Das Meßsystem

Der in der vorliegenden Arbeit verwendete Meßaufbau wird nachfolgend vorgestellt. Neben einer konkreten Beschreibung des verwendeten FTIR-Spektrometers wird auch auf die Meßanordnung und die den Messungen zugrundeliegenden Parameter eingegangen.

### 4.1 NIR-Spektroskopie

Für die Erzeugung der bei vorliegender Untersuchung verwendeten Spektrendaten wurde das FTIR-Spektrometer<sup>5</sup> FTS 175 der Firma Biorad verwendet. Eine schematische Skizze des Spektrometers zeigt Abbildung 4.1. Die Funktionsweise läßt sich wie folgt beschreiben:

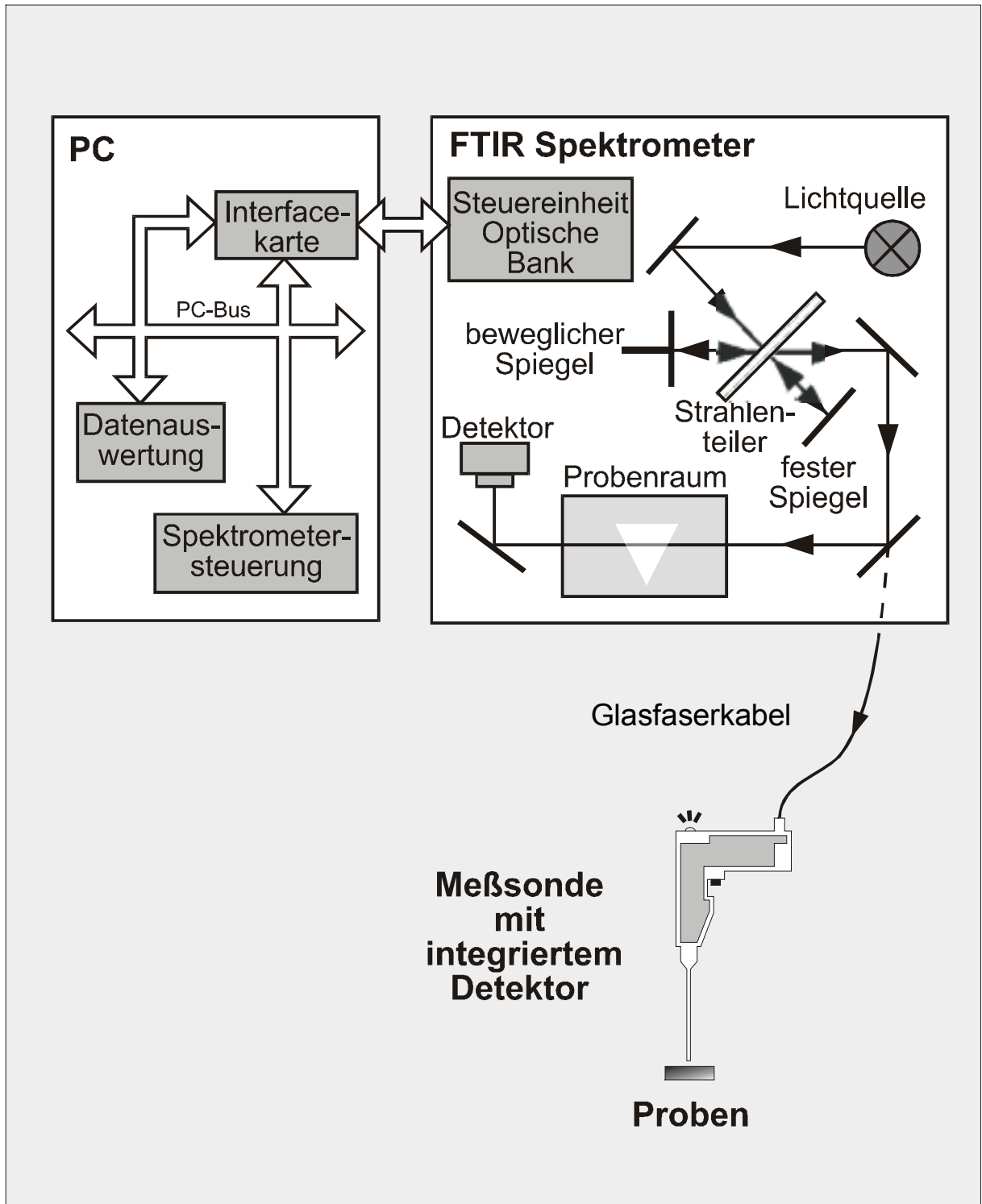
Das von der Lichtquelle erzeugte Infrarot-Licht wird über eine Spiegeloptik in ein Glasfaserkabel ausgekoppelt. Die eingeschränkte Handhabbarkeit und die Intransparenz der meisten Proben erforderte die Auskopplung des Infrarot-Lichts aus dem Spektrometer. Auf diese Weise konnte außerhalb des vorgesehenen Probenraums gemessen werden. Die räumliche Trennung von Meßstelle und Spektrometer wird durch die positiven Lichtleiteigenschaften von Glas im Nahen Infrarot ermöglicht: Es besitzt im Wellenlängenbereich des Nahen Infrarots ein Minimum an optischer Abschwächung (vgl. /SIP89/).

Am Ende des 1,5 m langen Glasfaserkabels befindet sich eine Meßsonde (Galileo HDR001) mit einem Saphirfenster und einem integrierten InAs<sup>6</sup>-Detektor. Durch den in die Sonde integrierten Detektor wird die Abschwächung des reflektierten NIR-Lichts, verursacht durch seine optische Rückführung in das Spektrometer, vermieden. Durch Glasfaserkabel und Sonde gelangt das Infrarot-Licht auf die Probe und wird von dieser spezifisch reflektiert. Das reflektierte Licht wird von dem Detektor in der Sonde aufgefangen und in elektronische Signale umgewandelt. Diese gelangen zur weiteren Verarbeitung in den PC, der über eine Interfacekarte an das Spektrometer angeschlossen ist, über die er Daten empfängt und das Spektrometer steuert.

---

<sup>5</sup> FTIR: Fourier Transform Infrared

<sup>6</sup> Indium Arsenid



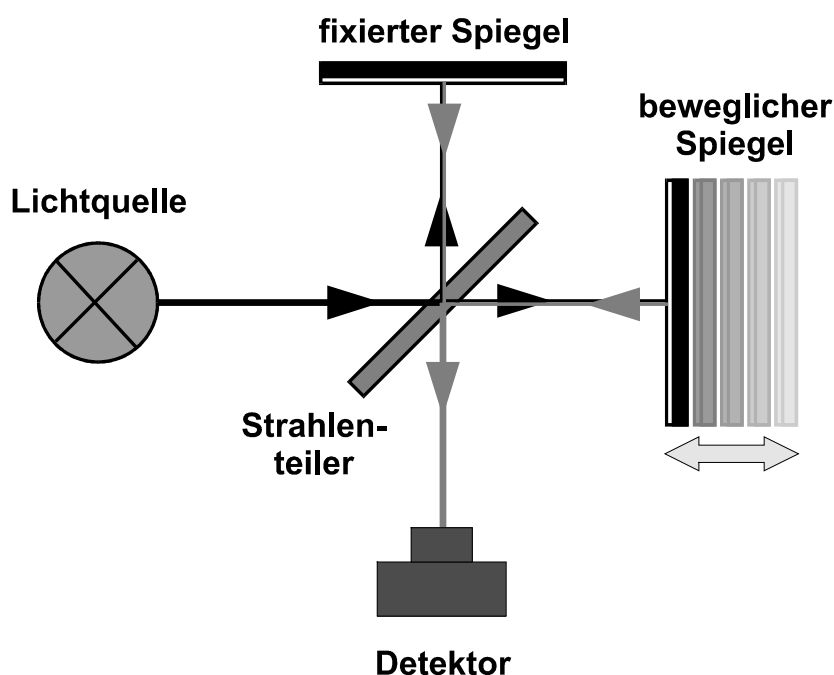
**Abbildung 4.1 Schematische Darstellung des Meßsystems**

Die Benutzerführung des Systems erfolgt mit der Software WIN-IR 4.0/GRAMS 32 unter Windows 95 oder Windows NT 4.0. Neben der Visualisierung der spektralen Daten und Prozeßzustände, besitzt diese Soft-

ware eine integrierte Entwicklungsumgebung, die die Programmierung von eigenständig ablaufenden Applikationen in der Programmiersprache Array-Basic ermöglicht.

Das Spezifische an einem FTIR-Spektrometer ist die Erzeugung von Licht verschiedener Wellenlängen mit Hilfe des sogenannten Michelson-Interferometers. Es teilt das Licht nacheinander in seine einzelnen Wellenlängen auf. Auf diese Weise kann die für das jeweilige Meßobjekt spezifische Absorption des Lichts für jede Wellenlänge einzeln bestimmt werden.

Das Michelson-Interferometer besteht aus einem feststehenden Spiegel, einem beweglichen Spiegel und einem Strahlenteiler (vgl. Abbildung 4.2). Der Strahlenteiler teilt den polychromatischen Infrarot-Lichtstrahl in zwei gleiche Teile auf - der eine Teil wird auf den feststehenden Spiegel reflektiert, der andere auf den beweglichen Spiegel durchgelassen. Das von den Spiegeln reflektierte Licht trifft wiederum auf den Strahlenteiler der es teilweise reflektiert und teilweise durchläßt. Hinter dem Strahlenteiler überlagern sich die von den beiden Spiegeln zurückgesendeten Lichtstrahlen und interferieren dabei.

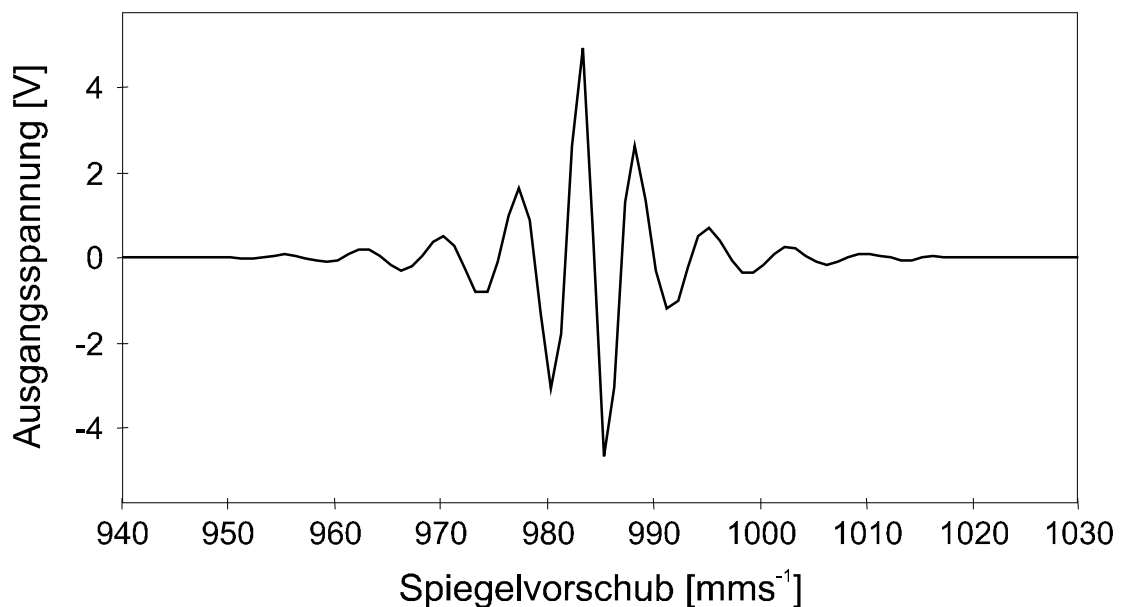


**Abbildung 4.2 Funktionsweise des Michelson-Interferometers**

Der bewegliche Spiegel schwingt um eine Mittellage, deren Entfernung zum Strahlenteiler derjenigen des feststehenden Spiegels entspricht. Je nachdem, wo sich der bewegliche Spiegel gerade befindet, kommt es zu einem Gangun-



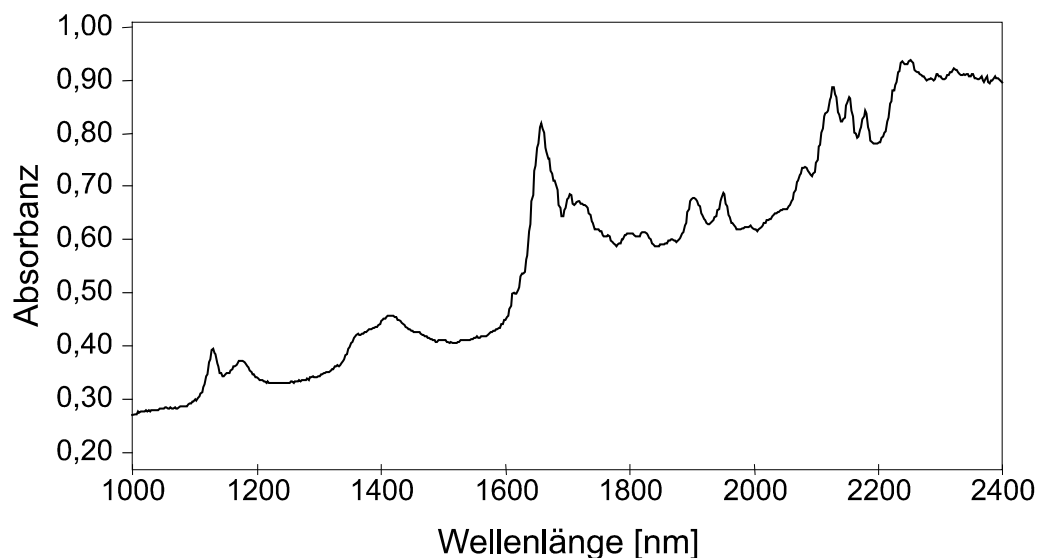
terschied der sich hinter dem Strahlenteiler vereinenden Lichtstrahlen. Diese können dabei konstruktiv oder destruktiv interferieren, das heißt sich gegenseitig verstärken oder abschwächen. Befindet sich beispielsweise der bewegliche Spiegel in seiner Mittellage, ist der Gangunterschied zwischen beiden Lichtstrahlen gleich Null und die Lichtstrahlen interferieren dergestalt, daß die Intensität des vereinten Lichtstrahls genau doppelt so groß ist wie die Intensität eines der beiden Lichtstrahlen vor der Vereinigung. Die Lichtstrahlen löschen sich hingegen hinter dem Strahlenteiler komplett aus, wenn die Wellenlänge des Lichts ein natürliches Vielfaches des doppelten Gangunterschieds beträgt. Auf diese Weise wird die Intensität des Lichts hinter dem Interferometer mit seiner Wellenlänge korreliert. Aufgetragen über der Position des beweglichen Spiegels und damit indirekt über der Zeit, ergibt die Intensität von monochromatischem Licht hinter dem Strahlenteiler eine sinusförmige Welle. Diese Darstellungsweise wird als Interferogramm bezeichnet. Für polychromatisches Licht, wie es in dem beschriebenen Spektrometer verwendet wird, ergibt sich ein Interferogramm wie es in Abbildung 4.3 gezeigt wird.



**Abbildung 4.3** Interferogramm eines FTIR-Spektrometers

Aus dem Interferogramm kann durch eine inverse Fouriertransformation das Spektrum in seiner gewünschten Form gewonnen werden. Abbildung 4.4 zeigt beispielhaft die Darstellung eines solchen Spektrums, nämlich das Spektrum des Kunststoffes PET. Auf der Ordinate ist die Absorbanz, ein Maß für die

Stärke der Absorption in nicht normierten Geräteeinheiten, aufgetragen, auf der Abszisse die Wellenlänge in Nanometern.<sup>7</sup>



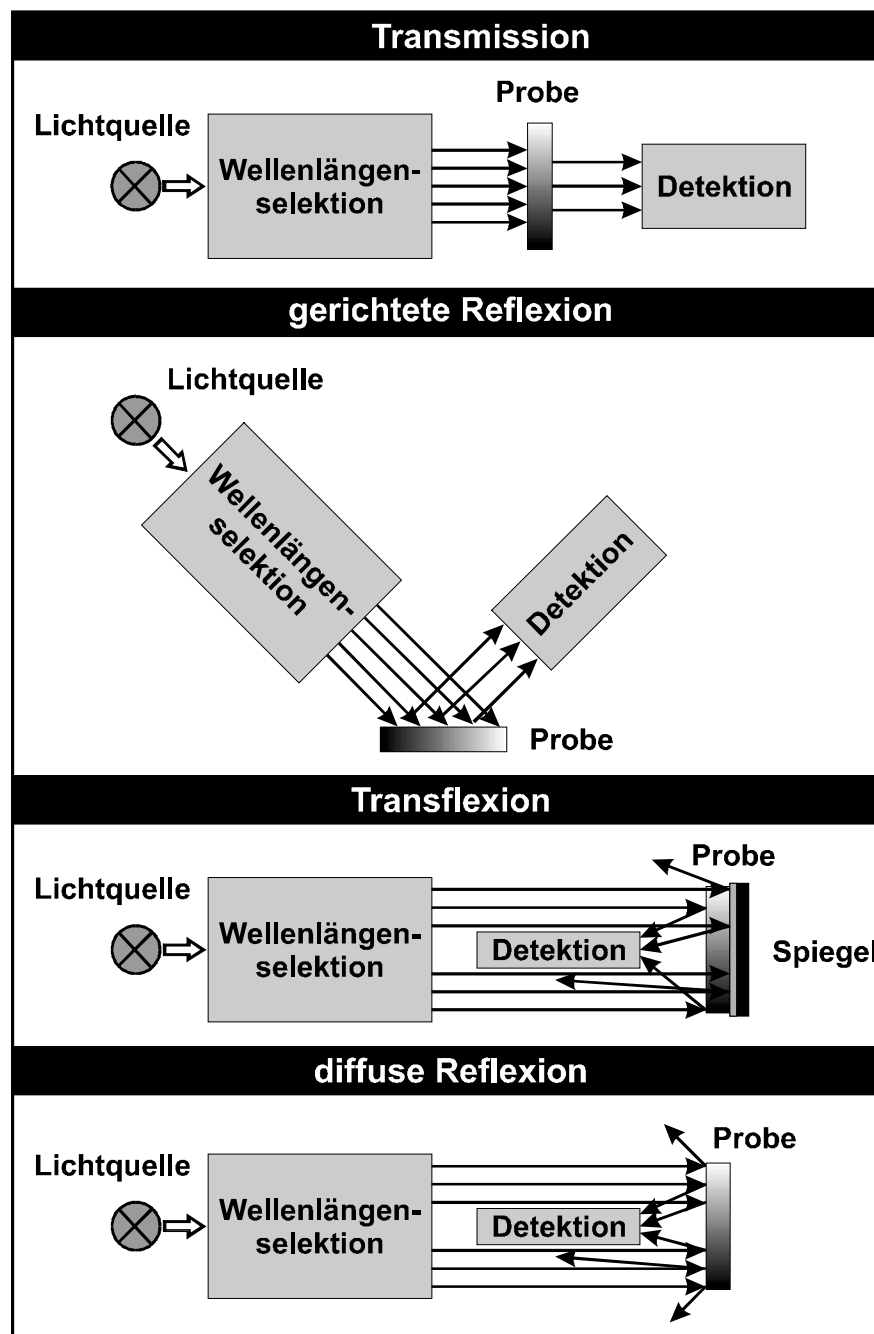
**Abbildung 4.4 NIR-Spektrum von PET, Absorptionsdarstellung**

### 4.1.1 Meßart

Abbildung 4.5 zeigt die möglichen Meßarten der Nah-Infrarot-Spektroskopie, das heißt die möglichen Anordnungen von Lichtquelle, Probe und Detektor bei der Messung von Spektren. Bei der Transmissionsmessung liegt die Probe zwischen Lichtquelle und Detektor. Das Licht muß auf seinem Weg zum Detektor die Probe durchqueren. Bei der Reflexionsmessung liegen Lichtquelle und Detektor auf derselben Seite der Probe. Das Licht durchquert dabei auf seinem Weg die Probe nicht, sondern wird an der Oberfläche reflektiert. Je nach Transparenz des zu messenden Stoffs dringen Teile des Lichts dabei auch in den Stoff ein und werden von tieferliegenden Schichten reflektiert. Die Anordnung der Transflexionsmessung schließlich entspricht derjenigen der Reflexionsmessung; der zu messende Stoff ist dabei jedoch so transparent, daß Teile des Lichts ihn durchqueren und vom Untergrund reflektiert werden.

---

<sup>7</sup> Eine ausführliche Einführung in die FTIR-Spektroskopie bietet /GRH86/.



**Abbildung 4.5** Mögliche Anordnungen von Lichtquelle, Probe und Detektor bei der Messung von Spektren

Die Transmissionsmessung hat gegenüber der Reflexionsmessung den theoretischen Vorteil, daß sie den zu messenden Stoff in seiner gesamten Tiefe erfaßt. Bei der Reflexionsmessung wird hauptsächlich die Oberfläche eines Stoffs gemessen. Dies ist besonders für den Fall von Oberflächenverunreinigungen von Nachteil, die, wenn nur die Oberfläche betrachtet wird, überproportional stark die Messung beeinflussen.

Die Transmissionsmessung hat jedoch den entscheidenden Nachteil, daß die Proben für das NIR-Licht transparent sein müssen und gleichzeitig nicht zu sperrig sein dürfen, da sie zwischen Lichtquelle und Detektor angeordnet werden müssen. Es ist daher in den meisten Fällen eine aufwendige Probenvorbereitung nötig. Da sich das in vorliegender Arbeit entwickelte Auswertesystem aber gerade durch seine Einfachheit auszeichnet, wurde auch das am einfachsten zu handhabende Meßverfahren, die diffuse Reflexion gewählt. Auf diese Weise konnten alle in vorliegender Untersuchung verwendeten Stoffe vergleichsweise einfach gemessen werden.

### 4.1.2 Meßparameter

In Tabelle 4.1 sind die Meßparameter, die für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit getätigten Messungen ausgewählt wurden, aufgeführt. Neben den Punkten, die das Spektrometer beschreiben, sind in diesem Zusammenhang v.a. die Meßeinstellungen, wie Meßbereich, spektrale Auflösung und Anzahl der Messungen je Spektrum interessant. Ihre Wahl richtete sich danach, einen möglichst guten Kompromiß zwischen Meßgeschwindigkeit und Meßgenauigkeit zu erreichen. Meßbereich und spektrale Auflösung bestimmen die Anzahl der Datenpunkte und damit die Datenmengen, mit denen bei der Auswertung gerechnet werden muß.

Meßparameter	
Spektrometer	Biorad FTS 175
Externe Meßsonde	Galileo HDR001
Lichtquelle	Wolfram-Halogen
Detektor	Indium-Arsenid
Meßbereich	4000 $\text{cm}^{-1}$ bis 11000 $\text{cm}^{-1}$
Spektrale Auflösung	8 $\text{cm}^{-1}$
Anzahl der Messungen je Spektrum	16
Aperturblende	offen
Spiegelgeschwindigkeit	5kHz
Apodisation	triangulär
Interferogrammsymmetrie	einseitig
Strahlenteiler	Quarz

**Tabelle 4.1**            **Meßparameter**

Der Meßbereich wurde dabei möglichst klein gewählt, das heißt gerade so groß, daß die für die betrachteten Stoffe relevanten Informationen enthalten waren. Die Auflösung wurde so gewählt, daß die in diesem Bereich üblichen Banden noch deutlich zu unterscheiden sind. Die Auswahl des Meßbereichs und der Auflösung erfolgte auf Grundlage eigener Erfahrungswerte.

Die Anzahl der Messungen je Spektrum gibt an, wie viele Einzelmessungen gemittelt werden, um ein Spektrum zu erhalten. Sie hat damit keinen Einfluß auf die Datenmenge, sie beeinflusst aber direkt proportional die Meßgeschwindigkeit. Je mehr Messungen für ein Spektrum gemacht werden, desto länger dauert die Aufnahme eines Spektrums, desto stärker treten aber auch die Störeinflüsse bei den einzelnen Messungen in den Hintergrund. Hier sei vor allem das sogenannte Rauschen genannt, das elektromagnetische Störungen zusammenfaßt, die ein Spektrum überlagern und teilweise dazu führen können, daß charakteristische Peaks in den Spektren verdeckt bleiben.

## 4.2 Meßmethodik

Um Störeinflüsse, hervorgerufen durch Geräteeigenschaften und Umgebungseinflüsse wie Absorptionen an Wasser- oder CO<sub>2</sub>-Molekülen auf der Strecke zwischen Signalquelle und Detektor, zu kompensieren, wird vor der Spektrenaufnahme von Stoffen in einer Vergleichsmessung ein sogenanntes Hintergrundspektrum generiert, zu dem die späteren Messungen in Bezug gesetzt werden. Das Hintergrundspektrum wird von einem Material gemessen, das selbst nicht NIR-aktiv ist, sprich keine Strahlung im NIR-Bereich absorbiert. Ein typisches Material für die Messung eines Hintergrundspektrums ist für den Fall der Reflexionsmessung Spektralon bzw. Polytetrafluorethylen (PTFE). Auf diese Weise werden bei der Hintergrundmessung nur die Einflüsse berücksichtigt, die auf das Gerät selbst oder auf die Meßstrecke zwischen Lichtquelle und Detektor zurückzuführen sind. Mit dem Hintergrundspektrum können diese Einflüsse von den späteren Messungen abgezogen werden. Die dabei ermittelte Absorbanz  $A$  errechnet sich nach Gleichung (4.1).

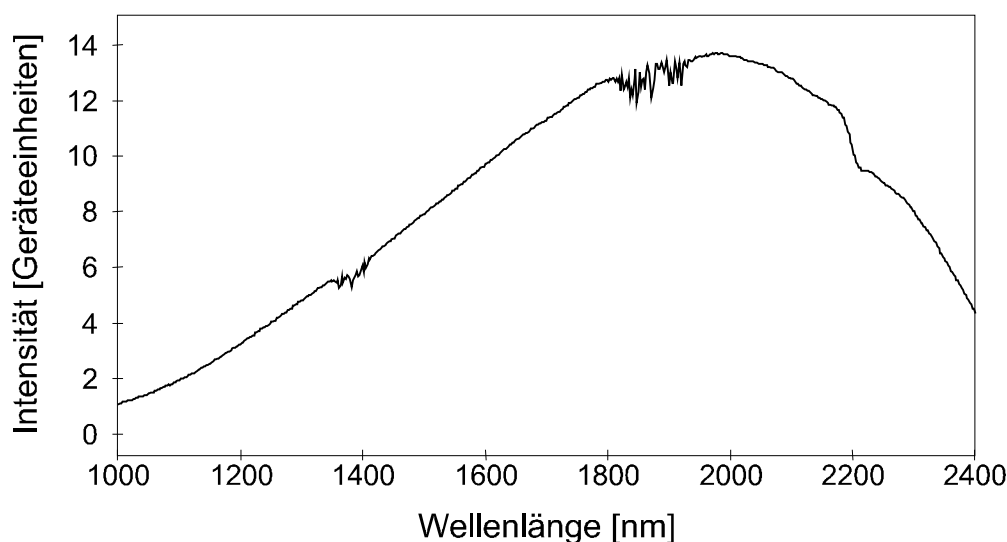
$$A = \log \left( \frac{R_H}{R_S} \right) \quad (4.1)$$

$R_H$  = Reflektierte Strahlungsleistung der Hintergrundmessung

$R_S$  = Reflektierte Strahlungsleistung der Stoffmessung

Um auch kleine Änderungen der Umgebungsbedingungen nicht unberücksichtigt zu lassen, ist es sinnvoll, in regelmäßigen Abständen ein neues Hintergrundspektrum aufzunehmen. Die Fachliteratur gibt in diesem Zusammenhang an, daß die Aufnahme eines einzigen Hintergrundspektrums pro Tag genügt. Diese Angabe wurde von den eigenen Erfahrungen bestätigt.

Abbildung 4.6 zeigt ein typisches Hintergrundspektrum. Die Form dieses Spektrums wird durch das Emissionsspektrum der verwendeten Lichtquelle und durch die Absorption der im Strahlengang befindlichen Stoffe wie Wasser oder CO<sub>2</sub> bestimmt. Stärkere Absorptionen dieser Stoffe sind in dem Hintergrundspektrum bei etwa 1450nm und 1940nm zu beobachten. Die gewünschte Absorbanzdarstellung, wie sie Abbildung 4.4 zeigt, erhält man durch die Division des Hintergrundspektrums durch das Spektrum einer Probe mit anschließendem Logarithmieren (vgl. (4.1)).



**Abbildung 4.6** Hintergrundspektrum eines FTIR-Spektrometers

## 5 Rechnergestützte Verarbeitung der Spektrendaten

Nachfolgend wird die IntellIdent zugrundeliegende rechnergestützte Auswertung von Spektren näher beschrieben. Sie basiert auf den Verfahren der multivariaten Statistik<sup>8</sup>. In Kapitel 5.1 wird gezeigt, wie mit Hilfe der Faktoranalyse große Datenmengen, wie sie zum Beispiel Stoffspektren darstellen, auf wesentliche Merkmale reduziert werden können. In Kapitel 5.2 wird die Gruppierung betrachteter Stoffe in dem sich aus der Faktoranalyse ergebenden n-dimensionalen Faktorraum mit Hilfe der Mahalanobis-Distanz behandelt.

### 5.1 Faktoranalyse

Ein Spektrum hat viele Bereiche, die für seine Charakterisierung im Vergleich zu anderen Spektren irrelevant sind. Wenn ein Spektrum charakterisiert, das heißt von anderen unterschieden werden soll, sind nur die Zusammenhänge in dem Spektrum interessant, die die anderen Spektren nicht aufweisen. Im Sinne einer Datenreduktion gilt es daher, aus der Vielzahl der Variablen<sup>9</sup> die relevanten Zusammenhänge in voneinander unabhängigen Einflußfaktoren darzustellen (vgl. /BEP96/). Das geeignete Mittel hierfür ist die Faktoranalyse.

Der Extraktion von Faktoren liegt der Gedanke zugrunde, daß sich ein Beobachtungswert, wie in diesem Fall ein Stoffspektrum, als Linearkombination mehrerer hypothetischer Variablen, den Faktoren, schreiben läßt. Gleichungen 5.1 bzw. 5.2 zeigen diesen Zusammenhang für ein einzelnes Spektrum (5.1) bzw. für mehrere Spektren in Matrixform (5.2). Um eine möglichst weitreichende Datenreduktion zu erreichen, werden in der Regel nicht so viele Faktoren extrahiert, daß die Ausgangsspektren vollständig durch die Linearkombination aus Faktoren und Faktorgewichten dargestellt werden können. Dieser Umstand wird in Gleichung 5.1 durch den Term '*Rest*' berücksichtigt.

---

<sup>8</sup> Für eine weitergehende Einführung in diese Thematik vgl. /BEP96/, /BER88/, /JOL86/, /MAR95/, /MNA89/.

<sup>9</sup> Die Variablen sind in diesem Fall die Absorbanzen bei den verschiedenen Wellenlängen

$$\text{Spektrum} = a_1 * \text{Faktor}_1 + a_2 * \text{Faktor}_2 + \dots + a_n * \text{Faktor}_n + \text{Rest} \quad (5.1)$$

$a$  = Faktorgewicht

$n$  = Anzahl der Spektren

$$X = P \cdot A' + R \quad (5.2)$$

$X$  = Spektrenmatrix

$P$  = Faktorgewichtematrix

$A$  = Faktorladungsmatrix

$R$  = Restmatrix

Als Konvention in der Faktoranalyse werden die Spalten der Datenmatrix  $X$  wie in Gleichung 5.3 auf einen Mittelwert von Null und eine Standardabweichung von 1 skaliert (vgl. /BER88/).

$$Z_{kj} = \frac{X_{kj} - \overline{X}_j}{S_j} \quad (5.3)$$

$X_{kj}$  = Absorbanz des Stoffs  $k$  bei der Wellenlänge  $j$

$\overline{X}_j$  = Mittelwert der Absorbanzen aller betrachteten Stoffe bei der Wellenlänge  $j$

$S_j$  = Standardabweichung bei Wellenlänge  $j$

$Z_{kj}$  = Standardisierte Absorbanz des Stoffs  $k$  bei Wellenlänge  $j$

Setzt man Gleichung 5.2 in Gleichung 5.3 ein, erhält man die Grundgleichung der Faktoranalyse (vgl. /BEP 96/):

$$Z = P \cdot A' + R \quad (5.4)$$



Die Faktorladungsmatrix  $A$  bildet den Zusammenhang zwischen den Faktoren und den Variablen ab. Die Faktoren selbst sind dabei nur gedachte Größen, die einzig durch ihre Faktorladungen in Erscheinung treten. Trägt man die Faktorgewichte gegeneinander graphisch auf, so entsprechen die einzelnen Dimensionen den Faktoren. Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom Faktorraum.

Zu den Eigenschaften der Faktoren zählt per definitionem, daß sie so viel wie möglich von der Varianz der Beobachtungswerte, in diesem Fall von der Streuung der Absorbanzwerte bei den einzelnen Wellenlängen, erklären und daß sie orthogonal zueinander sind, das heißt nicht zwei Faktoren denselben in den Ausgangsdaten zu beobachtenden Zusammenhang erklären (vgl. /MNA89/). Die Faktoren decken dabei unterschiedliche Anteile der in den Ausgangsdaten enthaltenen Varianz ab. Jeder Faktor soll ein Maximum der in den Ausgangsdaten enthaltenen Varianz erklären. Nach Bestimmung des ersten Faktors kann der zweite Faktor, da er orthogonal zum ersten sein muß, nur noch die Restvarianz, das heißt jene Varianz, die nicht schon im ersten Faktor enthalten ist, erklären. Die Faktorladungen stellen die Korrelation zwischen den auf diese Weise festgelegten Faktoren und den Ausgangsvariablen, in diesem Fall den Absorbanzwerten bei den einzelnen Wellenlängen, dar. Die Faktoren werden über iterative Verfahren ermittelt. Hierfür wurden eine Reihe numerischer Algorithmen entwickelt (vgl. /GVL83/).

Die Faktorgewichtematrix  $P$  stellt den Zusammenhang von den in  $Z$  enthaltenen Objekten, in diesem Fall den einzelnen Spektren, und den Faktoren dar. Die Faktorgewichte geben dabei an, wieviel eines Faktors sich in einem Spektrum wiederfindet. Ist die Faktorladungsmatrix  $A$  aus den Kalibrationsspektren errechnet, können mit ihr die Faktorgewichte der Spektren durch Auflösung der Gleichung 5.4 nach  $P$  errechnet werden (5.5).<sup>1011</sup>

$$P = Z \cdot A \cdot (A' \cdot A)^{-1} \quad (5.5)$$

Auf diese Weise können die Spektren, die ursprünglich aus mehreren hundert Datenpunkten bestehen, auf wenige Faktorgewichte, für jeden verwendeten Faktor ein Faktorgewicht, reduziert werden.

---

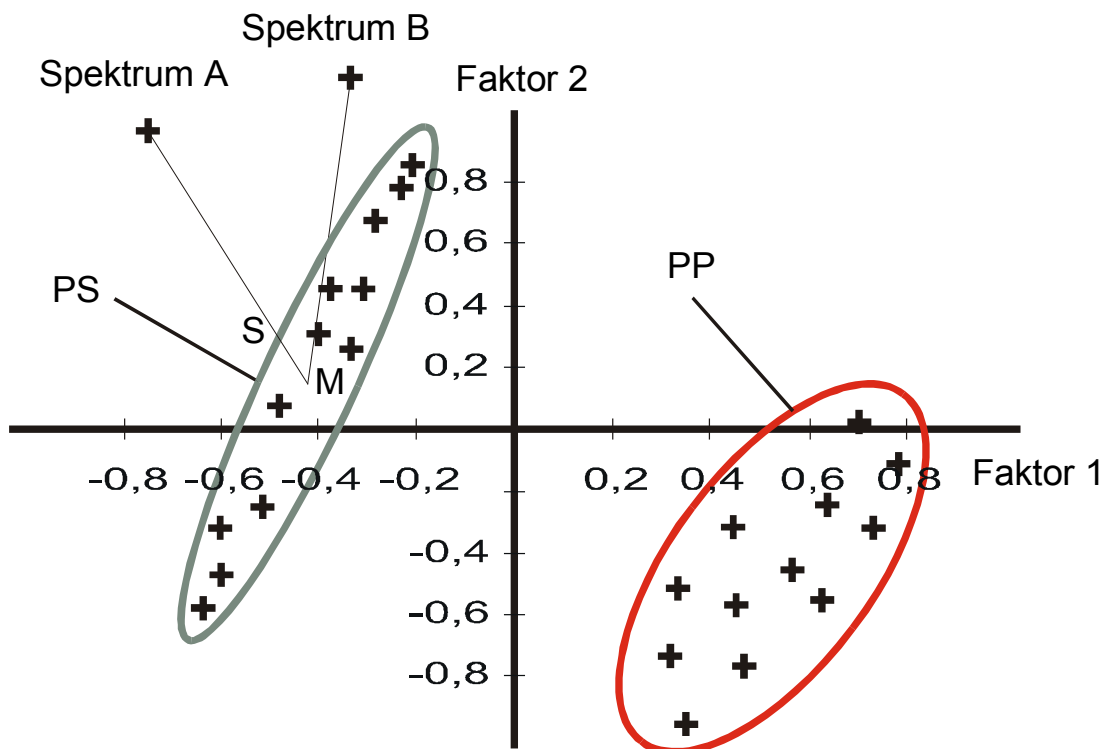
<sup>10</sup> Der in Gleichung 5.1 ursprünglich vorhandene *Rest* wird bei der Berechnung der Faktorgewichte nicht berücksichtigt. Der dadurch entstehende Verlust an erklärter Varianz, das heißt Streuung der Absorbanzwerte von Spektrum zu Spektrum, wird im Rahmen der Faktoranalyse zugunsten der Variablenverdichtung bewußt in Kauf genommen.

<sup>11</sup> Der einfachere Weg der Auflösung von Gleichung (5.4) nach  $P$  durch Multiplizieren der Gleichung mit der Inversen von  $A'$  von rechts ist nicht möglich, da  $A$  in der Regel nicht quadratisch ist (vgl. /BEP96/)

## 5.2 Anordnung von Spektren im n-dimensionalen Faktorraum

### 5.2.1 Gruppierung gleichartiger Spektren

In Kapitel 5.1 wurde gezeigt, wie sich aus vielen Datenpunkten aufgebaute Stoffspektren auf wenige Faktorgewichte reduzieren lassen. Um Stoffe anhand ihrer Spektren einander zuordnen zu können, müssen die Faktorgewichte sich stoffspezifisch gruppieren. Die Faktorgewichte gleicher oder sich ähnelnder Stoffe müssen näher aneinander liegen als die Faktorgewichte ungleicher Stoffe. Graphisch stellt sich dieser Zusammenhang wie in Abbildung 5.1 dar: Aufgetragen sind die Faktorgewichte von zwölf PS-Spektren und zwölf PP-Spektren. Die Spektren waren zuvor in zwei Faktoren zerlegt und ihre dazugehörigen Faktorgewichte bestimmt worden. Der abgebildete Faktorraum wird von den beiden Faktoren aufgespannt. Auf der Abszisse werden die für Faktor 1 ermittelten Faktorgewichte der Spektren aufgetragen, auf der Ordinate die für Faktor 2 ermittelten. Ein Kreuz repräsentiert ein Spektrum.



**Abbildung 5.1** Darstellung der Faktorgewichte von Spektren im zweidimensionalen Faktorraum.

Wie zu erkennen, ordnen sich die Spektren spezifisch an. Die von PS gemessenen Spektren gruppieren sich im zweiten und dritten Quadranten, die

von PP gemessenen im ersten und vierten. Eine Unterscheidung der Stoffe anhand ihrer Faktorgewichte ist damit möglich.

Es ist weiterhin zu sehen, daß die von den Stoffen gebildeten Punktwolken jeweils von einer Ellipse eingeschrieben werden können. Diese Anordnung entspricht im 2-dimensionalen Faktorraum einer Normalverteilung der Spektren. In höher-dimensionalen Faktorräumen können die stoffspezifischen Punktwolken normalverteilter Spektren von Ellipsoiden eingeschrieben werden (vgl. /DEM86/).

### 5.2.2 Zuordnung von Spektren mit Hilfe der Mahalanobis-Distanz

Aus Abbildung 5.1 wird ersichtlich, daß Spektren über ein Entfernungsmaß im n-dimensionalen Faktorraum einander zugeordnet werden können. Haben sich in einem Kalibrationsschritt stoffspezifische Punktwolken ausgebildet, können unbekannte Spektren über ihre Lage zu den Stoffgruppen diesen zugeordnet werden. Die Euklidische Distanz (5.6), die den Betrag der Entfernung von zwei Punkten darstellt, ist dabei als Entfernungsmaß nicht optimal, da sie die gestreckte Anordnung der Punktwolken nicht berücksichtigen kann (vgl. /MTU85/). Die Punktwolke hat in Längsrichtung eine viel größere Standardabweichung als in Querrichtung. Für die Lage der Spektren ist es somit wahrscheinlich, daß sie in Längsrichtung der Ellipse eine größere Entfernung zu deren Mittelpunkt haben als in Querrichtung.

$$d = \sqrt{(x_1 - x_2)^2} \quad (5.1)$$

*d = Euklidische Distanz*

Dieser Zusammenhang soll mit dem Beispiel aus Abbildung 5.1 verdeutlicht werden: Spektrum A und Spektrum B sind so gewählt, daß sie dieselbe Entfernung zum Mittelpunkt der Punktwolke von PS haben. Da jedoch die Lage von Spektrum B eine stärkere Komponente in Längsrichtung der Punktwolke, und damit eine schwächere Komponente in Querrichtung hat als die Lage von Spektrum A, muß davon ausgegangen werden, daß Spektrum B den Spektren von PS ähnlicher ist als Spektrum A.

Die Lage der Spektren eines Stoffs muß demnach in die Bestimmung der Zugehörigkeit eines anderen Stoffs mit Hilfe eines Entfernungsmaßes mit einbezogen werden. Dies ermöglicht die sogenannte Mahalanobis-Distanz. Sie berücksichtigt die Varianzen und Kovarianzen zwischen den zu gruppierenden Objekten (vgl. /JOL86/). Das bedeutet, daß die Entfernung eines Punktes von

dem Mittelpunkt einer Punkteschar auf die Entfernung zwischen Mittelpunkt und Ellipsenrand der die Punkteschar einschreibenden Ellipse skaliert wird. Für das Beispiel aus Abbildung 5.1 bedeutet dies, daß der Abstand des zu bestimmenden Spektrums A vom Mittelpunkt M der PS-Ellipse in Bezug zu dem Abstand des Schnittpunktes S der Strecke  $\overline{AB}$  mit der Ellipse vom Mittelpunkt M gesetzt wird. Überall auf dem Ellipsenrand beträgt die Mahalanobis-Distanz zu der Stoffspektrengruppe daher eins. Der Ellipsenrand gibt somit die Entfernungseinheit für die jeweilige Richtung an.

Auf diese Weise ergibt sich eine weitere Eigenschaft der Mahalanobis-Distanz: da die Werte für jede Stoffspektrengruppe neu auf die Stoffspektrengruppe skaliert werden, sind die Werte zwischen den einzelnen Stoffspektrengruppen vergleichbar (vgl. /DEM86/).

Gleichung 5.11 zeigt, wie die Mahalanobis-Distanz eines Spektrums, dargestellt durch seinen Faktorgewichtevektor  $k$ , zu einer Spektrengruppe berechnet wird. Die Spektrengruppe wird durch ihren Mittelwertvektor  $m$  (5.7) und die Varianz- Kovarianzmatrix  $S$  (5.10) repräsentiert. Die Varianz- Kovarianzmatrix  $S$  ist ein Maß für die Verteilung der Punkte bezogen auf den Mittelpunkt der Punktmenge. Sie wird nach Gleichungen 5.8 bis 5.10 gebildet.

$$m = u^T \cdot K \quad (5.2)$$

$m$  = Mittelwertvektor

$K$  = Datenmatrix: Sie enthält die Faktorgewichte der betrachteten Spektren. Die Faktorgewichte eines Spektrums stehen dabei in einer Zeile  $K$ . Die Faktorgewichte für den ersten Faktor bilden die erste Spalte von  $K$  etc.

$u$  = Einheitsvektor mit  $zk$  Elementen

$$M = K - \frac{1}{zk} \cdot (u \cdot u^T \cdot K) \quad (5.3)$$

$M$  = Abweichungsmatrix

$zk$  = Anzahl der Zeilen von  $K$  bzw. Anzahl der Spektren

$$T = M^T \cdot M \quad (5.4)$$

$T$  = Abweichungsquadrat- und -produktmatrix

$$S = \frac{1}{z^k - 1} \cdot T \quad (5.5)$$

$S$  = Varianz- Kovarianzmatrix

$$MD = (k - m) \cdot S^{-1} \cdot (k - m)^T \quad (5.6)$$

$MD$  = Mahalanobis-Distanz

$k$  = Faktorgewichtvektor eines Spektrums

$$GMD = \frac{1}{z^k} \left[ \sum_{l=0}^{z^k-1} (k_l - m) \cdot S^{-1} \cdot (k_l - m)^T \right] \quad (5.7)$$

$GMD$  = gemittelte Mahalanobis-Distanz

$k_l$  =  $l$ -te Zeile von  $K$

## 6 Das Auswertesystem IntellIdent

Das Auswertesystem IntellIdent, das im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelt wurde, kann grob in drei Teilbereiche unterteilt werden (vgl. für eine schematische Gesamtdarstellung des Systems Abbildung 6.1):

Die Faktoranalyse, die die Faktorzerlegung der Referenzdaten und die Berechnung der Faktorgewichte von Kalibrationspektren bzw. zu bestimmenden Spektren umfaßt.

Die Berechnung der optimalen Faktorkonfiguration für eine vorliegende Erkennungsproblematik.

Die Auswertung von zu bestimmenden Spektren.

Die Funktionsweise ist die folgende: Die Referenzspektren, also die Spektren einer möglichst großen Zahl von Stoffen, werden in einem ersten Schritt einer Faktorzerlegung unterzogen. Idealerweise sind die daraus resultierenden Faktoren universal, das heißt für alle Anwendungsfälle geeignet. Der von den Faktoren aufgespannte universale Faktorraum muß demnach nur ein einziges Mal berechnet werden und ist danach fester Bestandteil des Systems.

Sollen Stoffe in der Folge sortiert werden, muß das System zunächst auf diese Stoffe kalibriert werden. Hierfür müssen ihm die sogenannten Kalibrationspektren, also repräsentative Spektren der Stoffe, die von IntellIdent unterschieden werden sollen, bereitgestellt werden. Diese werden in den universalen Faktorraum projiziert: Ihre Faktorgewichte werden bezüglich der universalen Faktoren bestimmt. Das System trifft dann anhand dieser Faktorgewichte eine Faktorauswahl: es berechnet, mit welchen drei der universalen Faktoren die größte Trennschärfe bei der Unterscheidung der zu bestimmenden Stoffe erreicht werden kann.

Nach der Kalibration werden unbekannte, zu bestimmende Spektren mit der in der Kalibration ermittelten optimalen Faktorkonfiguration ausgewertet.

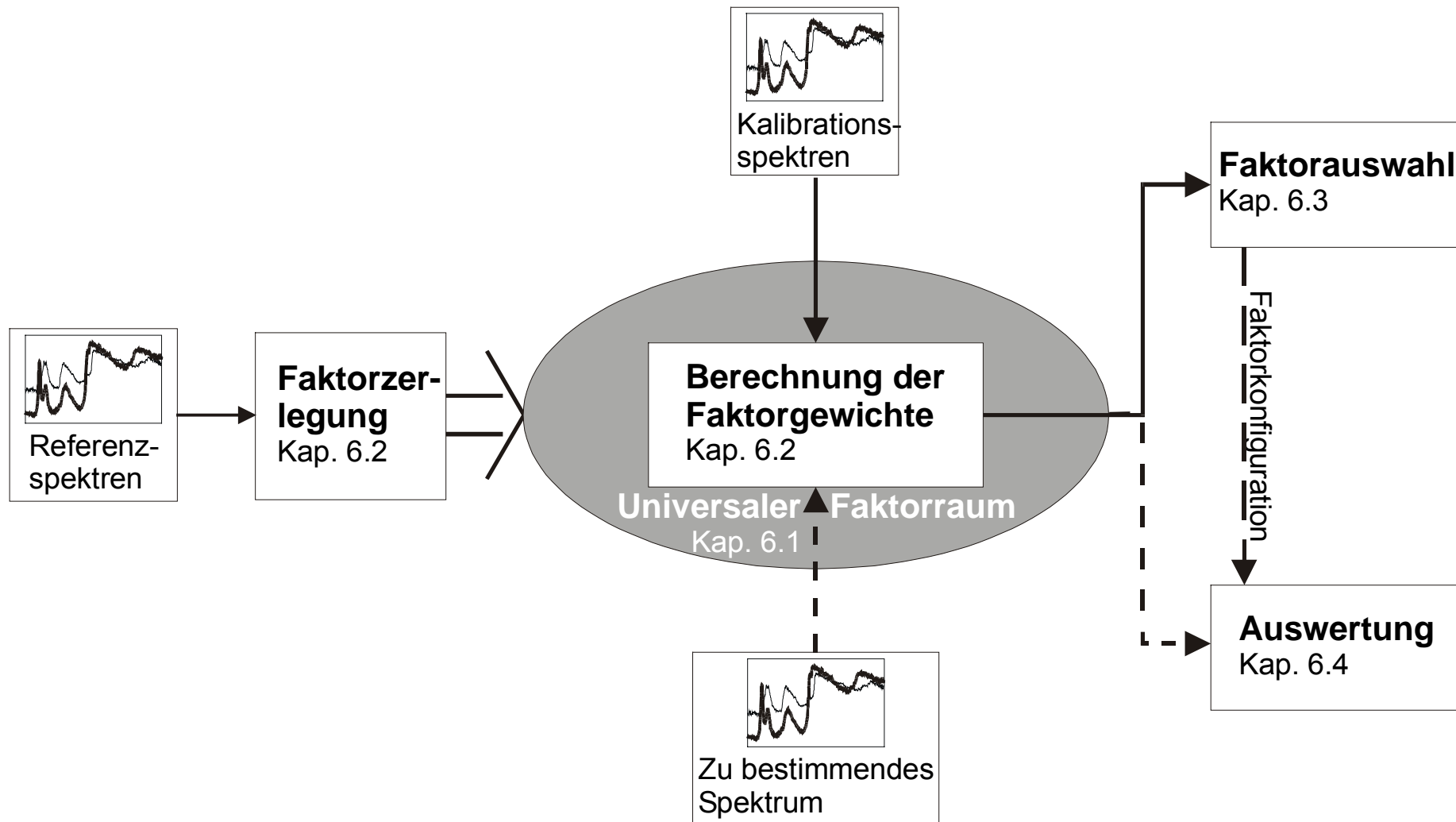


Abbildung 6.1 Schematische Darstellung des Auswertesystems IntellIdent

## 6.1 Universaler Faktorraum

Das Auswertesystem IntellIdent soll im Idealfall für alle Sortierungsaufgaben organischer Stoffe geeignet sein. Es macht sich dabei die Ähnlichkeit der organischen Stoffe zunutze, indem es aus einer großen Anzahl organischer Stoffe einen sogenannten universalen Faktorraum bildet: Die organischen Stoffe werden dafür anhand ihrer NIR-Spektren zerlegt und ein Set an charakteristischen Bausteinen, die Faktoren, gewonnen. Mit Hilfe dieser Faktoren können die NIR-Spektren organischer Stoffe zusammengesetzt werden. Aufgrund der Ähnlichkeit der organischen Stoffe sollen dabei nicht nur die Stoffe zusammengesetzt werden können, die für die Gewinnung der Faktoren verwendet wurden, sondern im Idealfall alle organischen Stoffe. Diese Faktoren bilden den universalen Faktorraum, einen Faktorraum, in dem sich alle organischen Stoffe trennscharf voneinander gruppieren.

Auf die Ähnlichkeit organischer Stoffe soll im folgenden näher eingegangen werden. Als umfangreichstes Teilgebiet der Chemie umfaßt die organische Chemie einen Großteil der Verbindungen des Kohlenstoffs. Etwa 90% der organischen Verbindungen bestehen aus Kohlenstoff (C), Wasserstoff (H) und Sauerstoff (O) in wechselnden Mengenverhältnissen. Zahlreiche organische Verbindungen enthalten zusätzlich Stickstoff (N) und in selteneren Fällen auch Schwefel (S), Phosphor (P) und die Halogene. Grundsätzlich kann jedoch jedes Element in organische Verbindungen eingebaut werden (vgl. /RÖM95/). Abbildung 6.1 bis Abbildung 6.9 zeigen beispielhaft die chemischen Grundbestandteile ausgewählter organischer Substanzen: Abbildung 6.1 bis Abbildung 6.4 zeigen jeweils eine Verbindung der Alkane, Alkene, Cycloalkane und der aromatischen Kohlenwasserstoffe wie sie u.a. in Dieselkraftstoffen vorkommen. Abbildung 6.5 und Abbildung 6.6 zeigen die Grundstrukturen von zwei Kunststoffen, dem Polyvinylchlorid und einem Polycarbonat. In Abbildung 6.7 ist die Grundstruktur der Cellulose dargestellt. Cellulose befindet sich u.a. als Gerüstsubstanz in der pflanzlichen Zellwand und ist Bestandteil von Papier. Abbildung 6.8 und Abbildung 6.9 zeigen zwei weitere pflanzliche Bestandteile. Zum einen das Farnesol, das eine bestimmende Komponente von Blüten-Duftstoffen, z.B. von Rosen, Akazien und Linden darstellt (vgl. /RIC96/); zum anderen das Chlorophyll, das in jeder grünen Pflanze als sog. Blattgrün an der Photosynthese beteiligt ist.

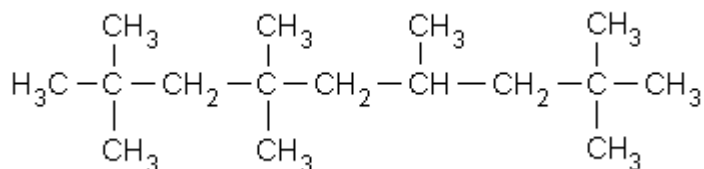
Die Auswahl dieser Stoffe soll verdeutlichen, wie ähnlich sich organische Stoffe in ihrem chemischen Aufbau sind. Die chemischen Verbindungen, die in den jeweiligen Stoffen zu finden sind, sind immer die gleichen. So befindet sich die nicht aromatische CH-Gruppe beispielsweise in Cellulose, Farnesol, Chlorophyll und im Polyvinylchlorid; die aromatische CH-Gruppe ist sowohl



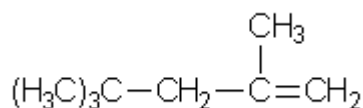
im Benzpyren als auch im Polycarbonat zu finden; die CH<sub>3</sub>-Gruppe ist Bestandteil von Heptamethylnonan, Trimethylpenten, Polycarbonat, Farnesol und Chlorophyll. Würde man organische Stoffe in ihre einzelnen chemischen Verbindungen zerlegen und beliebig wieder zusammensetzen können, so würde ein bestimmtes Repertoire an organischen Stoffen ausreichen, um daraus jede andere organische Substanz vollständig oder zumindest bis zu einem gewissen Grad zusammensetzen zu können.

Wie in Kapitel 3 beschrieben, reagiert die NIR-Spektroskopie gerade auf die einzelnen chemischen Verbindungen in ihrem jeweiligen molekularen Zusammenhang. So ergäbe z.B. die CH-Bindung in der Methyl-(CH<sub>3</sub>)-Gruppe eine charakteristische Bande in einem NIR-Spektrum.

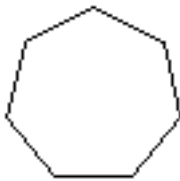
Vor diesem Hintergrund ist es der zentrale Gedanke dieser Arbeit, organische Stoffe anhand ihrer NIR-Spektren in ihre einzelnen Verbindungen oder in einzelne Gruppen von Verbindungen zu zerlegen und diese Einzelteile anschließend beliebig zusammensetzen. Dies wird mit Hilfe der Faktoranalyse möglich. Die Faktoren können dabei als charakteristische Gruppen einzelner Verbindungen interpretiert werden. Eine große Anzahl verschiedener organischer Stoffe soll demnach Faktoren liefern, aus denen jede beliebige organische Verbindung zusammengesetzt werden kann.



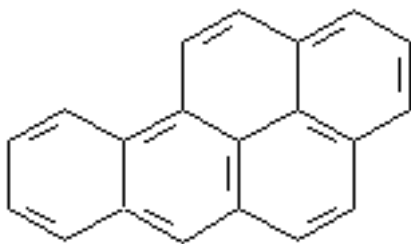
**Abbildung 6.1** 2,2,4,4,6,8,8-Heptamethylnonan als Beispiel eines in Diesel vorkommenden Alkans



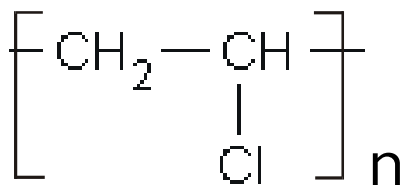
**Abbildung 6.2** 2,4,4-Trimethyl-1-Penten als Beispiel eines in Diesel vorkommenden Alkens



**Abbildung 6.3** Cycloheptan als Beispiel eines in Diesel vorkommenden Cycloalkans<sup>12</sup>



**Abbildung 6.4** 1,2-Benzpyren als Beispiel eines in Diesel vorkommenden kondensierten aromatischen Kohlenwasserstoffs<sup>13</sup>

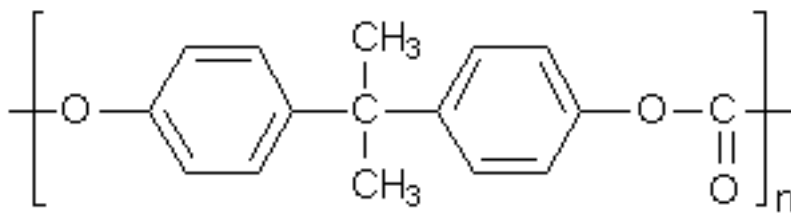


**Abbildung 6.5** Struktur des Polyvinylchlorids (PVC)

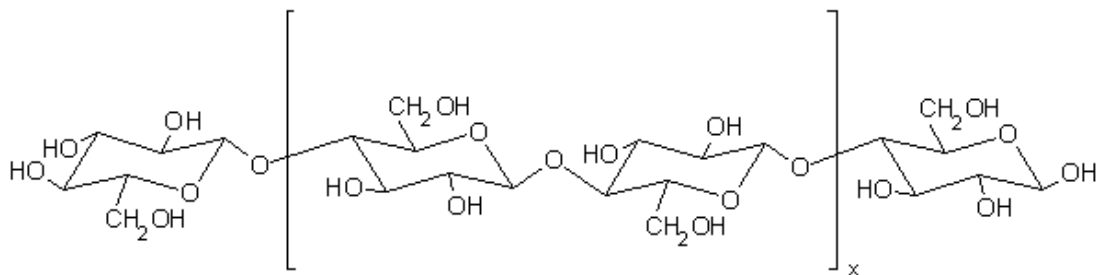
---

<sup>12</sup> Jede Ecke der Strukturformel symbolisiert ein C-Atom mit jeweils so vielen H-Atomen, daß jedes C-Atom vier Bindungen eingeht.

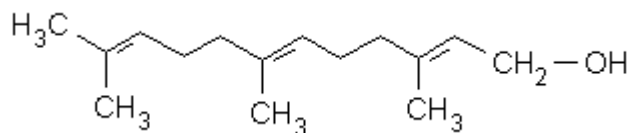
<sup>13</sup> Jede Ecke der Strukturformel symbolisiert ein C-Atom mit jeweils so vielen H-Atomen, daß jedes C-Atom vier Bindungen eingeht.



**Abbildung 6.6 Struktur eines Polycarbonats<sup>14</sup>**



**Abbildung 6.7 Struktur der Cellulose<sup>15</sup>**

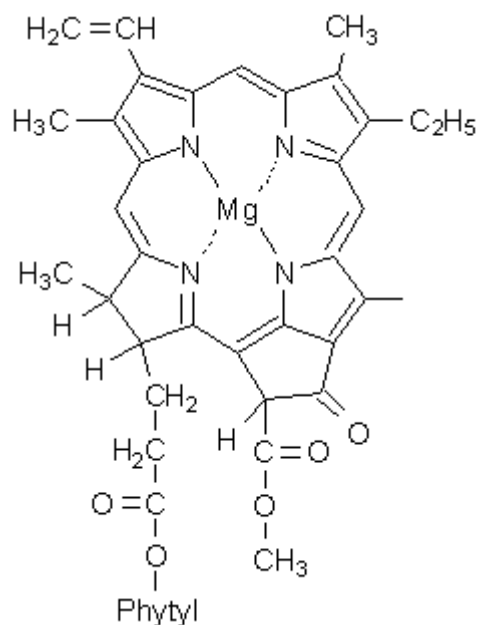


**Abbildung 6.8 Farnesol, als Beispiel eines Bestandteils ätherischer Öle<sup>16</sup>**

<sup>14</sup> Jede Ecke der Strukturformel symbolisiert ein C-Atom mit jeweils so vielen H-Atomen, daß jedes C-Atom vier Bindungen eingeht.

<sup>15</sup> Jede Ecke der Strukturformel symbolisiert ein C-Atom mit jeweils so vielen H-Atomen, daß jedes C-Atom vier Bindungen eingeht.

<sup>16</sup> Jede Ecke der Strukturformel symbolisiert ein C-Atom mit jeweils so vielen H-Atomen, daß jedes C-Atom vier Bindungen eingeht.



**Abbildung 6.9 Chlorophyll A<sup>17</sup>**

### 6.1.1 Referenzstoffe zur Bildung des universalen Faktorraums

In Kapitel 10.1 sind die Stoffe dargestellt, aus deren NIR-Spektren der universale Faktorraum berechnet wird. Der Anspruch der abgebildeten Auswahl ist es, möglichst viele für den Bereich der organischen Substanzen repräsentative chemische Verbindungen zu beinhalten. Es handelt sich insgesamt um 121 verschiedene Stoffe oder Stoffgemische. Neben einer großen Gruppe an Kunststoffen sind vor allem viele Biomaterialien (z.B. Holz, Linoleum, Leder) und Pflanzen (Flieder, Löwenzahn, Knoblauch, Buchshecke u.v.m.) enthalten, die sich besonders durch eine Vielfalt an chemischen Verbindungen auszeichnen. Neben festen organischen Substanzen wurden auch flüssige aufgenommen. Flüssige Substanzen unterscheiden sich von festen vor allem dadurch, daß die in Flüssigkeiten vorkommenden Moleküle deutlich kleiner sind als die in Feststoffen vorkommenden und die Bindungen der Moleküle untereinander schwächer sind als in Feststoffen. Daraus ergibt sich in Flüssigkeiten im Vergleich zu Feststoffen ein differierendes Umfeld für die einzelnen chemischen Verbindungen, was sich in den NIR-Spektren niederschlägt (vgl. Kapitel 3).

---

<sup>17</sup> Jede Ecke der Strukturformel symbolisiert ein C-Atom mit jeweils so vielen H-Atomen, daß jedes C-Atom vier Bindungen eingeht.

Als nicht organische Verbindungen sind Wasser und Sand in die Auswahl aufgenommen. Das Wasser ist selbst im Nahen Infrarot aktiv und kommt sehr häufig in Verbindung mit organischen Substanzen vor, so z.B. in vielen Biomaterialien oder als Rückstand auf gewaschenen Kunststoffen. Der Sand ist im Nahen Infrarot nicht aktiv und diente als Träger organischer Flüssigkeiten, um diese auch in geringer Konzentration messen zu können.

## **6.2 Faktoranalyse**

Die Faktoranalyse umfaßt zwei Vorgänge: zum einen die Faktorzerlegung von Spektren in die Faktoren und zum anderen die Bestimmung der Faktorgewichte von Spektren bezüglich der Faktoren (vgl. Kapitel 5.1).

Die Faktoranalyse ist im Fall von IntellIdent prinzipiell nur ein einziges Mal notwendig und wird mit möglichst vielen verschiedenen Stoffen durchgeführt. Da der Fokus der vorliegenden Arbeit auf der Untersuchung organischer Stoffe liegt, wurden möglichst viele verschiedene organische Stoffe ausgewählt und als Spektren aufgenommen. Die Gesamtheit dieser Stoffe, repräsentiert durch jeweils fünf Spektren, wurde der Faktoranalyse unterzogen. Dabei ergaben sich 30 sinnvolle Faktoren. Die darüber hinaus berechneten Faktoren enthielten keine signifikante Information, sondern nur noch sog. Rauschen. Dieser Zusammenhang wurde mit Hilfe der Visualisierungsfunktion der verwendeten Software hergestellt. Die Faktoranalyse wurde gerätenah durchgeführt, das heißt mit der Software, die der Anbieter des Geräts, Biorad, bereitstellt. Dieser Schritt kann von jedem NIR-Anwender nachvollzogen werden, da die angebotenen NIR-Spektroskope standardgemäß über eine entsprechende Software verfügen. Dasselbe gilt für die Faktorgewichte, die nach bekanntem Verfahren berechnet werden (vgl. Kap. 5.1). Sowohl die Kalibrationsspektren der Stoffe, die das System erkennen soll, als auch unbekannte Spektren, die nach der Kalibration bestimmt werden sollen, werden in die zu den universalen Faktoren gehörigen Faktorgewichte umgerechnet.

## **6.3 Faktorauswahl**

Die Untersuchung von Stoffspektren mit Hilfe der Faktoranalyse geschieht folgendermaßen: Zunächst werden Kalibrationsspektren von zu bestimmenden Stoffen in den universalen Faktorraum projiziert, in dem sie sich anhand ihrer Faktorgewichte spezifisch gruppieren. Jedes unbekannte Spektrum wird dann in der Folge ebenfalls in den universalen Faktorraum projiziert; dort werden die Mahalanobis-Distanzen zu Spektren bekannter Stoffe errechnet. Mit diesem Entfernungsmaß kann eine Aussage über die Zugehörigkeit des untersuchten Spektrums zu den Kalibrationsstoffen erfolgen. Der hier aufgestellte

universale Faktorraum besitzt 30 Dimensionen - jedes Spektrum wird durch 30 Faktorgewichte dargestellt.

Bei der bisher üblichen Anwendung der Faktoranalyse, das heißt bei der Errechnung der Faktoren aus den Stoffen, die danach auch bestimmt werden sollen, kann der Informationsgehalt eines Spektrums schon mit Hilfe von zwei Faktoren mit zumeist deutlich über 80% dargestellt werden (vgl. z.B. /MNA89/). Die bei IntellIdent verwendeten Faktoren sind zwar nicht aus den zu bestimmenden Stoffen selbst errechnet, auf Grund der Ähnlichkeit organischer Stoffe untereinander wird aber erwartet, daß sich für jeden Anwendungsfall aus dem Bereich organischer Stoffe einige unter den 30 Universalfaktoren befinden, die große Ähnlichkeit zu aus den zu bestimmenden Stoffen selbst errechneten Faktoren haben. Die Verwendung aller 30 Faktoren für die Beschreibung eines Spektrums wurde daher als nicht ideal erachtet. Sie würde entweder zur Überbestimmung eines Spektrums führen, das heißt Eigenschaften eines Spektrums überbewerten, die nicht stoffspezifisch, sondern nur für das eine betrachtete Spektrum spezifisch sind. Darunter fiel das sog. Rauschen, eine Folge von Störeinflüssen bei der Messung. Oder aber diejenigen Faktoren, die über die für das betrachtete Spektrum relevante Information auch noch irrelevante Information enthalten, müßten diese überflüssige Information gegenseitig ausgleichen. Daher und weiterhin wegen des verminderten Rechenaufwands wurde die Anzahl zu verwendender Faktoren auf drei festgelegt. Die damit erzielten guten Ergebnisse sowie Versuche, die mit zwei, vier und fünf Faktoren durchgeführt wurden und deutlich schlechtere Ergebnisse erzielten, haben diese Entscheidung als richtig bestätigt.

Aufgabe der Faktorauswahl von IntellIdent ist es vor diesem Hintergrund, jene drei der 30 Universalfaktoren zu bestimmen, die für einen vorliegenden Anwendungsfall am geeignetsten sind. Das einfachste Vorgehen bestünde an dieser Stelle darin, alle theoretisch möglichen Faktortripels aus dem Set der 30 Universalfaktoren zu bilden und auf ihre Eignung hin zu überprüfen. Der sich dabei ergebende Rechenaufwand ist aber erheblich. Daher wurde, wie in Abbildung 6.11 gezeigt, ein zweistufiges Verfahren entwickelt, das den Vorgang verkürzt.

In der ersten Stufe werden die optimalen vier Erstfaktoren bestimmt, das heißt vier Faktoren, von denen einer Bestandteil des optimalen Faktortripels sein wird. In einer zweiten Stufe wird daraufhin ermittelt, welche zwei weiteren Faktoren zusammen mit einem der vier optimalen Erstfaktoren das optimale Faktortripel ergeben. Für diese Vorgehensweise benötigt das System einen Bewertungsmaßstab, mit dem es die Güte eines Erstfaktors oder eines Faktortripels evaluieren kann. Hierfür wurden zwei Kennzahlen entwickelt, die

Andrassy-Selektivität (ANSEL) und der Andrassy-Stair-Wert (ANSTAIR-Wert), auf die im nachfolgenden Kapitel näher eingegangen wird.

**Berechnung der optimalen vier Erstfaktoren**  
Kap. 6.3.2



**Berechnung des optimalen Faktortripels**  
Kap. 6.3.3

**Abbildung 6.11 Schematische Darstellung der Faktorauswahl**

### 6.3.1 Andrassy-Selektivität und Andrassy-Stair-Wert

Die Bestimmung von Stoffen erfolgt über die Zuordnung ihrer Spektren zu den Spektren der Kalibrationsstoffe. Diese Zuordnung geschieht, wie in Kapitel 5.2.2 beschrieben, in einem n-dimensionalen Faktorraum. In ihm wird mit Hilfe der Mahalanobis-Distanz bestimmt, wie weit Spektren voneinander entfernt liegen.

Tabelle 6.1 zeigt beispielhaft das Ergebnis einer Bestimmung von fünf Kunststoffen gegenüber zehn Kalibrationsstoffen. In der ersten Spalte befinden sich die Kalibrationsstoffe, das heißt die zehn Kunststoffe, auf deren Erkennung das System in diesem Fall trainiert wurde. Die zu erkennenden Stoffe sind fünf der zehn Kalibrationskunststoffe. Die Werte zeigen die Mahalanobis-Distanzen des zu erkennenden Stoffs zu den Kalibrationsstoffen an. Die Entfernung zu dem Kalibrationsstoff, um den es sich bei dem zu erkennenden Stoff handelt, ist jeweils markiert. Die geringste Entfernung entscheidet darüber, welchem Kalibrationsstoff der zu erkennende Stoff vom System zugeordnet wird. Der zu erkennende Kunststoff 1 (PA6) beispielsweise hat eine Entfernung zu dem Kalibrations-Kunststoff 1 von 32,2 und zu den übrigen Kalibrationsstoffen eine Entfernung größer als 129,8. Er wurde demnach richtig als Kunststoff 1 (PA6) erkannt. Der zu erkennende Kunststoff 10 (ABS) hat zu dem Kalibrations-Kunststoff 10 eine Entfernung von 6,7 und zu den übrigen Kalibrations-Kunststoffen eine Entfernung von mindestens 9,3. Er würde demnach von dem System ebenfalls richtig zugeordnet werden. Jedoch sind die Entfernungen zu Kalibrations-Kunststoff 6 (LF-Fraktion) und Kalibrations-Kunst-

stoff 9 (PC/ABS-Blend) von 9,3 bzw. 10,9 nicht deutlich größer als die Entfernung zu Kunststoff 10 selbst. Der zu erkennende Kunststoff liegt also von diesen drei Kunststoffen ungefähr gleich weit entfernt. Eine eindeutige Zuordnung kann nicht geleistet werden.

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe				
		1	2	7	9	10
PA6	1	<b>32,2</b>	591,7	2835,4	905,5	88,6
PP	2	352,8	<b>3,8</b>	1225,8	472,7	235,8
PET 9921 B	3	1042,4	1890,9	653,5	467,3	97,6
PS	4	432,0	262,0	414,1	50,4	87,7
PMMA	5	1328,4	1067,2	783,4	207,0	27,4
LF-Fraktion	6	1255,8	596,3	68,7	11,5	9,3
Polyolefine	7	129,8	97,3	<b>9,8</b>	92,1	72,3
PBT	8	587,6	1497,9	748,7	162,3	266,0
PC/ABS-Blend	9	629,1	1331,4	111,7	<b>5,5</b>	10,9
ABS	10	1989,8	975,9	438,6	196,2	<b>6,7</b>

**Tabelle 6.1 Gemittelte Fremd- und Eigendistanzen von fünf aus zehn Kunststoffen**

Durch dieses Beispiel wird deutlich, daß die jeweiligen Ergebnisse der Anordnung der Stoffspektren in einem Faktorraum bewertet werden müssen. Hierfür wurde eine Methode entwickelt, die die einzelnen Entfernungen mit Hilfe einer Kennzahl, die im folgenden Andrassy-Selektivität (ANSEL) genannt wird, in Bezug zueinander setzt. Die Vorgehensweise ist dabei wie folgt:

Es wird angenommen, daß  $n$  Kalibrationsstoffe vorliegen, das heißt das System soll in der Folge diese  $n$  Stoffe erkennen. Jeder dieser  $n$  Kalibrationsstoffe wird durch eine beliebige Anzahl von Spektren repräsentiert. Alle Spektren wurden in ihre Faktorgewichte bezüglich der vorher festgelegten Universal Faktoren umgewandelt und wurden damit in den universalen Faktorraum projiziert.



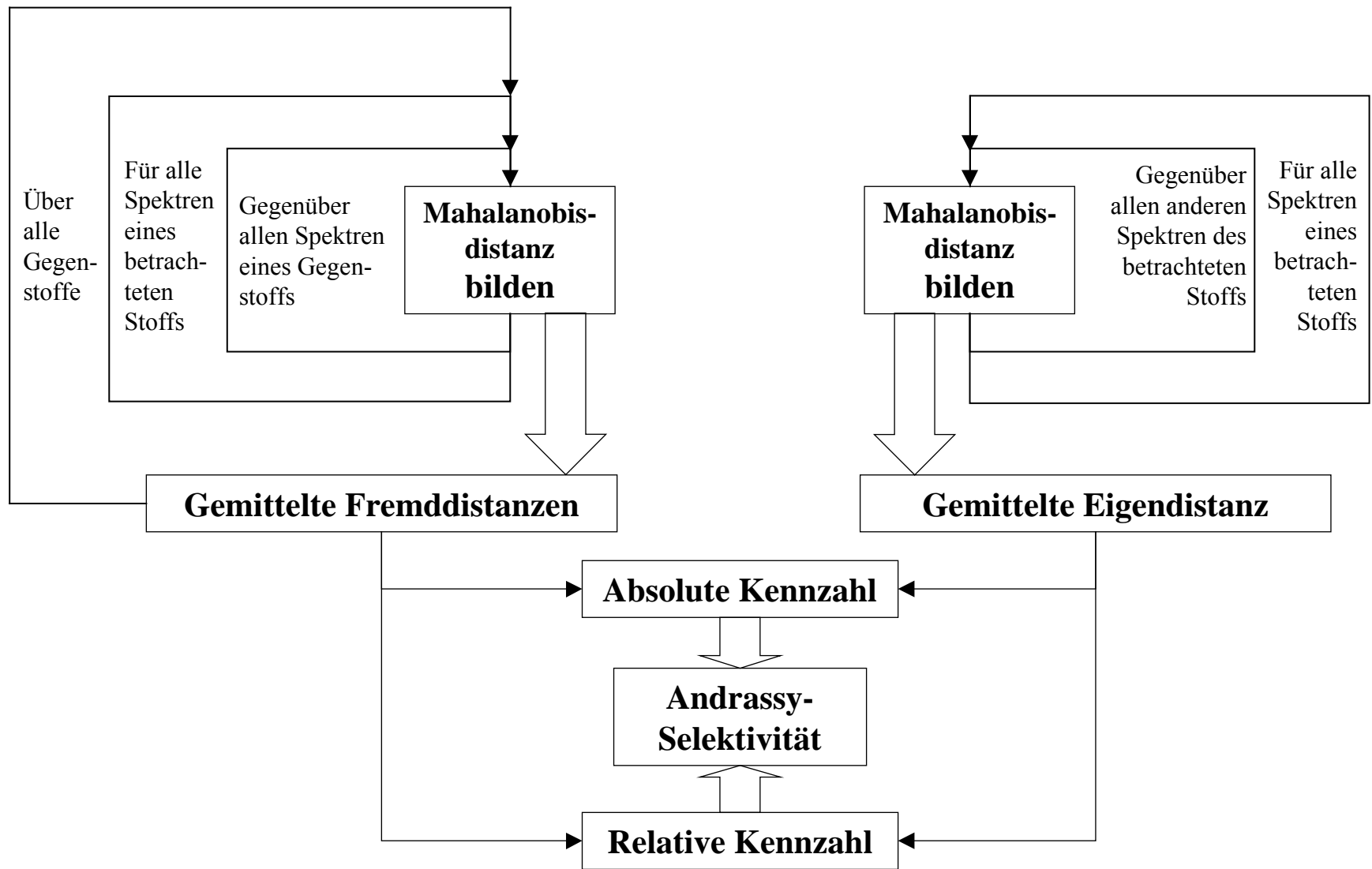


Abbildung 6.12 Schematische Darstellung der Andrassy-Selektivität

Wie gut ein Kalibrationsstoff sich dabei von den übrigen Kalibrationsstoffen<sup>18</sup> in dem Faktorraum absetzt, inwiefern sich also die Spektren eines betrachteten Kalibrationsstoffs nahe beieinander und gleichzeitig entfernt von den Spektren der übrigen Kalibrationsstoffe anordnen, wird wie in Abbildung 6. schematisch gezeigt ermittelt:

Berücksichtigt wird zunächst ein Spektrum des betrachteten Kalibrationsstoffs. Es werden die Mahalanobis-Distanzen zu jedem Spektrum eines Gegenstoffs berechnet und der Mittelwert darüber gebildet. Dieses Maß wird die 'Fremddistanz' des betrachteten Stoffs zu einem Gegenstoff genannt. Zusätzlich werden von diesem einen Spektrum zu den anderen Spektren des betrachteten Kalibrationsstoffs selbst die Mahalanobis-Distanzen gebildet und darüber der Mittelwert gebildet. Dieses Maß wird die 'Eigendistanz' eines betrachteten Stoffs genannt.

Für alle weiteren Spektren des betrachteten Kalibrationsstoffs werden ebenfalls die Fremd- und Eigendistanzen bestimmt. Der Mittelwert aller Eigendistanzen eines betrachteten Stoffs ergibt die gemittelte Eigendistanz. Der Mittelwert aller Fremddistanzen eines betrachteten Stoffs zu einem Gegenstoff ergibt die gemittelte Fremddistanz zwischen diesen beiden Stoffen. Die gemittelte Fremddistanz wird dabei zu jedem der  $n-1$  Gegenstoffe errechnet.

Ein Stoff ist genau dann von den anderen zu unterscheiden, wenn seine gemittelte Eigendistanz gegenüber allen gemittelten Fremddistanzen klein ist<sup>19</sup>. Diese Aussage wird in mehreren Schritten mathematisch formuliert und in der Andrassy-Selektivität zusammengefaßt. Sie wird nach Gleichung 6.6 aus den beiden Kennzahlen,  $K_{rel}$  (6.3) und  $K_{abs}$  (6.5) gebildet.

$K_{rel}$  ist ein Maß für die Größe der Eigendistanz ( $D_{eigen}$ ) eines Stoffes relativ zu den Fremddistanzen ( $D_{fremd\ g}$ ) der Gegenstoffe. Ziel dieser Kennzahl ist es, zu erfassen, ob die gemittelten Fremddistanzen sich deutlich in ihrer Größenordnung von der Eigendistanz unterscheiden. Dafür wird zunächst die gemittelte Eigendistanz zu jeder gemittelten Fremddistanz einzeln in Bezug gesetzt. Dies geschieht nach den Gleichungen 6.1 bis 6.3. In Gleichung 6.1 wird der Quotient REL aus gemittelter Eigen- und Fremddistanz gebildet. Ist die gemittelte Fremddistanz von gleicher oder niedrigerer Größenordnung als die gemittelte Eigendistanz, ist die Unterscheidung der beiden dazugehörigen Stoffe nicht

---

<sup>18</sup> Ein Stoff wird immer im Vergleich zu anderen Stoffen bestimmt. Diese anderen Stoffe werden durch die Kalibrationsstoffe festgelegt. Es sind jeweils die Kalibrationsstoffe, die nicht dem betrachteten Stoff entsprechen. Sie werden im folgenden 'Gegenstoffe' genannt.

<sup>19</sup> Die Eigendistanz eines zu bestimmenden Stoffs muß im Verhältnis zu den Fremddistanzen klein sein. Was 'klein' dabei jeweils bedeutet wird basierend auf Erfahrungswerten unter Berücksichtigung der in dieser Bewertung enthaltenen Unschärfe mathematisch formuliert.

möglich, es ergibt sich für diesen Fall ein Wert REL größer gleich eins. Ist sie jedoch von deutlich höherer Größenordnung, ist eine Unterscheidung der Stoffe erfolgreich. Der Wert REL geht dann gegen null.

Gleichung 6.2 bildet die Werte REL auf das Intervall von 0 bis 1 ab. Die Aufgabe von Gleichung 6.2 ist es, das Verhältnis einer Eindistanz zu den Fremddistanzen bewertend zu formulieren, wobei ein Wert  $k_{rel}$  nahe eins bedeutet, daß die Unterscheidung der betrachteten Stoffe nicht möglich und ein Wert  $k_{rel}$  nahe null bedeutet, daß die Unterscheidung der betrachteten Stoffe gut möglich ist. Dazwischen liegt ein schmaler Bereich, in dem die Güte einer Unterscheidung sehr schnell über REL ansteigt.<sup>20</sup>

Abbildung 6.13 veranschaulicht diese Funktion. Alle Werte REL, die nahe eins oder größer eins sind, bekommen einen Wert  $k_{rel}$  nahe eins zugewiesen. Alle Werte REL die gegen null gehen bekommen einen Wert  $k_{rel}$  nahe null zugewiesen.

$$REL_g = \frac{D_{eigen}}{D_{fremd_g}} \quad (6.1)$$

$$k_{rel_g} = \frac{1}{1 + e^{-(14 * REL_g - 10)}} \quad (6.2)$$

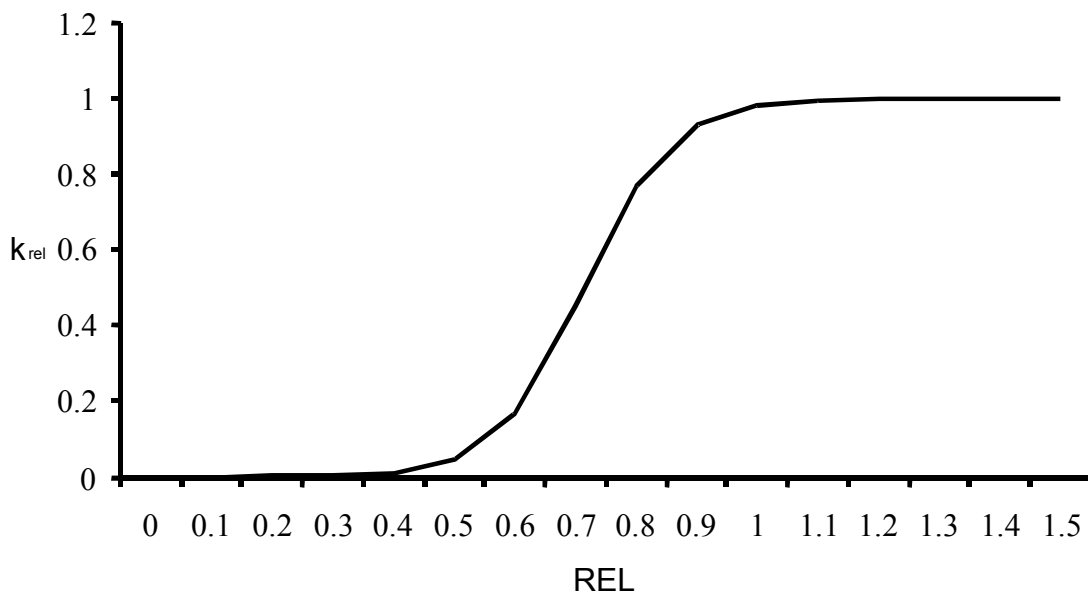
$$K_{rel} = \sum_G k_{rel_g} \quad (6.3)$$

Über alle Werte  $k_{rel}$  einer Trennungsaufgabe wird nach Gleichung 6.3 die Summe  $K_{rel}$  gebildet, die explizit nicht gemittelt wird. Auf diese Weise wird jeder Gegenstoff in der Bewertung gleichermaßen berücksichtigt, unabhängig davon, wie viele Gegenstoffe vorhanden sind.

Diesem Vorgehen liegt die Prämisse zugrunde, daß eine Unterscheidung von n Stoffen nur dann als erfolgreich gilt, wenn jeder Stoff von jedem anderen der n-1 Stoffe unterschieden werden kann. Sie muß als gescheitert gelten, wenn

<sup>20</sup> Die hier gewählte Vorgehensweise ist der aus der Fuzzy-Logik bekannten Formulierung unscharfer Mengen angelehnt. Eine Eigenschaft unscharfer Mengen ist der in der Unschärfe begründete Umstand, daß es beliebig viele Möglichkeiten gibt, unscharfe Mengen zu formulieren, die denselben Sachverhalt beschreiben wollen. Diese werden in der Fuzzy-Logik 'ähnlich' genannt (vgl. /KAF94/). Ebenso gibt es für Gleichung 6.2 beliebig viele ähnliche Möglichkeiten, die beschriebenen Zusammenhänge darzustellen. Die gewählte Form entspricht den Erfahrungen des Autors bei der Bestimmung organischer Stoffe mit Hilfe der Mahalanobis-Distanz.

mindestens zwei Stoffe nicht unterschieden werden können. Nur dann, wenn die gemittelte Eigendistanz deutlich kleiner ist als jede gemittelte Fremddistanz, wird der Wert  $K_{rel}$  nahe null sein. Da  $K_{rel}$  umgekehrt proportional in die Andrassy-Selektivität eingeht, wird diese bei sehr guter Unterscheidbarkeit aller betrachteten Stoffe, das heißt bei sehr kleinem  $K_{rel}$  sehr groß. Ist nur eine gemittelte Fremddistanz von ähnlicher Größenordnung wie die gemittelte Eigendistanz, bleibt die Andrassy-Selektivität vergleichsweise klein.



**Abbildung 6.13 S-Funktion zur Ermittlung der relativen Kennzahlen  $k_{rel}$**

$K_{abs}$  berücksichtigt die absolute Differenz zwischen Eigendistanz und Fremddistanz. Dies ist notwendig, da  $K_{rel}$  nicht zwischen relativ großen Werten von gemittelten Eigen- und Fremddistanzen und relativ kleinen Werten von gemittelten Eigen- und Fremddistanzen unterscheiden kann. Zur Verdeutlichung der Problematik dient das folgende Beispiel: Für eine Eigendistanz von 50 und eine Fremddistanz von 100 ergibt sich dieselbe relative Kennziffer REL (0.5) wie für eine Eigendistanz von eins und eine Fremddistanz von zwei. Dabei ist ein Stoff, dessen Spektren sich mit einer durchschnittlichen Mahalanobis-Distanz zueinander von 50 gruppieren, deutlicher von einem Stoff zu unterscheiden, dessen Spektren im Durchschnitt eine Mahalanobis-Distanz von 100 von den Spektren des betrachteten Stoffs entfernt liegen, als ein Stoff mit den entsprechenden Distanzen eins und zwei. Um dies zu korrigieren, wird die absolute Kennziffer  $K_{abs}$  (Gleichungen 6.4 bis 6.5) eingeführt, die aus der durch-

schnittlichen Differenz aller Fremddistanzen zur Eigendistanz eines Stoffes gebildet wird.

$$ABS_g = \begin{cases} D_{fremd} - D_{eigen} & \text{für } D_{fremd} - D_{eigen} \leq 500 \\ 500 & \text{für } D_{fremd} - D_{eigen} > 500 \end{cases} \quad (6.4)$$

$$K_{abs} = \frac{1}{n-1} \cdot \sum_{n-1} ABS_g \quad (6.5)$$

$n = \text{Anzahl der Stoffe}$

$$ANSEL = \frac{K_{abs}}{K_{rel}} \quad (6.6)$$

Dabei erhält jede Differenz zwischen einer Fremddistanz und der Eigendistanz, die größer als 500 ist, den Wert 500, da dieser Wert als ausreichend erachtet wird, um zwei Stoffe deutlich voneinander zu unterscheiden. Werte, die darüber liegen, bedeuten keinen Zugewinn an Trennschärfe und würden die Bewertung der Trennschärfe übermäßig beeinflussen, wenn sie mit ihrem vollen Betrag in die Bewertung eingingen.

Tabelle 6.2 zeigt die ANSEL-Werte und ANSTAIR-Werte für das in Tabelle 6.1 gezeigte Beispiel. Wie oben beschrieben wurde Kunststoff 1 sehr gut erkannt. Für ihn ergibt sich eine Andrassy-Selektivität von  $8,72 \cdot 10^5$  Kunststoff 2 und Kunststoff 7 werden, wie aus Tabelle 6.1 zu ersehen ist, ebenfalls sehr gut erkannt. Ihre gemittelten Eigendistanzen sind mit 3,8 bzw. 9,8 kleiner als bei Kunststoff 1, das heißt sie gruppieren sich dichter bei den zu erwartenden Kalibrationsstoffen als Kunststoff 1.

Kennzahlen zur Bewertung der Trennschärfe	Zu erkennende Stoffe				
	1	2	7	9	10
ANSEL	8,72E+05	4,03E+06	1,93E+06	2,46E+04	4,04E+02
ANSTAIR	1,100	1,200	1,130	0,300	0,010

**Tabelle 6.2 Andrassy-Selektivitäten und ANSTAIR-Werte des Beispiels aus Tabelle 6.1**

Gleichzeitig ist aber auch die geringste gemittelte Fremddistanz, das heißt die geringste Entfernung zu einem der anderen Kalibrationsstoffe niedriger als bei Kunststoff 1: Kunststoff 2 liegt 97,3 von Kunststoff 7 entfernt; Kunststoff 7 68,7 von Kunststoff 6. Kunststoff 1 liegt mit 129,8 weiter von dem nächstliegenden Gegenstoff (Kunststoff 7) entfernt. Die Entfernung zum nächstgelegenen Gegenstoff ist dabei deshalb besonders relevant, da die Erkennung eines zu bestimmenden Stoffs bereits dann gescheitert ist, wenn ein Gegenstoff so nahe an dem zu bestimmenden Stoff liegt, daß er von diesem nicht deutlich genug unterschieden werden kann. In diesem Fall werden allerdings die niedrigeren Distanzen zu dem nächstgelegenen Gegenstoff durch die deutlich engere Gruppierung des betrachteten Stoffs selbst mehr als ausgeglichen: Mit ANSEL-Werten von  $4,03 \cdot 10^6$  für Kunststoff 2 und  $1,93 \cdot 10^6$  für Kunststoff 7 wird ihre Erkennung deshalb als noch besser eingestuft als die von Kunststoff 1. Der zu bestimmende Kunststoff 9 gruppiert sich mit einer gemittelten Eigendistanz von 5,5 auch sehr dicht um Kunststoff 9 als Kalibrationsstoff, liegt allerdings mit einer gemittelten Fremddistanz von 11,5 relativ nahe an Kunststoff 6. Diese Erkennung wird mit einer Andrassy-Selektivität von  $2,46 \cdot 10^4$  deutlich niedriger bewertet als die Erkennung der Kunststoffe 1, 2 und 7. Kunststoff 10 wird wie oben beschrieben nur sehr schlecht erkannt und erfährt mit einer Andrassy-Selektivität von  $4,04 \cdot 10^2$  eine nochmals niedrigere Bewertung.

Die Andrassy-Selektivität erstreckt sich theoretisch auf einen Bereich von 0 bis  $\infty$  und liegt in der Praxis zumeist in einem Bereich zwischen  $1 \cdot 10^2$  und  $1 \cdot 10^8$ , ist damit relativ unübersichtlich. Zudem wurde festgestellt, daß sich die Trennschärfe nicht linear über diesen Bereich verhält sondern über weite Teile konstant bleibt und in einigen relativ kleinen Bereichen steil ansteigt. Abbildung 6.14 zeigt den beobachteten Verlauf der Trennschärfe über der Andrassy-Selektivität näherungsweise.<sup>2122</sup> Insgesamt ergeben sich neun unterschiedlich steile und unterschiedlich hohe Stufen im Bereich von null bis  $1 \cdot 10^8$ . Es ist somit relativ komplex, die Trennschärfe einer Bestimmung von Stoffen anhand der Andrassy-Selektivität einzuschätzen. Um dies zu vereinfachen, wurde eine stetige Funktion entwickelt, die den in Abbildung 6.14 gezeigten Zusammenhang zwischen Trennschärfe und Andrassy-

---

<sup>21</sup> Aus Gründen der Skalierung ist der Graph auf drei Bereiche aufgeteilt. Der erste deckt die ANSEL-Werte von null bis  $6,00 \cdot 10^4$ , der zweite ANSEL-Werte von  $6,00 \cdot 10^4$  bis  $4,00 \cdot 10^5$  und der dritte ANSEL-Werte von  $6,00 \cdot 10^5$  bis  $1,00 \cdot 10^8$  ab.

<sup>22</sup> Auf der Ordinate sind die sogenannten ANSTAIR-Werte aufgetragen, die im weiteren Verlauf des Kapitels erläutert werden und in diesem Fall als Synonym für die Trennschärfe gesehen werden sollen.

Selektivität mathematisch wiedergibt. Gleichung 6.7<sup>23</sup> zeigt diese sogenannte Andrassy-Stair-Funktion. Sie bildet die Andrassy-Selektivität auf ein Intervall von 0 bis 1,2<sup>24</sup> ab und steigt ungefähr linear mit der Trennschärfe einer Erkennung. Ein ANSTAIR-Wert von 1,2 signalisiert demnach eine sehr gute Erkennung, ein Wert von null eine sehr schlechte.

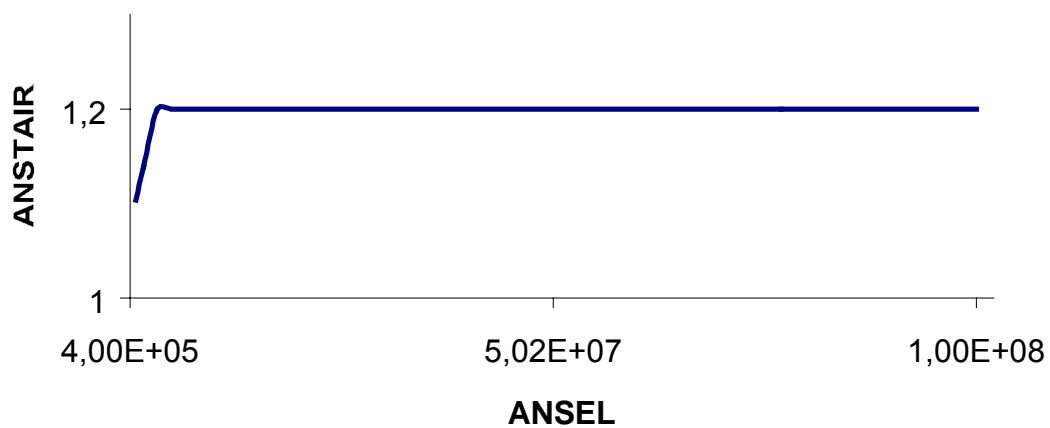
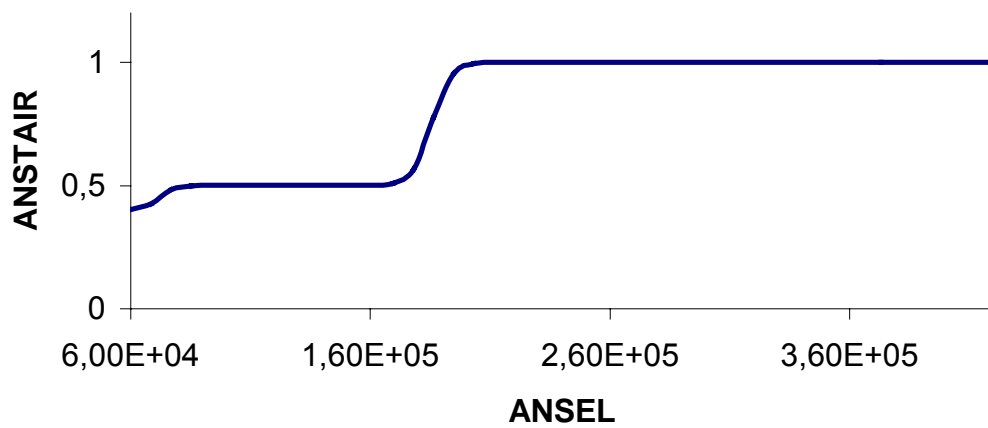
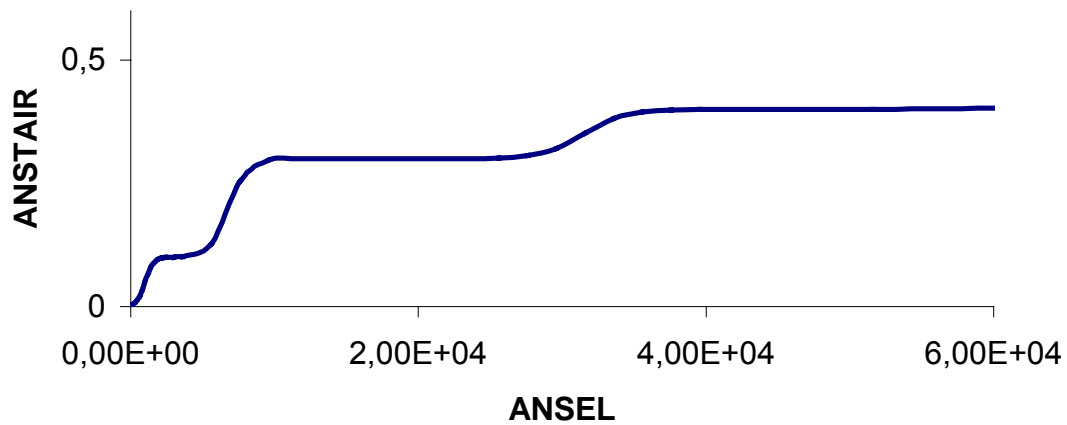
$$\begin{aligned}
 ANSTAIR = & 0,05 \cdot \tanh\left(\frac{x-1000}{600}\right) + 0,1 \cdot \tanh\left(\frac{x-6800}{1300}\right) + \\
 & + 0,05 \cdot \tanh\left(\frac{x-31500}{2800}\right) + 0,05 \cdot \tanh\left(\frac{x-71900}{6200}\right) + 0,25 \cdot \tanh\left(\frac{x-185500}{8000}\right) + \\
 & + 0,005 \cdot \tanh\left(\frac{x-590000}{500}\right) + 0,01 \cdot \tanh\left(\frac{x-690000}{28000}\right) + 0,035 \cdot \tanh\left(\frac{x-805000}{28000}\right) + \\
 & + 0,05 \cdot \tanh\left(\frac{x-2150000}{650000}\right) + 0,6 \qquad (6.7)
 \end{aligned}$$

Mit der ANSTAIR-Funktion läßt sich die Trennschärfe der Bestimmung eines Stoffs übersichtlicher bewerten als mit der Andrassy-Selektivität alleine. So ergeben sich für das Beispiel aus Tabelle 6.1 die in Tabelle 6.2 gezeigten ANSTAIR-Werte: Die Kunststoffe 1, 2 und 7 wurden gut erkannt und erhalten ANSTAIR-Werte von 1,100, 1,200 und 1,130. Kunststoff 9 war nur mit mäßiger Sicherheit erkannt worden und erhält einen ANSTAIR-Wert von 0,300. Kunststoff 10 wurde nicht erkannt. Der ANSTAIR-Wert für seine Erkennung ergibt 0,010.

Durch ANSEL- und ANSTAIR-Wert ist es möglich geworden, die Trennschärfe der Bestimmung eines Stoffs reproduzierbar zu bewerten. Dadurch können unterschiedliche Parameter bei der Durchführung einer Stoffbestimmung miteinander verglichen werden. So kann, wie im folgenden beschrieben, beispielsweise untersucht werden, welcher Faktorraum für die Bestimmung eines Stoffs der geeignetste ist. Diese Untersuchung kann das System anhand dieser Kennzahlen selbständig durchführen. Sie sind daher notwendige Voraussetzung für eine Automatisierung des gesamten Kalibrationsprozesses.

<sup>23</sup> Der Tangens hyperbolicus erlaubt es, die einzelnen Stufen unabhängig voneinander zu modellieren. Durch die drei Koeffizienten in dem Term  $a \cdot \tanh\left(\frac{x-b}{c}\right)$  werden die Höhe (a) einer Stufe, ihre Lage (b) und ihre Steigung (c) jeweils festgelegt.

<sup>24</sup> Der Wert 1,2 ist relativ zufällig festgelegt worden. Die Skala von 0 bis 1,2 kann durch einfache Multiplikation beliebig verändert werden. Wichtig war in diesem Zusammenhang nur, nicht den Wert 1 zu wählen, um das vorgeprägte Bewertungsschema von 0% bis 100% zu umgehen. Während der ANSTAIR-Wert nämlich nur ungefähr linear über der Trennschärfe einer Erkennung steigt, suggeriert eine Skala von 0% bis 100% dahingegen Linearität.



**Abbildung 6.14** Andrassy-Stair-Funktion



### 6.3.2 Bestimmung der vier Erstfaktoren

Die Faktorauswahl erfolgt, wie in Abbildung 6.11 gezeigt, in zwei Schritten: Zuerst werden vier Erstfaktoren bestimmt und mit diesen dann das optimale Faktortripel errechnet. Die vier Erstfaktoren werden aus den Universalfaktoren wie folgt ermittelt (vgl. schematisch Abbildung 6.15): Zunächst wird ein Universalfaktor ausgewählt. Für diesen werden die Andrassy-Selektivitäten aller Kalibrationsstoffe errechnet und anschließend gemittelt. Gibt es beispielsweise fünf Kalibrationsstoffe, wird als erstes Stoff 1 betrachtet. Zwischen ihm und den vier übrigen Kalibrationsstoffen wird die Andrassy-Selektivität gebildet. Anschließend wird für Stoff 2 die Andrassy-Selektivität ermittelt, usw. So wird für alle Stoffe die Andrassy-Selektivität bezüglich eines Universalfaktors errechnet, der Mittelwert darüber gebildet und dieser Mittelwert zwischengespeichert. Dasselbe wird für jeden weiteren Universalfaktor wiederholt. Jedem Universalfaktor wird auf diese Weise eine gemittelte Andrassy-Selektivität zugeordnet. Die vier Universalfaktoren mit den vier größten Andrassy-Selektivitäten werden als Erstfaktoren für die Berechnung des optimalen Faktortripels weiterverwendet.

An diesem Punkt der Untersuchung wäre theoretisch zu erwarten gewesen, daß einzig der Faktor mit der größten Andrassy-Selektivität weiter verwendet wird, da er die größtmögliche Unterschiedlichkeit zwischen den zu unterscheidenden Stoffen abbildet. Es stellte sich jedoch im weiteren Verlauf der Untersuchungen heraus, daß die Verwendung des Erstfaktors mit der größten Andrassy-Selektivität als einer der Faktoren des optimalen Faktortripels nicht immer das maximal zu erreichende Ergebnis liefert. Dies wird darauf zurückgeführt, daß die Andrassy-Selektivität mit einer gewissen Unschärfe versehen ist, da sie die unendlichen Möglichkeiten der Anordnung der Stoffspektren in einem Faktorraum berücksichtigen muß. Diesem Umstand wird dadurch Rechnung getragen, daß neben dem Faktor mit der größten Andrassy-Selektivität zusätzlich die drei Faktoren mit den nächst kleineren Andrassy-Selektivitäten für die Ermittlung des optimalen Faktortripels weiter verwendet werden.

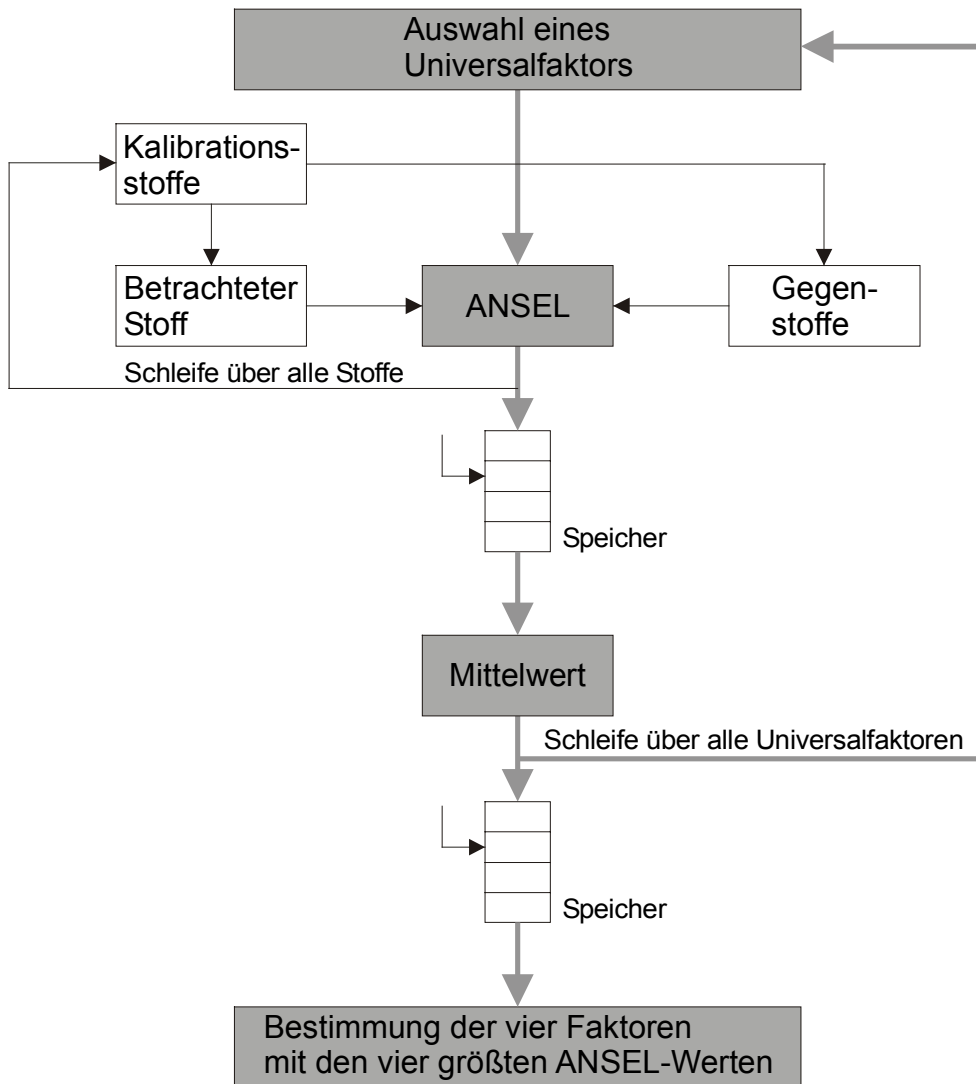


Abbildung 6.15 Bestimmung der vier Erstfaktoren

### 6.3.3 Bestimmung des optimalen Faktortripels

In der zweiten Stufe der Faktorauswahl wird das optimale Faktortripel bestimmt, das letztlich für den vorliegenden Anwendungsfall verwendet werden soll. Die drei Universalfaktoren, anhand derer das System die vorliegenden Stoffe am besten unterscheiden kann, werden festgelegt.

Abbildung 6.16 zeigt schematisch, wie hierbei vorgegangen wird: Für jede theoretisch mögliche Kombination aus einem der vier Erstfaktoren und zwei der jeweils anderen 29 Universalfaktoren wird die gemittelte Andrassy-Selektivität der vorliegenden Stoffe gebildet. Dabei wird für jeden Stoff die Andrassy-Selektivität zu den anderen Stoffen berechnet und über alle Andrassy-Selektivitäten der Mittelwert gebildet. Jedem Faktortripel lässt sich

somit eine gemittelte Andrassy-Selektivität zuordnen. Das Faktortripel mit der größten Andrassy-Selektivität wird als das für die Bestimmung der vorliegenden Stoffe geeignetste angesehen und für die weitere Verwendung festgehalten.

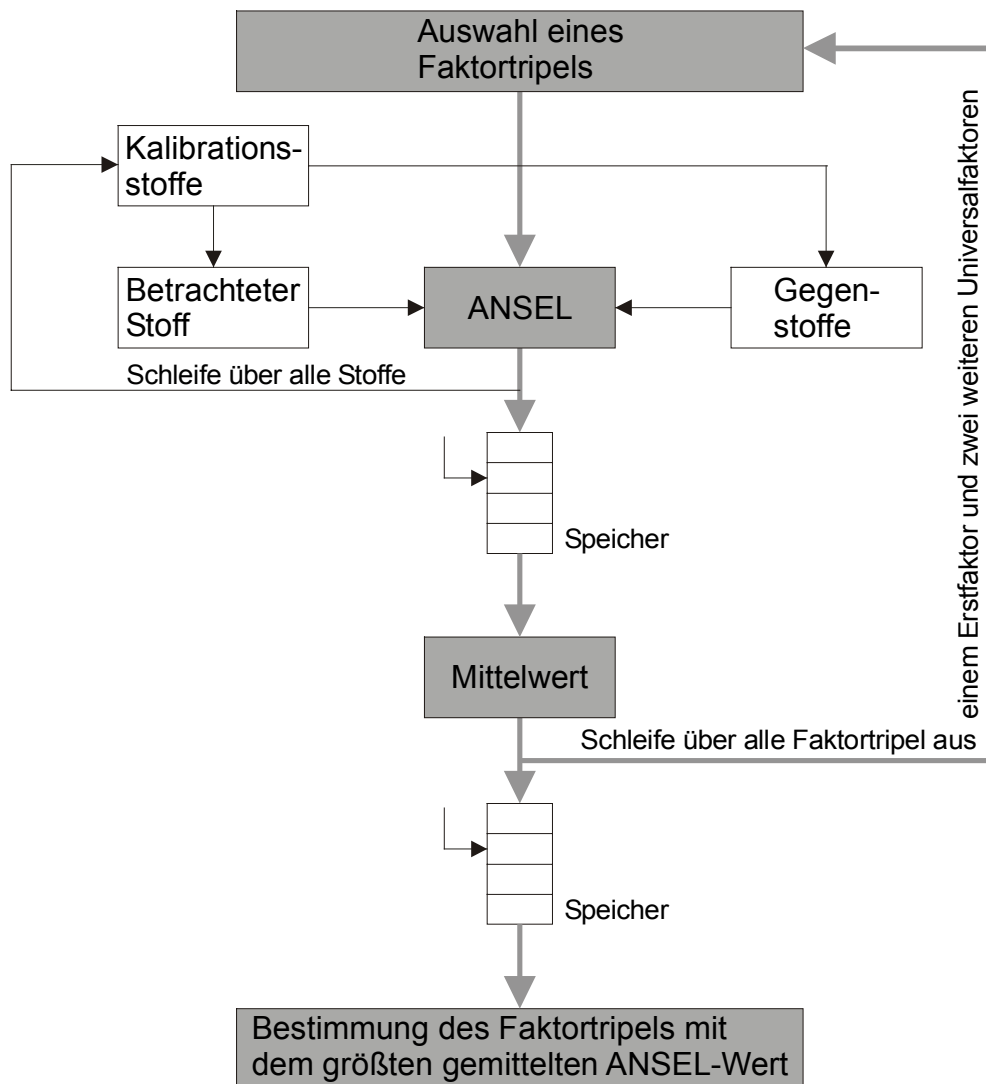


Abbildung 6.16 Bestimmung des optimalen Faktortripels

## 6.4 Auswertung zu bestimmender Stoffe

Die Auswertung zu bestimmender Stoffe vor dem Hintergrund der Kalibration verläuft wie in Abbildung 6.17 dargestellt: Der zu bestimmende Stoff wird ebenso wie die Kalibrationsstoffe in den Faktorraum projiziert, der von dem optimalen Faktortripel aufgespannt wird. Dort werden die Gemittelten Maha-

lanobis-Distanzen (GMD) des zu bestimmenden Stoffs zu allen Kalibrationsstoffen ermittelt. Dem Kalibrationsstoff mit der kleinsten Gemittelten Mahalanobis-Distanz wird der zu bestimmende Stoff als Ergebnis zugeordnet. Zusätzlich werden ANSEL- und ANSTAIR-Wert zwischen der kleinsten GMD und den übrigen GMD gebildet. Damit kann bewertet werden, mit welcher Sicherheit die Zuordnung des zu bestimmenden Stoffs zu einem der Kalibrationsstoffe erfolgt ist.

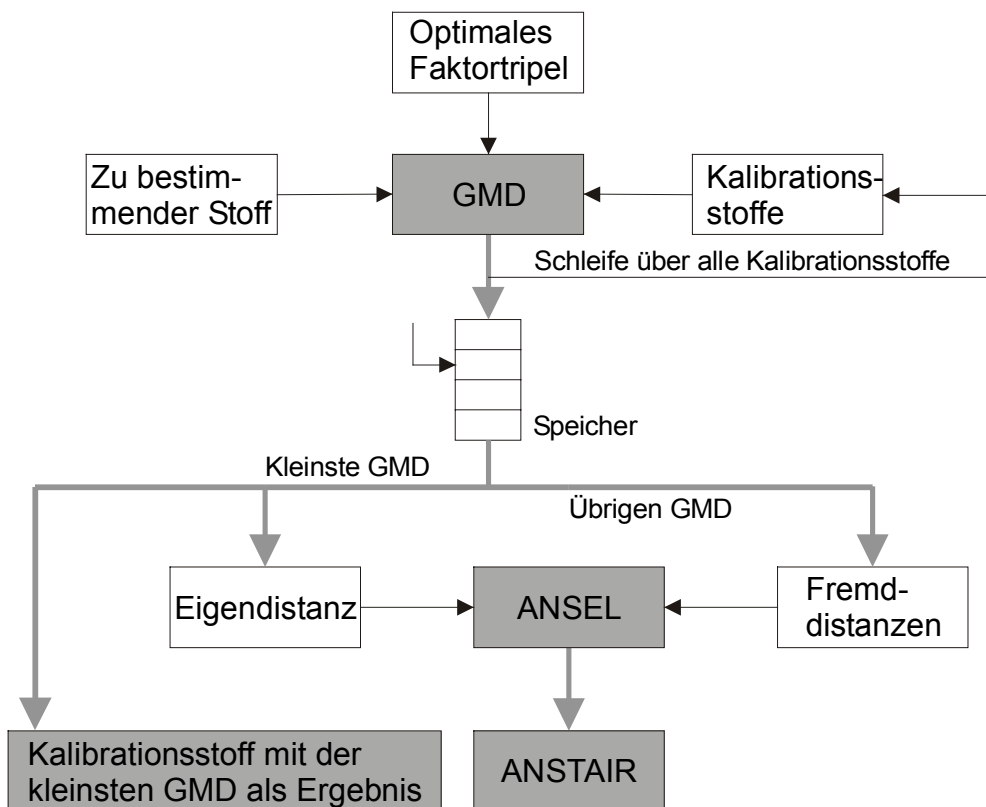


Abbildung 6.17 Auswertung zu bestimmender Stoffe

## 6.5 Umsetzung des Auswertesystems IntellIdent

Das Auswertesystem IntellIdent besteht, wie in Abbildung 6.1 bereits dargestellt, grob gesprochen aus drei Teilen: Der Faktoranalyse, die die Faktorzerlegung und Berechnung der Faktorgewichte umfaßt, der Faktorauswahl und der Auswertung zu bestimmender Stoffe.

Bei der Faktoranalyse wurde auf die Software Win-IR des Geräteherstellers Biorad zurückgegriffen. Sie ist in Array-Basic programmiert und erlaubt das Entwickeln eigener Module. Die Faktorzerlegung konnte ohne Veränderung

der Software durchgeführt werden. Für die Berechnung der Faktorgewichte waren jedoch Modifikationen nötig. Vor allem mußten die Ein- und Ausgabe der Daten neu gestaltet werden. Die Faktorgewichte werden hierbei durch eine hierfür entwickelte Schnittstelle in das ASCII-Format umgewandelt, um weiterverarbeitet werden zu können.

Die Faktorauswahl und die Auswertung zu bestimmender Stoffe wurden komplett neu entwickelt. Da für Faktorauswahl und Auswertung mathematische Zusammenhänge gefunden werden mußten, und zu einem großen Teil mit Matrizen gerechnet wird, wurde für ihre Entwicklung die Mathematiksoftware Mathcad verwendet. Die einzelnen Schritte der Faktorauswahl verteilen sich dabei auf verschiedene sogenannte Mathcad-Arbeitsblätter. Diese wurden mit Hilfe der MathConnex-Software zu einem System zusammengefügt, das nach der Eingabe von Konfigurationsdaten selbständig abläuft. Die Auswertung zu bestimmender Stoffe beschränkt sich auf ein Mathcad-Arbeitsblatt und läuft nach der Eingabe der relevanten Daten ebenfalls selbständig ab. Die Spektren werden der Faktorauswahl und der Auswertung in Form von ASCII-Dateien übergeben, die die Faktorgewichte der Spektren enthalten. Die Faktorgewichte werden zuvor von der oben beschriebenen Software errechnet und in eine ASCII-Datei geschrieben.

## 7 Versuchsreihen

In dem vorliegenden Kapitel soll das Auswertesystem IntellIdent evaluiert werden. Hierfür wurden verschiedene Versuchsreihen durchgeführt, die in den einzelnen Unterkapiteln dieses Kapitels beschrieben werden.

Die Vorgehensweise bei diesen Untersuchungen ist dabei wie folgt: Von Stoffen, die IntellIdent bestimmen soll, werden Spektren gemessen. In einem ersten Schritt errechnet IntellIdent für den eingesetzten universalen Faktorraum die Faktorgewichte aller gemessener Spektren. Da regulär 30 feststehende Faktoren festgelegt sind, werden die Spektren dementsprechend von jeweils 30 Faktorgewichten repräsentiert. Alle weiteren Berechnungen innerhalb des Systems werden mit diesen Faktorgewichten durchgeführt.

Die Spektren werden in Kalibrationsspektren und Testspektren aufgeteilt. Anhand der Kalibrationsspektren entscheidet IntellIdent selbständig, auf welche Weise es die betrachteten Stoffe am besten unterscheiden kann. Die Testspektren werden von IntellIdent anschließend in Bezug zu den Kalibrationsspektren gesetzt. Dies geschieht über ein Entfernungsmaß. Die Spektren des zu bestimmenden Stoffs werden dem Stoff, zu dessen Kalibrationsspektren sie die geringste Entfernung haben, zugeordnet. Die Trennschärfe dieser Zuordnung wird von IntellIdent mit Hilfe der hierfür entwickelten Kennzahlen, dem ANSEL-Wert und dem ANSTAIR-Wert, bewertet.

### 7.1 Evaluierung des universalen Faktorraums mit Hilfe der Bestimmung von 15 Kunststoffen

Wie in Kapitel 6.1 beschrieben, greift IntellIdent auf einen universalen Faktorraum zurück. Dieser wird aus einer Vielzahl unterschiedlicher Stoffe errechnet. Zu bestimmende Stoffe werden in diesen Faktorraum projiziert. Daraufhin werden die drei Dimensionen des Faktorraums ausgewählt, mit denen die zu bestimmenden Stoffe am besten bestimmt werden können (vgl. Kapitel 6.3). Das Neue an dieser Methode ist, daß der Faktorraum idealerweise für alle Anwendungsfälle aus dem Bereich organischer Stoffe geeignet ist. Er muß daher, im Unterschied zu bisherigen Verfahren, nur ein einziges Mal berechnet werden und wird dann fester Bestandteil des Auswertesystems. Das Auswerte-

system kann dadurch ohne Eingriffe von Seiten des Anwenders arbeiten. Somit wird die Bestimmung organischer Stoffe stark vereinfacht.

Um die prinzipielle Eignung dieses Vorgehens zu überprüfen und um im besonderen den gewählten universalen Faktorraum nach Kapitel 6.1 zu evaluieren, wurden die 15 Kunststoffe mit verschiedenen Faktorräumen bestimmt und die Ergebnisse der unterschiedlichen Faktorräume verglichen. Die 15 Kunststoffe werden in Tabelle 7.1 beschrieben. Es handelt sich dabei um zufällig ausgewählte Kunststoffe.

<b>Stoffnr.:</b>	<b>Kunststoff</b>
1	PA6, Ultramid B4, BASF
2	PP, P8000 natur, Vestolen
3	(HD)PE, Lupolen 5261Z, BASF
4	PET 9921 B, Eastman Chemical
5	PA, Abfälle von Radkappen: PA6 u. PA66 gemischt; Mischungsverhältnis unbek. Beimengungen von Glasfasern, Farbe oder Mineralstoffen (wie z.B. absichtlich zugemischtes Kalk)
6	PS, 158 K, BASF
7	PMMA, eingemahlene Autorückleuchten, Mischung, unterschiedl. Farben
8	LF-Fraktion, Abfälle aus DSD, Firma Kerium (Aufbereitungsfirma)
9	Polyolefine, Polyolefinfraktion des KAKTUS-Projekts, nicht über DSD erfaßt, vermutlich 90% PE, Rest hauptsächlich PP und ein paar PS-Kügelchen
10	PVC, Typ 2380 natur, Vestolit
11	PC (Polycarbonat), Makrolon CD 2005, Bayer
12	POM (Polyoxymethylen), Hostaform 7609214, Hoechst
13	PBT (Polybutylenterephthalat), Celanex
14	PC/ABS-Blend, Cycoloy, GE-Plastics
15	ABS, Terluran 877M, BASF

**Tabelle 7.1 Fünfzehn von Intellident zu bestimmende Kunststoffe**

Die Kunststoffe wurden mit fünf verschiedenen Faktorräumen untersucht:

1. Zum einen wurde wie in 6.1 beschrieben ein universaler Faktorraum aus allen in Kapitel 10.1 enthaltenen Stoffen gebildet. Er enthält auch viele Kunststoffe, darunter die zu bestimmenden 15.
2. Des weiteren wurde ein universaler Faktorraum berechnet, der aus allen Stoffen wie in Kapitel 10.1 ohne den darin enthaltenen Kunststoffen generiert wurde. Mit ihm sollte unmittelbar untersucht werden, wie gut sich Kunststoffe durch einen Vergleich mit anderen organischen Stoffen bestimmen lassen – wie gut sich somit organische Stoffe mit Hilfe der Faktoranalyse bestimmen lassen, ohne selbst in die Berechnung des Faktorraums eingegangen zu sein.
3. Als drittes wurde ein Faktorraum generiert, der sich aus den 15 Kunststoffen selbst konstituiert; er entspricht damit der üblichen Vorgehensweise bei der Bestimmung organischer Stoffe mit Hilfe der Faktoranalyse.
4. Viertens wurde ein Faktorraum aus zehn der 15 Kunststoffe gebildet. Die Auswahl der zehn Kunststoffe entspricht derjenigen aus Tabelle 7.3. Hierbei stand wiederum die Frage im Vordergrund, ob organische Stoffe unter Verwendung eines Faktorraums, in dem sie nicht enthalten sind, ähnlich gut erkannt werden können wie die in dem Faktorraum enthaltenen.
5. Schließlich wurde ein Faktorraum aus fünf der 15 Kunststoffe mit demselben Ziel wie unter Punkt 4. generiert. Die Auswahl der fünf Kunststoffe entspricht derjenigen aus Tabelle 7.4 .

Die Bestimmung der 15 Kunststoffe verlief in zwei Schritten: In dem ersten Schritt wurden dem System die zu bestimmenden Stoffe mit je acht Kalibrationsspektren präsentiert. Nachdem IntellIdent in der Faktorauswahl berechnet hatte, wie es die 15 Kunststoffe optimal bestimmen kann, wurden dem System in einem zweiten Schritt die zu bestimmenden Stoffe mit jeweils sieben Testspektren zur Bestimmung gegeben. Um das Auswertesystem verlässlich evaluieren zu können, wurden als zu bestimmende Stoffe die gleichen Kunststoffe wie die Kalibrations-Kunststoffe ausgewählt. IntellIdent mußte somit bei der Bestimmung eine eindeutige Zuweisung der zu bestimmenden Stoffe zu jeweils einem Kalibrationsstoff vornehmen.

Die Ergebnisse sind im Anhang in Kapitel 10.2.1 in den Tabellen 11.1 bis 11.6 abgebildet. In den fünf Tabellen sind die Ergebnisse der fünf verschiedenen Faktorräume, die IntellIdent für die Bestimmung der Stoffe jeweils zur Verfügung standen, dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind die Tabellen zweigeteilt: in dem ersten Teil der Tabellen befinden sich die Ergebnisse der Kunststoffe 1 bis 8, im zweiten Teil diejenigen der Kunststoffe 9 bis 15.



Tabelle 10.1a+b ist ein zweites Mal als Tabelle 7.2a+b dargestellt, anhand derer exemplarisch ein Auswertergebnis besprochen wird. Das Ergebnis für die Bestimmung eines Kunststoffes ist in jeweils einer Spalte der Tabellen dargestellt. Aufgetragen sind die Mahalanobis-Distanzen des zu bestimmenden Stoffes zu den Kalibrationsstoffen sowie die beiden Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR. Wie gut beispielsweise Test-Kunststoff 1 gegenüber den anderen 14 Kunststoffen von IntellIdent mit Hilfe des Faktorraums, der aus allen Stoffen gebildet wurde, bestimmt wurde, findet sich in der ersten Spalte der 'zu erkennenden Stoffe' von Tabelle 7.2a. Test-Kunststoff 1 wurde den 15 dem System bekannten Stoffen mit den Gemittelten Mahalanobis-Distanzen (GMD) (vgl. Kap.5.2.2), die in der ersten Spalte zu sehen sind, zugeordnet. Zu sich selbst als Kalibrationsstoff wurde eine GMD von 27,0 errechnet; zu den beiden Kunststoffen 9 und 11 wurde eine MD von ca. 500 errechnet, zu den übrigen 12 Kunststoffen GMD von teilweise weit größer als 1000. Test-Kunststoff 1 liegt also von allen anderen Kalibrationsstoffen viel weiter entfernt als von dem Kalibrations-Kunststoff 1 und wurde somit richtig zugeordnet, das heißt eindeutig als Kunststoff 1 erkannt. Dies drückt sich in dem ANSTAIR-Wert von 1,19 aus, der nahe dem Maximum von 1,2 liegt.

Test-Kunststoff 7 konnte dahingegen nur schlecht erkannt werden, wie in Spalte '7' von Tabelle 7.2a zu sehen ist. Er wurde mit einer GMD von 20,0 als Kunststoff 7 bestimmt, jedoch mit einem Wert von 28,8 als Kunststoff 11. Dies wird von dem System als schlechte Trennschärfe erachtet und dementsprechend mit einem ANSTAIR-Wert von 0,1 bewertet. Daß zu den übrigen Kunststoffen in diesem Fall eine ausreichend große GMD ermittelt wird, spielt dabei eine untergeordnete Rolle, da per definitionem die eindeutige Zuordnung als gescheitert gelten soll, wenn ein Stoff nicht von jedem anderen ausreichend unterschieden werden kann. Betrachtet man die Tabellen 7.2a+b, so wird deutlich, daß IntellIdent zwei Kunststoffe (7 und 8) schlecht, zwei Kunststoffe (11 und 15) mäßig und die übrigen elf sehr gut erkannt hat. Hierbei werden Werte, die ungefähr zwischen 0,3 und 0,8 liegen als mäßig, Werte um 0,1 als schlecht und Werte größer 1,0 als sehr gut angesehen.

Bei der beschriebenen Untersuchung der 15 Kunststoffe in dem Faktorraum aus allen Stoffen waren die Kunststoffe Teil des universalen Faktorraums dessen IntellIdent sich bei der Bestimmung bedient hat. Wie in der einschlägigen wissenschaftlichen Literatur beschrieben, ist diese Vorgehensweise üblich: Spektren von ein- und demselben Stoff werden in Kalibrationsspektren und Testspektren aufgeteilt (vgl. z.B. /WBM95/ oder /LAU97/). Mit den Kalibrationsspektren wird ein Faktorraum berechnet, mit den Testspektren wird die Trennschärfe des Systems überprüft. Da IntellIdent jedoch universell einsetzbar sein soll, sollte an dieser Stelle gezeigt werden, daß das System auch für den Fall funktioniert, daß die zu untersuchenden Stoffe selbst nicht für die

Konstituierung des Faktorraums verwendet wurden. Hierfür wurde ein Faktorraum mit allen Stoffen aus Kapitel 10.1 ohne den darin enthaltenen Kunststoffen gebildet und die 15 Kunststoffe wurden mit diesem Faktorraum untersucht. Es standen IntellIdent somit in diesem Fall nur Faktoren zur Verfügung, die ohne Beteiligung von Kunststoffen berechnet wurden. Das Ergebnis ist in Tabelle 10.2a+b zu sehen: Fünf Kunststoffe (6, 7, 8, 10 und 15) wurden schlecht, ein Kunststoff (11) mäßig und die übrigen neun sehr gut erkannt.

Ein Vergleich der Ergebnisse mit jenem der Untersuchung mit dem Faktorraum aus allen Stoffen ermöglichen Abbildung 7.1 und Abbildung 7.2. Hier sind jeweils die ANSTAIR-Werte über den Stoffen aufgetragen. Für Kunststoffe 6 und 10 ergeben sich für den Faktorraum ohne Kunststoffe deutlich schlechtere Werte als für den Faktorraum aus allen Stoffen; für die Kunststoffe 11 und 15 ergeben sich ebenfalls schlechtere Werte, die aber nicht so stark abfallen wie bei den Kunststoffen 6 und 10. Die übrigen elf Kunststoffe wurden ähnlich gut bestimmt wie mit dem Faktorraum aus allen Stoffen.

Die Ergebnisse für die Faktorräume aus 15, zehn und fünf Kunststoffen befinden sich in Tabelle 10.3 - Tabelle 10.5. Zusätzlich sind die sich ergebenden ANSTAIR-Werte in Abbildung 7.3 bis Abbildung 7.5 dargestellt. Für die Faktorräume aus zehn bzw. fünf Kunststoffen (Abbildung 7.4 bzw. Abbildung 7.5) sind die Stoffe auf der Abszisse dunkel markiert, aus denen die Faktorräume gebildet wurden. Dabei kann festgestellt werden, daß sich die Kunststoffe, die für die Berechnung des Faktorraums verwendet wurden (dunkel markiert), besser bestimmen lassen, als diejenigen, die nicht im Faktorraum enthalten sind. Gerade Abbildung 7.5 aber zeigt auch, daß es prinzipiell möglich ist, Stoffe zu erkennen, die nicht im Faktorraum enthalten sind: von den zehn Kunststoffen, die nicht im Faktorraum enthalten sind, wurden nur vier nicht erkannt.

In Verbindung mit dem besseren Abschneiden des Faktorraums aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe läßt sich der folgende Zusammenhang herstellen: Es ist prinzipiell möglich, Stoffe zu bestimmen, die nicht in dem Faktorraum enthalten sind, mit dem sie bestimmt werden; das dabei erzielte Ergebnis ist um so besser, je mehr Stoffe in dem Faktorraum enthalten sind.

Ein Vergleich über alle Ergebnisse, die mit den fünf verschiedenen Faktorräumen erzielt wurden, erlauben Abbildung 7.1 bis Abbildung 7.5: Mit elf sehr gut, zwei mäßig und zwei schlecht erkannten Kunststoffen schneidet der Faktorraum aus allen zur Verfügung stehenden Stoffen am besten ab. Deutlich schlechter werden die 15 Kunststoffe mit den Faktorräumen aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe bzw. aus den 15 Kunststoffen selbst erkannt (neun sehr gut, einer mäßig und fünf schlecht bzw. acht sehr gut, drei mäßig und vier schlecht). Dabei ist eine vergleichende Bewertung dieser beiden Fälle schwie-

rig, da im Fall des Faktorraums ohne die Kunststoffe ein Kunststoff mehr sehr gut und einer mehr schlecht erkannt wird als bei dem Faktorraum aus den 15 Kunststoffen. Je nach Gewichtung kann sowohl der eine als auch der andere Faktorraum für geeigneter gehalten werden. Deutlich schlechter schneidet wiederum der Faktorraum aus zehn Kunststoffen und nochmals schlechter derjenige aus fünf Kunststoffen ab (sieben sehr gut, vier mäßig und vier schlecht bzw. sechs sehr gut, vier mäßig und fünf schlecht erkannt).

Aus der Untersuchung können demnach folgende Schlußfolgerungen gezogen werden:

Zum einen kann eine Bestimmungsaufgabe organischer Stoffe mit Hilfe der Verfahren der Faktoranalyse gelöst werden, auch wenn die verwendeten Faktoren nicht aus den zu bestimmenden Stoffen berechnet wurden. Dies hat der Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe gezeigt. Bei der Bestimmung von fünfzehn Kunststoffen schneidet er ähnlich gut ab wie ein Faktorraum aus den fünfzehn zu erkennenden Kunststoffen selbst, was dem herkömmlichen Vorgehen bei der Bestimmung der 15 Kunststoffe mit Hilfe der Faktoranalyse entspräche.

Zum anderen gibt es einen Zusammenhang zwischen der Eignung eines Faktorraums und der Anzahl an Stoffen, aus denen er gebildet wurde - seiner Variabilität: Der Faktorraum aus zehn Kunststoffen schneidet besser ab als derjenige aus fünf und schlechter als derjenige aus fünfzehn. Derjenige aus fünfzehn wiederum schneidet schlechter ab als derjenige aus allen Stoffen, der neben den fünfzehn Kunststoffen noch 92 weitere Stoffe bzw. Stoffgemische enthält.

Es ist also möglich, zu bestimmende Stoffe nicht zur Bildung des Faktorraums, mit dessen Hilfe sie bestimmt werden sollen, heranzuziehen. Das dabei erzielte Ergebnis ist um so besser, je mehr verschiedene Stoffe zur Bildung des Faktorraums herangezogen werden. Die Hypothese, daß ein Faktorraum nur einmal berechnet werden muß, um dann für alle Anwendungsfälle der Bestimmung organischer Stoffe verwendet werden zu können, ließ sich somit verifizieren.



Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe							
		1	2	3	4	5	6	7	8
PA6	1	27,0	1465,3	9274,8	19219,0	612,2	3644,2	3998,0	1217,7
PP	2	1706,1	3,3	5039,2	33149,6	322,8	4433,6	4235,9	952,5
(HD)PE	3	28391,1	30896,0	11,9	14677,6	31503,4	23144,8	17827,0	26178,8
PET 9921 B	4	1612,0	549,7	6685,8	2,9	985,6	190,4	185,3	1305,1
PA	5	2282,4	1294,6	9069,2	24976,6	3,4	3515,0	3576,9	335,0
PS	6	3209,2	1603,4	101284,9	12185,5	2053,2	8,2	89,9	6330,1
PMMA	7	2603,9	2080,2	16274,8	6908,9	457,1	49,8	20,0	965,9
LF-Fraktion	8	1015,0	503,3	2121,7	7438,0	56,2	1205,3	1198,8	27,8
Polyolefine	9	541,8	91,4	137,8	3547,1	44,3	325,0	297,3	26,8
PVC	10	2748,1	454,8	2351,5	18767,2	87,8	1864,0	1559,7	250,9
PC	11	515,7	1022,1	16674,6	5786,4	231,4	60,7	28,8	1092,0
POM	12	5446,6	1984,6	24506,9	34052,8	2390,8	5544,5	3651,2	5700,7
PBT	13	1312,8	524,1	4412,9	108,5	499,4	47,2	53,8	654,4
PC/ABS-Blend	14	3601,4	411,3	16595,8	5643,0	347,5	1380,7	1252,8	506,1
ABS	15	7531,0	1435,3	73769,0	19603,9	666,8	5917,7	5930,8	2126,9
ANSEL		2,80E+06	3,00E+06	2,86E+06	3,27E+06	1,78E+06	8,68E+05	3,53E+03	1,97E+03
ANSTAIR		1,190	1,190	1,190	1,200	1,120	1,100	0,100	0,100

**Tabelle 7.2a Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		9	10	11	12	13	14	15
PA6	1	3212,3	1662,0	3671,9	9959,2	17394,0	1256,3	417,06
PP	2	2379,0	520,7	3827,0	6741,0	26225,4	1207,9	227,7
(HD)PE	3	3625,8	28107,2	25301,5	1735,7	15500,0	31651,3	55800,3
PET 9921 B	4	2123,0	421,5	193,5	623,2	54,9	761,9	893,6
PA	5	1471,1	864,5	3478,3	9080,8	20075,1	421,8	20,5
PS	6	26211,0	510,7	272,8	2040,4	7934,3	1636,2	311,7
PMMA	7	4375,9	623,1	18,9	690,0	3854,6	257,0	78,7
LF-Fraktion	8	205,5	366,1	1212,6	2614,9	5908,3	141,0	70,5
Polyolefine	9	19,1	26,7	277,5	548,1	2713,9	48,4	68,9
PVC	10	764,7	8,9	1442,2	1744,1	13266,1	332,4	40,1
PC	11	4384,7	235,6	7,7	504,4	3328,4	337,0	47,2
POM	12	9215,8	563,6	3632,3	14,4	18538,8	4631,0	3252,7
PBT	13	1359,5	257,2	50,5	530,4	2,6	323,1	339,7
PC/ABS-Blend	14	2878,5	217,2	1554,8	2914,2	4149,3	1,3	16,4
ABS	15	12427,9	1418,2	7151,0	16486,1	16565,7	114,9	6,3
ANSEL		2,66E+06	3,12E+05	1,17E+05	3,06E+06	3,13E+06	2,20E+06	5,95E+04
ANSTAIR		1,180	1,000	0,500	1,190	1,200	1,150	0,400

**Tabelle 7.2b Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**



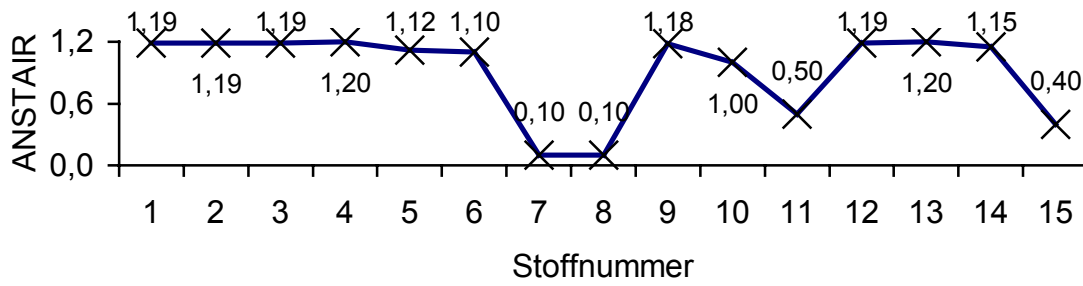


Abbildung 7.1 Faktorraum aus allen Stoffen

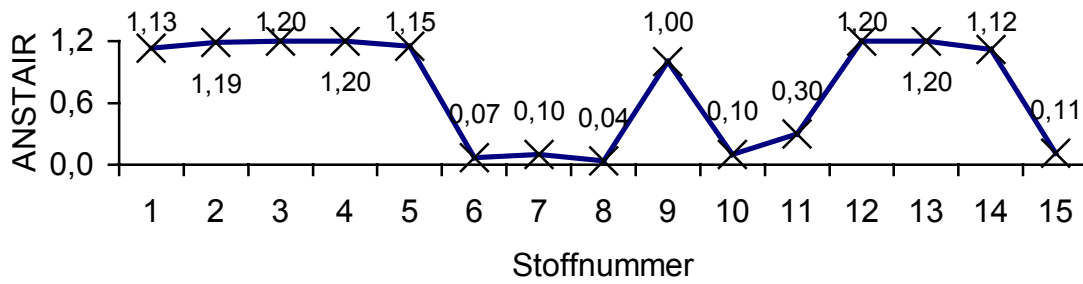


Abbildung 7.2 Faktorraum aus allen Stoffen ohne Kunststoffe

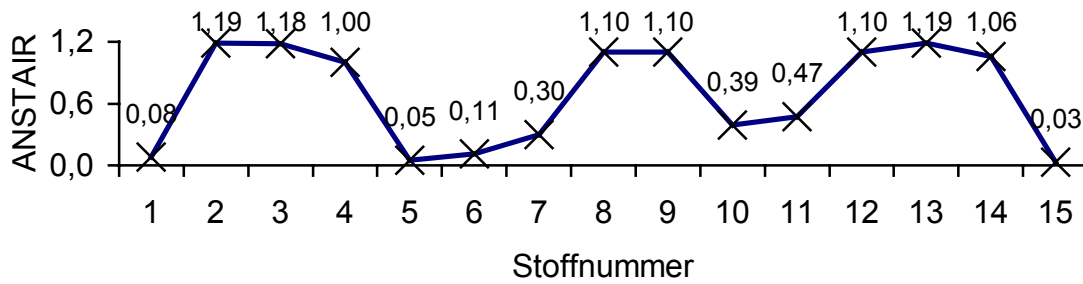


Abbildung 7.3 Faktorraum aus 15 Kunststoffen

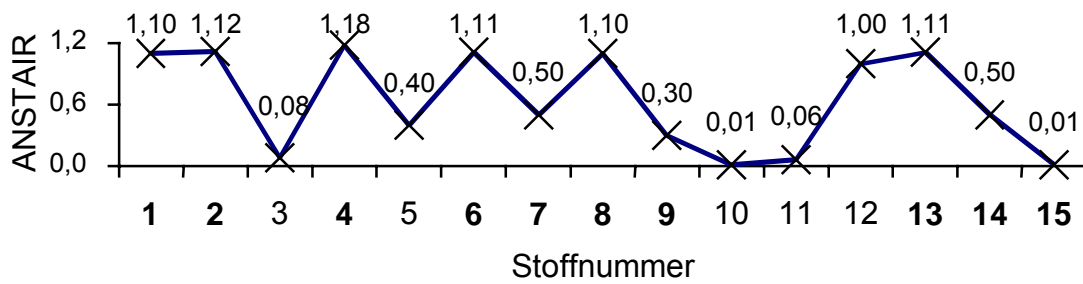


Abbildung 7.4 Faktorraum aus zehn Kunststoffen

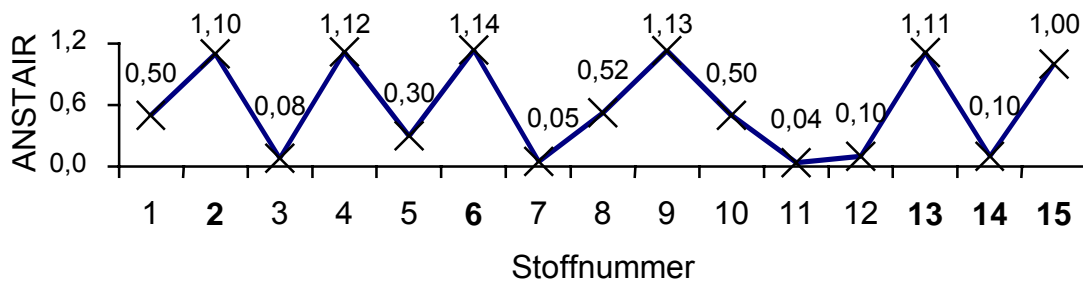


Abbildung 7.5 Faktorraum aus fünf Kunststoffen



## 7.2 Evaluierung des universalen Faktorraums mit Hilfe der Bestimmung von zehn Kunststoffen

Um die Ergebnisse aus Kapitel 7.1 zu vertiefen und um zu untersuchen, ob die Trennschärfe des Auswertessystems IntellIdent steigt, wenn weniger Stoffe auf einmal bestimmt werden sollen, wurden die Untersuchungen aus Kapitel 7.1 mit zehn Kunststoffen wiederholt. Tabelle 7.3 zeigt, um welche Kunststoffe es sich dabei handelt. Sie wurden zufällig aus den 15 Kunststoffen von Kapitel 7.1 ausgewählt. Die zehn Kunststoffe wurden erneut durchnummeriert, so daß ihre Stoffnummer nicht mit den Stoffnummern aus Kapitel 7.1 übereinstimmt. Für die dadurch erschwerte vergleichende Betrachtung der Ergebnisse eignet sich die Gegenüberstellung der Ergebnisse in Kapitel 7.4.

Stoffnr.:	Kunststoff
1	PA6, Ultramid B4, BASF
2	PP, P8000 natur, Vestolen
3	PET 9921 B, Eastman Chemical
4	PS, 158 K, BASF
5	PMMA, eingemahlene Autorückleuchten, Mischung, unterschiedl. Farben
6	LF-Fraktion, Abfälle aus DSD, Firma Kerium (Aufbereitungsfirma)
7	Polyolefine, Polyolefinfraktion des KAKTUS-Projekts, nicht über DSD erfaßt, vermutlich 90% PE, Rest hauptsächlich PP und ein paar PS-Kügelchen
8	PBT (Polybutylenterephthalat), Celanex
9	PC/ABS-Blend, Cycoloy, GE-Plastics
10	ABS, Terluran 877M, BASF

**Tabelle 7.3 Zehn von IntellIdent zu bestimmende Kunststoffe**

Die Ergebnisse der Untersuchung befinden sich in Tabelle 10.6 – Tabelle 10.9; die jeweiligen ANSTAIR-Werte sind in Abbildung 7.6 bis Abbildung 7.9 dargestellt.

Wie die Abbildungen zeigen, ergeben sich wiederum für den Faktorraum aus allen Stoffen die besten Ergebnisse. Acht der zehn Kunststoffe werden sehr gut erkannt, haben ANSTAIR-Werte von 1,0 und größer. Kunststoff 9 wird mäßig gut erkannt. Er gruppiert sich mit einer Eigendistanz von 5,5 zwar sehr dicht am Kalibrations-Kunststoff 9, liegt aber mit 11,5 auch sehr nahe bei Kunststoff

6 (vgl. Tabelle 11.6b im Anhang). Kunststoff 10 wird dagegen gar nicht erkannt, er erhält einen ANSTAIR-Wert von 0,01.

Die anderen vier Faktorräume schneiden schlechter ab. Allerdings ist nicht wie in Kapitel 7.1 ein kontinuierlicher Abstieg der Trennschärfe über der Anzahl an Stoffen je Faktorraum zu beobachten. Die vier Faktorräume sind in ähnlicher Weise geeignet, die zehn Kunststoffe zu bestimmen. Der Faktorraum aus den zehn Kunststoffen selbst schneidet dabei noch leicht besser ab als die übrigen drei. Mit ihm wird nur Kunststoff 10 mit einem ANSTAIR-Wert von 0,01 nicht erkannt, er kann weder von Kunststoff 1 noch von Kunststoff 8 unterschieden werden (vgl. Tabelle 11.9b im Anhang). Kunststoff 5 und Kunststoff 9 haben ANSTAIR-Werte von 0,5. Kunststoff 5 hat dabei eine Eigendistanz von 19,5 und liegt von den Gegenstoffen Kunststoff 6 mit 55,6 am nächsten. Kunststoff 9 hat eine Eigendistanz von 1,5 und liegt mit 4,4 auch zu Kunststoff 6 recht nahe. Es mag an dieser Stelle auf den ersten Blick bemerkenswert erscheinen, daß diese beiden Fälle mit einem ANSTAIR-Wert von 0,5 gleich bewertet werden. Die durch die Eigendistanz von 1,5 angezeigte Lage des Test-Kunststoffs 9 zu dem Kalibrations-Kunststoff 9 ist jedoch so außergewöhnlich nahe, daß selbst die relativ geringe Entfernung zu Kunststoff 6 von 4,4 noch als trennscharf erscheint.

Die Bestimmung von Kunststoff 7 wird mit einem ANSTAIR-Wert von 0,3 als noch unsicherer bewertet. Er liegt mit einer Entfernung von 17 bei einer Eigendistanz von 9,7 dem Kunststoff 6 zu nahe.

Der Faktorraum aus fünf Kunststoffen schneidet leicht schlechter ab als der Faktorraum aus zehn Kunststoffen. Ein Vergleich ergibt das folgende Bild: Es wird mit Kunststoff 5 ebenfalls ein Kunststoff überhaupt nicht erkannt, und sechs der zehn Kunststoffe werden ebenfalls sehr gut erkannt. Des weiteren werden zwei Kunststoffe mit ANSTAIR-Werten um 0,5 gleich gut erkannt. Ein Kunststoff wird jedoch mit einem ANSTAIR-Wert von 0,1 schlechter erkannt als bei dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen: Hier wird der verbleibende Kunststoff mit einem ANSTAIR-Wert von 0,3 erkannt.

Die Faktorräume aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe und aus den 15 Kunststoffen schneiden nochmals leicht schlechter ab, eine Rangfolge zwischen ihnen läßt sich aber nicht festlegen: Mit dem Faktorraum aus den 15 Kunststoffen wird ein Kunststoff mehr sehr gut erkannt und, mit einem ANSTAIR-Wert von 0,1, ein Kunststoff mehr sehr schlecht. Mit dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe werden dafür zwei Kunststoffe, mit ANSTAIR-Werten von 0,5, mäßig erkannt: Kunststoff 4 hat eine Eigendistanz von 1,7 und eine kleinste Fremddistanz von 5,4; Kunststoff 8 eine Eigendistanz von 5,4 und eine kleinste Fremddistanz von 14,5. Die kleinste Fremddistanz, also die Entfernung zu dem nächstliegenden Gegenstoff ist dabei für eine Bestimmung

ein besonders kritischer Wert, da eine Bestimmung als trennscharf gelten kann, wenn der zu bestimmende Stoff von dem nächstliegenden, und damit dem für das Auswertesystem ähnlichsten, Gegenstoff unterschieden werden kann. Dies ist genau dann der Fall, wenn die Eigendistanz im Vergleich zur kleinsten Fremddistanz ausreichend klein ist.

Mit den Ergebnissen dieser Untersuchung läßt sich eine der zentralen Aussagen aus Kapitel 7.1 modifizieren. Ein Faktorraum ist demnach nicht notwendigerweise um so besser für die Bestimmung von Stoffen geeignet ist, je mehr Stoffe er enthält: Der Faktorraum aus den 15 Kunststoffen schneidet nicht besser ab als derjenige aus den fünf Kunststoffen. Erst wenn deutlich mehr Stoffe in einem Faktorraum enthalten sind, nimmt dessen Eignung für die Bestimmung von Stoffen zu: Der Faktorraum aus allen Stoffen schneidet wieder deutlich besser ab als die übrigen. Zusammenfassend läßt sich vermuten, daß es für jeden Anwendungsfall eine spezifische kritische Anzahl an Stoffen je Faktorraum gibt, ab der die Eignung des Faktorraums für die Bestimmung der Stoffe deutlich steigt.

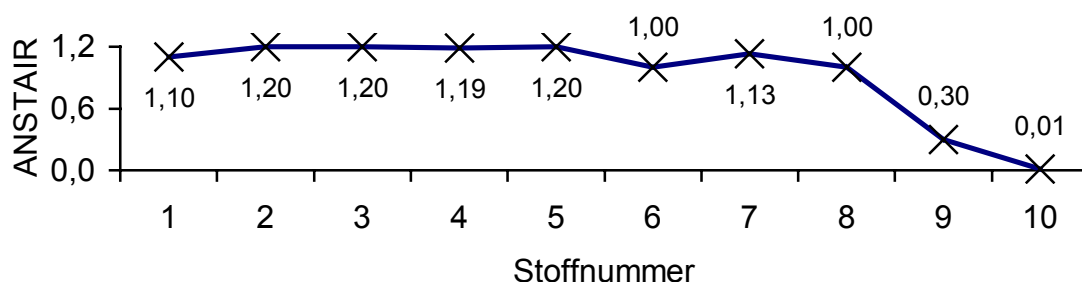


Abbildung 7.6 Faktorraum aus allen Stoffen

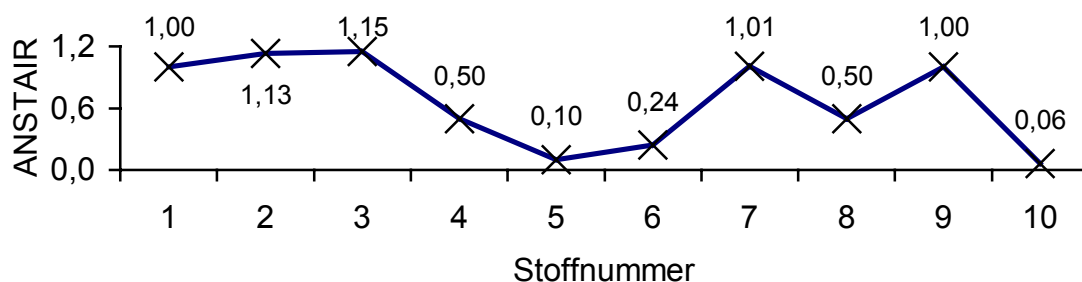


Abbildung 7.7 Faktorraum aus allen Stoffen ohne Kunststoffe

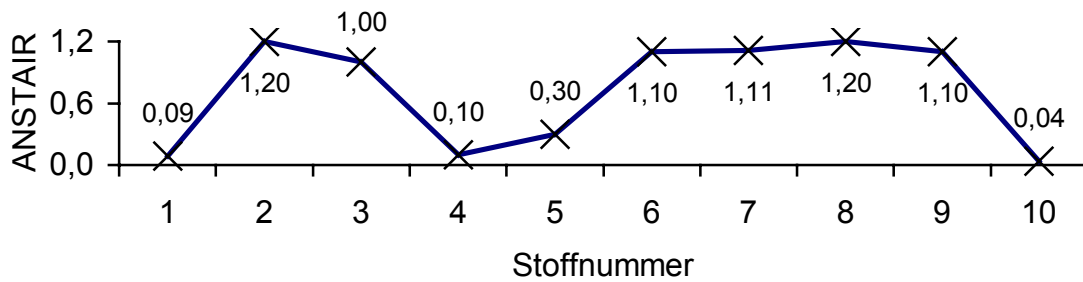


Abbildung 7.8 Faktorraum aus 15 Kunststoffen

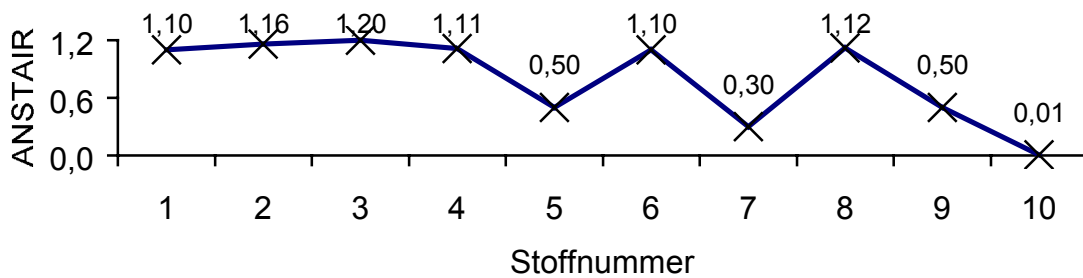


Abbildung 7.9 Faktorraum aus zehn Kunststoffen

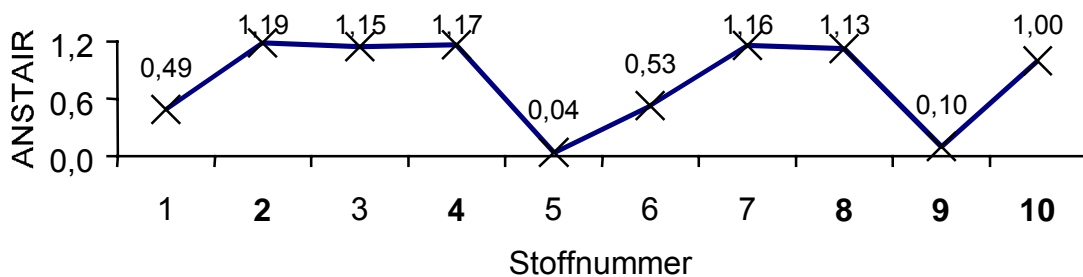


Abbildung 7.10 Faktorraum aus fünf Kunststoffen

### 7.3 Evaluierung des universalen Faktorraums mit Hilfe der Bestimmung von fünf Kunststoffen

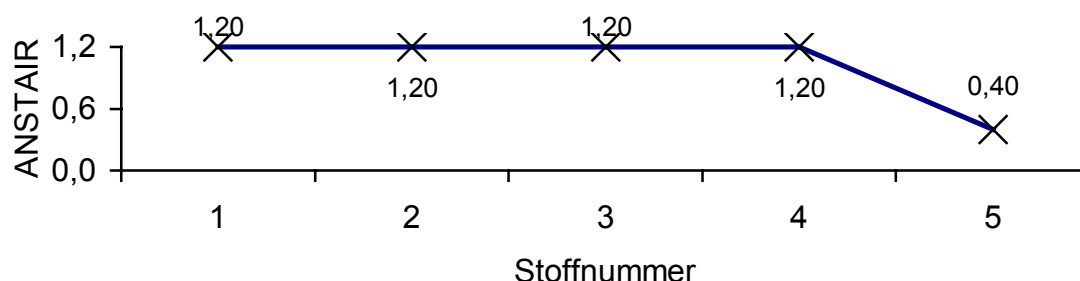
Die Untersuchungen, die wie in den Kapiteln 7.1 und 7.2 beschrieben mit fünfzehn respektive zehn Kunststoffen durchgeführt wurden, wurden in gleicher Form mit fünf Kunststoffen wiederholt. Die fünf Kunststoffe sind in Tabelle 7.13 abgebildet. Sie sind eine zufällige Auswahl aus den zehn Kunststoffen aus Kapitel 7.2 und damit Teilmenge sowohl der zehn Kunststoffe als auch der 15 Kunststoffe aus Kapitel 7.1.

Die Ergebnisse der Untersuchung befinden sich im Anhang (Kapitel 10.2.3 in Tabelle 10.10 bis Tabelle 10.14). Die entsprechenden ANSTAIR-Werte sind in Abbildung 7.11 bis Abbildung 7.15 dargestellt.

Stoffnr.:	Kunststoff
1	PP, P8000 natur, Vestolen
2	PS, 158 K, BASF
3	PBT (Polybutylenterephthalat), Celanex
4	PC/ABS-Blend, Cycoloy, GE-Plastics
5	ABS, Terluran 877M, BASF

**Tabelle 7.4 Fünf von Intellident zu bestimmende Kunststoffe**

Anders als bei den Ergebnissen aus den Kapiteln 7.1 und 7.2 ergibt sich für den Faktorraum aus allen Stoffen ein schlechteres Ergebnis als für alle anderen Faktorräume: Es können nicht alle fünf Kunststoffe sehr trennscharf bestimmt werden. Bei der Bestimmung von ABS ergibt sich mit GMD von 5,1 zu 11,9 eine zu große Ähnlichkeit zu dem Blend aus PC und ABS (vgl. Tab. 11.10 im Anhang). Dies kann nur so interpretiert werden, daß in diesem Fall im Faktorraum aus allen Stoffen der Unterschied zwischen den Kalibrations- und Testspektren stärker zu Tage tritt als in den anderen Faktorräumen und daher die für die Kalibrationsdaten optimale Faktorkonfiguration nicht gleich der optimalen Faktorkonfiguration für die Testdaten ist. Um diesen Zusammenhang zu validieren, wurde derselbe Versuch für den Faktorraum aus allen Stoffen mit der vom System bei der Faktorauswahl als der zweit- und drittbesten ausgegebenen Faktorkonfiguration wiederholt. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 10.15 und Tabelle 10.16 im Anhang. Mit der zweitbesten Faktorkonfiguration verbessert sich das Ergebnis leicht: der ANSTAIR-Wert von Kunststoff 5 steigt von 0,4 auf 0,5. Die übrigen vier ANSTAIR-Werte bleiben bei 1,2. Mit der drittbesten Faktorkonfiguration ergibt sich ein noch besseres Ergebnis: die Kunststoffe 1 bis 4 bleiben bei 1,2 und Kunststoff 5 erreicht 1,0.



**Abbildung 7.11 Faktorraum aus allen Stoffen**

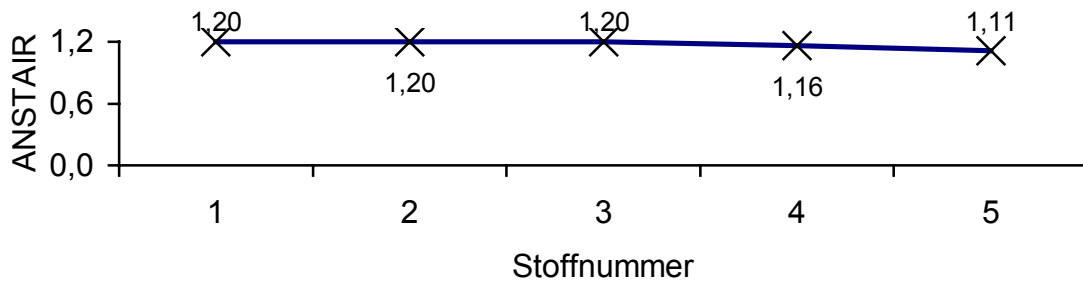


Abbildung 7.12 Faktorraum aus allen Stoffen ohne Kunststoffe

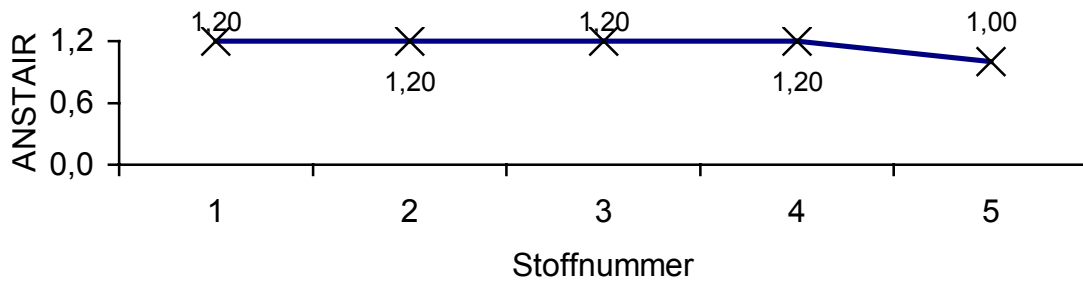


Abbildung 7.13 Faktorraum aus 15 Kunststoffen

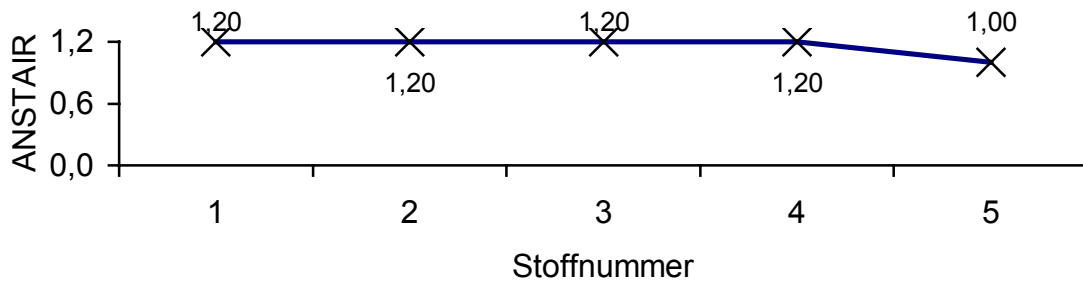


Abbildung 7.14 Faktorraum aus zehn Kunststoffen

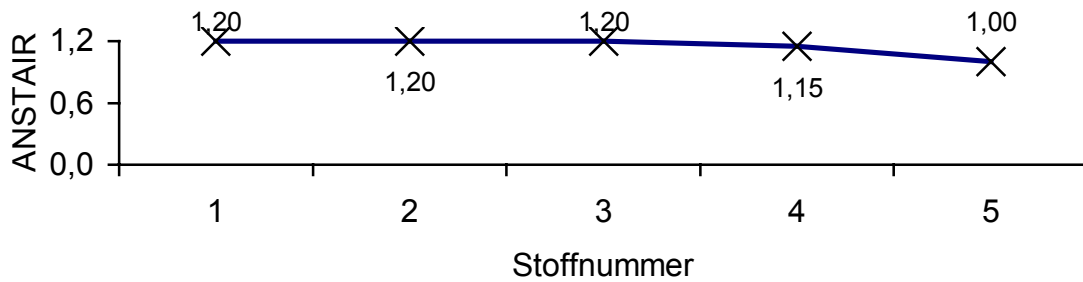


Abbildung 7.15 Faktorraum aus fünf Kunststoffen

## 7.4 Vergleich der Untersuchungen mit fünfzehn, zehn und fünf Kunststoffen

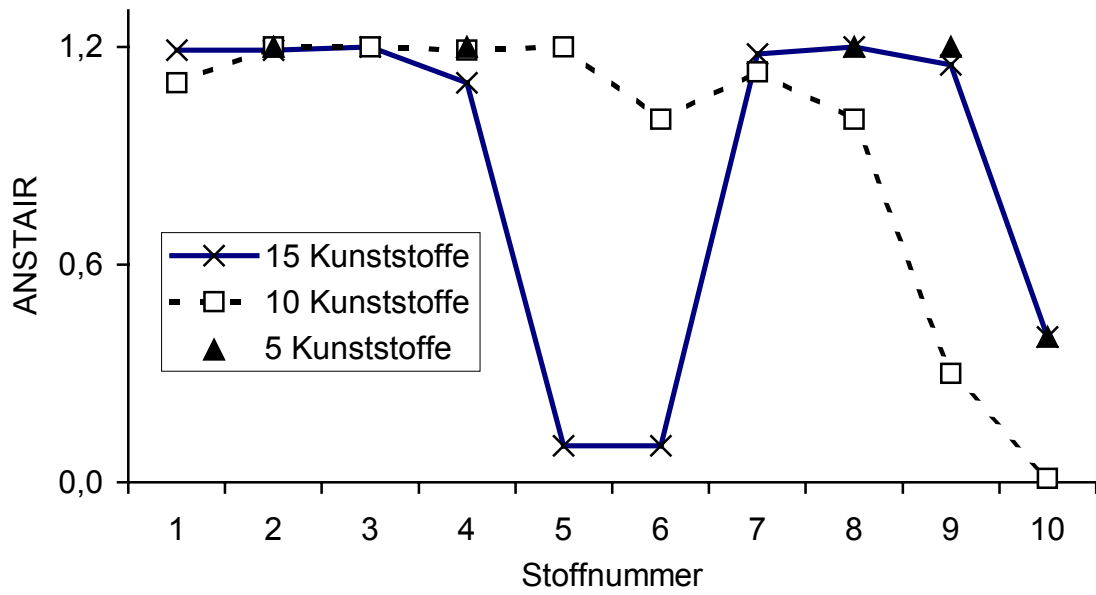
In vorliegendem Kapitel werden die Ergebnisse der Bestimmungen von 15, zehn und fünf Kunststoffen in den fünf verschiedenen Faktorräumen (vgl. Kap. 7.1 – 7.3) insbesondere auf die Fragestellung hin, inwiefern sich die Trenn-

schärfe von IntellIdent mit der Anzahl der zu bestimmenden Stoffe verändert, miteinander verglichen.

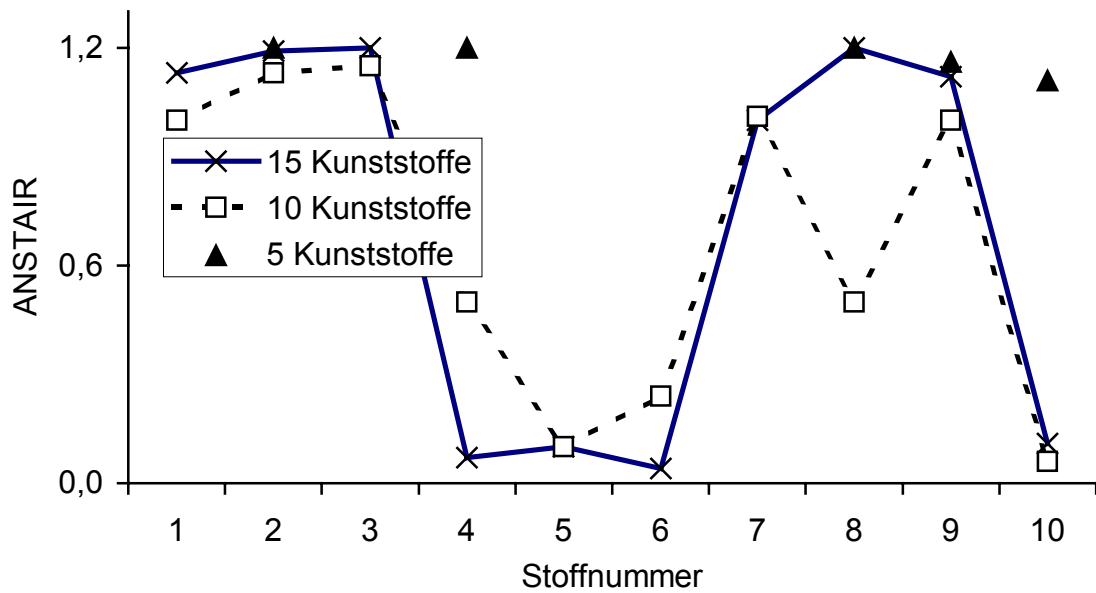
In den fünf Abbildungen 7.16 bis 7.20 sind die Bestimmungsergebnisse aus den Kapiteln 7.1 bis 7.3 aufgetragen. Jede Abbildung steht dabei für einen Faktorraum. In Abbildung 7.16 sind z.B. die ANSTAIR-Werte für die Bestimmung der Kunststoffe in dem Faktorraum aus allen Stoffen zu sehen. Verglichen werden dabei die Ergebnisse der Bestimmung von 15 Kunststoffen (vgl. Kap.7.1) mit denen der Bestimmung von zehn (vgl. Kap.7.2) und fünf Kunststoffen (vgl. Kap.7.3). Von den fünfzehn zu bestimmenden Kunststoffen wurden im Sinne einer besseren Vergleichbarkeit nur jene zehn Kunststoffe berücksichtigt, die auch in dem Fall der zehn zu bestimmenden Kunststoffe verwendet wurden. Zusätzlich sind die ANSTAIR-Werte der Bestimmung von fünf Kunststoffen aufgetragen. Die Numerierung der Kunststoffe bezieht sich auf den Fall der zehn zu bestimmenden Kunststoffe aus Tabelle 7.3.

Wie aus Abbildung 7.16 bis Abbildung 7.20 zu erkennen ist, ändert sich die Trennschärfe des Systems von der gleichzeitigen Bestimmung der 15 Kunststoffe zu derjenigen der zehn in allen Faktorräumen kaum. Für den Faktorraum aus allen Stoffen (vgl. Abbildung 7.16) werden die Kunststoffe 1 bis 4 und Kunststoff 7 gleich gut bestimmt, unabhängig davon, ob insgesamt 15 oder zehn Kunststoffe zu erkennen waren. Die Kunststoffe 5 und 6 werden bei der Bestimmung der 15 Kunststoffe deutlich schlechter, die Kunststoffe 8 bis 10 schlechter erkannt als bei der Bestimmung der zehn Kunststoffe. Für die Faktorräume aus 15, zehn und fünf Kunststoffen (vgl. Abbildung 7.18 – Abbildung 7.20) sind die Ergebnisse für beide Fälle, die Bestimmung von 15 und die Bestimmung von zehn Kunststoffen, nahezu identisch. Dies legt die Vermutung nahe, daß sich die Faktoren, die aus den 15, aus den zehn und aus den fünf Kunststoffen jeweils gebildet wurden zumindest teilweise sehr ähnlich sind. Bei der Verwendung des Faktorraums aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe werden die Kunststoffe 4 und 6 bei der Bestimmung von zehn Kunststoffen etwas besser, Kunststoff 8 dahingegen deutlich schlechter erkannt als bei der Bestimmung von 15 Kunststoffen.

Sollen jedoch nur fünf Kunststoffe bestimmt werden, ist in allen Faktorräumen eine Verbesserung der Trennschärfe zu beobachten. In dem Faktorraum aus allen Stoffen fällt sie lediglich gering aus. In den Faktorräumen aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe, in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen und in dem aus zehn Kunststoffen werden jeweils zwei Kunststoffe, in dem Faktorraum aus fünf Kunststoffen lediglich einer deutlich besser erkannt.

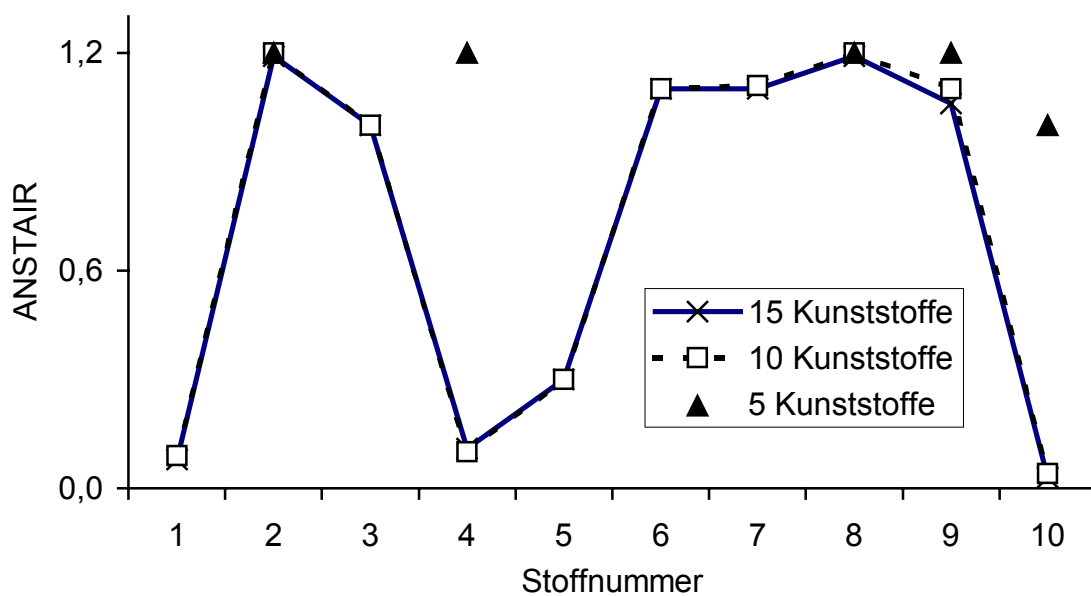


**Abbildung 7.16** Bestimmung von 15, zehn und fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen

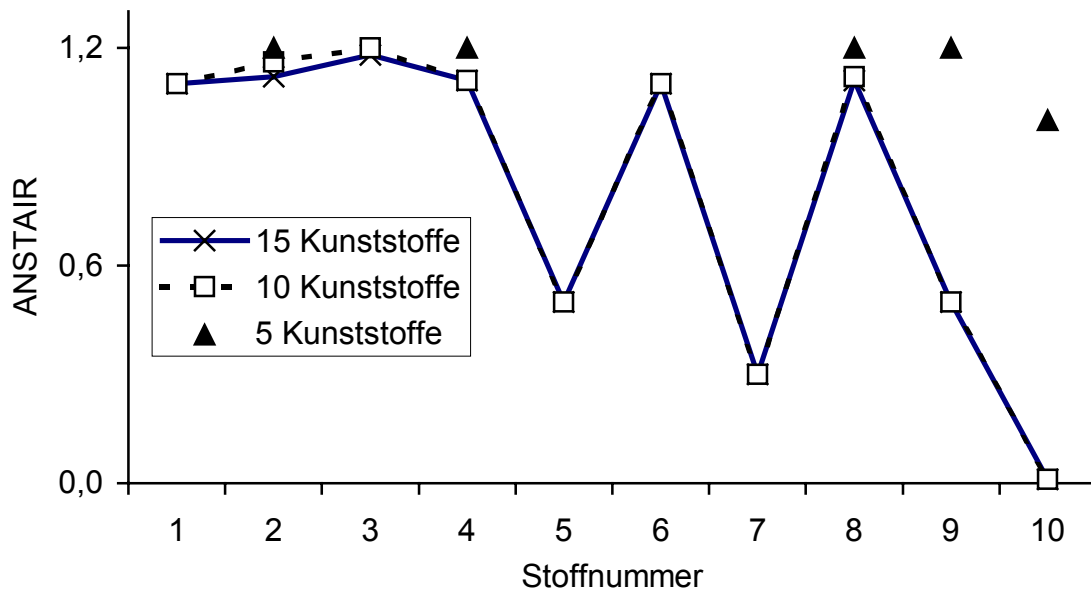


**Abbildung 7.17** Bestimmung von 15, zehn und fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe

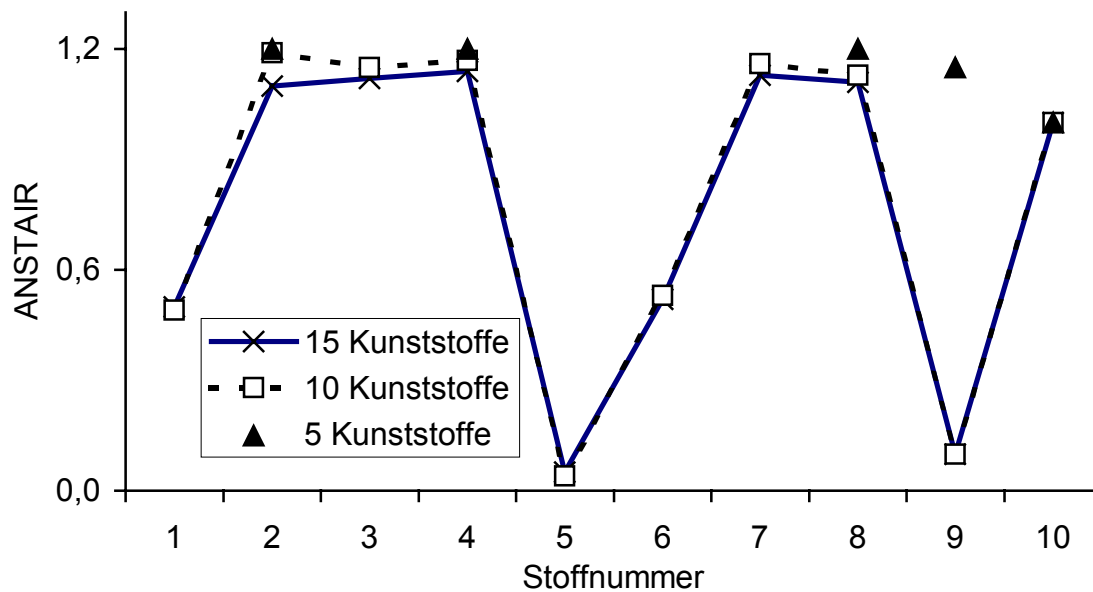




**Abbildung 7.18** Bestimmung von 15, zehn und fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen



**Abbildung 7.19** Bestimmung von 15, zehn und fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen



**Abbildung 7.20 Bestimmung von 15, zehn und fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus fünf Kunststoffen**

Es läßt sich somit festhalten, daß IntellIdent die zu bestimmenden Stoffe um so detaillierter berücksichtigen kann, je weniger Stoffe gleichzeitig zu bestimmen sind. Dieser Zusammenhang ist jedoch nicht linear, das heißt die Bestimmung ist nicht um so besser je weniger Stoffe erkannt werden sollen. Dies zeigen die ähnlichen Ergebnisse für die Bestimmungen von 15 und zehn Kunststoffen. Vielmehr scheint es für jeden Anwendungsfall eine spezifische kritische Anzahl an Stoffen zu geben, die gleichzeitig erfolgreich bestimmt werden können.

## 7.5 Überprüfung der Gültigkeitsdauer einer Konfiguration

Ziel der Untersuchung der Gültigkeitsdauer einer Konfiguration war es, herauszufinden, ob eine von IntellIdent einmal vorgenommene Einstellung robust ist hinsichtlich zeitlicher Veränderungen. Unter letzteren sind sowohl stoffliche Veränderungen durch Alterungsprozesse als auch Veränderungen der Meßapparatur, wie z.B. solche durch Abnutzungserscheinungen des Detektors, zu verstehen.

Für diese Untersuchung wurden die beiden Kunststoffe 2 und 13 der in Tabelle 7.1 beschriebenen 15 Kunststoffe ausgewählt und ca. eineinhalb Jahre nach den ursprünglichen Messungen nochmals gemessen. Die erneut gemessenen Spektren wurden dann mit der ursprünglichen Konfiguration, dem ursprüng-

lich ermittelten optimalen Faktortripel, bestimmt. Die Untersuchungen wurden für alle fünf Faktorräume aus Kapitel 7.1 wiederholt. Die dabei ermittelten Ergebnisse sind in Tabelle 7.8 für Kunststoff 2 und in Tabelle 7.10 für Kunststoff 13 dargestellt. Die Ergebnisse der ursprünglichen Untersuchungen sind zum Vergleich für Kunststoff 2 in Tabelle 7.9 und für Kunststoff 13 in Tabelle 7.11 zusammengefaßt.

Es ergibt sich dabei sowohl für Kunststoff 2 als auch für Kunststoff 13 das gleiche Bild: Die einzelnen Eigen- und Fremddistanzen ändern sich nur wenig. Von der Größenordnung bleiben die Werte gleich. Die größte Veränderung der Trennschärfe ergibt sich für Kunststoff 2 in dem Faktorraum aus fünf Kunststoffen: Die Eigendistanz sinkt von ursprünglichen 7,8 auf 5,7 und die Gegen-  
distanz zu Kunststoff 12 steigt von ursprünglichen 37,7 auf 118,5. Dadurch verbessert sich das Ergebnis insgesamt leicht, der ANSTAIR-Wert steigt von ursprünglichen 1,100 auf 1,130.

Ein Vergleich aller ursprünglich - und erneut ermittelten ANSTAIR-Werte erlauben Tabelle 7.5 für Kunststoff 2 und Tabelle 7.6 für Kunststoff 13. Es wird deutlich, daß die Trennschärfe sich nur leicht über der Zeit verändert. Das angewendete Verfahren ist somit vergleichsweise unempfindlich gegen leichte, für die Erkennung irrelevante Veränderungen in den Spektren.

Faktorräume	Alle	Alle ohne Kunststoffe	15 Kunststoffe	10 Kunststoffe	5 Kunststoffe
Zu erkennende Stoffe	2	2	2	2	2
ANSTAIR, alt	1,190	1,190	1,190	1,120	1,100
ANSTAIR, neu	1,190	1,200	1,200	1,120	1,130

**Tabelle 7.5 Vergleich der ANSTAIR-Werte bei der Bestimmung von Kunststoff 2 anhand von älteren Spektren und anhand von eineinhalb Jahre danach erneut gemessenen.**

Faktorräume	Alle	Alle ohne Kunst-stoffe	15 Kunst-stoffe	10 Kunst-stoffe	5 Kunst-stoffe
Zu erkennende Stoffe	13	13	13	13	13
ANSTAIR, alt	1,200	1,200	1,190	1,110	1,110
ANSTAIR, neu	1,190	1,200	1,190	1,130	1,110

**Tabelle 7.6 Vergleich der ANSTAIR-Werte bei der Bestimmung von Kunststoff 13 anhand von älteren Spektren und anhand von eineinhalb Jahre danach erneut gemessenen.**

Der Eindruck, daß die Faktorräume aus wenigen Stoffen dabei etwas empfindlicher sind, wird durch die Ergebnisse in Tabelle 7.7 bestätigt. Sie zeigt die durchschnittliche prozentuale Veränderung der Distanzen für die fünf Faktorräume: Sowohl bei der Bestimmung von Kunststoff 2 als auch bei der Bestimmung von Kunststoff 13 ergeben sich für die Faktorräume aus allen Stoffen deutlich niedrigere Veränderungen als für die Faktorräume aus fünf und zehn Kunststoffen. Dies macht wiederum deutlich, daß der Ansatz, möglichst viele Stoffe für die Errechnung des universalen Faktorraums zu verwenden, richtig ist. Die Bestimmung wird durch diese Vorgehensweise robuster gegen irrelevante Veränderungen in den Spektren.

Faktorräume	Alle	Alle ohne Kunst-stoffe	15 Kunst-stoffe	10 Kunst-stoffe	5 Kunst-stoffe
Kunststoff2	9,19%	10,93%	16,14%	13,18%	20,86%
Kunststoff13	13,09%	14,21%	12,33%	15,54%	29,94%

**Tabelle 7.7 Durchschnittliche prozentuale Veränderung der Distanzen von den ursprünglichen Werten zu den erneut ermittelten.**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Faktorräume		Alle Stoffe	Alle ohne Kunststoffe	15 Kunststoffe	10 Kunststoffe	5 Kunststoffe
Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe				
		2	2	2	2	2
PA6	1	1564,4	1391,8	3340,4	78,1	114,3
PP	2	2,9	5,1	3,0	3,9	5,7
(HD)PE	3	33425,2	8558,5	3307,4	119562,9	75683,9
PET 9921 B	4	536,5	3299,3	2865,0	205,6	10688,1
PA	5	1438,9	1267,0	2504,9	238,0	4320,2
PS	6	2091,4	5782,6	7013,4	1129,8	5428,9
PMMA	7	2234,8	5549,4	763,9	2572,6	9154,6
LF-Fraktion	8	543,3	457,4	1838,3	194,5	794,7
Polyolefine	9	95,2	166,3	419,0	114,1	123,0
PVC	10	468,1	623,6	304,4	225,7	57,3
PC	11	1194,5	3949,3	2701,0	548,5	1282,5
POM	12	2089,5	8368,9	841,5	906,7	118,5
PBT	13	510,3	2941,7	321,7	166,9	1997,3
PC/ABS-Blend	14	422,8	1251,2	8473,2	1626,0	39109,2
ABS	15	1823,7	3361,7	6834,8	3689,4	15220,5
ANSEL		3,06E+06	3,14E+06	3,20E+06	1,78E+06	1,83E+06
ANSTAIR		1,190	1,200	1,200	1,120	1,130

**Tabelle 7.8** Bestimmung von Kunststoff 2 in verschiedenen Faktorräumen anhand von Spektren, die eineinhalb Jahre nach der ersten Messung aufgenommen wurden.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Faktorräume:		Alle Stoffe	Alle ohne Kunststoffe	15 Kunststoffe	10 Kunststoffe	5 Kunststoffe
Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe				
		2	2	2	2	2
PA6	1	1465,3	1467,8	2795,5	93,9	80,3
PP	2	3,3	5,2	3,6	4,3	7,8
(HD)PE	3	30896,0	7703,5	3089,0	114991,2	73739,2
PET 9921 B	4	549,7	3635,8	2343,5	221,2	9973,8
PA	5	1294,6	1294,2	2227,9	224,4	3808,4
PS	6	1603,4	6997,9	5437,5	1032,0	4850,8
PMMA	7	2080,2	5959,6	623,3	2680,2	8130,6
LF-Fraktion	8	503,3	434,5	1658,5	157,8	685,0
Polyolefine	9	91,4	154,6	365,1	92,9	107,0
PVC	10	454,8	476,3	257,9	142,3	70,3
PC	11	1022,1	4540,7	2370,3	747,3	1527,9
POM	12	1984,6	9444,1	975,6	858,1	37,7
PBT	13	524,1	3331,9	246,7	171,2	1799,9
PC/ABS-Blend	14	411,3	1434,8	7338,9	1543,0	35442,1
ABS	15	1435,3	4054,9	6010,0	3351,8	13562,1
ANSEL		3,00E+06	3,09E+06	3,04E+06	1,67E+06	9,06E+05
ANSTAIR		1,190	1,190	1,190	1,120	1,100

**Tabelle 7.9 Bestimmung von Kunststoff 2 in verschiedenen Faktorräumen anhand von Spektren, die ursprünglich gemessen wurden.**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Faktorräume:		Alle Stoffe	Alle ohne Kunststoffe	15 Kunststoffe	10 Kunststoffe	5 Kunststoffe
Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe				
		13	13	13	13	13
PA6	1	18868,2	27167,7	16157,1	1222,7	235,3
PP	2	28476,0	14042,4	2523,1	541,7	209,6
(HD)PE	3	18578,6	15313,2	45336,9	40060,2	89322,5
PET 9921 B	4	77,3	250,5	88,4	75,7	907,1
PA	5	22053,3	14990,9	846,8	150,6	47,0
PS	6	7896,4	1223,9	76449,4	151,3	190,8
PMMA	7	4025,7	3617,9	599,0	2798,9	127,1
LF-Fraktion	8	6500,2	2099,0	945,9	67,4	26,8
Polyolefine	9	2991,7	4803,4	1512,9	72,0	34,2
PVC	10	14447,0	13727,7	5844,4	3178,7	166,9
PC	11	3424,0	915,1	1351,1	7545,7	2341,2
POM	12	19220,3	41540,0	41342,4	1189,0	2299,7
PBT	13	4,7	5,2	6,1	1,7	1,8
PC/ABS-Blend	14	4688,6	609,7	8579,7	106,6	1182,1
ABS	15	18647,8	3847,8	7018,6	3642,6	423,4
ANSEL		3,06E+06	3,31E+06	2,92E+06	1,91E+06	1,37E+06
ANSTAIR		1,190	1,200	1,190	1,130	1,110

Tabelle 7.10

**Bestimmung von Kunststoff 13 in verschiedenen Faktorräumen anhand von Spektren, die eineinhalb Jahre nach der ersten Messung aufgenommen wurden.**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Faktorräume:		Alle Stoffe	Alle ohne Kunststoffe	15 Kunststoffe	10 Kunststoffe	5 Kunststoffe
Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe				
		13	13	13	13	13
PA6	1	17394,0	24974,0	14802,0	1097,3	223,6
PP	2	26225,4	13016,1	2320,9	478,5	188,1
(HD)PE	3	15500,0	13176,7	42847,1	49045,2	97270,0
PET 9921 B	4	54,9	317,5	62,2	82,2	902,0
PA	5	20075,1	13747,6	794,6	129,6	147,0
PS	6	7934,3	1069,3	69089,2	134,7	208,8
PMMA	7	3854,6	3355,8	532,7	2647,1	142,8
LF-Fraktion	8	5908,3	1902,4	884,0	57,4	89,1
Polyolefine	9	2713,9	4300,6	1392,6	65,9	45,2
PVC	10	13266,1	13140,6	5366,7	2795,7	149,0
PC	11	3328,4	863,4	1306,6	6812,7	1936,0
POM	12	18538,8	39587,0	37661,7	1175,3	2157,4
PBT	13	2,6	2,4	3,9	4,1	2,8
PC/ABS-Blend	14	4149,3	546,1	7809,3	110,8	1609,8
ABS	15	16565,7	3564,5	6435,5	3235,7	743,8
ANSEL		3,13E+06	3,45E+06	2,99E+06	1,48E+06	1,52E+06
ANSTAIR		1,200	1,200	1,190	1,110	1,110

**Tabelle 7.11 Bestimmung von Kunststoff 13 in verschiedenen Faktorräumen anhand von Spektren, die ursprünglich gemessen wurden.**

## 7.6 Erprobung von IntellIdent

Wie in den Kapiteln 7.1 bis 7.4 gezeigt, arbeitet IntellIdent um so effektiver, je größer die Anzahl der Stoffe ist, mit denen der zugrundeliegende Faktorraum berechnet wird. Im folgenden wird für die Untersuchung von IntellIdent daher



nur noch der Faktorraum aus allen zur Verfügung stehenden Stoffen als universaler Faktorraum verwendet. Mit dieser Konfiguration werden verschiedene Bestimmungsaufgaben vorgenommen. Bis auf die Untersuchungen mit Papiersorten (vgl. Kapitel 7.6.4) und mit dieserverunreinigtem Sand (vgl. Kapitel 7.6.5) war keiner der untersuchten Stoffe auch für die Bildung des Faktorraums verwendet worden. Es handelt sich also um Stoffe, die dem System vorher nicht 'bekannt' waren.

### **7.6.1 Bestimmung von vier Kunststoffen**

Im vorliegenden Kapitel wird dargestellt, wie gut vier Kunststoffe, die nicht für die Bildung des universalen Faktorraums herangezogen wurden und die sich äußerlich sehr ähnlich sind, von IntellIdent bestimmt werden können. Bei den vier Kunststoffen handelt es sich um mit 20 Gew.% Talk versetztes Polypropylen (PP), um Polyethylen High Density (PE-HD), um reines Polypropylen und um Polyvinylchlorid (PVC), die alle milchig bis weiß sind. Interessant an dieser Auswahl ist neben der äußeren Ähnlichkeit der ausgewählten Kunststoffe, daß anhand ihrer untersucht werden konnte, inwiefern IntellIdent PP und PE gegeneinander bestimmen kann, zwei in ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften sehr ähnliche Kunststoffe. Des weiteren war von besonderem Interesse, inwiefern sich reines PP von zu 20 Gew.% mit Talk versetztem PP, mit Hilfe von IntellIdent unterscheiden läßt.

Tabelle 7.12 zeigt die Ergebnisse der Untersuchung: Die Bestimmungen aller vier Kunststoffe erhalten ANSTAIR-Werte von 1,2 und können damit als sehr trennscharf bezeichnet werden. Die Eigendistanzen der einzelnen Stoffe unterscheiden sich dabei deutlich. Während Test-Kunststoff 1 sich mit 6,1 sehr nahe an dem Kalibrations-Kunststoff 1 gruppiert, liegt Test-Kunststoff 2 mit 131,0 vergleichsweise weit entfernt von dem Kalibrations-Kunststoff 2. Da aber auch für Kunststoff 2 der nächste Gegenstoff mit 6072,4 in ausreichender Entfernung liegt, kann seine Bestimmung ebenfalls als sehr sicher gelten.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR					
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe			
		1	2	3	4
PP 20% Talk	1	6,1	16577,0	35850,5	23435,9
PE-HD	2	51865,5	131,0	77175,8	428338,0
PP	3	22525,7	6072,4	33,7	34326,1
PVC	4	94986,7	222371,7	219795,9	61,1
ANSEL		1,57E+07	1,38E+07	1,57E+07	1,55E+07
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200

**Tabelle 7.12 Bestimmung von vier Kunststoffen mit Hilfe von Intellident**

### 7.6.2 Bestimmung unterschiedlicher Handelstypen einer Kunststoffsorte

Kunststoffe der gleichen Sorte unterscheiden sich oft in ihrer spezifischen Zusammensetzung. Durch Beimengungen werden die Eigenschaften der Kunststoffe wie beispielsweise Einfärbung, Temperaturbeständigkeit oder Molekulargewicht beeinflusst. Vor diesem Hintergrund wurde versucht, fünf Polypropylene unterschiedlicher Herkunft (vgl. Tabelle 7.13) und vier Polyvinylchloride unterschiedlicher Herkunft (vgl. Tabelle 7.14) zu bestimmen.

PP	Bezeichnung	Material	Farbe	Oberfläche	Firma
PP1	-	PP	hellgrau	glänzend	-
PP2	-	PP recycelt mit PET	gelbgrau	glänzend	-
PP3	Novolen 1102K +1.5% Nukleierungsmittel	PP	weiß	halbtransparent	BASF
PP4	PP-DWST	PP	milchig	halbtransparent	SIMONA
PP5	PP-DWU	PP	beige	glänzend	SIMONA

**Tabelle 7.13 Fünf verschiedene Proben des Kunststoffes Polypropylen**

PVC	Bezeichnung	Material	Farbe	Oberfläche	Firma
PVC1	-	PVC-H	dkl grau	halbmatt	-
PVC2	-	PVC hart	mittelgrau	halbmatt	SIMONA
PVC3	PVC-CAW	PVC	grau	glänzend	SIMONA
PVC4	PVC-MZ	PVC	weiß	glänzend	SIMONA

**Tabelle 7.14 Fünf verschiedene Proben des Kunststoffes Polyvinylchlorid**

Die Ergebnisse der Untersuchungen zeigen Tabelle 7.15 für die Polypropylene und Tabelle 7.16 für die Polyvinylchloride: Alle Kunststoffe wurden sehr trennscharf bestimmt, ihre Bestimmungen werden jeweils mit einem ANSTAIR-Wert von 1,2 bewertet. Für die trennscharfe Bestimmung dürften zumindest zum Teil die unterschiedlichen Farbstoffe verantwortlich sein. Aber auch die Kunststoffe mit ähnlicher Farbe wie PP3 und PP4 oder PVC2 und PVC3 werden sehr trennscharf voneinander unterschieden: Test-Kunststoff PP3 hat eine Eigendistanz von 36,3 und eine Fremddistanz zu dem Kalibrations-Kunststoff PP4 von 67365,1; Test-Kunststoff PVC2 hat eine Eigendistanz von 24,5 und eine Fremddistanz zu dem Kalibrations-Kunststoff PVC3 von 14452,7.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR					
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe				
	PP1	PP2	PP3	PP4	PP5
PP1	11,1	32250,7	144011,6	216232,2	3493,9
PP2	1648,1	6,7	43029,1	27913,6	9086,0
PP3	5368,3	8209,8	36,3	27577,6	5064,3
PP4	16326,5	21116,3	67365,1	2,7	36176,6
PP5	1784,2	12049,7	44582,8	79861,7	5,3
ANSEL	1,15E+07	1,20E+07	1,20E+07	1,21E+07	1,20E+07
ANSTAIR	1,200	1,200	1,200	1,200	1,200

**Tabelle 7.15 Bestimmung von fünf unterschiedlichen Polypropylenen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe			
	PVC1	PVC2	PVC3	PVC4
PVC1	4,9	4995,3	54687,0	391710,9
PVC2	7897,7	24,5	31532,0	401025,5
PVC3	32727,6	14452,7	11,2	101771,1
PVC4	77289,9	61084,6	30531,9	15,1
ANSEL	1,57E+07	1,53E+07	1,57E+07	1,58E+07
ANSTAIR	1,200	1,200	1,200	1,200

**Tabelle 7.16 Bestimmung von vier unterschiedlichen Polyvinylchloriden**

### 7.6.3 Bestimmung eines Pulvergemisches aus Polypropylen und Polystyrol mit unterschiedlichen Zusammensetzungen

Die in diesem Kapitel beschriebene Untersuchung dient dazu, die Genauigkeit des Auswertesystem IntellIdent besser abschätzen zu können. IntellIdent ist darauf ausgelegt, Stoffe voneinander zu unterscheiden. Es wurde untersucht, inwiefern ein Gemisch aus zwei gleichbleibenden Stoffen mit unterschiedlichen Mischungsverhältnissen voneinander unterschieden werden können. Hierfür wurde ein Pulvergemisch aus Polypropylen (PP) und Polystyrol (PS) in Mischungsverhältnissen von 0% PS bis 100% PS verwendet. Das Mischungsverhältnis wurde dabei in Schritten von jeweils 10% variiert. Die Ergebnisse der Untersuchung findet sich in Tabelle 7.17a + b. Bis auf die Ergebnisse für die Mischungsverhältnisse 10% PS und 60 % PS werden die zu erkennenden Mischungsverhältnisse dem entsprechenden Mischungsverhältnis mit der geringsten Mahalanobis-Distanz (MD) zugeordnet. Jedoch ist der Großteil der Zuordnungen dahingehend unscharf, daß die Mischungsverhältnisse, die in unmittelbarer Nachbarschaft zu den betrachteten liegen, ebenfalls eine niedrige MD besitzen. Dies spiegelt sich in den niedrigen ANSTAIR-Werten wieder. Für das zu erkennende Mischungsverhältnis von 20% PS ergeben sich beispielsweise folgende Werte (vgl. die dritte Wertespalte in Tabelle 7.17a): Dem Mischungsverhältnis 20% PS wird eine Eigendistanz von 3,8 zugeordnet, den Mischungsverhältnissen 10 % PS und 30 % PS die Fremddistanzen 9,1 bzw. 8,4. Darüber hinaus sind die Fremddistanzen zu den übrigen Mischungsverhältnissen groß genug, um als trennscharf zu gelten. Ähnlich verhält es sich mit den anderen zu erkennenden Mischungsverhältnissen. Die zu bestimmenden Mischungsverhältnisse verhalten sich tendenziell wie Senken, in deren nahen Umgebung die Fremddistanzen ähnlich klein sind wie die jeweiligen Eigendistanzen, und in deren weiterer Umgebung die Fremddistanzen gegenüber den jeweiligen Eigendistanzen groß werden.

IntellIdent reagiert demnach prinzipiell auch auf quantitative Veränderung eines Stoffgemisches, die quantitative Veränderung muß jedoch ausreichend groß sein. Letzteres läßt sich mit den Ergebnissen der Bestimmung des PP/PS-Pulvergemisches mit jeweils um 20 Prozentpunkte variierenden Mischungsverhältnissen in Tabelle 7.18 bekräftigen. Dabei werden ein Mischungsverhältnis (60% PS) schlecht eines (80% PS) mäßig und die übrigen drei sehr gut bestimmt.

Hierbei sei noch einmal darauf hingewiesen, daß IntellIdent ein ausschließlich qualitatives Auswertesystem ist, daß es erlauben soll, ohne Vorkenntnisse unterschiedliche Stoffe gegeneinander zu bestimmen. Es hat dabei den Anspruch, universal einsetzbar zu sein. Die in diesem Kapitel vorgestellte Unter-

suchung zeigt, daß IntellIdent auch quantitative Aufgaben, die als anspruchsvolle, spezialisierte qualitative Aufgaben bezeichnet werden können, bis zu einem gewissen Grad lösen kann.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR							
Kalibrationsstoffe	Zu erkennende Stoffe						
	0% PS	10% PS	20% PS	30% PS	40% PS	50% PS	60% PS
0% PS	5,7	56,1	99,8	250,9	355,5	506,2	555,9
10% PS	13,0	5,9	9,1	35,0	60,1	90,1	106,0
20% PS	21,4	5,8	3,8	14,8	29,8	34,8	47,9
30% PS	37,8	15,5	8,4	3,4	8,7	22,8	21,9
40% PS	43,1	29,5	24,3	7,5	5,0	6,9	6,2
50% PS	112,3	85,0	75,5	28,7	18,2	4,7	4,9
60% PS	197,3	183,4	182,3	64,0	39,0	11,1	8,3
70% PS	400,6	307,5	259,7	93,5	58,5	44,8	23,4
80% PS	102,6	98,0	95,2	45,2	31,4	28,9	18,2
90% PS	312,0	291,5	272,8	147,2	107,9	94,5	68,3
100% PS	3475,3	3292,4	3090,9	1821,1	1404,7	1299,5	996,4
ANSEL	2,62E+04	5,35E+02	1,29E+04	1,30E+04	3,15E+03	1,04E+03	2,01E+02
ANSTAIR	0,300	0,020	0,300	0,300	0,100	0,050	0,010

**Tabelle 7.17a Bestimmung eines PP/PS-Pulvergemisches mit Mischungsverhältnissen, die in Schritten von jeweils 10% variieren.**

<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>				
<b>Kalibrationsstoffe</b>	<b>Zu erkennende Stoffe</b>			
	70% PS	80% PS	90% PS	100% PS
0% PS	558,6	653,6	1110,4	2568,7
10% PS	114,9	151,9	282,0	644,4
20% PS	53,6	91,4	191,4	404,7
30% PS	21,5	31,2	82,9	215,5
40% PS	7,7	10,7	28,5	95,5
50% PS	9,7	20,6	41,3	119,8
60% PS	11,6	45,5	97,6	167,4
70% PS	5,1	15,1	89,4	265,6
80% PS	6,8	2,4	10,3	24,5
90% PS	37,4	12,3	3,1	11,1
100% PS	627,1	276,6	72,8	5,6
ANSEL	3,97E+02	1,32E+05	1,21E+05	1,65E+04
ANSTAIR	0,010	0,500	0,500	0,300

**Tabelle 7.17b Bestimmung eines PP/PS-Pulvergemisches mit Mischungsverhältnissen, die in Schritten von jeweils 10% variieren.**



Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe	Zu erkennende Stoffe					
	0% PS	20% PS	40% PS	60% PS	80% PS	100% PS
0% PS	5,4	443,8	1298,7	1562,0	2212,3	8972,1
20% PS	25,6	7,3	47,5	60,7	93,2	407,9
40% PS	91,5	31,5	8,5	12,1	27,9	352,2
60% PS	185,7	170,4	37,6	7,0	16,4	128,4
80% PS	384,6	330,6	99,2	36,3	4,5	38,9
100% PS	576,8	490,9	193,0	105,7	36,3	2,0
ANSEL	7,99E+05	8,38E+05	3,17E+05	3,68E+03	1,50E+05	3,80E+06
ANSTAIR	1,060	1,100	1,000	0,100	0,500	1,200

**Tabelle 7.18** Bestimmung eines PP/PS-Pulvergemisches mit Mischungsverhältnissen, die in Schritten von jeweils 20% variieren.

### 7.6.4 Bestimmung von drei Papiersorten

In diesem Kapitel wird die Bestimmung von drei verschiedenen Papiersorten mit Hilfe von IntellIdent beschrieben. Als Proben ausgewählt wurden zum einen das Papier der Frankfurter Allgemeinen Zeitung (FAZ), wobei nur an unbedruckten Stellen gemessen wurde. Zum anderen wurde ein handelsüblicher Bogen Umweltschutzpapier sowie als drittes das Papier der VDI-Nachrichten, wiederum nur an unbedruckten Stellen, gemessen. Das Papier der FAZ sowie der Bogen Umweltschutzpapier waren auch für die Erstellung des universalen Faktorraums verwendet worden.

Tabelle 7.19 zeigt die Ergebnisse der Untersuchung. Alle drei Papiersorten können trennscharf bestimmt werden. Der Bogen Umweltschutzpapier hat dabei eine recht große Eigendistanz von 89,6, liegt aber mit Fremddistanzen von 569,8 zu dem Papier der VDI-Nachrichten und mit 808,5 zu dem Papier der FAZ weit genug von diesen entfernt, um als sicher bestimmt zu gelten. Auch das Papier der VDI-Nachrichten, das nicht im universalen Faktorraum enthalten ist, läßt sich mit einer Eigendistanz von 51,3 und Fremddistanzen von 160,5 und 436,5 sicher bestimmen.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		1	2	3
FAZ	1	12,8	808,5	160,5
Umweltpapier	2	1121,2	89,6	436,5
VDI	3	274,4	569,8	51,3
ANSEL		1,09E+07	3,62E+06	2,32E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,000

**Tabelle 7.19 Bestimmung von drei Papiersorten mit Hilfe von IntellIdent**

### 7.6.5 Bestimmung von mit Diesel verunreinigtem Sand

Nachfolgend beschriebene Untersuchung sollte überprüfen, ob mit IntellIdent das Vorhandensein einer Dieselverunreinigung in gewaschenem Sand bestimmt werden kann. Hierfür wurde lufttrockener gewaschener Sand mit 4,6

Gew.% Diesel verunreinigt. Diese Versuchsanordnung soll eine reale Bodenkontamination im Ansatz simulieren. In der Regel besitzt Boden in unseren Breiten eine Grundfeuchte. Daher wurde die Dieselkontamination ebenfalls in Sand bestimmt, der vorher mit 4,1 Gew.% Wasser angefeuchtet worden war.

<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>			
<b>Kalibrationsstoffe</b>		<b>zu erkennende Stoffe</b>	
		1	2
Lufttrockener Sand	1	23,7	343,7
Sand, mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt	2	193,4	6,8
ANSEL		2,30E+06	1,96E+07
ANSTAIR		1,160	1,200

**Tabelle 7.20 Bestimmung von mit Diesel verunreinigtem trockenem Sand**

<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>			
<b>Kalibrationsstoffe</b>		<b>zu erkennende Stoffe</b>	
		1	2
Feuchter Sand (4,1Gew.% Wasser auf das Gewicht des Sands bezogen)	1	3,9	664,1
Feuchter Sand (4,1Gew.% Wasser) mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt	2	58,9	14,2
ANSEL		1,18E+06	3,15E+07
ANSTAIR		1,100	1,200

**Tabelle 7.21 Bestimmung von mit Diesel verunreinigtem feuchtem Sand**

Wie aus Tabelle 7.20 und Tabelle 7.21 hervorgeht, wird sowohl in trockenem als auch in feuchtem Sand die Dieselkontamination verlässlich bestimmt. Es läßt sich dabei kein signifikanter Unterschied in der Trennschärfe erkennen zwischen dem trockenen und dem feuchten Sand.

Vor dem Hintergrund dieser Ergebnisse wurde des weiteren untersucht, ob IntelliIdent auch in trockenem und feuchtem Sand gleichzeitig die Dieselkontamination bestimmen kann. Dazu wurden der trockene und der feuchte Sand ohne die Dieserverunreinigung in einer Gruppe zusammengefaßt, und der trockene und der feuchte Sand mit der Dieserverunreinigung in einer anderen. Mit diesen beiden Gruppen wurde IntelliIdent kalibriert. Die Ergebnisse bei der anschließenden Bestimmung zeigt Tabelle 7.22: Unabhängig davon, ob der zu bestimmende Sand trocken oder feucht war, wird die Dieselkontamination sehr trennscharf erkannt.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe			
	Lufttrockener Sand	Feuchter Sand: 4,1Gew.% Wasser auf das Gewicht des Sands bezogen	Sand, mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt	Feuchter Sand (4,1Gew.% Wasser) mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt
Ohne Dieserverunreinigung	11,1	4,5	477,2	231,2
Mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt	158,7	55,7	5,2	4,3
ANSEL	3,82E+06	8,91E+05	3,30E+07	1,21E+07
ANSTAIR	1,200	1,100	1,200	1,200

**Tabelle 7.22 Bestimmung einer Dieserverunreinigung in trockenem und feuchtem Sand**

Um die Flexibilität von IntelliIdent noch genauer zu überprüfen, wurden die Kalibrationsstoffe aus Tabelle 7.22 anders aufgeteilt: Diesmal wurden der mit Diesel verunreinigte und der nicht verunreinigte trockene Sand in einer Gruppe zusammengefaßt und der mit Diesel verunreinigte und der nicht verunreinigte feuchte Sand in einer anderen. IntelliIdent wurde mit diesen beiden Gruppen kalibriert, also daraufhin, das Wasser in den Proben unabhängig von der Dieselverunreinigung zu detektieren.

Tabelle 7.23 zeigt die Ergebnisse dieser Auswertung: mit der Ausnahme bei dem nicht verunreinigten trockenen Sand, wurde von IntelliIdent trennscharf erkannt, ob in der zu bestimmenden Probe Wasser enthalten war oder nicht, unabhängig davon, ob zusätzlich Diesel vorhanden war.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe			
	Lufttrockener Sand	Sand, mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt	Feuchter Sand 4,1Gew.% Wasser auf das Gewicht des Sands bezogen	Feuchter Sand (4,1Gew.% Wasser) mit 4,6 Gew.% Diesel verunreinigt
Trockener Sand	7,0	6,3	581,7	181,4
Feuchter Sand	31,6	160,2	4,7	5,6
ANSEL	5,50E+04	5,84E+06	3,66E+07	7,62E+06
ANSTAIR	0,400	1,200	1,200	1,200

**Tabelle 7.23 Bestimmung des Wassers in dieselverunreinigtem und nicht verunreinigtem Sand**

Die Trennschärfe der Bestimmung des trockenen Sands ohne Dieselverunreinigung wird mit einem ANSTAIR-Wert von 0,4 bewertet. Dieser suggeriert eine relativ schlechte Trennschärfe. Mit einer Eigendistanz von 7,0 und einer Fremddistanz von 31,6 erscheint die Bestimmung dennoch relativ sicher. Dies wird darauf zurückgeführt, daß die Andrassy-Selektivität ihr Verhalten mit der

Anzahl der zu bestimmenden Stoffe verändert. Die Andrassy-Selektivität stellt demnach zunächst einmal einen Bewertungsmaßstab innerhalb eines Anwendungsfalls dar. Verschiedene Anwendungsfälle können nur bedingt verglichen werden.

Unabhängig davon läßt sich für dieses Kapitel das folgende Ergebnis festhalten: In dem Stoffgemisch aus Wasser und Diesel, konnte sich IntellIdent sowohl auf das Erkennen von Wasser als auch auf das Erkennen von Diesel, und zwar unabhängig von dem Vorhandensein der jeweils anderen Komponente, eingerichtet. Es ist somit möglich, Komponenten unabhängig von ihrer Umgebung zu erkennen.

### 7.6.6 Bestimmung von fünf Hölzern

In vorliegendem Kapitel wird die Bestimmung von fünf Hölzern mit Hilfe von IntellIdent beschrieben. Bei dieser Untersuchung wurde luftgetrocknetes Holz aus einer Schreinerei vermessen. Es handelte sich hierbei um Ebenholz sowie das Holz von Eiche, Esche, Fichte und Wenge. Wie Tabelle 7.24 zeigt, waren alle Bestimmungen, bis auf die Bestimmung der Esche, mit ANSTAIR-Werten größer 1,120 sehr trennscharf. Die Bestimmung des Eschenholzes war mit einem ANSTAIR-Wert von 0,4 nur mäßig trennscharf. Es wurde dabei eine Eigendistanz der Esche von 12,6 gegenüber der kleinsten Fremddistanz zu dem Holz der Eiche von 31,6 ermittelt.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR					
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe				
	Ebenholz	Eiche	Esche	Fichte	Wenge
Ebenholz	3,4	575,3	442,7	447,7	1057,9
Eiche	20263,4	4,6	87,9	396,9	3220,1
Esche	53843,5	236,3	12,6	202,3	6068,5
Fichte	53759,2	95,4	31,6	6,6	2874,8
Wenge	3640,4	35,2	56,6	113,0	4,2
ANSEL	1,21E+07	1,62E+06	3,64E+04	3,86E+06	1,18E+07
ANSTAIR	1,200	1,120	0,400	1,200	1,200

**Tabelle 7.24 Bestimmung von fünf Hölzern mit Hilfe von IntellIdent**

### 7.6.7 Bestimmung von drei Pflanzen anhand ihrer Blätter

Diese Untersuchung sollte überprüfen, inwiefern drei Pflanzen anhand ihrer Blätter bestimmt werden können. Bei den untersuchten Pflanzen handelte es sich um einen Ficus Benjaminicus, eine Zimmerpalme und eine Schefflera.

Tabelle 7.25 zeigt die Ergebnisse der Untersuchung: Während der Ficus und die Palme gut bestimmt werden können, gelingt es IntellIdent nicht, die Schefflera ausreichend treffsicher zu bestimmen. Es wurde vermutet, daß IntellIdent, ähnlich wie bei der Bestimmung von fünf Kunststoffen mit dem Faktorraum aus allen Stoffen (vgl. Kap. 7.4), nicht die bestmögliche Faktorkonfiguration verwendet. Deshalb wurde die Bestimmung der drei Pflanzen nochmals mit den Faktorkonfigurationen durchgeführt, die bei der Faktorauswahl (vgl. 6.3.3) als zweit-, dritt- und viertbeste Faktorkonfiguration errechnet worden waren. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7., Tabelle 7. bzw. Tabelle 7. dargestellt: Während die 'zweitbeste' Faktorkonfiguration mit ANSTAIR-Werten von 1,20, 1,20 und 0,48 eine leichte Verbesserung gegenüber den Werten mit der 'besten' Faktorkonfiguration von 1,00, 1,20, und 0,09 darstellt, schneidet die drittbeste Faktorkonfiguration deutlich schlechter ab. Sie hat ANSTAIR-Werte von 0,10, 1,20 und 0,05 – zwei Pflanzen werden nicht erkannt. Die viertbeste ist allerdings besser geeignet als alle anderen. Mit ihr werden alle drei Pflanzen sehr gut bestimmt. Es ergeben sich für sie ANSTAIR-Werte von 1,20, 1,00 und 1,16. Dieser Umstand ist darin begründet, daß die optimale Faktorkonfiguration von IntellIdent anhand von Kalibrationsspektren errechnet wird. Da diese jeweils nur einen geringen Ausschnitt eines Stoffs erfassen, kann es vorkommen, daß die Testspektren, die IntellIdent bestimmen soll, sich von den Kalibrationsspektren zum Teil recht stark unterscheiden. Aus diesem Grund ist es möglich, daß so wie in diesem Fall in der Anwendung eine andere als die von IntellIdent ermittelte Faktorkonfiguration die optimale ist.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR			
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe		
	Ficus	Palme	Schefflera
Ficus Benjaminicus	32,2	932,0	106,7
Zimmerpalme	800,2	20,8	819,0
Schefflera	101,1	154,6	80,5
ANSEL	2,92E+05	3,57E+06	1,67E+03
ANSTAIR	1,000	1,200	0,090

**Tabelle 7.25 Bestimmung von drei Pflanzen mit der von Intellident als beste ermittelten Faktorkonfiguration**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR			
Kalibrationsstoffe	zu erkennende Stoffe		
	Ficus	Palme	Schefflera
Ficus Benjaminicus	4,5	311,3	115,7
Zimmerpalme	449,5	12,0	146,1
Schefflera	144,1	294,4	34,1
ANSEL	8,87E+06	6,98E+06	7,57E+04
ANSTAIR	1,200	1,200	0,480

**Tabelle 7.26 Bestimmung von drei Pflanzen mit der von Intellident als zweitbeste ermittelten Faktorkonfiguration**



<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>			
<b>Kalibrationsstoffe</b>	<b>zu erkennende Stoffe</b>		
	Ficus	Palme	Schefflera
Ficus Benjaminicus	36,7	844,6	62,3
Zimmerpalme	1170,0	10,9	697,3
Schefflera	57,9	153,5	63,9
ANSEL	4,31E+03	7,11E+06	1,00E+03
ANSTAIR	0,100	1,200	0,050

**Tabelle 7.27 Bestimmung von drei Pflanzen mit der von Intellident als drittbeste ermittelten Faktorkonfiguration**

<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärpen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>			
<b>Kalibrationsstoffe</b>	<b>zu erkennende Stoffe</b>		
	Ficus	Palme	Schefflera
Ficus Benjaminicus	4,4	662,0	132,4
Zimmerpalme	419,3	22,8	173,1
Schefflera	156,6	80,5	8,6
ANSEL	8,68E+06	4,61E+05	2,30E+06
ANSTAIR	1,200	1,000	1,160

**Tabelle 7.28 Bestimmung von drei Pflanzen mit der von Intellident als viertbeste ermittelten Faktorkonfiguration**

## **7.7 Untersuchung der für die Darstellung eines Stoffs verwendeten Anzahl an Spektren**

Im Laufe der Untersuchungen hat sich herausgestellt, daß die Anzahl der Spektren, die jeweils für die Darstellung eines Kalibrationsstoffs bzw. eines zu bestimmenden Stoffs verwendet wurden, einen gewissen Einfluß auf die Güte der Bestimmung hat. Ein Spektrum ist selbst schon ein Mittelwert aus 16 Einzelmessungen. Solche Mittelungen sind wichtig, um singuläre Einflüsse bei der Messung, die nicht mit den Stoffeigenschaften korrelieren, zu mindern. Ein Spektrum wird jeweils an einer Stelle eines Stoffs gemessen. Sollten sich an dieser Stelle jedoch Verschmutzungen befinden oder aber die Stoffzusammensetzung an dieser Stelle nicht charakteristisch für den Stoff sein, wird die Bestimmung des Stoffs beeinträchtigt. Es ist daher im Sinne einer möglichst trennscharfen Bestimmung sinnvoll, möglichst viele Spektren je Stoff zu messen, um einen repräsentativen Querschnitt zu erhalten. Auf der anderen Seite steigt mit der Anzahl der Spektren je Stoff auch der insgesamt benötigte Zeitaufwand. Da die Stärke von IntellIdent jedoch gerade in dem geringen zeitlichen Aufwand besteht, den seine Kalibration benötigt, ist es das Ziel, mit möglichst wenig Spektren je Stoff auszukommen.

Die Versuche aus den Kapiteln 7.1 bis 7.5 wurden mit je acht Spektren pro Kalibrationsstoff und je sieben Spektren pro zu bestimmendem Stoff durchgeführt.

Bei der Bestimmung des ersten Kunststoffstoffs aus der Untersuchung aus Kapitel 7.6.1 wurde mit jeweils fünf Spektren je Kalibrationsstoff und einer unterschiedlichen Anzahl an Spektren des zu bestimmenden ersten Test-Kunststoffstoffs gearbeitet und zwar mit drei, vier, fünf, sieben und zehn Spektren. Wie Tabelle 7.29 zeigt, hatte dies jedoch keinen Einfluß auf die Trennschärfe der Bestimmung.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Anzahl der Spektren des zu erkennenden Stoffs		3	4	5	7	10
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
		1	1	1	1	1
PP 20% Talk	1	4,7	7,2	6,2	6,9	6,1
PE-HD	2	51831,3	49774,2	50579,7	51166,3	51865,5
PP	3	22326,6	21651,2	21942,6	22353,1	22525,7
PVC	4	94419,0	94816,7	94749,3	95196,4	94986,7
ANSEL		1,57E+07	1,57E+07	1,57E+07	1,57E+07	1,57E+07
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200	1,200

**Tabelle 7.29 Bestimmung von Kunststoff 1 unter Verwendung einer jeweils unterschiedlichen Anzahl an Spektren**

Ein anderes Bild ergibt sich für die Bestimmung der drei Papiersorten aus Kapitel 7.6.4: Diese Untersuchung wurde mit fünf Kalibrationsspektren und fünf Testspektren je Stoff (vgl. Tabelle 7.30), fünf Kalibrationsspektren und zehn Testspektren je Stoff (vgl. Tabelle 7.31), 20 Kalibrationsstoffen und fünf Testspektren je Stoff (vgl. Tabelle 7.32) und 20 Kalibrationsstoffen und zehn Testspektren je Stoff (vgl. Tabelle 7.33) durchgeführt. Die Verwendung von 20 Kalibrationsstoffen erwies sich dabei als robuster: es konnte trennscharf bestimmt werden, unabhängig davon, ob fünf oder zehn Testspektren je Stoff verwendet wurden. Bei Verwendung von fünf Kalibrationsspektren waren die Bestimmungsergebnisse unter Verwendung von zehn Testspektren schlechter als unter Verwendung von fünf. Da die Kombination aus 20 Kalibrationsspektren und zehn Testspektren ein gutes Ergebnis lieferte und der damit einhergehende Meßaufwand auch für die Praxis vertretbar erscheint, wurden für die Untersuchungen in Kapitel 7.6 daher jeweils 20 Kalibrationsspektren und zehn Testspektren verwendet.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		1	2	3
FAZ	1	392,9	23731,3	3674,6
Umweltpapier	2	1786,3	196,4	990,4
VDI	3	1001,6	2013,9	72,2
ANSEL		1,99E+05	9,75E+06	1,19E+07
ANSTAIR		0,980	1,200	1,200

**Tabelle 7.30** Bestimmung von drei Papiersorten unter Verwendung von jeweils fünf Kalibrations- und fünf Testspektren.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		1	2	3
FAZ	1	440,9	22573,2	3828,2
Umweltpapier	2	1772,7	150,3	943,1
VDI	3	989,9	2083,5	51,7
ANSEL		9,79E+04	1,26E+07	1,42E+07
ANSTAIR		0,500	1,200	1,200

**Tabelle 7.31** Bestimmung von drei Papiersorten unter Verwendung von jeweils fünf Kalibrations- und zehn Testspektren.

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		1	2	3
FAZ	1	11,4	781,6	158,4
Umweltpapier	2	1152,2	106,5	447,6
VDI	3	281,1	570,0	45,9
ANSEL		1,17E+07	2,40E+06	3,64E+05
ANSTAIR		1,200	1,170	1,000

**Tabelle 7.32 Bestimmung von drei Papiersorten unter Verwendung von jeweils zwanzig Kalibrations- und fünf Testspektren.**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		1	2	3
FAZ	1	12,8	808,5	160,5
Umweltpapier	2	1121,2	89,6	436,5
VDI	3	274,4	569,8	51,3
ANSEL		1,09E+07	3,62E+06	2,32E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,000

**Tabelle 7.33 Bestimmung von drei Papiersorten unter Verwendung von jeweils zwanzig Kalibrations- und zehn Testspektren.**

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß man keine konkrete Angabe darüber machen kann, wie viele Spektren je Stoff für eine trennscharfe Bestimmung notwendig sind. Teilweise wird mit fünf Kalibrationspektren und drei Testspektren schon ein sehr gutes Ergebnis erzielt, teilweise erscheint es notwendig, eine höhere Zahl vor allem an Kalibrationspektren zu verwenden.

Die Robustheit läßt sich jedoch prinzipiell mit der Anzahl an verwendeten Spektren steigern.

Darüber hinaus ist festzuhalten, daß die Anzahl der zu verwendenden Spektren natürlich mit der Inhomogenität des zu bestimmenden Stoffs steigt: wenn eine Dieserverunreinigung z.B. sowohl in trockenem als auch in feuchtem Sand bestimmt werden soll, müssen Spektren sowohl des feuchten als auch des trockenen Sands bei der Kalibration verwendet werden. Für die Bestimmung eines homogenen Stoffs läßt sich jedoch festhalten, daß vergleichsweise wenig Spektren je Stoff für eine ausreichende Trennschärfe bei der Bestimmung ausreichen.

## **7.8 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick auf weitere Forschungsschwerpunkte**

Aufgrund der in den Kapiteln 7.1 bis 7.4 beschriebenen Untersuchungen lassen sich die zu Beginn der Arbeit aufgestellten Hypothesen verifizieren: Demnach ist es möglich, organische Stoffe mit Hilfe der Faktoranalyse ihrer NIR-Spektren zu bestimmen ohne diese Stoffe selbst bei der Erstellung des der Faktoranalyse zugrunde liegenden Faktorraums zu verwenden. Dies wurde durch die Bestimmung von 15 Kunststoffen mit Hilfe von Faktorräumen, in denen die 15 Kunststoffe gar nicht oder nur teilweise enthalten waren, gezeigt. Des weiteren erwies es sich als sinnvoll, den der Faktoranalyse zugrunde liegenden Faktorraum aus möglichst vielen Stoffen zu bilden, da eine Bestimmung dann trennschärfer wird, wenn möglichst viele verschiedene Stoffe den zugrundeliegenden Faktorraum bilden.

Diese Erkenntnisse stützen die Richtigkeit der Vorgehensweise, dem Auswertesystem einen feststehenden universalen Faktorraum, der sich aus möglichst vielen organischen Stoffen konstituiert, zur Verfügung zu stellen. Mit diesem Faktorraum aus 121 Stoffen bzw. Stoffgemischen wurden nachfolgend weitere Untersuchungen durchgeführt: Unter anderem wurden verschiedene Kunststoffe bestimmt, darunter auch unterschiedliche Handelssorten einer Kunststoffsorte, die sich lediglich in ihrer spezifischen Zusammensetzung unterschieden. Weiterhin untersucht wurden drei Papiersorten, drei Pflanzenblätter, fünf Hölzer, Diesel in Sand und Wasser in Sand. Die gleichbleibend guten Ergebnisse für die Bestimmung dieser unterschiedlichen Stoffe belegen, daß das Auswertesystem im Idealfall für alle Bestimmungsaufgaben aus dem Bereich organischer Stoffe geeignet ist. Ein Stoff kann dabei in verschiedenen Umgebungen bestimmt werden, sobald die Umgebung mit in die Kalibration einbezogen wird. Dies hat die Untersuchung von mit Diesel verunreinigtem trockenem und feuchtem Sand gezeigt: Das

System konnte dabei zum einen das Wasser unabhängig davon erkennen, ob Diesel vorhanden war oder nicht; zum anderen konnte es den Diesel unabhängig von dem Vorhandensein des Wassers detektieren.

Vor dem Hintergrund dieser Ergebnisse ergeben sich für die Zukunft folgende Forschungsschwerpunkte:

Die Weiterentwicklung, das heißt die Optimierung von IntellIdent

Die Ausweitung der Untersuchungen im Hinblick auf die Anwendbarkeit des Systems in der Praxis

Hinsichtlich der Weiterentwicklung von IntellIdent, müssen zum einen die beiden Kennzahlen Andrassy-Selektivität und ANSTAIR-Wert, die für die Bewertung der Bestimmungsergebnisse entwickelt wurden, überprüft und gegebenenfalls optimiert werden. Denn es zeigte sich beispielsweise, daß die Bewertung der Trennschärfe einer Bestimmung mit Hilfe der Andrassy-Selektivität sich mit der Anzahl der untersuchten Stoffe verändert. Es wäre daher erstrebenswert, Korrekturfaktoren zu ermitteln, die eine vergleichende Bewertung von Bestimmungen unabhängig von der Anzahl der betrachteten Stoffe verlässlich ermöglicht.

Weiterhin muß überprüft werden, ob sich das Verfahren der Faktorauswahl verbessern läßt. So hat sich beispielsweise ergeben, daß die anhand der Kalibrationsdaten ermittelte optimale Faktorkonfiguration nicht immer auch die für die Bestimmung der zu untersuchenden Stoffe Optimale war. An zwei Beispielen wurde gezeigt, daß die vom System als drittbeste bzw. viertbeste ermittelte Faktorkonfiguration für die Bestimmung der zu untersuchenden Stoffe besser geeignet war, als die jeweils vom System als beste ermittelte Faktorkonfiguration.

Schließlich sollte der universale Faktorraum im Mittelpunkt weitergehender Untersuchungen stehen. Er war unter dem Aspekt erstellt worden, möglichst viele unterschiedliche organische Stoffe zu seiner Erstellung zu verwenden. Die Auswahl und die Anzahl der verwendeten Stoffe muß auf ihre Optimierung hin untersucht werden.

Ein zweiter Forschungsschwerpunkt sollte auf der Ausweitung der Anwendung des Systems liegen. Die im Rahmen dieser Arbeit geleisteten Untersuchungen konzentrierten sich v.a. auf Kunststoffe. Daneben wurden auch einige andere organische Stoffe untersucht. Da das System theoretisch für alle Sortierungsaufgaben aus dem Bereich der organischen Stoffe geeignet ist, müssen in Zukunft gezielt weitere Anwendungsfälle ermittelt und nachgestellt werden, um die Einsatzmöglichkeiten von IntellIdent auszuweiten.

## 8 Schlußbetrachtung

Mit vorliegender Arbeit sollte ein Auswertesystem entwickelt werden, das die Anwendung der NIR-Technologie für die Erkennung organischer Stoffe so weit vereinfacht, daß sie ohne Expertenwissen auskommt. Dabei wurde die chemische Ähnlichkeit der organischen Stoffe untereinander genutzt, indem aus einer großen Anzahl organischer Stoffe mit Hilfe der Faktoranalyse ein Set von 30 spektralen Grundbausteinen, den sog. Faktoren, gewonnen wurde, mit dessen Hilfe sich das Spektrum möglichst jeder organischen Substanz rekonstruieren läßt.

Die sich bei der Rekonstruktion ergebenden Faktorgewichte lassen sich in den aus den 30 Faktoren aufgespannten Faktorraum projizieren. Der Faktorraum ist dabei so beschaffen, daß sich in ihm möglichst jede organische Substanz anhand ihrer Faktorgewichte spezifisch anordnet, das heißt von jeder anderen Substanz, die ebenfalls in dem Faktorraum abgebildet wird, unterscheidbar ist. So wird ein universaler Faktorraum gewonnen. Dadurch entfällt der in bisherigen Auswerteverfahren aufwendige Schritt, für jeden Anwendungsfall einen neuen Faktorraum zu errechnen.

Um den Rechenaufwand der Projektion von Spektren in den universalen Faktorraum zu minimieren und um einen Kompromiß zwischen Overfitting und Underfitting<sup>25</sup> zu erreichen, wurde festgelegt, daß jeweils drei Faktoren aus dem Set an 30 Faktoren für eine trennscharfe Abbildung von organischen Stoffen gegeneinander ausreicht. Das System wurde zu diesem Zweck so eingerichtet, daß es die für einen Anwendungsfall optimale Kombination aus drei Faktoren selbst errechnet. Es bedient sich hierfür zweier Kennzahlen, die für die Bewertung der Trennschärfe, mit der sich Stoffe in einem dreidimensionalen Faktorraum anordnen, entwickelt wurden. Diese Vorgehensweise verspricht, den Widerspruch in den Anforderungen, die an ein solches Auswertesystem gestellt werden, aufzuheben. So ist IntellIdent

---

<sup>25</sup> Die Anglizismen 'Overfitting' und 'Underfitting' haben sich als Bezeichnung für die Über- bzw. Unterbestimmung von Stoffen anhand von Faktoren eingebürgert. Bei der Überbestimmung werden zu viele Faktoren für die Bestimmung eines Stoffs verwendet. Dies hat zur Folge, daß kleine Änderungen in den Spektren eines Stoffs überbewertet werden. Eine Unterbestimmung tritt bei der Verwendung zu weniger Faktoren ein. Ein Stoff wird dabei zu ungenau dargestellt.



einerseits robust gegenüber Unterschieden in Spektren gleicher Stoffe, andererseits weist es jedoch eine hohe Empfindlichkeit gegenüber Unterschieden in Spektren verschiedener Stoffe auf.

Um das entwickelte Auswertesystem zu validieren, wurde es in eine Software umgesetzt. Mit dieser konnten verschiedene organische Stoffe, wie Kunststoffe, Papier, Pflanzen oder dieselkontaminierter Sand, anhand ihrer NIR-Spektren sortiert werden. Es gelang dabei sowohl, verschiedene Kunststoffe, als auch gleiche Kunststoffe unterschiedlicher Zusammensetzung zu sortieren. Bis zu einem gewissen Grad ließen sich auch Pulvergemische aus zwei Kunststoffen mit jeweils unterschiedlichen Mischungsverhältnissen bestimmen. Das System arbeitete dabei um so trennschärfer, je mehr Stoffe für die Bildung des universalen Faktorraums herangezogen wurden und je weniger Stoffe unterschieden werden sollten.

Für die Praxis des Sortierens organischer Stoffe bedeutet dies: Die zu sortierenden Stoffe müssen dem System in einem Kalibrationsschritt gezeigt werden, damit es lernt, welche Stoffe es erkennen soll. Dieser Vorgang dauert einige Minuten und benötigt keine andere Expertise als das Bereitstellen der NIR-Spektren der Stoffe, die bestimmt werden sollen. In der Folge kann IntellIdent die zu sortierenden Stoffe dann anhand ihrer NIR-Spektren bestimmen. Durch diese Vereinfachung der Kalibration des Auswerteverfahrens auf einen Anwendungsfall, wird der Einsatz der NIR-Technologie für Sortierungsaufgaben aus dem Bereich organischer Stoffe entscheidend flexibilisiert.

Hieraus ergeben sich insbesondere zwei neue Einsatzmöglichkeiten der NIR-Spektroskopie: Zum einen können stationäre NIR-Geräte damit auch für häufig wechselnde Anwendungsfälle verwendet werden. Auf diese Weise kann ein Gerät nahezu ohne zusätzlichen Aufwand für beliebig viele Anwendungsfälle eingesetzt werden. Somit rechnet sich der Einsatz dieser Technik auch für kleine Stoffströme, was zu ihrer stärkeren Verbreitung beitragen kann. Zum anderen wird es möglich, zusätzlich zu stationären Systemen, Systeme für den mobilen kurzfristigen Einsatz der NIR-Technologie zu entwickeln. IntellIdent stellt dabei eine ideale Ergänzung zu den seit kurzem auf dem Markt erhältlichen mobilen NIR-Spektroskopen dar (vgl. /WASD/). Deren Kalibrationen müssen nach wie vor zentral von Experten entwickelt werden. IntellIdent entwickelt diese Kalibrationen hingegen selbständig, womit ihm gerade für diese Geräte eine Vielzahl neuer Anwendungsgebiete in der schnellen Analytik organischer Stoffe erschlossen werden kann.

## 9 Literaturverzeichnis

- /ANK99/ Anderson, C.E. / Kalivas, J.H. Fundamentals of Calibration Transfer through Procrustes Analysis. *Applied Spectroscopy*, Bd. 53, Nr. 10, 1999, S. 1268.
- /ASM93/ Aastveit, A.H. / Marum, P. Near-Infrared Reflectance Spectroscopy: Different Strategies for Local Calibrations in Analyses of Forage Quality. *Applied Spectroscopy*, Bd. 47, Nr. 4, 1993, S.463.
- /ATK87/ Atkins, P.W. *Physikalische Chemie*. Weinheim: Wiley / VCH, 1987.
- /BAR98/ Barros, A.S. / Rutledge, D.N. Genetic Algorithm Applied to the Selection of Principal Components. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 40, 1998, S. 65-81.
- /BCB94/ Buerck, J. / Conzen, J.P. / Beckhaus, B. / Ache, H.J. Fiber-optic Evanescent Wave Sensor for In-Situ Determination of Non-Polar Organic Compounds in Water. *Sensors and Actuators B*, Bd. 18-19, 1994, S. 291-295.
- /BCI92/ Burns, D.A. / Ciurcak, E.W. *Handbook of Near-Infrared Analysis*. New York: Marcel Dekker, 1992.
- /BEP96/ Backhaus, K. / Erichson, B. / Plinke, W. *Multivariate Analysemethoden: eine anwendungsorientierte Einführung*. Berlin Heidelberg New York: Springer, 1996.
- /BER88/ Bernstein, I. *Applied Multivariate Analysis*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1988.
- /CAM00/ Candolfi, A. / Massart, D.L. Model Updating for the Identification of NIR Spectra from a Pharmaceutical Excipient. *Applied Spectroscopy*, Bd. 54, Nr. 1, 2000, S. 48.

- /CMM98/ Conlin, A.K. / Martin, E.B. / Morris, A.J. Data Augmentation: An Alternative Approach to the Analysis of Spectroscopic Data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 44, 1998, S. 161-173.
- /DBF88/ Davies, A.M.C. / Britcher, H.V. / Franklin, J.G. / Ring, S.M. / Grant, A. / McClure, W.F. The Application of Fourier-Transformed Near-Infrared Spectra to Quantitative Analysis by Comparison of Similarity Indices (CARNAC). *Mikrochimica Acta*, Bd. I, 1988, S.61-64.
- /DEM86/ Derde, M.P. / Massart, D.L. *Analytica Chimica Acta*, Bd. 184, 1986, S.33
- /EHK95/ Eisenreich, N. / Herz, J. / Kull, H. / Mayer, W. Fast On-Line Identification of Plastic Materials by Near Infrared Spectroscopy, *R'95 - Recovery, Recycling, Re-integration* Collected Papers of the R'95 International Congress Geneva Switzerland.
- /EIN96/ Eisenreich, N. / Rohe, T. Identifizieren von Kunststoffen. Analytische Methoden helfen Altkunststoffe zu sortieren (Identifying Plastics). *Kunststoffe*, Bd. 86, Nr. 2, 1996, S. 222-224.
- /ELL99/ Espinoza, L.H. / Lucas, D. / Littlejohn, D. / Kyauk, S. Total Organic Carbon Content in Aqueous Samples Determined by Near-IR Spectroscopy. *Applied Spectroscopy*, Bd. 53, Nr. 1, 1999, S. 103.
- /ELR88/ El-Rafey, H.H.A. / et al. Possibilities of Application of NIR Techniques in the Analysis of Oilseeds and their Derivatives - Examination of Used Frying Oils. *Fett Wissenschaft Technologie. Fat Science Technology*, Bd. 90 ,Nr 5, 1988 , S. 175.
- /ESL99/ Espinoza, L.H. / Lucas, D. / Littlejohn. Characterization of Hazardous Aqueous Samples by Near-IR Spectroscopy. *Applied Spectroscopy*, Bd. 53, Nr. 1, 1999, S. 97.
- /FEL96/ Feldhoff, R. *Entwicklung eines Verfahrens zur schnellen berührungslosen Erkennung von Kunststoffen mittels NIR-Spektroskopie*. Dissertation Universität Münster , 1996.

- /FWC97/ Feldhoff, R. / Wienke, D. / Cammann, K. and Fuchs, H. On-Line Post Consumer Package Identification by NIR Spectroscopy Combined with a FuzzyARTMAP Classifier in an Industrial Environment. *Applied Spectroscopy*, Bd. 51, Nr. 3, 1997, S. 362-368.
- /GRH86/ Griffiths, P. R. / Haseth, J. H. *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*. New York Chichester: John Wiley & Son, 1986.
- /GVL83/ Golub, G. H. / Van Loan, C. F. *Matrix Computations*. Baltimore, Maryland: The Johns Hopkins University Press, 1983
- /HHM97/ Hoberg, H. / Höcker, H. / Michaeli, W. / Pleßmann, K.W. / et al. Material recycling of thermoplastics. Konferenz-Einzelbericht in: *Waste Treatment, Recycling and Soil Remediation*. Proc. of the XX International Mineral Processing Congress - Aachen, 21.-26. Sept. 1997, Bd. 5, S. 414-430.
- /HÖS98/ Höskuldsson, A. The Heisenberg Modelling Procedure and Application to Nonlinear Modelling. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 44, 1998, S. 15-30.
- /HPS99/ Henry, C. R. / Park, E. S. / Spiegelman C. H. Comparing a New Algorithm with the Classic Methods for Estimating the Number of Factors. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 48, 1999, S. 91-97.
- /JJJ94/ Josefson, M. / Jedvert, I. / Johansson, S. / Langkilde, F.W. New Opportunities with NIR Spectrometry in the Analysis of Dosage Forms. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, Bd. 2, Nr. 1 /2, 1994, S. 82-83.
- /JOL86/ Jolliffe, I.T. *Principal Component Analysis*. New York Berlin Heidelberg: Springer Verlag, 1986.
- /KAF94/ Kahlert, J./ Frank, H. *Fuzzy-Logik und Fuzzy-Control*. Braunschweig: Fr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft, 1994.
- /KOH94/ Kohlus, R. / et al. Neuronale Netzwerke zum Auswerten von NIR-Spektren (Teil 1). *ZFL Zeitschrift für die Lebensmittelwirtschaft -Coburg-*, Bd. 45, Nr. 3, 1994, S. 55-60.

- /KZB94/ Kohlus, R. / Zuerner, I. / Bottlinger, M. / Jansen, H.D. Neuronale Netzwerke zum Auswerten von NIR-Spektren (Teil2). *ZFL - Zeitschrift für die Lebensmittelwirtschaft*, Bd. 45, 1994, Nr. 4, S. 50-52, 54
- /LAU97/ Laufens, P. *Computergestützte Auswertung von Infrarotspektren zur Kunststoffidentifizierung unter Verwendung eines neuronalen Netzes*, MARECK-Kolloquium, Aachen, Germany, February 1997.
- /LDL95/ Lambert, D. / Descales, B. / Llinos, J.R. / Espinosa, A. On-Line NIR Monitoring and Optimisation for Refining and Petrochemical Processes. *Analisis*, Bd. 23, Nr. 4, 1995, S. M9-M13.
- /MAR95/ Marinell, G. *Multivariate Verfahren*. München Wien: R. Oldenbourg Verlag, 1995.
- /MCM99/ De Maesschalck, R. / Candolfi, A. / Massart, D.L. / Heuerding, S. Decision Criteria for Soft Independent Modelling of Class Analogy Applied to Near Infrared Data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 47, 1999, S. 65-77.
- /MNA89/ Martens, H. / Naes, T. *Multivariate Calibration*. Chichester: John Eiley & Sons, 1989.
- /MTU85/ Mark, H.L. / Tunnell, D. Qualitative Near-Infrared Reflectance Analysis Using Mahalanobis Distances. *Analytical Chemistry*, Bd. 57, 1985, S. 1449-1456.
- /NAI90/ Naes, T. / Isaksson, T. Locally Weighted Regression and Scatter Correction for Near-Infrared Reflectance Data. *Analytical Chemistry*, Bd. 62, 1990, S. 664-673.
- /OSF86/ Osborne, B. G. / Fearn, T. *Near Infrared Spectroscopy in Food Analysis*. Longman Scientific & Technical, 1986.
- /RIC96/ Richter, Gerhard. *Biochemie der Pflanzen*. Stuttgart; New York: Thieme, 1996.
- /RÖM95/ Falbe, J. (Hrsg.) / Regitz, M. (Hrsg.). *CD-Römpp*, 9., erweiterte und überarbeitete Auflage des Römpp Chemie Lexikons auf CD-ROM, Version 1.0. Stuttgart New York: Thieme, 1995.

- /SDA94/ Sinnaeve, G. / Dardenne, P. / Agneessens, R. Global or Local? A Choice for NIR Calibrations in Analyses of Forage Quality. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, Bd. 2, 1994, S. 163-175.
- /SIE96/ Siesler, H. W. Qualitätssicherung mit NIR. Zerstörungsfreie, quantitative Bestimmung von Additiven. *Kunststoffe*, Bd. 86, Nr. 7, 1996, Seite 1007-1008, 1010.
- /SIP89/ Siesler, H. W. / Paul, C. NIR Spektroskopie. *Nachr. Chem. Tech. Lab.*, Sonderheft 37, 1989, S. 172-182.
- /SWW99/ Swierenga, H. / de Weijer, A. P. / van Wijk, R. J. / Buydens, L. M. C. Strategy for Constructing Robust Multivariate Calibration Models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 49, 1999, S. 1-17.
- /SZA87/ Szalanczy, E. Application of Near-Infrared Reflection (NIR) Spectroscopy for the Rapid Determination of the Nutrient Content of Mixed Feeds and Raw Materials for Mixed Feed Production. *Acta Chimica Hungarica*, Bd. 124, Heft 6, 1987, S. 813.
- /VAM98/ Verdú-Andrés, J. / Massart, D.L. Comparison of Prediction- and Correlation-Based Methods to Select the Best Subset of Principal Component Regression and Detect Outlying Objects. *Applied Spectroscopy*, Bd. 52, Nr. 11, 1998, S. 1425.
- /WBM95/ Wienke, D. / van den Broek, W. / Mellsen, W. / et al. Comparison of an Adaptive Resonance Theory Based Neural Network (ART-2a) Against Other Classifiers for Rapid Sorting of Post Consumer Plastics by Remote Near-infrared Spectroscopic Sensing Using an InGaAs Diode Array. *Analytica Chimica Acta*, Bd. 317, 1995, S. 1-16.
- /WASD/ <http://www.asdi.com/>
- /WBS96/ Wienke, D. / van den Broek, W. / et al. Adaptive Resonance Theory Based Neural Network for Supervised Chemical Pattern Recognition (Fuzzy ARTMAP). *Chemometric & Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 32, 1996, S. 165-176.

/WBU96/ Wienke, D. / Buydens, L. Adaptive Resonance Theory Based Neural Network for Supervised Chemical Pattern Recognition (FUZZY ARTMAP). Part 1. *Chemometric & Intelligent Laboratory Systems*, Bd. 32, Nr. 2, 1996, S. 151-164.

/WLOCAL/ [www.foss-nirsystems.com/SpecSheets/WinISI.htm](http://www.foss-nirsystems.com/SpecSheets/WinISI.htm)

# 10 Anhang

## 10.1 Referenzstoffe zur Bildung des universalen Faktorraums

Nr.	Referenzstoffe
	<b>Biomaterialien</b>
	Hanf
1	Hanf aus dem Sanitärbedarf
	Holz
2	Merbau, Fichte (Fertigparkett)
3	Buche
4	Getrocknete Binsen
	Kork
5	Weinkorken
	Linoleum
6	Graues Linoleum
	Leder
7	Lederrucksack, natur
	<b>Verschiedene Materialien</b>
	<b>Fette</b>
8	Schuhcreme von Collonil "Soft Practic", multicolor (farblos)
9	Butter



	<b>Finger</b>
10	Finger und Fingernagel
	<b>Schokolade</b>
11	Schokoladennikolausbruch, Vollmilch
	<b>Stoffe</b>
12	Weinrotes Seidentuch
13	Weiß-blaues Baumwolltuch
14	Buntes Baumwolltuch
	<b>Wachs</b>
15	Weißer Kerze von Ikea
	<b>Zucker</b>
16	Raffinierter weißer Zucker
	<b>Papier</b>
17	Küchenrolle von ALDI
18	Pappschachtel der Schoko-Mousse Kekse von ALDI
19	Butterbrottüte
20	bräunliche Filtertüte von PLUS: Kaffee Filterpapier ungebleicht Nr.3
21	brauner DIN A4 Umschlag
22	FAZ, bedruckt und unbedruckt
23	Hochglanzbroschüre
24	Schreibblock, weiß, kariert
25	Umweltpapier
26	Toilettenpapier
27	Toilettenpapier mit Diesel verunreinigt
28	Toilettenpapier mit Ethanol verunreinigt
29	Toilettenpapier mit Nitroverdünner verunreinigt
30	Toilettenpapier mit Olivenöl verunreinigt
31	Toilettenpapier mit Xylol verunreinigt
32	Reisschachtel
33	Salzschachtel
34	Tobleroneschachtel

	<b>Kunststoffe</b>
35	PA6, Ultramid B4, BASF
36	PA6, Sniamid C216, Nyltech
37	PA66, Technyl A216, Nyltech
38	PS, 144C-glasklar, BASF
39	(HD)PE, Lupolen 1810H, BASF
40	PP, P8000 natur, Vestolen
41	(HD)PE, Lupolen 5261Z, BASF
42	PP, mit Maleinsäureanhydrid gefropft; MAH vermutlich zw. 3% und 5%
43	PET 9921 B, Eastman Chemical
44	PET 7352, Eastman Chemical
45	PA, Abfälle von Radkappen: PA6 u. PA66 gemischt; Mischungsverhältnis unbek. Beimengungen von Glasfasern, Farbe oder Mineralstoffen (wie z.B. absichtlich zugemischtes Kalk)
46	HDPE, vormals Treibstofftanks; gemischte Typen (HDPE), bis 5% Diesel eindiffundiert
47	PP, Novolen 1102 K, BASF
48	PS, 158 K, BASF
49	PMMA, eingemahlene Autorückleuchten, Mischung, unterschiedl. Farben
50	PO (Polyolefine), Abfälle aus DSD, Firma Kerium (Aufbereitungsfirma)
51	LF-Fraktion, Abfälle aus DSD, Firma Kerium (Aufbereitungsfirma)
52	Polyolefine, Polyolefinfraktion des KAKTUS-Projekts, nicht über DSD erfasst, vermutlich 90% PE, Rest hauptsächlich PP und ein paar PS-Kügelchen
53	PVC, Typ 2380 natur, Vestolit
54	PP, Novolen, BASF
55	LLDPE, Escorene, Exxon
56	HDPE, Daplen 5272, PCD-Polymere
57	PC (Polycarbonat), Makrolon CD 2005, Bayer
58	POM (Polyoxymethylen), Hostaform 7609214, Hoechst
59	PMMA, Plexiglas VQ 1015, Röhms
60	PMMA, Degalan G7, Degussa
61	PBT (Polybutylenterephthalat), Celanex
62	PC/ABS-Blend, Cycoloy, GE-Plastics
63	ABS, Terluran 877M, BASF

<b>Verunreinigte Kunststoffe</b>	
	<b>PA</b>
64	PA-Pulver zu 6 Gew.%, 9 Gew.% und 12 Gew.% mit Glykol verunreinigt
	<b>PP</b>
65	PP-Pulver zu 6 Gew.%, 9 Gew.% und 12 Gew.% mit Glykol verunreinigt
66	PP-Pulver zu 5.9 Gew.% mit Diesel verunreinigt
	<b>PP/PS</b>
67	Platte aus 26 Vol.% PP und 74 Vol.% PS zu 0,5 Gew.% mit Papier verunreinigt
68	Platte aus 26 Vol.% PP und 74 Vol.% PS zu 1 Gew.% mit Papier verunreinigt
69	Platte aus 26 Vol.% PP und 74 Vol.% PS zu 2 Gew.% mit Papier verunreinigt
70	Platte aus 82 Vol.% PP und 18 Vol.% PS zu 0,5 Gew.% mit Papier verunreinigt
71	Platte aus 82 Vol.% PP und 18 Vol.% PS zu 1 Gew.% mit Papier verunreinigt
72	Platte aus 82 Vol.% PP und 18 Vol.% PS zu 2 Gew.% mit Papier verunreinigt
	<b>PP/PE</b>
73	Platte aus 26 Vol.% PP und 74 Vol.% PE zu 2 Gew.% mit Papier verunreinigt
74	Platte aus 82 Vol.% PP und 18 Vol.% PE zu 2 Gew.% mit Papier verunreinigt
	<b>PP/PA6</b>
75	Pulvermischungen der Zusammensetzungen: 0 Gew.% PP, 15 Gew.% PP, 85 Gew.% PP und 100 Gew.% PP, jeweils zu 0 Gew.%, 1 Gew.% und 2 Gew.% mit Papier verunreinigt.
	<b>Pflanzen</b>
	<b>Blätter</b>
76	Getrocknete Blätter der Buchshecke
77	Getrocknetes Palmenblatt
78	Junge, getrocknete Fliederblätter
79	Junge, getrocknete Birkenblätter
80	Junge, getrocknete Buchenblätter
	<b>Blüten</b>
81	Getrocknete Blütenblätter von weißem Flieder
82	Getrocknete Blütenblätter der Forsythie
83	Getrocknete Blüte der Heckenrose
84	Getrocknete Blütenblätter des Löwenzahns

	<b>Gemüse</b>
85	Getrocknete Zehe und Schale des Knoblauchs
86	Getrocknete Schale und Inneres einer Zwiebel
	<b>Knospe</b>
87	Birkenknospe
	<b>Nüsse</b>
88	Schale und Kern einer Pistazie
89	Schale und Kern einer Walnuss
	<b>Obst</b>
90	Schale und Fleisch eines Apfels in feuchtem und getrocknetem Zustand
91	Getrockneten Bananenstrunk
92	Getrocknete Schale und Fleisch einer Mandarine
93	Getrocknete Schale, Fleisch und Kerne einer Zitrone
	<b>Sand</b>
94	Gewaschener Sand vom Baustoffhandel
95	Gewaschener Sand vom Baustoffhandel zu je 1 Gew.%, 3 Gew.%, 6 Gew.% und 12 Gew.%, jeweils mit Diesel, Nitroverdünner und Xylol verunreinigt. Der Sand war vor der Verunreinigung lufttrocken. Zusätzlich wurden die Verunreinigungsstufen 1 Gew.% und 6 Gew.% mit feuchtem Sand durchgeführt.
96	Bei 0.63 mm abgesiebter Vogelsand (Vitakraft Vogelsand 3PLUS)
97	Bei 0.63 mm abgesiebter Vogelsand (Vitakraft Vogelsand 3PLUS) zu je 1 Gew.%, 3 Gew.%, 6 Gew.% und 12 Gew.%, jeweils mit Diesel, Nitroverdünner und Xylol verunreinigt. Der Sand war vor der Verunreinigung lufttrocken. Zusätzlich wurden die Verunreinigungsstufen 1 Gew.% und 6 Gew.% mit feuchtem Sand durchgeführt.
98	Bei 0.63 mm abgesiebter Vogelsand (Vitakraft Vogelsand 3PLUS) zu je 6 Gew.% mit Nitroverdünner und Xylol gleichzeitig verunreinigt. Der Sand war vor der Verunreinigung lufttrocken.
99	Bei 0.63 mm abgesiebter Vogelsand (Vitakraft Vogelsand 3PLUS) jeweils zu je 1 Gew.% und je 6 Gew.% mit Diesel Nitroverdünner und Xylol gleichzeitig verunreinigt. Der Sand war vor der Verunreinigung lufttrocken. Zusätzlich wurde die Verunreinigungsstufe 1 Gew.% mit feuchtem Sand durchgeführt.
	<b>Flüssigkeiten</b>
	<b>Wasser</b>
100	Kaltes und heißes Wasser
	<b>Alkohol</b>
101	Ethanol absolut 99.8%, Riedel de Haen
102	Jeweils 1 Vol.%, 10 Vol.%, 15 Vol.%, 25 Vol.% und 50 Vol.% Ethanol in Wasser
	<b>Diesel</b>
103	Diesel von Shell
104	Diesel von BP
105	Jeweils 0,5 Vol.%, 1 Vol.%, 5 Vol.% und 10 Vol.% BP-Diesel in Wasser

	<b>Lösungsmittel</b>
106	Nitroverdünner
107	Je 5 Vol.% und 10 Vol.% Nitroverdünner in Wasser
	<b>Öl</b>
108	Olivenöl
109	Je 5 Vol.% und 10 Vol.% Olivenöl in Wasser
110	Distelöl
111	Je 5 Vol.% und 10 Vol.% Distelöl in Wasser
	<b>Xylol</b>
112	Unverdünntes Xylol
113	Je 0,5 Vol.%, 1 Vol.%, 5 Vol.% und 10 Vol.% Xylol in Wasser
	<b>Gemische</b>
114	BP-Diesel/Xylol Gemisch aus folgenden Volumenverhältnissen: 1:1, 1:2, 1:5, 2:1, 5:1
115	Nitroverdünner/Xylol-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen
116	Olivenöl/Ethanol-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen
117	BP-Diesel/Xylol/Nitroverdünner-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen
118	Olivenöl/Ethanol/Xylol-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen
119	Ethanol/Nitroverdünner/Xylol-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen
120	Olivenöl/Ethanol/Xylol/BP-Diesel-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen
121	Olivenöl/Ethanol/Xylol/BP-Diesel/Nitroverdünner-Gemisch aus jeweils gleichen Volumenanteilen

## 10.2 Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7

### 10.2.1 Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.1



Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe							
		1	2	3	4	5	6	7	8
PA6	1	27,0	1465,3	9274,8	19219,0	612,2	3644,2	3998,0	1217,7
PP	2	1706,1	3,3	5039,2	33149,6	322,8	4433,6	4235,9	952,5
(HD)PE	3	28391,1	30896,0	11,9	14677,6	31503,4	23144,8	17827,0	26178,8
PET 9921 B	4	1612,0	549,7	6685,8	2,9	985,6	190,4	185,3	1305,1
PA	5	2282,4	1294,6	9069,2	24976,6	3,4	3515,0	3576,9	335,0
PS	6	3209,2	1603,4	101284,9	12185,5	2053,2	8,2	89,9	6330,1
PMMA	7	2603,9	2080,2	16274,8	6908,9	457,1	49,8	20,0	965,9
LF-Fraktion	8	1015,0	503,3	2121,7	7438,0	56,2	1205,3	1198,8	27,8
Polyolefine	9	541,8	91,4	137,8	3547,1	44,3	325,0	297,3	26,8
PVC	10	2748,1	454,8	2351,5	18767,2	87,8	1864,0	1559,7	250,9
PC	11	515,7	1022,1	16674,6	5786,4	231,4	60,7	28,8	1092,0
POM	12	5446,6	1984,6	24506,9	34052,8	2390,8	5544,5	3651,2	5700,7
PBT	13	1312,8	524,1	4412,9	108,5	499,4	47,2	53,8	654,4
PC/ABS-Blend	14	3601,4	411,3	16595,8	5643,0	347,5	1380,7	1252,8	506,1
ABS	15	7531,0	1435,3	73769,0	19603,9	666,8	5917,7	5930,8	2126,9
ANSEL		2,80E+06	3,00E+06	2,86E+06	3,27E+06	1,78E+06	8,68E+05	3,53E+03	1,97E+03
ANSTAIR		1,190	1,190	1,190	1,200	1,120	1,100	0,100	0,100

**Tabelle 10.1a Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		9	10	11	12	13	14	15
PA6	1	3212,3	1662,0	3671,9	9959,2	17394,0	1256,3	417,06
PP	2	2379,0	520,7	3827,0	6741,0	26225,4	1207,9	227,7
(HD)PE	3	3625,8	28107,2	25301,5	1735,7	15500,0	31651,3	55800,3
PET 9921 B	4	2123,0	421,5	193,5	623,2	54,9	761,9	893,6
PA	5	1471,1	864,5	3478,3	9080,8	20075,1	421,8	20,5
PS	6	26211,0	510,7	272,8	2040,4	7934,3	1636,2	311,7
PMMA	7	4375,9	623,1	18,9	690,0	3854,6	257,0	78,7
LF-Fraktion	8	205,5	366,1	1212,6	2614,9	5908,3	141,0	70,5
Polyolefine	9	19,1	26,7	277,5	548,1	2713,9	48,4	68,9
PVC	10	764,7	8,9	1442,2	1744,1	13266,1	332,4	40,1
PC	11	4384,7	235,6	7,7	504,4	3328,4	337,0	47,2
POM	12	9215,8	563,6	3632,3	14,4	18538,8	4631,0	3252,7
PBT	13	1359,5	257,2	50,5	530,4	2,6	323,1	339,7
PC/ABS-Blend	14	2878,5	217,2	1554,8	2914,2	4149,3	1,3	16,4
ABS	15	12427,9	1418,2	7151,0	16486,1	16565,7	114,9	6,3
ANSEL		2,66E+06	3,12E+05	1,17E+05	3,06E+06	3,13E+06	2,20E+06	5,95E+04
ANSTAIR		1,180	1,000	0,500	1,190	1,200	1,150	0,400

**Tabelle 10.1b Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**



Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe							
		1	2	3	4	5	6	7	8
PA6	1	35,4	1467,8	1942,2	29071,3	1023,0	2044,7	9456,2	1745,8
PP	2	314,4	5,2	2321,5	15873,4	284,5	1079,6	2498,0	747,5
(HD)PE	3	17009,5	7703,5	9,3	14047,1	9353,2	7160,1	1391,4	7491,9
PET 9921 B	4	5771,8	3635,8	21965,1	2,3	2710,2	1618,0	355,7	2830,6
PA	5	2635,0	1294,2	1667,8	19744,9	3,9	722,5	2274,4	250,3
PS	6	9141,8	6997,9	53070,7	3443,8	1402,6	10,7	553,9	1128,6
PMMA	7	5971,6	5959,6	7355,8	7421,6	482,7	242,4	9,1	141,9
LF-Fraktion	8	388,6	434,5	1601,7	2806,8	51,3	102,4	1125,3	91,1
Polyolefine	9	913,9	154,6	361,5	5530,8	95,7	23,8	758,2	110,8
PVC	10	345,9	476,3	22354,7	14443,7	572,6	1847,1	509,9	1948,1
PC	11	5020,7	4540,7	20599,6	2338,5	755,4	137,6	10,4	546,6
POM	12	11703,7	9444,1	35471,6	67160,5	3574,9	12706,5	5328,7	7266,5
PBT	13	3604,7	3331,9	12622,4	523,1	745,0	142,3	119,1	563,4
PC/ABS-Blend	14	1279,8	1434,8	5373,9	804,1	179,0	7,6	352,2	120,6
ABS	15	5407,0	4054,9	33120,9	5437,9	835,8	208,1	490,6	805,0
ANSEL		1,81E+06	3,09E+06	3,36E+06	3,60E+06	2,17E+06	1,25E+03	2,04E+03	9,37E+02
ANSTAIR		1,130	1,190	1,200	1,200	1,150	0,070	0,100	0,040

**Tabelle 10.2a Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		9	10	11	12	13	14	15
PA6	1	2539,7	1899,9	6618,2	20103,2	24974,0	1242,7	703,3
PP	2	1723,2	190,9	1672,4	4579,1	13016,1	764,8	147,4
(HD)PE	3	1477,7	6550,8	2867,7	5683,7	13176,7	9469,1	15383,3
PET 9921 B	4	5813,4	2658,6	431,8	998,9	317,5	2079,2	1551,1
PA	5	384,9	198,9	1419,6	3507,2	13747,6	422,1	15,9
PS	6	7923,6	2965,1	373,2	3177,2	1069,3	86,9	36,7
PMMA	7	991,4	2057,7	12,6	1443,8	3355,8	187,8	68,0
LF-Fraktion	8	57,0	227,9	829,5	1876,9	1902,4	36,7	102,8
Polyolefine	9	21,8	52,5	370,4	2312,2	4300,6	46,1	160,0
PVC	10	6697,0	38,2	321,4	1003,3	13140,6	1966,0	109,5
PC	11	3359,7	1866,6	7,3	1703,0	863,4	162,7	38,0
POM	12	10186,8	2026,8	5101,0	21,3	39587,0	12104,6	4987,5
PBT	13	2292,9	1543,7	83,1	1810,2	2,4	214,9	169,7
PC/ABS-Blend	14	840,5	612,2	227,3	1772,0	546,1	1,5	9,8
ABS	15	5350,7	1692,2	321,0	2006,6	3564,5	203,2	5,8
ANSEL		2,07E+05	3,18E+03	1,22E+04	3,14E+06	3,45E+06	1,75E+06	4,55E+03
ANSTAIR		1,000	0,100	0,300	1,200	1,200	1,120	0,110

**Tabelle 10.2b Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne Kunststoffe**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe							
		1	2	3	4	5	6	7	8
PA6	1	36,1	2795,5	1328,8	18172,2	873,5	645,2	2628,1	1371,7
PP	2	46,3	3,6	505,6	2995,4	136,2	129,5	251,4	232,4
(HD)PE	3	5816,6	3089,0	11,8	50078,8	5865,7	12813,7	10261,9	3260,5
PET 9921 B	4	223,6	2343,5	498,5	2,2	621,9	1943,6	187,6	1004,6
PA	5	873,7	2227,9	1055,4	1150,8	4,0	181,9	98,7	71,3
PS	6	598,9	5437,5	11908,4	79833,4	168,4	27,1	5676,9	1442,6
PMMA	7	279,3	623,3	393,1	513,6	354,7	286,4	22,7	978,2
LF-Fraktion	8	563,8	1658,5	1236,6	1509,9	3,8	144,3	39,9	3,8
Polyolefine	9	93,2	365,1	273,3	1755,0	35,3	82,9	170,7	18,3
PVC	10	55,5	257,9	1253,4	6901,4	117,4	421,1	426,9	214,2
PC	11	837,8	2370,3	1268,5	2432,9	146,2	578,3	53,9	309,4
POM	12	2579,9	975,6	15627,2	51477,7	472,7	182,1	2372,2	1111,6
PBT	13	160,9	246,7	374,4	6,0	317,8	859,4	108,0	451,8
PC/ABS-Blend	14	2686,9	7338,9	411,9	7061,7	83,6	42,6	1631,1	166,6
ABS	15	2268,8	6010,0	2067,0	7263,6	70,2	223,0	1036,2	76,4
ANSEL		1,38E+03	3,04E+06	2,54E+06	2,47E+05	9,55E+02	4,51E+03	9,18E+03	8,69E+05
ANSTAIR		0,080	1,190	1,180	1,000	0,050	0,110	0,300	1,100

**Tabelle 10.3a Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		9	10	11	12	13	14	15
PA6	1	1305,5	338,7	2211,1	493,7	14802,0	783,5	366,9
PP	2	297,4	20,9	189,3	148,2	2320,9	160,3	99,5
(HD)PE	3	2461,8	4894,7	9370,9	14442,2	42847,1	7964,2	4777,0
PET 9921 B	4	904,2	273,1	202,5	155,9	62,2	1041,9	959,6
PA	5	184,5	432,5	149,9	582,8	794,6	48,2	8,7
PS	6	3485,0	588,0	5334,7	6475,3	69089,2	51,6	790,9
PMMA	7	1310,2	72,5	28,8	413,7	532,7	425,3	463,3
LF-Fraktion	8	54,5	311,2	54,5	150,2	884,0	40,1	3,3
Polyolefine	9	11,7	59,9	147,9	132,0	1392,6	57,3	8,3
PVC	10	387,3	10,1	316,0	392,6	5366,7	202,2	74,5
PC	11	277,4	285,5	11,8	270,5	1306,6	394,1	136,3
POM	12	1576,9	779,7	1515,6	16,8	37661,7	635,8	391,7
PBT	13	459,1	163,9	106,1	188,9	3,9	459,7	464,4
PC/ABS-Blend	14	562,2	1558,5	1916,7	3904,3	7809,3	5,2	20,4
ABS	15	300,8	1250,0	1171,2	2331,9	6435,5	104,8	5,2
ANSEL		9,53E+05	3,43E+04	7,50E+04	8,52E+05	2,99E+06	8,00E+05	7,21E+02
ANSTAIR		1,100	0,390	0,470	1,100	1,190	1,060	0,030

**Tabelle 10.3b Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe							
		1	2	3	4	5	6	7	8
PA6	1	19,2	93,9	1612,7	1206,9	374,6	486,2	572,5	674,5
PP	2	84,1	4,3	612,6	608,4	120,1	209,2	246,4	269,8
(HD)PE	3	86454,6	114991,2	51,0	68679,1	114994,7	143066,2	143943,9	87820,0
PET 9921 B	4	762,0	221,2	2333,8	1,7	34,5	222,2	159,1	36,3
PA	5	929,0	224,4	1310,5	254,6	4,9	144,5	211,5	79,6
PS	6	4273,6	1032,0	4614,3	476,5	74,0	3,9	310,8	136,5
PMMA	7	7175,9	2680,2	20883,2	1019,8	963,2	1405,8	19,5	1085,6
LF-Fraktion	8	407,0	157,8	77,5	88,9	12,0	33,8	55,6	4,7
Polyolefine	9	299,3	92,9	26,9	138,6	35,1	101,6	55,8	35,4
PVC	10	923,5	142,3	5697,0	3035,8	252,5	1367,2	315,4	772,4
PC	11	1416,2	747,3	21424,4	5575,9	1261,4	3595,0	91,8	2227,4
POM	12	5962,5	858,1	10932,7	3483,4	1207,3	2855,8	3252,0	1448,2
PBT	13	922,7	171,2	2095,5	111,0	16,3	82,3	333,1	61,2
PC/ABS-Blend	14	5758,0	1543,0	6356,4	486,9	61,7	268,7	407,1	113,8
ABS	15	12208,0	3351,8	18542,5	3895,2	251,3	2090,8	724,4	700,3
ANSEL		1,07E+06	1,67E+06	1,49E+03	2,54E+06	5,00E+04	1,41E+06	8,28E+04	9,12E+05
ANSTAIR		1,100	1,120	0,080	1,180	0,400	1,110	0,500	1,100

**Tabelle 10.4a Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		9	10	11	12	13	14	15
PA6	1	1161,6	185,7	468,3	458,5	1097,3	395,3	265,9
PP	2	419,2	30,9	200,4	126,6	478,5	149,5	91,9
(HD)PE	3	18271,6	124407,8	169337,1	81332,5	49045,2	135652,7	172940,2
PET 9921 B	4	367,1	114,3	161,8	80,5	82,2	22,1	25,6
PA	5	244,5	74,9	184,9	89,1	129,6	9,1	9,2
PS	6	979,9	317,3	322,8	549,7	134,7	65,1	93,0
PMMA	7	5983,2	1617,0	12,0	1524,9	2647,1	555,5	178,3
LF-Fraktion	8	17,0	60,5	62,1	188,8	57,4	4,4	19,0
Polyolefine	9	9,7	45,7	65,9	88,4	65,9	58,8	68,5
PVC	10	1917,0	50,5	283,0	304,5	2795,7	429,9	116,3
PC	11	7097,0	921,2	20,8	346,6	6812,7	1356,1	414,2
POM	12	1260,7	654,6	3673,0	16,2	1175,3	2251,7	2755,6
PBT	13	268,2	47,0	331,4	65,0	4,1	29,2	62,1
PC/ABS-Blend	14	942,4	573,2	386,7	384,0	110,8	1,5	14,2
ABS	15	3556,5	1222,5	757,2	1303,5	3235,7	281,5	11,2
ANSEL		1,51E+04	2,33E+02	1,07E+03	2,66E+05	1,48E+06	1,47E+05	2,96E+02
ANSTAIR		0,300	0,010	0,060	1,000	1,110	0,500	0,010

**Tabelle 10.4b Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe							
		1	2	3	4	5	6	7	8
PA6	1	20,2	80,3	908,1	347,7	347,6	366,9	167,3	556,5
PP	2	179,4	7,8	2410,1	189,9	362,2	412,3	92,6	478,4
(HD)PE	3	79932,0	73739,2	39,2	121561,9	81942,6	136273,8	108056,2	58342,8
PET 9921 B	4	8400,1	9973,8	32161,3	2,7	839,6	33,5	615,8	655,4
PA	5	2109,7	3808,4	4210,5	122,1	4,3	238,7	240,1	76,8
PS	6	2982,6	4850,8	12215,4	420,9	232,3	3,1	147,6	331,0
PMMA	7	6075,4	8130,6	24348,2	1279,9	275,1	709,3	21,6	686,4
LF-Fraktion	8	160,4	685,0	55,9	40,3	7,9	677,2	256,2	7,6
Polyolefine	9	46,3	107,0	43,0	62,9	30,1	125,7	66,5	21,0
PVC	10	507,4	70,3	4266,1	133,7	347,6	776,0	78,6	315,8
PC	11	4646,7	1527,9	37162,0	1133,0	3848,7	1434,2	236,3	3959,8
POM	12	505,7	37,7	1022,3	3974,3	2763,7	1862,2	1672,9	2395,4
PBT	13	1249,0	1799,9	8517,7	310,0	15,4	243,7	12,1	35,5
PC/ABS-Blend	14	25092,6	35442,1	77151,3	451,3	641,7	375,5	1632,4	339,8
ABS	15	8248,9	13562,1	23521,7	316,8	393,7	1440,2	970,5	474,4
ANSEL		8,94E+04	9,06E+05	1,40E+03	1,59E+06	1,48E+04	1,98E+06	1,02E+03	1,72E+05
ANSTAIR		0,500	1,100	0,080	1,120	0,300	1,140	0,050	0,520

**Tabelle 10.5a Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		9	10	11	12	13	14	15
PA6	1	820,5	73,6	171,8	112,4	223,6	336,0	259,1
PP	2	1005,9	32,2	103,4	11,4	188,1	244,6	123,0
(HD)PE	3	16310,7	89696,7	122277,6	75835,9	97270,0	100385,0	113671,8
PET 9921 B	4	5494,7	3896,7	543,5	10339,4	902,0	193,9	68,3
PA	5	526,7	1473,5	363,9	4197,3	147,0	31,4	13,2
PS	6	1885,0	1604,0	152,9	5203,1	208,8	243,2	170,9
PMMA	7	2678,8	1963,4	48,0	8735,8	142,8	579,5	655,0
LF-Fraktion	8	31,6	435,6	367,1	788,4	89,1	6,9	49,9
Polyolefine	9	5,5	76,2	86,3	121,1	45,2	43,5	54,5
PVC	10	1030,4	13,7	123,4	57,2	149,0	180,4	63,9
PC	11	10764,8	658,1	27,7	1267,6	1936,0	2121,6	610,8
POM	12	929,8	447,0	1586,3	9,6	2157,4	3374,3	3089,0
PBT	13	1080,7	418,2	24,3	1876,2	2,8	88,8	153,5
PC/ABS-Blend	14	9717,7	13060,6	1986,8	37837,9	1609,8	4,7	20,5
ABS	15	3476,5	5369,3	1434,9	14796,6	743,8	143,0	3,7
ANSEL		1,87E+06	8,90E+04	9,37E+02	1,95E+03	1,52E+06	2,57E+03	2,21E+05
ANSTAIR		1,130	0,500	0,040	0,100	1,110	0,100	1,000

**Tabelle 10.5b Die Bestimmung von 15 Kunststoffen in dem Faktorraum aus fünf Kunststoffen**





## **10.2.2 Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.2**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		1	2	3	4	5	6	7
PA6	1	32,2	591,7	7384,5	1558,7	1934,4	1398,0	2835,4
PP	2	352,8	3,8	6194,8	920,8	938,4	601,6	1225,8
PET 9921 B	3	1042,4	1890,9	1,9	132,6	1394,2	640,6	653,5
PS	4	432,0	262,0	640,3	2,3	714,6	157,4	414,1
PMMA	5	1328,4	1067,2	5528,7	951,6	9,1	331,4	783,4
LF-Fraktion	6	1255,8	596,3	4402,2	209,8	170,0	11,7	68,7
Polyolefine	7	129,8	97,3	906,0	115,4	507,0	42,3	9,8
PBT	8	587,6	1497,9	42,9	114,6	1184,7	478,6	748,7
PC/ABS-Blend	9	629,1	1331,4	1861,5	371,3	778,1	94,7	111,7
ABS	10	1989,8	975,9	10783,3	653,8	3539,2	294,6	438,6
ANSEL		8,72E+05	4,03E+06	4,43E+06	2,87E+06	4,09E+06	4,44E+05	1,93E+06
ANSTAIR		1,100	1,200	1,200	1,190	1,200	1,000	1,130

**Tabelle 10.6a Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		8	9	10
PA6	1	6063,9	905,5	88,6
PP	2	4737,2	472,7	235,8
PET 9921 B	3	26,1	467,3	97,6
PS	4	368,1	50,4	87,7
PMMA	5	3784,7	207,0	27,4
LF-Fraktion	6	2870,0	11,5	9,3
Polyolefine	7	548,8	92,1	72,3
PBT	8	9,3	162,3	266,0
PC/ABS-Blend	9	1148,6	5,5	10,9
ABS	10	7014,9	196,2	6,7
ANSEL		2,82E+05	2,46E+04	4,04E+02
ANSTAIR		1,000	0,300	0,010

**Tabelle 10.6b Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		1	2	3	4	5	6	7
PA6	1	17,8	38,9	1119,7	357,2	62,5	702,5	1957,1
PP	2	63,7	6,9	1359,3	458,6	163,6	714,3	1559,8
PET 9921 B	3	487,8	739,9	1,5	51,8	279,4	113,2	152,6
PS	4	332,4	518,5	66,9	1,7	152,4	167,2	494,8
PMMA	5	304,4	1252,8	3712,5	884,5	36,6	2015,1	5507,1
LF-Fraktion	6	419,9	770,7	181,7	15,6	163,1	19,5	26,5
Polyolefine	7	170,5	244,5	27,7	63,1	106,1	33,3	7,1
PBT	8	351,6	628,6	78,8	37,7	125,5	116,8	332,8
PC/ABS-Blend	9	378,8	649,4	108,5	5,4	158,3	66,1	151,4
ABS	10	898,3	2006,7	956,5	132,2	322,0	531,3	1964,6
ANSEL		4,42E+05	1,93E+06	2,12E+06	1,59E+05	2,91E+03	7,41E+03	6,31E+05
ANSTAIR		1,000	1,130	1,150	0,500	0,100	0,240	1,010

**Tabelle 10.7a Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe**

<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>				
<b>Kalibrationsstoffe</b>		<b>zu erkennende Stoffe</b>		
		8	9	10
PA6	1	915,9	455,5	197,9
PP	2	1152,0	519,8	285,5
PET 9921 B	3	31,1	66,5	103,8
PS	4	96,6	16,9	14,0
PMMA	5	2594,0	1680,5	245,2
LF-Fraktion	6	49,8	11,4	21,9
Polyolefine	7	14,5	61,5	89,9
PBT	8	5,4	26,3	13,0
PC/ABS-Blend	9	50,3	2,6	12,6
ABS	10	479,8	427,7	7,2
ANSEL		1,01E+05	4,18E+05	1,17E+03
ANSTAIR		0,500	1,000	0,060

**Tabelle 10.7b Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe**

Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		1	2	3	4	5	6	7
PA6	1	36,1	2795,5	18172,2	645,2	2628,1	1371,7	1305,5
PP	2	46,3	3,6	2995,4	129,5	251,4	232,4	297,4
PET 9921 B	3	223,6	2343,5	2,2	1943,6	187,6	1004,6	904,2
PS	4	598,9	5437,5	79833,4	27,1	5676,9	1442,6	3485,0
PMMA	5	279,3	623,3	513,6	286,4	22,7	978,2	1310,2
LF-Fraktion	6	563,8	1658,5	1509,9	144,3	39,9	3,8	54,5
Polyolefine	7	93,2	365,1	1755,0	82,9	170,7	18,3	11,7
PBT	8	160,9	246,7	6,0	859,4	108,0	451,8	459,1
PC/ABS-Blend	9	2686,9	7338,9	7061,7	42,6	1631,1	166,6	562,2
ABS	10	2268,8	6010,0	7263,6	223,0	1036,2	76,4	300,8
ANSEL		1,65E+03	4,71E+06	2,40E+05	3,88E+03	1,04E+04	1,09E+06	1,24E+06
ANSTAIR		0,090	1,200	1,000	0,100	0,300	1,100	1,110

**Tabelle 10.8a Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen**

<b>Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR</b>				
<b>Kalibrationsstoffe</b>		<b>zu erkennende Stoffe</b>		
		8	9	10
PA6	1	14802,0	783,5	366,9
PP	2	2320,9	160,3	99,5
PET 9921 B	3	62,2	1041,9	959,6
PS	4	69089,2	51,6	790,9
PMMA	5	532,7	425,3	463,3
LF-Fraktion	6	884,0	40,1	3,3
Polyolefine	7	1392,6	57,3	8,3
PBT	8	3,9	459,7	464,4
PC/ABS-Blend	9	7809,3	5,2	20,4
ABS	10	6435,5	104,8	5,2
ANSEL		4,18E+06	1,00E+06	8,81E+02
ANSTAIR		1,200	1,100	0,040

**Tabelle 10.8b Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen**



Kalibrationsstoffe		Zu erkennende Stoffe						
		1	2	3	4	5	6	7
PA6	1	19,2	93,9	1206,9	486,2	572,5	674,5	1161,6
PP	2	84,1	4,3	608,4	209,2	246,4	269,8	419,2
PET 9921 B	3	762,0	221,2	1,7	222,2	159,1	36,3	367,1
PS	4	4273,6	1032,0	476,5	3,9	310,8	136,5	979,9
PMMA	5	7175,9	2680,2	1019,8	1405,8	19,5	1085,6	5983,2
LF-Fraktion	6	407,0	157,8	88,9	33,8	55,6	4,7	17,0
Polyolefine	7	299,3	92,9	138,6	101,6	55,8	35,4	9,7
PBT	8	922,7	171,2	111,0	82,3	333,1	61,2	268,2
PC/ABS-Blend	9	5758,0	1543,0	486,9	268,7	407,1	113,8	942,4
ABS	10	12208,0	3351,8	3895,2	2090,8	724,4	700,3	3556,5
ANSEL		1,14E+06	2,23E+06	3,44E+06	1,48E+06	8,48E+04	8,60E+05	1,42E+04
ANSTAIR		1,100	1,160	1,200	1,110	0,500	1,100	0,300

**Tabelle 10.9a Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR				
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe		
		8	9	10
PA6	1	1097,3	395,3	265,9
PP	2	478,5	149,5	91,9
PET 9921 B	3	82,2	22,1	25,6
PS	4	134,7	65,1	93,0
PMMA	5	2647,1	555,5	178,3
LF-Fraktion	6	57,4	4,4	19,0
Polyolefine	7	65,9	58,8	68,5
PBT	8	4,1	29,2	62,1
PC/ABS-Blend	9	110,8	1,5	14,2
ABS	10	3235,7	281,5	11,2
ANSEL		1,60E+06	1,00E+05	2,64E+02
ANSTAIR		1,120	0,500	0,010

**Tabelle 10.9b Die Bestimmung von zehn Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen**

### 10.2.3 Ergebnisse der Versuchsreihen aus Kapitel 7.3

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	12,2	7118,4	52130,7	2476,9	460,2
PS	2	8565,8	6,3	2917,4	129,3	43,8
PBT	3	14733,1	52,5	5,7	637,3	576,1
PC/ABS-Blend	4	4130,1	215,8	684,2	2,5	11,9
ABS	5	4425,4	690,0	7290,7	190,4	5,1
ANSEL		1,18E+07	3,12E+06	1,17E+07	6,31E+06	5,27E+04
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200	0,400

**Tabelle 10.10 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	2,5	202,8	1177,3	62,2	72,6
PS	2	307,6	9,7	131,7	94,3	78,5
PBT	3	2135,9	228,5	11,1	716,9	764,8
PC/ABS-Blend	4	713,3	717,6	3460,6	4,1	23,7
ABS	5	802,3	2368,7	13117,9	142,2	3,0
ANSEL		1,01E+07	5,32E+06	5,92E+06	2,25E+06	1,25E+06
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,160	1,110

**Tabelle 10.11 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen ohne die Kunststoffe**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	11,1	5543,1	12033,4	215,8	112,1
PS	2	188,2	2,4	1557,3	255,4	107,7
PBT	3	392,2	86,6	3,4	474,7	465,8
PC/ABS-Blend	4	2682,6	27314,8	34322,1	9,5	24,9
ABS	5	1193,8	12196,7	29522,0	169,9	6,2
ANSEL		6,08E+06	8,14E+06	1,20E+07	3,27E+06	3,52E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200	1,000

**Tabelle 10.12 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus 15 Kunststoffen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	6,8	71,0	1133,4	531,9	234,3
PS	2	423,0	3,6	776,4	356,4	125,4
PBT	3	413,4	47,8	4,0	276,5	309,7
PC/ABS-Blend	4	9920,8	7634,1	3902,1	4,3	42,2
ABS	5	8873,4	6092,6	2409,4	166,5	9,8
ANSEL		9,60E+06	3,46E+06	1,17E+07	5,68E+06	4,14E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200	1,000

**Tabelle 10.1 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus zehn Kunststoffen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	7,8	412,3	188,1	244,6	123,0
PS	2	4850,8	3,1	208,8	243,2	170,9
PBT	3	1799,9	243,7	2,8	88,8	153,5
PC/ABS-Blend	4	35442,1	375,5	1609,8	4,7	20,5
ABS	5	13562,1	1440,2	743,8	143,0	3,7
ANSEL		1,18E+07	7,77E+06	6,87E+06	2,13E+06	4,87E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,150	1,000

**Tabelle 10.14 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus fünf Kunststoffen**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	6,0	601,8	1813,3	99,5	89,5
PS	2	282,4	2,3	201,1	75,2	54,9
PBT	3	453,9	62,5	6,0	731,2	765,0
PC/ABS-Blend	4	1292,1	410,7	2124,9	1,8	13,8
ABS	5	1168,2	1153,2	7604,7	175,9	4,6
ANSEL		8,67E+06	6,88E+06	8,60E+06	3,41E+06	1,17E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200	0,500

**Tabelle 10.15 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen mit der zweitbesten Faktorkonfiguration.**

Mahalanobis-Distanzen der angezeigten Stoffe zueinander sowie eine Bewertung der Trennschärfen mit den Kennzahlen ANSEL und ANSTAIR						
Kalibrationsstoffe		zu erkennende Stoffe				
Kunststoff		1	2	3	4	5
PP	1	4,5	1960,5	3000,5	117,7	60,5
PS	2	523,7	6,4	2396,3	458,9	202,9
PBT	3	554,1	432,1	5,6	560,9	635,7
PC/ABS-Blend	4	877,2	1833,4	3620,4	4,6	13,6
ABS	5	583,3	2547,1	7974,3	116,6	3,3
ANSEL		1,10E+07	1,07E+07	1,19E+07	4,47E+06	4,50E+05
ANSTAIR		1,200	1,200	1,200	1,200	1,000

**Tabelle 10.16 Die Bestimmung von fünf Kunststoffen in dem Faktorraum aus allen Stoffen mit der drittbesten Faktorkonfiguration.**

# Lebenslauf

---

Persönliche Angaben	Name: Bernt Andrassy Geburtsdatum: 26.01.1971 Geburtsort: Heidelberg Wohnort: Anglerstr. 9, 80339 München Staatsangehörigkeit: deutsch Familienstand: ledig
Schulbildung	Pestalozzi-Grundschule, Heidelberg 1981-90 Kurfürst-Friedrich-Gymnasium, Heidelberg Abschluss: Abitur, Note: 1,1
Ersatzdienst	1990-91 Arbeiter-Samariter-Bund, Heidelberg: Individuelle Schwerstbehindertenbetreuung
Studium	1991-95 Maschinenbaustudium an der RWTH Aachen Fachrichtung: Verbrennungsmotoren, Abschluss: Vordiplom; vier Diplomprüfungen 1994-97 Studium der Aufbereitung und Veredlung an der RWTH Aachen Abschluss: Diplom, Note: 1,2 (mit Auszeichnung) 1997-2000 Promotion im Lehr- und Forschungsgebiet für Prozessdatenverarbeitung (pdv) der RWTH Aachen Abschluss: Mit Auszeichnung
Wissenschaftliche Tätigkeiten	1993-94 Studentischer Mitarbeiter an der FEV-Motorentchnik, RWTH Aachen 1995-97 Studentischer Mitarbeiter im Lehr- und Forschungsgebiet für Prozessdatenverarbeitung (pdv) der RWTH Aachen
Auslands- erfahrung	1986-87 Besuch des Brighton-College in Brighton, England Juli 1990 Forschungsaufenthalt im Weizmann Institute of Science in Rehovot, Israel
Sprachen	Deutsch, Muttersprache Englisch, Cambridge Certificate of Proficiency in English Französisch, gute Kenntnisse in Wort und Schrift Italienischkenntnisse
Auszeichnungen/ Stipendien	Stipendium des Weizmann Institute of Science in Rehovot, Israel, '90 Springorum-Denk Münze der RWTH-Aachen Promotionsstipendium der Deutschen Bundesstiftung Umwelt
Forschungs- projekte	<b>Entwicklung einer Erkennungssoftware für die spektroskopische Analyse von Kunststoffen im Nahen Infrarot</b> Entwicklung einer Software zur Verbindung der Methoden Neuronaler Netze mit denen der multivariaten Statistik mit dem Ziel der optimalen Erkennung von Kunststoffen anhand ihrer NIR-Spektren.  <b>Materielles Recycling von unverstärkten thermoplastischen Kunststoffen (MARECK)</b> Betreuung einer interdisziplinären Forschungskooperation von seiten des Lehr- und Forschungsgebietes für Prozessdatenverarbeitung (pdv) der RWTH-Aachen mit dem Ziel der Adaptation der NIR-Technik an einen Extruder zur On-line-Bestimmung qualitätsspezifischer Merkmale von Kunststoffen während des Extrusionsprozesses.

---

**IntellIdent: Auswerteverfahren zur intelligenten Identifikation organischer Stoffe.**

Entwicklung eines Auswertesystems, das sich den ihm gestellten Erkennungsaufgaben selbständig anpasst. Es wird dadurch dem Benutzer ermöglicht, auch ohne besondere Vorkenntnisse wechselnde Erkennungsaufgaben aus dem Bereich der organischen Stoffe zu lösen. Die NIR-Technik wird damit flexibilisiert und ihr Anwendungsbereich vergrößert.

Eigene Veröffentlichungen

**Qualitative and Quantitative Characterisation of Mixed Polymers Using Near-Infrared-Spectroscopy (NIR)**

Michaeli, Pleßmann, Andrassy, Breyer and Laufens  
Polymer Recycling, Vol.3, No.4, 1997/98

München, den 25.05.2001



Bernt Andrassy