

# Signalverarbeitung

## Aufgabenstellung zum Einsendeskript

WS 2019/2020

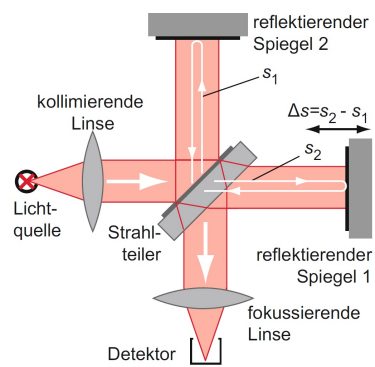


Abb.: Michelson-Interferometer, das üblicherweise in IR-Spektrometern verwendet wird

Ziele:

- Erstellung eines Skripts
- Recherche neuer MATLAB-Befehle

## **Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Einleitung und Hintergrund</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Aufgabe</b>	<b>1</b>
<b>3</b>	<b>Anmerkungen und Hinweise zur Aufgabe</b>	<b>2</b>

## 1 Einleitung und Hintergrund

Die Infrarot-Strahlung wurde 1800 im Rahmen der Untersuchungen von Sonnenstrahlen von W. Herschel entdeckt, als sich das Licht bei einem Versuchsaufbau in seine Spektralfarben zerlegte. Allerdings wurde erst im Jahre 1939 das erste vollautomatische Zweistrahl-Ultrarot-Spektrometer gebaut, kommerzielle Geräte folgten schließlich 1944. Am Anfang der 60er Jahre erfolgte die Anwendung der Fourier-Transformation, die eine Erfassung des kompletten Infrarotbereichs von 780 nm bis 2000  $\mu\text{m}$  ermöglichte. Kommerzielle FT-IR-Spektrometer waren erst deutlich später erhältlich, da die aufwendige Fourier-Transformation der Interferogramme die damaligen Computer an die Grenzen ihrer Rechenkapazität brachte [1] [2].

Die Infrarotspektroskopie ermöglicht unterschiedliche Methoden der Messung sowie Probenpräparation. Das gemessene Spektrum einer unbekannt Probe liefert ohne die Notwendigkeit von Vergleichssubstanzen eine Vielzahl an Informationen; aufgrund der Lage sowie Intensität der auftretenden Absorptionsbanden ist eine Analyse anhand theoretischer und empirischer Zusammenhänge realisierbar.

Ein Bandenspektrum ist charakteristisch für die zu analysierende Materie und somit stoffspezifisch, vergleichbar mit dem menschlichen Fingerabdruck [2, 4]. Eine Messung kann im nahen und mittleren (Rotationsschwingungsspektren) sowie im fernen Infrarotbereich (Rotationsspektren) durchgeführt werden [4, 3].

### Problemstellung

Sie haben mit Hilfe der FT-IR-Spektroskopie Spektren des Proteins Albumin in unterschiedlichen Konzentrationen,  $2 \text{ mg L}^{-1}$ ,  $4 \text{ mg L}^{-1}$  and  $8 \text{ mg L}^{-1}$  aufgenommen, die sie als Kalibration verwenden möchten. Weiterhin haben Sie ein Spektrum einer aufgereinigten Probe gemessen, deren Albuminkonzentration sie bestimmen wollen. Bei der Datenübertragung vom Spektrometer ist ein Datenverlust aufgetreten, sodass Sie die Spektren der Albuminlösungen aus den Referenz- und Proben-Interferogrammen reproduzieren müssen. Das Spektrum der unbekannt Probe ist erhalten geblieben.

## 2 Aufgabe

Laden Sie sich den Datensatz aus Moodle herunter. Dieser umfasst das Referenz-Interferogramm als `.csv`-Datei, die drei Proben-Interferogramme als eine `.fl t`-Datei sowie das Spektrum der unbekannt Probe als `.csv`-Datei. Die Auswertung umfasst folgende Punkte:

1. Einlesen der Datensätze:
  - a) Das Referenz-Interferogramm kann als `.csv`-Datei eingelesen werden. Die Datei beinhaltet eine Spalten mit den Amplitudenwerten.
  - b) Die Proben-Interferogramme sind als eine einzelne `.fl t`-Datei mit Intensitätswerten gespeichert. Die Daten sind in einer einzelnen Spalte untereinander, so dass diese mit einem Optionalen Argument für die Funktion `fread( )` oder mit der Funktion `reshape( )` in eine 3-spaltige Matrix umgewandelt werden muss. Die Länge können sie anhand der Länge des Referenz-Datensatzes oder Berechnung ermitteln. Beachten Sie, dass viele Operationen in Matlab sowohl auf Vektoren als auch auf Matrizen angewendet werden können, so dass die Daten nicht in einzelne Variablen aufgeteilt werden müssen. Hier hilft die Dokumentation der Befehle.

- c) Das Spektrum der unbekannt Probe ist eine .csv-Datei mit zwei Spalten: die erste Spalte enthält die Wellenzahl, die zweite die Absorption.
2. Die Sampling-Rate der Interferogramme beträgt 33 412 Hz. Berechnen Sie alle notwendigen Variablen.
  3. Stellen Sie das Referenz-Interferogramm sowie ein Proben-Interferogramm dar. Können Sie Unterschiede ausmachen?
  4. Um die Qualität der Fourier-Transformation zu erhöhen, wird das Spektrum mit einem Fenster multipliziert:
    - a) Erstellen Sie ein Fenster nach dem Schema „Blackmann-Harris“ mit der Länge der Interferogramme.
    - b) Multiplizieren Sie die Interferogramme mit dem Fenster.
  5. Führen Sie die Fourier-Transformation mit den gefensterten Interferogrammen durch. Sie erhalten Einkanalspektren der Referenz sowie der Proben.
  6. Führen Sie ein Resampling aller Einkanalspektren durch, sodass die Frequenzauflösung  $4 \text{ cm}^{-1}$  beträgt. Beachten Sie, dass sie den Frequenzvektor neu erstellen müssen, damit er zu den neuen Einkanalspektren passt.
  7. Stellen Sie die Einkanalspektren in einem Diagramm dar. Begrenzen Sie die Wellenzahl auf  $4000 \text{ cm}^{-1}$  bis  $400 \text{ cm}^{-1}$  und beachten Sie, dass die übliche Darstellung für Infrarotspektren mit inverser x-Achse erfolgt.
  8. Berechnen Sie die Absorption nach folgender Formel, wobei  $I$  der Intensität der Proben-Einkanalspektren und  $I_0$  der Intensität des Referenz-Einkanalspektren entspricht:

$$A = -\log_{10} \left( \frac{I}{I_0} \right)$$

9. Filtern Sie die Absorptionsspektren mit Hilfe eines Savitzky-Golay-Filters. Bestimmen Sie dazu eigenständig passende Parameter. Als Referenz dafür kann das Spektrum der unbekannt Probe dienen.
10. Stellen Sie die Absorptionsspektren im Bereich  $1200 \text{ cm}^{-1}$  bis  $1650 \text{ cm}^{-1}$  dar.
11. Bestimmen sie die minimale und die maximale Absorption im Bereich  $1450 \text{ cm}^{-1}$  bis  $1580 \text{ cm}^{-1}$  mit den Funktionen  $\min(\ )$  und  $\max(\ )$ . Kopieren sie dazu die Absorptionsdaten in dem betreffenden Bereich in eine neue Variable.
12. Berechnen Sie die Differenz von Maxima und Minima. Dieser Wert ist proportional zur Konzentration der Albuminlösung.
13. Erstellen Sie eine lineare Regression mit den Differenzwerten und den Konzentrationen der Albuminlösungen und stellen Sie die Messpunkte und die Regressionsgrade in einem Diagramm dar.
14. Bestimmen Sie die Konzentration der unbekannt Probe mit Hilfe der Regressionskoeffizienten.

### 3 Anmerkungen und Hinweise zur Aufgabe

Der Schwierigkeitsgrad der Aufgabe ist absichtlich etwas höher gewählt, allerdings sind die Methoden und Aufgabenstellungen genau die, die bei der Auswertung dieser Daten anfallen. Für das Bestehen dieser Aufgabe ist es nicht erforderlich, alle genannten Punkte vollständig zu erfüllen.

#### Wichtig

Die Bewertung des Skriptes berücksichtigt folgende Punkte:

- die korrekte Berechnung aller Daten

- aussagekräftige Variablenbenennung
- Kommentare zum Vorgehen
- sinnvolle Gliederung, idealerweise mit Überschriften

Beachten Sie, dass das Skript irgendwann wieder benutzt werden könnte und es erforderlich ist, dass Sie die Schritte und Berechnungen dann nachvollziehen können. Frist ist der 13.03.2021 mit einer Verlängerungsmöglichkeit um 2 Wochen. Um die Verlängerung in Anspruch zu nehmen, reicht eine kurze Mail mit Begründung.