



Ein neues Werkzeug für die Verarbeitung chemischer Signale

Die Technik der Fourier-Transformation (FT) spielt eine sehr wichtige Rolle in der Chemie und wird häufig sowohl in chemischen Geräten als auch bei der chemischen Signalverarbeitung eingesetzt. In letzter Zeit hat die Wavelet-Transformation (WT) das Interesse vieler Chemiker geweckt, die auf dem Gebiet der Signalverarbeitung tätig sind.^[1] Der wesentliche Unterschied zur FT besteht darin, dass nicht nach Sinus- und Cosinus-Funktionen entwickelt wird, sondern nach einer neuen Familie von Funktionen, den so genannten Wavelets (Elementarwellen). Diese sind definiert durch Streckung und Verschiebung einer Basisfunktion. Bisher sind rund 400 Veröffentlichungen zu Anwendungen der WT auf verschiedenen Feldern erschienen: von der Analytik bis zur Quantenchemie. Allerdings erfordern sowohl die Theorie als auch die Anwendung der WT viele komplexe Gleichungen, was es nicht einfach macht, dieses mächtige Werkzeug effektiv einzusetzen.

Auf den Seiten des „Wavelet Tutorial“ von Robi Polika (Rowan University, Glassboro, New Jersey, USA) findet man eine gute Einführung in die Grundlagen der WT. Auf dieser Website wird die mathematische Theorie auf ein Minimum reduziert. Die grundlegenden Konzepte und Anwendungen in der Signalverarbeitung werden gut mithilfe von Diagrammen veranschaulicht. In Teil I und II wird die Verarbeitung künstlicher Signal aus Komponenten mit verschiedenen Frequenzen durch FT, Kurzzeit-FT (short-term FT, STFT) und kontinuierliche WT (CWT) beschrieben, um eine spezielle Eigenschaft der WT zu demonstrieren: die doppelte

Lokalisierung. Zugleich werden die Unterschiede zwischen FT und WT und die Bedeutung der WT bei der Verarbeitung nichtstationärer Signale klar beschrieben. In Teil III wird anhand einer sehr einfachen Beschreibung eines wichtigen Konzepts, der Analyse in mehreren Auflösungen (multiresolution analysis, MRA) die Definition, Berechnung, Eigenschaften und Theorie der CWT eingeführt. Verwandte mathematische Konzepte wie das innere Produkt, Orthogonalität und Orthonormalität werden diskutiert. Einmal mehr wird die Zeit- und Frequenzauflösung, eine weitere wichtige Eigenschaft der WT, anhand eines realen nichtstationären Signals diskutiert.

Die Ergebnisse der Verarbeitung eines Signals mit vier Frequenz-Komponenten mit FT, STFT und CWT werden erläutert (Abbildung 1). Hieraus kann man auch mit wenig mathematischem Hintergrundwissen die grundlegenden Eigenschaften der WT erkennen. Insbesondere erkennt man in Abbildung 1d, dass kleinere Maßstäbe mit höheren Frequenzen korrespondieren, große dagegen mit kleinen Frequenzen. In Richtung der Verschiebung, die der Zeit bei der FT entspricht, sind die vier Frequenzen klar lokalisiert. Weiter kann man sehen, dass kleinere Maßstäbe bessere Orts-, aber schlechtere Frequenzauflösung liefern.

In Teil IV finden wir eine Beschreibung der diskreten WT, die häufig

angewendet wird, da sie weniger Redundanzen enthält (schnellere Berechnung), aber dennoch die gewünschten Informationen liefert. Die Gleichungen für die Signalzerlegung in mehreren Auflösungen (multiresolution signal decomposition, MRSD) werden nicht nur präzise angegeben, sondern auch mit Diagrammen veranschaulicht.

Die Website könnte wie folgt weiter verbessert werden: Zunächst sollten die Quelltexte der Beispiele herunterzuladen sein, um Anfängern den Einstieg zu erleichtern. Einzelheiten der Rechnungen sollten ebenfalls angegeben werden, um die Abbildungen auf der Website leichter reproduzieren zu können. Eine Liste mit Links zu weiteren relevanten Websites wäre ebenfalls sehr hilfreich.

WEB: <http://engineering.rowan.edu/~polikar/WAVELETS/WTtutorial.html>

Mail: polikar@rowan.edu

Xue-Guang Shao

University of Science and Technology of China, Hefei (China)

Foo-Tim Chau

The Hong Kong Polytechnic University (China)

[1] X. G. Shao, A. K. M. Leung, F. T. Chau, *Acc. Chem. Res.* **2003**, 36, 276.

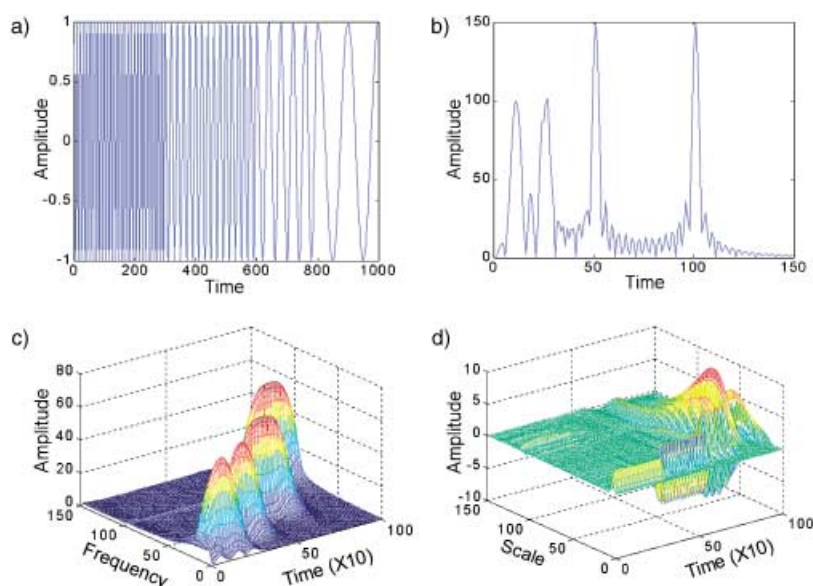


Abbildung 1. Zerlegung eines Signals mit vier Frequenzkomponenten (a) durch b) Fourier-, c) Kurzzeit-Fourier- und d) kontinuierliche Wavelet-Transformation.