

# Projektdokumentation

EUT-P6bb-21HS-RS

Projektstart: 21HS

Projektende: 16.09.2022

## Makro- und Mikrokunststoffuntersuchungen in Kompost mittels hyperspektraler Bildgebung

### **Auftraggeber:**

Epyx GmbH, Ing. Slavi Bonev

### **Projektteam:**

Raffael Schreiber

EUT 7. Semester, Herbstsemester 2021, Projekt 6

### **Coach:**

Petar Mandaliev

## Contents

1	Einleitung .....	4
2	Einführung Technologie .....	5
2.1	Hyperspektrale Bildgebung (HSI).....	5
2.2	Künstliche neuronale Netzwerke (KNN) .....	5
3	Materialien und Methoden.....	6
3.1	Referenz-Kunststoffe .....	6
3.2	Kunststoffe aus Kompostanlage.....	6
3.3	Hyperspektralkamera Specim FX17 .....	7
3.4	Python.....	7
4	Resultate und Diskussion.....	9
4.1	Rebuild Matlab-Klassifikator von P5 in Python.....	9
4.1.1	Einlesen HSI-Daten.....	9
4.1.2	Visualisieren HSI-Daten .....	10
4.1.3	ROI-Auswahl .....	11
4.1.4	Preprocessing .....	11
4.1.5	Künstliches neuronales Netzwerk .....	12
4.2	HSI von zusätzlichen Referenz-Kunststofftypen .....	13
4.2.1	Unterschiedliche PE-Typen.....	13
4.2.2	Polycarbonat.....	13
4.2.3	Polyvinylchlorid.....	14
4.2.4	PLA.....	15
4.2.5	Übersicht aller Referenzkunststoffe .....	16
4.3	HSI von Kunststoffen aus Kompostanlage .....	16
4.3.1	HSI-Aufnahmen der Fremdstoffe.....	17
4.3.2	Ursachen für Unterschiede gegenüber Referenzkunststoffen .....	24
4.3.3	Erkenntnisse .....	25
4.4	Einfluss Probenfeuchtigkeit .....	25
4.5	Preprocessing.....	26
4.5.1	Spectral Binning.....	27
4.5.2	Scatter-Correction bzw. Streuungs-Korrektur.....	28
4.5.3	Glättung.....	32
4.5.4	Spektrale Derivative .....	32
4.5.5	Preprocessing-Routine .....	34
4.6	Modell zur Segmentierung von Kompost und Kunststoff.....	38
5	Zusammenfassung / Schlussfolgerung.....	40
6	Glossar.....	41
7	Verzeichnisse.....	42
7.1	Abbildungen.....	42
7.2	Tabellen .....	43
7.3	Literatur .....	44
8	Anhang .....	45

## Management Summary

### Ausgangslage / Problemstellung

Im vorhergehenden Projekt EUT-P5bb-RS-HS20 wurde die Tauglichkeit von hyperspektraler Bildgebung zur Identifikation von Mikro- und Makroplastik in Kompost untersucht. Dafür wurde ein neuronales Netzwerk mit hyperspektralen Daten von Referenzkunststoffen der Typen Polyethylen (PE), Polystyrol (PS), Polypropylen (PP) und Polyethylenterephthalat (PET) trainiert. Mit diesem Netzwerk konnten Körner der Referenzkunststoffe erfolgreich in Kompostproben erkannt werden. Das Netzwerk konnte die meisten Alltagskunststoffe aber nicht korrekt identifizieren.

Ziel dieser Arbeit war es also zu untersuchen, ob sich die Methode aus dem vorhergehenden Projekt auch zur Erkennung von Alltagskunststoffen aus der Kompostanlage eignet. Daher wurden solche Kunststoffe analysiert, um die Auswirkungen von Umwelteinflüssen auf die hyperspektrale Bildgebung zu untersuchen und mögliche Preprocessing-Schritte zur Kompensation zu definieren.

### Vorgehen

Es wurden hyperspektrale Aufnahmen von diversen Kunststoffen gemacht, die aus einer Kompostanlage aussortiert wurden. Darunter befanden sich unter anderem Stücke von Blumentöpfen, Plastiksäcke in unterschiedlicher Dicke und Farbe und Hygienemasken in unterschiedlich gutem Zustand und mit unterschiedlich starker Verschmutzung. Der Einfluss der Probenfeuchtigkeit wurde separat untersucht, indem von derselben Probe sowohl im ursprünglichen als auch im getrockneten Zustand Aufnahmen gemacht wurden.

### Hauptergebnisse

Die Kombination von SNV-Transformation (standard normal variate) und Savitzky-Golay-Filter erweist sich als gute Preprocessing-Routine für die Betrachtung der Spektren und eine Identifikation der Kunststoffe von Menschaugen. Dabei kann es auch hilfreich sein mit spektralen Derivativen zu arbeiten. Die optimalen Filter-Parameter sind stark von der Probe abhängig und sollten daher jeweils individuell bestimmt werden. Das Gegenteil zeichnete sich beim Training von neuronalen Netzwerken ab: Die Netzwerke, die mit vorbearbeiteten Daten trainiert wurden, erzielten bei sämtlichen Preprocessing-Kombinationen schlechtere Resultate als das Netz, welches anhand der unbearbeiteten Daten trainiert wurde.

Wasser zeigt eine starke Absorptionslinie im Bereich um 1400 nm. Da sich die Feuchtigkeit vor allem in der Kompostprobe ablagert und kaum auf der Kunststoffoberfläche bleibt, sollte die Probenfeuchtigkeit keinen negativen Einfluss auf die Erkennung von Kunststoffen haben. Damit aber unterschiedlich feuchter Kompost korrekt erkannt wird, müssen die neuronalen Netze entsprechend anhand Daten von unterschiedlich feuchtem Kompost trainiert werden.

## 1 Einleitung

In der Schweiz werden jährlich ungefähr 16'000 Tonnen Plastik in landwirtschaftliches Land eingetragen, wovon ungefähr 160 Tonnen im Grund bleiben. Hauptsächlich stammen die Kunststoffe aus Littering (ca. 80 t/a), aus verunreinigtem Gärgut/Kompost, der als Dünger eingesetzt wurde (ca. 50 t/a) und aus Mulch-Filmen (Schätzung: 0.3 – 3 t/a). [1]

Umweltwissenschaftliche Forschung zeigt, dass Makro- (>5 mm), Mikro- (< 5mm) und Nanokunststoffe (<1  $\mu\text{m}$ ) die Funktion von Ökosystemen ernsthaft beeinträchtigen können. Die meisten Techniken zur Kunststoff-Identifikation erfordern, dass die Bodenpartikel zuerst von den Kunststoffpartikeln getrennt werden und anschliessend eine separate Analyse (z.B. Fourier-Transform-Infrarot- oder Raman Spektroskopie) durchgeführt wird. Um eine statistisch relevante Aussage zum Vorkommen von Kunststoff in landwirtschaftlichen Böden abgeben zu können, muss eine grosse Menge an Proben analysiert werden. Mit den aktuellen Methoden bedeutet das einen grossen Zeit- und Personalaufwand und ist somit kostenintensiv und ineffizient.

In der vorhergehenden Projektarbeit EUT-P5bb-20HS-RS wurden bereits Referenzproben der vier Kunststoffe Polyethylen (PE), Polystyrol (PS), Polypropylen (PP) und Polyethylenterephthalat (PET) auf ihre spektralen Features untersucht und Tests zur Kunststofferkennung in Kompost mittels Machine Learning unternommen.

Dabei konnte mit einem simplen neuronalen Netzwerk und einem kleinen Trainingsdatenset (500 Proben à 224 Features pro Kunststoff) eine zuverlässige Erkennung von 2-5 mm grossen Körnern der Referenzkunststoffe in Kompost erzielt werden. Allerdings wurde auch festgestellt, dass bei der Klassifikation von Alltagskunststoffen diverse zusätzliche Challenges auftauchen werden. So gab es um Beispiel bei der Aufnahme von durchsichtigem Kunststoff eine Überlappung der Spektren von Kunststoffprobe und Hintergrund. Liegt also ein Stück einer durchsichtigen PET-Flasche oder eines dünnen Plastiksacks auf einer Bodenprobe, nimmt die hyperspektrale Kamera ein Spektrum auf, das einem Verschnitt der beiden einzelnen Spektren entspricht. Weiter weisen die Aufnahmen von Alltagskunststoffen erheblich stärkeres Rauschen als die der Referenzproben auf und die feinen spektralen Features können zum Teil nur schlecht oder gar nicht ausgemacht werden.

In der vorhergehenden Arbeit (von hier an als P5 referenziert) wurde ein simples neuronales Netzwerk mit der Matlab «Deep Learning Toolbox» erstellt. Um in Zukunft breitere Möglichkeiten und keine Abhängigkeit von proprietärer Software zu haben, soll der Klassifikator aus dem P5 in Python anstelle Matlab programmiert werden.

## 2 Einführung Technologie

### 2.1 Hyperspektrale Bildgebung (HSI)

Für das menschliche Auge sind primär drei Bänder im Bereich 400–700 nm sichtbar (lange, rot wahrgenommene Wellenlängen, mittlere, grün wahrgenommene Wellenlängen und kurze, blau wahrgenommene Wellenlängen). Bei HSI werden eine grosse Zahl Wellenlängen in feiner Auflösung von einigen Nanometern abgedeckt. Die Kamera, die in der Arbeit verwendet wird, nimmt 224 Bänder zwischen 900 und 1700 nm auf. Die Aufnahmedaten werden in einem dreidimensionalen Objekt, einem sogenannten hyperspektralen Würfel, abgespeichert. Jeder Datenpunkt des Würfels beinhaltet Informationen zum Pixel-Standort und zur Reflexion der gemessenen Wellenlängen. Anhand der Reflexion kann ein Spektrum dargestellt werden. Unterschiedliche Moleküle weisen unterschiedliche spektrale Signaturen auf, anhand derer eine Aussage zum Material des Aufnahmeobjekts gemacht werden kann.

### 2.2 Künstliche neuronale Netzwerke (KNN)

Künstliche neuronale Netze werden grundsätzlich in den Bereichen Machine Learning und künstliche Intelligenz eingeordnet. Dabei werden künstliche Neuronen in einer definierten Topologie angeordnet und anschliessend trainiert. Ein Eingangssignal wird durch die Neuronen verarbeitet und gegebenenfalls an weitere Neuronen weitergegeben, bis am Schluss ein Ausgangssignal zurückgegeben wird. Bevor ein KNN verwendet werden kann, muss es trainiert werden. Dabei werden Eingangssignale mit Soll-Ausgangssignalen gepaart an das Netz übergeben. Das Netz passt über mehrere Iterationen die Übergabeparameter (Gewichte) an, um die Ausgangssignale an die Soll-Ausgangssignale anzupassen. Je näher die Ausgangssignale am Soll sind, desto kleiner ist der Fehler des neuronalen Netzes. So können Netze verschiedene Aufgaben bewältigen, wie zum Beispiel Objekterkennung, Vorhersage von Wetterereignissen, Übersetzung von Texten und viele weitere. Eine Möglichkeit ein hyperspektrales Bild zu klassifizieren, ist die Weitergabe der Spektren an ein trainiertes KNN, welches eine Zuordnung macht im Sinne von: Dieses Spektrum gehört zu einem Kunststoff, dieses Spektrum gehört zu einem Nicht-Kunststoff.

## 3 Materialien und Methoden

### 3.1 Referenz-Kunststoffe

Im P5 wurden die Kunststoffe PE, PS, PP und PET untersucht, da diese die Verpackungsindustrie dominieren [2] und Littering und falsch entsorgte Kunststoffe zwei der Haupt-Eintragswege von Kunststoff in den Boden sind [3].

Im P5 wurde ein Typ PE untersucht, aber PE wird grundsätzlich als drei verschiedene Typen eingesetzt: High-Density-Polyethylen (PE-HD), Linear-Low-Density-Polyethylen (PE-LLD) und Low-Density-Polyethylen (PE-LD). Um eine zuverlässigere Aussage zur Herkunft eines Kunststoffs zu machen wurde untersucht, ob sich diese PE-Typen im gewählten Spektralbereich unterscheiden lassen.

Zusätzlich zu den vier Kunststoffen aus dem P5 wurden folgende Kunststoffe untersucht:

- PC: Abdeckungen von Mobiltelefonen, Solarmodule, Campinggeschirr
- PVC: Dominantester Kunststofftyp in der Baubranche
- PLA: Biologisch abbaubare Kunststoffsäcke werden in der Kompostanlage oft nicht schnell genug zersetzt

### 3.2 Kunststoffe aus Kompostanlage

Von der [AVAG Umwelt AG](#) wurde eine Kiste von Fremdstoffen bereitgestellt, die aus Vergärungs- und Kompostieranlagen gefiltert wurden. Nebst Plastik in verschiedenen Formen, Farben und Kunststofftypen hat es auch noch andersartige Fremdstoffe wie Metalle oder Steine dabei. Den grössten Teil der Fremdstoffe machen dabei Kunststoffsäcke aus, weshalb diese genauer betrachtet wurden. Abbildung 1 a-c zeigt einige Beispiele der Fremdstoffe.

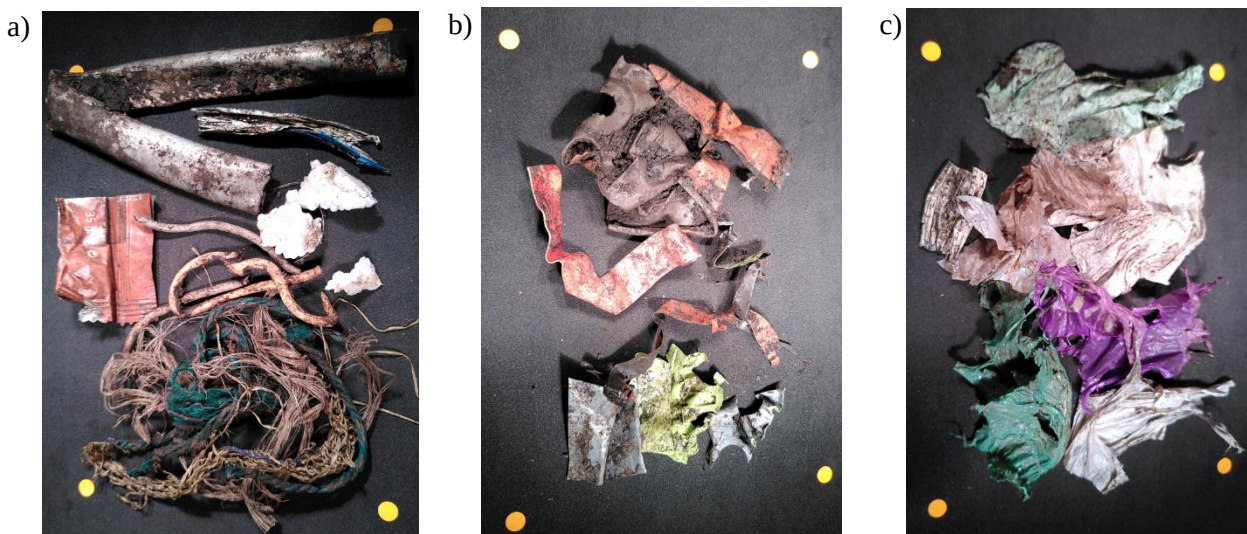


Abbildung 1: Fremdstoffe aus der Kompostieranlage der AVAG

### 3.3 Hyperspektralkamera Specim FX17

Die Specim FX17 ist eine Hyperspektralkamera, die im Bereich von 900–1700 nm aufnimmt und für die Bereiche Mülltrennung, Recycling, Feuchtigkeitsmessungen, Essensqualität und Sicherheit ausgelegt ist. Die Kamera arbeitet mit räumlichem Scanning (line-scan), hat in der Breite eine Auflösung von 640 Pixel und nimmt 224 Bänder im Arbeitsbereich auf (Auflösung von ca. 3.5 nm). Es ist ein InGaAs (Indiumgalliumarsenid) Sensor verbaut. Mit dem Laboraufbau sind Aufnahmen mit einer Breite von 20 cm und einer Länge von 40 cm möglich. Das technische Datenblatt der Kamera befindet sich im Anhang als «Specim-FX17-Datasheet.pdf».

### 3.4 Python

Sämtlicher Code wurde in Python 3.10 entwickelt. Dafür wurden die unten aufgelisteten Libraries (heruntergeladen von pypi) eingesetzt; installiert wurde jeweils die neuste Version. Sämtliche eingesetzte Modul sind frei erhältlich, ohne dass kommerzielle Lizenzen benötigt werden.

List der Nicht-Standard Module:

- Spectral Python
- Pandas, Numpy
- Matplotlib
- Scipy
- Plotly
- Tensorflow, Keras
- Sklearn
- Pydot/graphviz
- Ipykernel/ipyml
- Pyqt5

Im Anhang lässt sich das «pipfile» finden, womit das virtuelle Python Environment installiert werden kann (alternativ auch mit «requirements.txt»).

#### **Spectral Python (SPy)**

Spectral Python (SPy) (Dokumentation: <https://www.spectralpython.net>) ist ein Python Modul, um hyperspektrale Daten zu verarbeiten. Hyperspektrale Daten mit ENVI headers – wie sie die eingesetzte Software der HSI-Kamera produziert – können eingelesen, untersucht und weiterverarbeitet werden.

Es lassen sich beispielsweise die Aufnahmen als False-RGB-Bild darstellen, wobei drei gewählte Wellenlängen für die Darstellung in RGB verwendet werden, oder es können Spektren einzelner Pixel

direkt angezeigt werden. Das Modul bietet auch einige Möglichkeiten zu Image Segmentation und Machine Learning, welche aber nicht verwendet wurden.

### **Pandas, Numpy**

Pandas ist ein Modul zur Datenverarbeitung in Python. Nebst den DataFrame-Objekten, welche optimal zur Verarbeitung von indizierten Daten sind, können Daten aus text-basierten Formaten eingelesen oder gespeichert werden. Mithilfe der Pandas DataFrames lassen sich ausserdem Daten in alle Richtungen transformieren oder aufteilen. Numpy wird für Pandas verwendet und ist das Modul für alle unterliegenden mathematischen Funktionen.

### **Matplotlib, Plotly**

Plotly und Matplotlib sind zwei Module zum Plotten von diversen Daten in diversen Formen. Durch unterschiedliche Vor- und Nachteilen der beiden Libraries wurden beide parallel für unterschiedliche Zwecke eingesetzt.

### **SciPy**

SciPy ist ein Modul, das aufgrund seiner vielfältigen Funktionen in diversen Bereichen wissenschaftlicher Programme eingesetzt wird. In der Arbeit wurden die Module für Signal- und Bildverarbeitung verwendet.

### **Tensorflow, Keras, Sklearn**

Tensorflow ist ein Modul für Machine Learning und künstliche Intelligenz und wurde in diversen Programmiersprachen implementiert. Keras bietet eine Python-API aufbauend auf TensorFlow2. Sklearn ist ein Modul, welches diverse Funktionen für Machine Learning bietet und wurde als Ergänzung zu Tensorflow eingesetzt.

### **Pydot/Graphviz**

Pydot/Graphviz wurden dafür verwendet, die Struktur der Tensorflow-Modelle zu plotten.

### **Ipykernel/Ipyml**

Ermöglicht die Verwendung von Jupyter Notebooks und bietet Unterstützung für Matplotlib in Jupyter Notebooks.

### **PyQt5**

UI-Library für Python. Wurde verwendet, um Graphen in einem separaten Fenster anstelle inline in den Jupyter Notebooks zu öffnen.

## 4 Resultate und Diskussion

### 4.1 Rebuild Matlab-Klassifikator von P5 in Python

Der Matlab-Klassifikator aus dem P5 ist im Stande die vier Referenzkunststoff-Körner auf verschiedenen Untergründen zu klassifizieren, was als Anforderung an einen Klassifikator mit Python übernommen wurde. Für das Training wurden dieselben Daten von Kunststoffen, Kompost und Hintergrund eingesetzt, die auch im P5 verwendet wurden. Eigens entwickelte Funktionen sind daran zu erkennen, dass sie nur mit dem Funktionsnamen referenziert und violett eingefärbt sind, wohingegen Funktionen aus heruntergeladenen Modulen den jeweiligen Modulnamen als Prefix haben (z.B. *get\_hsi\_capture()* vs. *spectral.imshow()*). Alle eigens entwickelten Methoden sind im Anhang unter «python\data\_handling.py» zu finden.

#### 4.1.1 Einlesen HSI-Daten

Die Funktion *get\_hsi\_capture()* sucht anhand vom Parameter «capture\_name» innerhalb des Parameters «data\_folder» den Ordner einer HSI-Aufnahme. Wird der Ordner gefunden, wird mittels SPy anhand von Header- und Daten-File die HSI-Aufnahme eingelesen und als SpyFile (bzw. Subclass BilFile) zwischengespeichert. Objekte der Klasse SpyFile enthalten Informationen dazu, wie die Aufnahme vom Programm zu verarbeiten ist. Grundsätzlich werden so nur die Informationen im RAM zwischengespeichert, wo sich die HSI-Aufnahme befindet, ohne die kompletten Daten ins RAM zu laden. Um die Daten ins RAM zu laden, kann *capture.load()* aufgerufen werden, dann ist die Aufnahme aber an der X-Achse gespiegelt. Dafür wurde die Funktion *load\_hsi\_data()* (Abbildung 1, Zeile 7) geschrieben, mit der die Daten korrekt gespiegelt eingelesen werden. Von der Funktion wird ein *spectral.image.ImageArray* zurückgegeben.

```

1 from data_handling import get_hsi_capture, load_hsi_data
2
3 root = "D:\OneDriveFHNW\FHNW\EUT-P6bb-21HS-RS_M365 - General\captures\old"
4 capture_name = "Referenzmaterialien_(oben_nach_unten)"
5
6 capture = get_hsi_capture(capture_name, root)
7 data = load_hsi_data(capture)

```

✓ 2.4s Python

```

INFO:data_handling: Data Source: 'D:\OneDriveFHNW\FHNW\EUT-P6bb-21HS-RS_M365 -
General\captures\old\qd_Referenzmaterialien_(oben_nach_unten)_PE_-_PET_-_PP_-_PS_2020-07-10_12-39-
11\capture\REFLECTANCE_qd_Referenzmaterialien_(oben_nach_unten)_PE_-_PET_-_PP_-_PS_2020-07-10_12-39-11.dat'
# Rows: 869
# Samples: 640
# Bands: 224
Interleave: BIL
Quantization: 16 bits
Data format: uint16

```

Abbildung 2: Beispiel: Einlesen einer HSI-Datei

### 4.1.2 Visualisieren HSI-Daten

Die zuvor eingelesenen Daten können auf verschiedene Weise betrachtet werden. Eine Möglichkeit bietet die Funktion `spectral.imshow()`. An die Funktion können Bild-Daten und RGB-Bänder mitgegeben werden, um ein False-RGB-Bild darzustellen. Damit Bilder, bei denen es an einzelnen Punkten extrem hohe Reflexionen hat, nicht nahezu schwarz dargestellt werden, werden die Bild-Daten



Abbildung 3: Darstellen von HSI als False-RGB

via der Funktion `limit_reflectance()` an `spectral.imshow()` weitergegeben. Damit wird die Reflexion aller Punkte auf allen Wellenlängen auf einen spezifischen Schwellenwert limitiert (default 8500). Zu beachten ist hier, dass die Daten noch unverarbeitet sind und daher die Unterscheidung der verschiedenen Kunststoffe nicht gleich gut funktioniert wie bei verarbeiteten Daten.

### 4.1.3 ROI-Auswahl

Für das Training des Neuronalen Netzwerks wurden ROIs (Range of Interest) von den Einzelaufnahmen der Referenzkunststoffe ausgewählt. Wo möglich, wurde ein Rechteck der Grösse 100x100 Pixel ausgewählt. Bei PS ging dies nicht, da es kein genug grosses Feld mit verwertbaren Daten gab. Daher wurde für PS ein Feld der Grösse 40x40 Pixel ausgewählt. Die ROIs ergeben zusammen ein Datenset von 51'600 Punkten und 5 Kategorien, wovon je 10'000 davon LDPE, PP, PET und Hintergrundmaterial sind und 1'600 Punkte PS sind.

Die Abbildungen mit den eingerahmten ROIs wurden mit der Funktion `display_roi_rectangle()` produziert. Die ROI-Daten zur Weiterverarbeitung wurden mit der Funktion `get_2d_roi()` extrahiert.

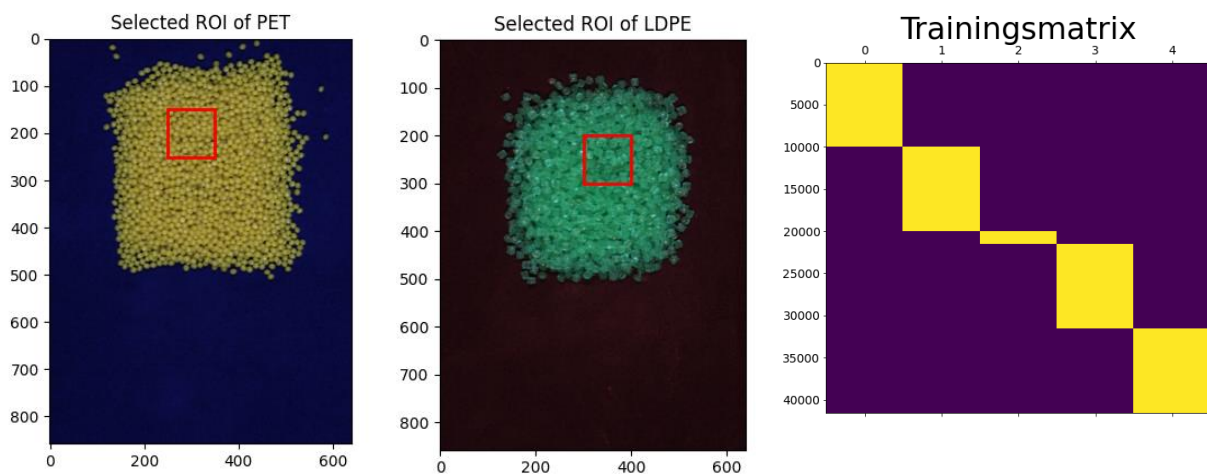


Abbildung 4: Zwei Beispiele für ROIs und die daraus resultierende Trainingsmatrix

### 4.1.4 Preprocessing

Vor dem Training werden die Features der Daten mit einem Scaler von scikit learn auf einen Bereich zwischen 0 und 1 skaliert. Dafür wird ein `scikit.preprocessing.MinMaxScaler()` eingesetzt. Mit der Methode `scaler.fit()` werden vom Scaler das Minimum und Maximum jeder Wellenlänge des gegebenen Datenset identifiziert. Die Methode `scaler.transform()` greift auf die eingelesenen Werte zu und transformiert die Trainingsdaten dementsprechend. Die Transformation wird durch folgende mathematische Operation durchgeführt:

$$X\_std = (X - X.min(axis = 0)) / (X.max(axis = 0) - X.min(axis = 0))$$

$$X\_scaled = X\_std * (max - min) + min$$

Der Scaler wird anschliessend mit dem Modul pickle und dessen Methode `pickle.dump()` serialisiert und als byte-file abgespeichert, damit bei der Klassifikation der Scaler wieder geladen und die zu klassifizierenden Daten anhand derselben Kriterien transformiert werden können.

Für den Nachbau des Klassifikators aus dem P5 wurden keine weiteren Transformationen wie z.B. Glättung oder scatter-correction vorgenommen.

#### 4.1.5 Künstliches neuronales Netzwerk

Mit `keras.models.Sequential()` wird ein lineares Neuronales Netzwerk initialisiert. Mit einem Netzwerk bestehend aus Input, Output, zwei Dense-Layers und einem Dropout-Layer dazwischen konnten zufriedenstellende Ergebnisse erzielt werden. Das Modell wurde mit der Loss-Funktion «categorical\_crossentropy» und dem Optimizer «Stochastic Gradient Descent (SGD)» und einer Learning-Rate von 0.001 kompiliert. Das Netzwerk wurde über 25 Iteration trainiert und erzielte anschliessend die Klassifikation, die auf Abbildung 5 zu sehen ist. Das LDPE-Korn und die drei PP-Körner, die bei der PET-Gruppe beigelegt sind, wurden korrekt identifiziert. Die Kunststoffe LDPE, PET und PP konnten mit ausreichender Zuverlässigkeit klassifiziert werden. Bei der PS-Gruppierung gibt es einige Falschklassifikationen, wo PS als PET erkannt wird. Da der Hauptfokus der Arbeit nicht darauf liegt, den Klassifikator für die Laborkunststoffe zu optimieren, wird das Resultat so als ausreichend bewertet.

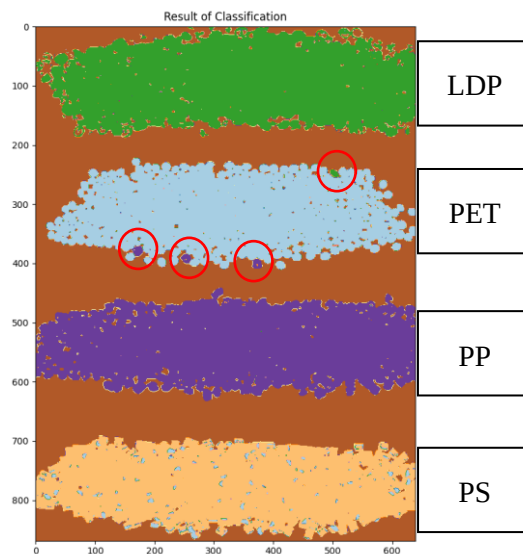


Abbildung 5: Klassifikation der vier Laborkunststoffe

## 4.2 HSI von zusätzlichen Referenz-Kunststofftypen

Im P5 wurden Referenzen der Kunststofftypen Polyethylen (PE), Polystyrol (PS), Polypropylen (PP) untersucht und Polyethylenterephthalat (PET). Zusätzlich zu den bereits vorhanden Referenzen wurden Polylactatsäure (PLA), Polycarbonat (PC) und Polyvinylchlorid (PVC) untersucht. Ausserdem wurden verschiedene Polyethylen-Typen verglichen: Linear Low-Density Polyethylene (LLDPE), Low-Density Polyethylene (LDPE) und High-Density Polyethylene (HDPE).

### 4.2.1 Unterschiedliche PE-Typen

Zum Vergleich der Polyethylene wurde pro Typ eine Aufnahme mit einem Häufchen des Granulats erstellt. Davon wurde ein ROI von 150x150 Pixel definiert, der für den Vergleich betrachtet wird. Die Datensets der ROIs wurden mit dem SNV-Verfahren transformiert ([standard normal variate](#)) und die Spektren anschliessend über die 22'500 Punkte gemittelt. Die drei Kunststoffe zeigen keine eindeutigen Identifizierungsmerkmale im Spektralbereich von 900 – 1700 nm, an denen sich die PE-Typen unterscheiden liessen. Durch das SNV-Verfahren ergeben sich Spektren mit Mittelwert gleich Null, daher die negativen Werte für die Reflektanz auf dem Graphen in Abbildung 6.

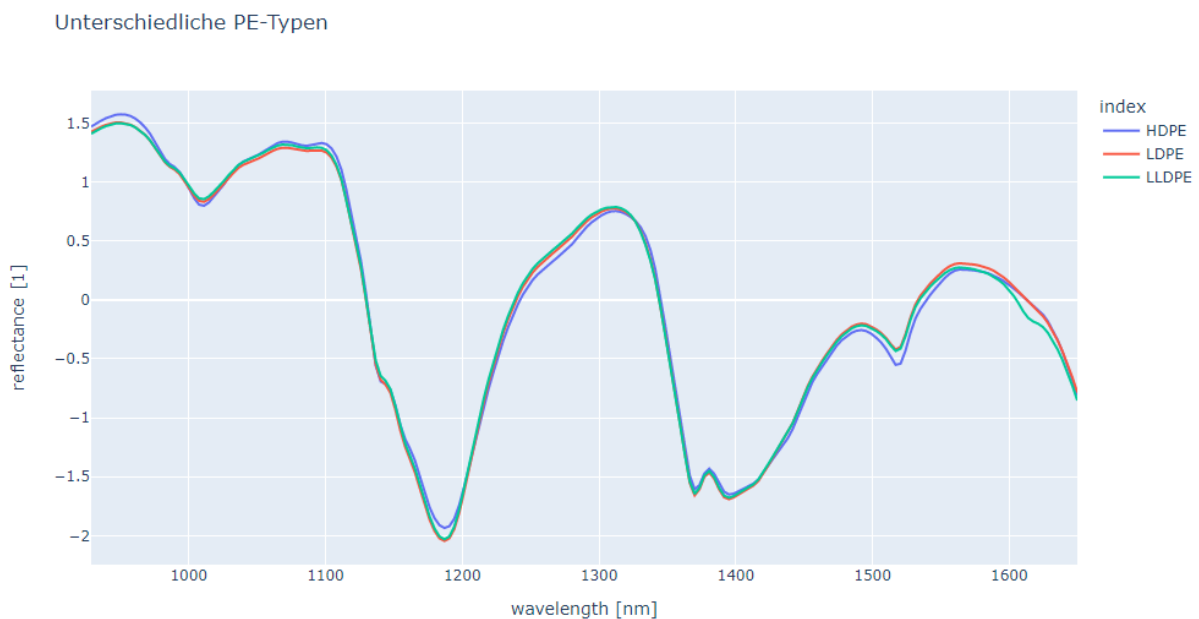


Abbildung 6: Spektren unterschiedliche PE-Typen (HDPE, LDPE und LLDPE)

### 4.2.2 Polycarbonat

Polycarbonat ist wie Polystyrol ein Thermoplast und ist transparent und hart. Bei transparenten Materialien kommt es vor, dass die Reflexion des darunterliegenden anstatt des gewünschten Materials aufgenommen wird, wie dies zum Beispiel im P5 bei PET-Flaschen beobachtet wurde.

Optisch, von der Konsistenz und auch von der Spektrallinie befindet sich PC am nächsten bei PS. Anhand desselben Vorgehens wie bei den Polyethylenen (SNV-Transformation und Mittelwert-

Bildung) wurden die beiden Kunststoffe in der Abbildung 7 nebeneinander geplottet. Nebst einer leichten Verschiebung auf der X-Achse (Wellenlänge) zeigen sich auch einige Features in den Spektrallinien, anhand derer sich die Mittelwerte der Kunststoffe unterscheiden lassen. Bei weniger klaren Aufnahmen (z.B. stärkeres Rauschen) besteht die Möglichkeit, dass sich die beiden Kunststoffe nicht mehr unterscheiden lassen, da sich die feinen Features nicht klar genug abzeichnen.

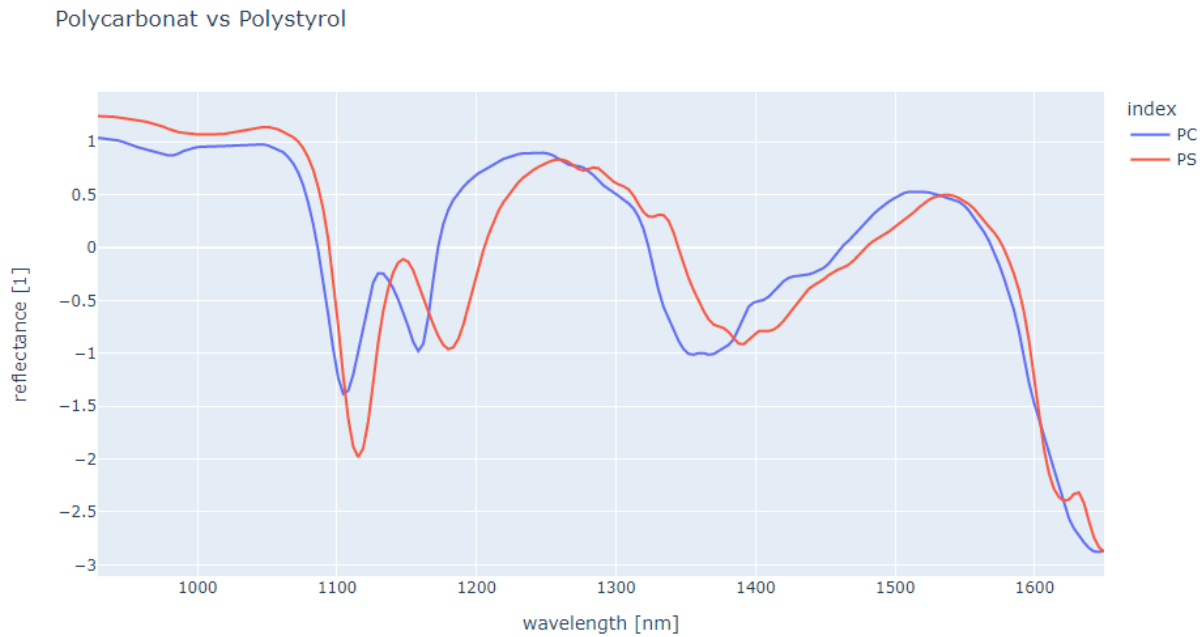


Abbildung 7: Polycarbonat und Polystyrol Mittelwert-Spektren, abweichende Features eingekreist

### 4.2.3 Polyvinylchlorid

Vom Kunststofflabor der FHNW konnte nur ein Typ PVC organisiert werden, wobei es sich um ein Recycling-Produkt handelt. Die erhaltenen PVC-Pellets haben eine dunkle braun-graue Farbe, die NIR-Licht stark absorbiert und somit nicht genügend Licht reflektiert, um ein korrektes Spektrum aufzunehmen. Die Abbildung 8 zeigt auf dem linken Graphen einen Vergleich zwischen schwarzem und weissem PVC, wobei das schwarze Material kaum reflektiert. Im rechten Graphen sind PVC und HDPE

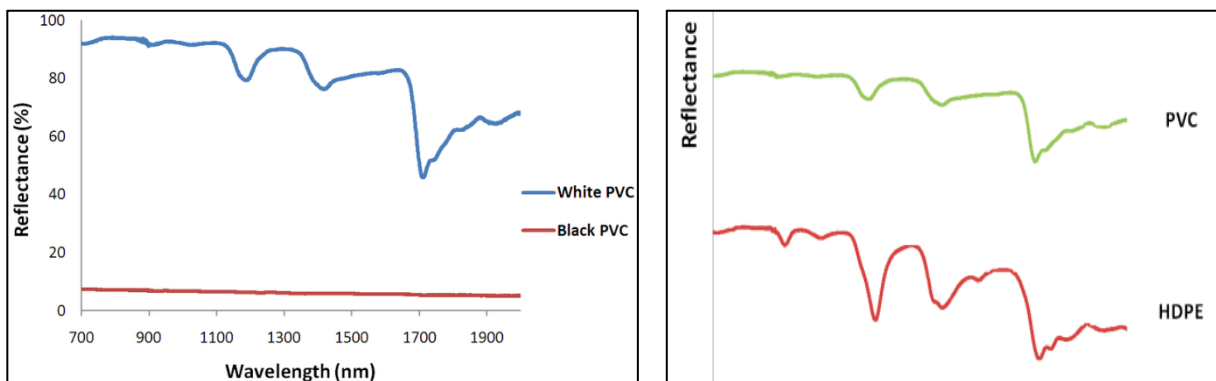


Abbildung 8: Links: Vergleich zwischen schwarzem und weissem PVC, Rechts: Vergleich zwischen HDPE und PVC [4]

(der Kunststoff der untersuchten Typen, dessen Reflexion der von PVC am nächsten ist) übereinander geplottet, um aufzuzeigen, dass sich PVC grundsätzlich von den anderen Kunststoffen unterscheiden liesse.

#### 4.2.4 PLA

Für die Referenzaufnahme von PLA konnte kein Granulat organisiert werden, daher wurden kompostierbare Kunststoffsäcke der Axpo verwendet. Der besonders auffällige Unterschied gegenüber den anderen Kunststoffen ist das Fehlen eines deutlichen Maximums zwischen 1450 – 1550 nm, das alle anderen Referenzkunststoffe aufweisen. Auch ist das Minimum bei 1180 nm im Vergleich viel weniger stark ausgeprägt. PLA sollte klar von den anderen Kunststoffen unterschieden werden können. Es empfiehlt sich PLA noch in unterschiedlichen Zersetzungszuständen zu untersuchen, da sich das Spektrum während der Kompostierung verändern könnte.

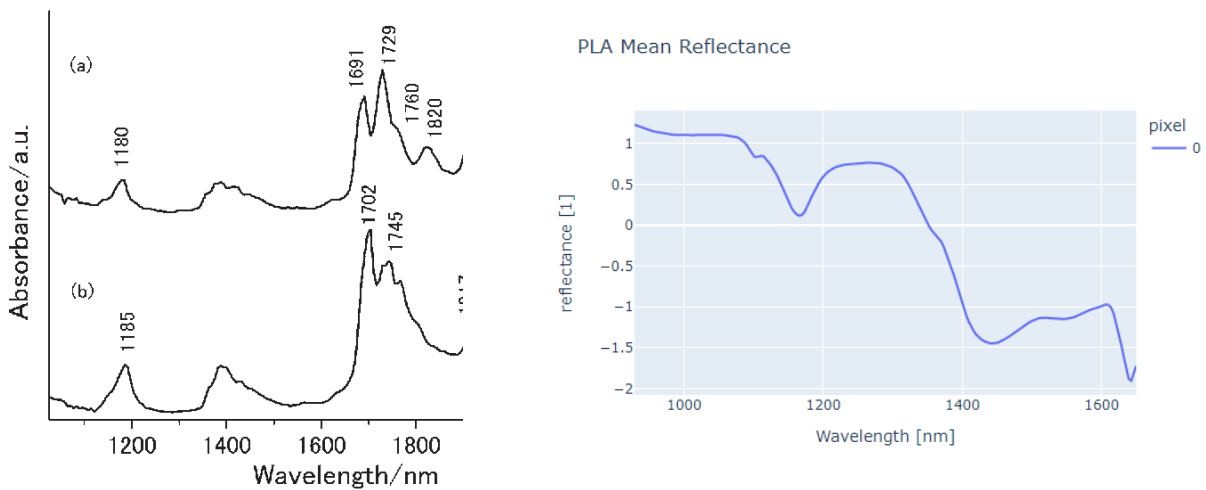


Abbildung 9: Links: PLA Absorptions-Spektrum aus Publikation [3]; Rechts: Gemessenes PLA Reflexions-Spektrum

#### 4.2.5 Übersicht aller Referenzkunststoffe

Aufgrund der Erkenntnisse in Abschnitt «[Unterschiedliche PE-Typen](#)» wurde LDPE als einziger Typ PE als Referenzkunststoff aufgenommen. PVC wurde nicht mit aufgenommen, da kein passendes Granulat besorgt werden konnte. Die Aufnahmen der Referenzkunststoffe wurden für die Abbildung 10 mit SNV transformiert, eine Glättung wurde nicht vorgenommen. Die Ansicht der gemittelten Spektren der Referenzproben kann mit der Datei «references\_plot.ipynb» erstellt und im Browser interaktiv betrachtet werden.

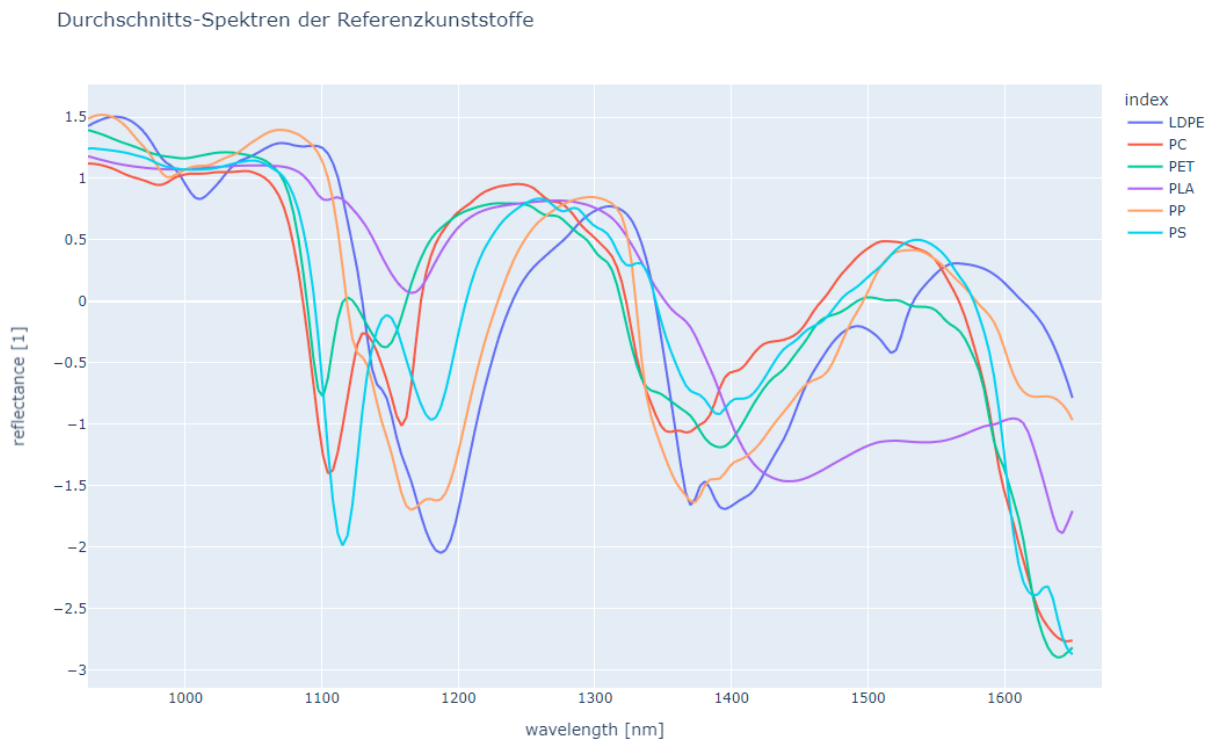


Abbildung 10: Durchschnittliche Spektren der sechs Referenzkunststoffe, SNV transformiert

#### 4.3 HSI von Kunststoffen aus Kompostanlage

Von diversen Kunststoffproben aus einer Kompostanlage wurden hyperspektrale Aufnahmen erstellt und analysiert. Die Kunststoffproben wurden in verschiedene Grössen zerteilt und danach auf dem normalen Hintergrundmaterial des Probenstischs, wie auch auf Kompost aufgenommen. Der Kunststoffteil der Fremdstoffe bestehen grösstenteils aus Plastiksäcken und Plastik-Gegenständen, die bei Gartenarbeiten eingesetzt werden, wie zum Beispiel Blumentöpfe oder Beet-Abtrennungen.

### 4.3.1 HSI-Aufnahmen der Fremdstoffe

Folgend einige Beispielaufnahmen von Fremdstoffen aus der Kompostanlage. Dargestellt ist jeweils ein RGB-Bild, ein False-rgb-Bild mit den Wellenlängen 1115 nm, 1187 nm und 1509 nm sowie Spektren von 500 zufällig ausgewählten Pixel und das Mittelwerts-Spektrum des ROIs. Die Spektren wurden nicht transformiert.

#### 4.3.1.1 Blumentöpfe

Die unbearbeiteten Daten in Abbildung 11 zeigen eine starke Verschiebung auf der Y-Achse, die wahrscheinlich durch die raue Oberfläche und die dadurch unterschiedliche Oberflächenbeschaffenheit

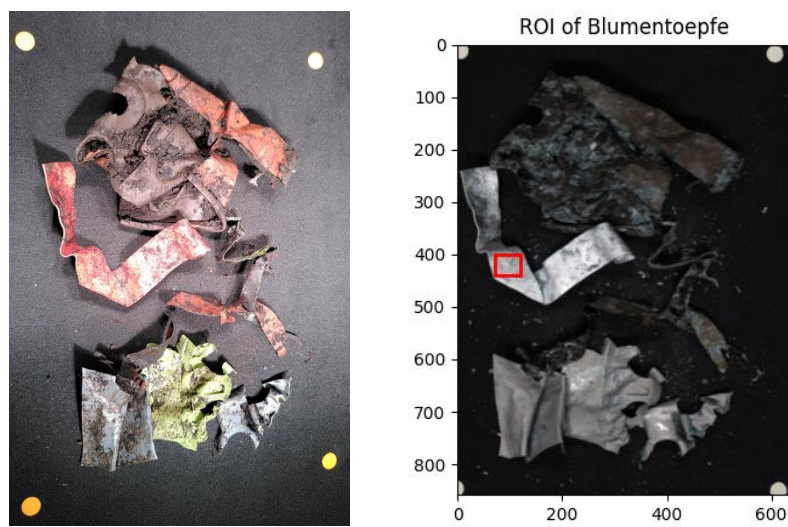


Abbildung 11: Links: RGB-Bild, Rechts: HSI-Bild mit ausgewähltem ROI

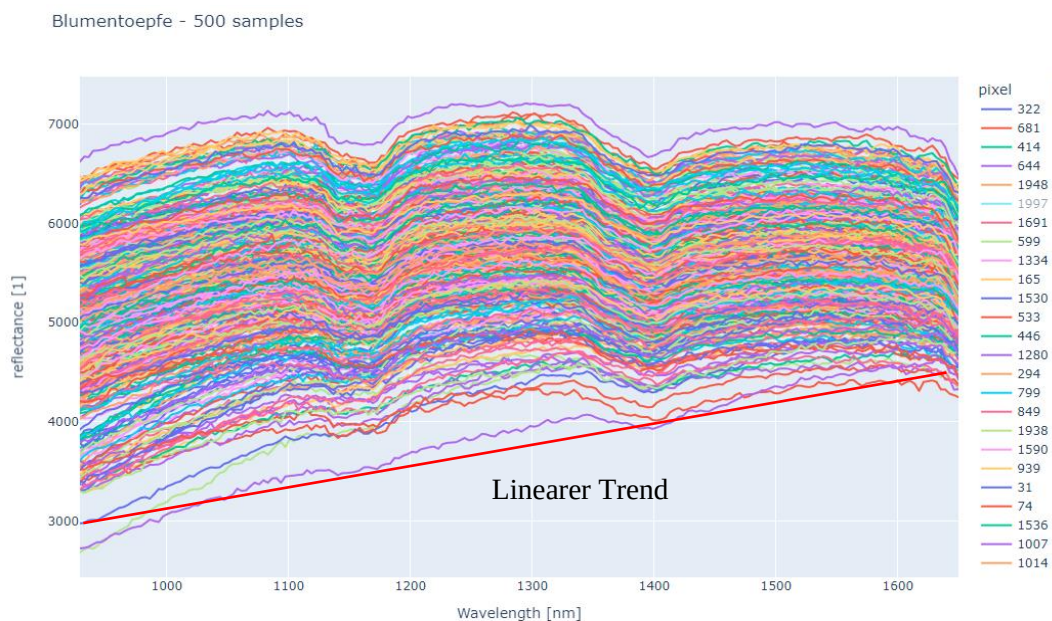


Abbildung 12: Spektren von 500 zufälligen Pixel aus dem ausgewählten ROI des Blumentopf-Stücks

der einzelnen Pixel erklärt werden kann. Einige Spektrallinien zeigen auch einen linearen Aufwärtstrend.

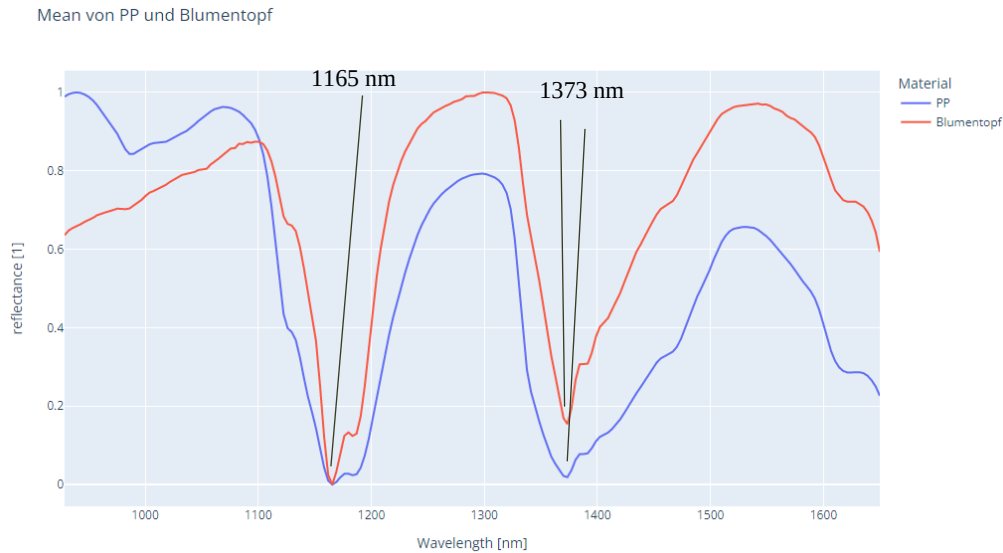


Abbildung 13: Durchschnitts-Spektren von PP und Blumentopf, skaliert zwischen 0 und 1

Durch die Mittelung über die ganze Fläche verbessert sich das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis. So lässt sich beim Vergleich der beiden Mittelwerts-Spektren des Blumentopfs und von PP (Abbildung 13) anhand der beiden markierten und den direkt daneben liegenden Minima/Maxima vermuten, dass es sich beim Blumentopf um PP handelt.

### 4.3.1.2 Mund-Nasen-Schutz

Der betrachtete Mund-Nasen-Schutz (MNS) ist über die ganze Fläche verteilt ungleichmässig schmutzig. Für einen direkten Vergleich wurden zwei ROIs gewählt, einer im sauberen und einer im schmutzigen Bereich.

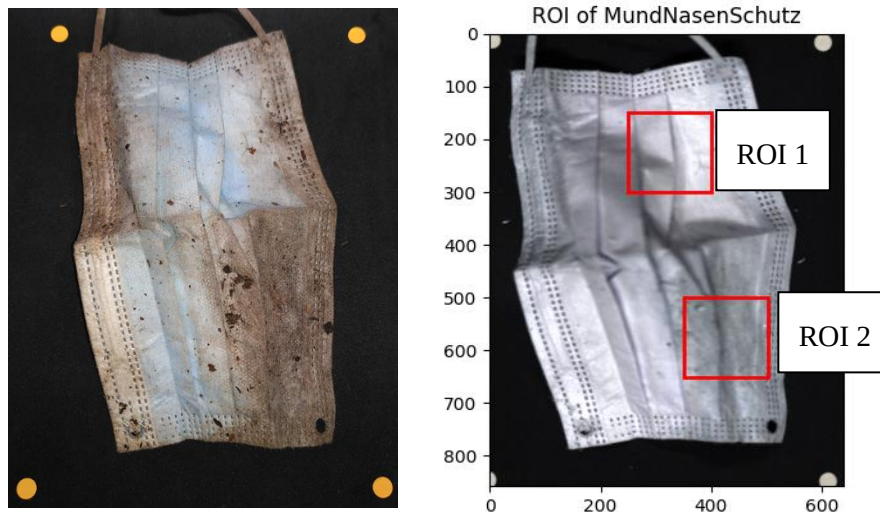


Abbildung 14: Links: RGB-Bild, Rechts: False-RGB-Bild anhand der HSI-Daten und ausgewählte ROIs

In Abbildung 15 ist ersichtlich, dass die Verschmutzung der Probe einen Einfluss auf die HSI-Aufnahme hat. Es ergibt sich ein stärkere lineare Verschiebung und die Minima bei 1150-1170nm und 1370nm werden weniger deutlich.

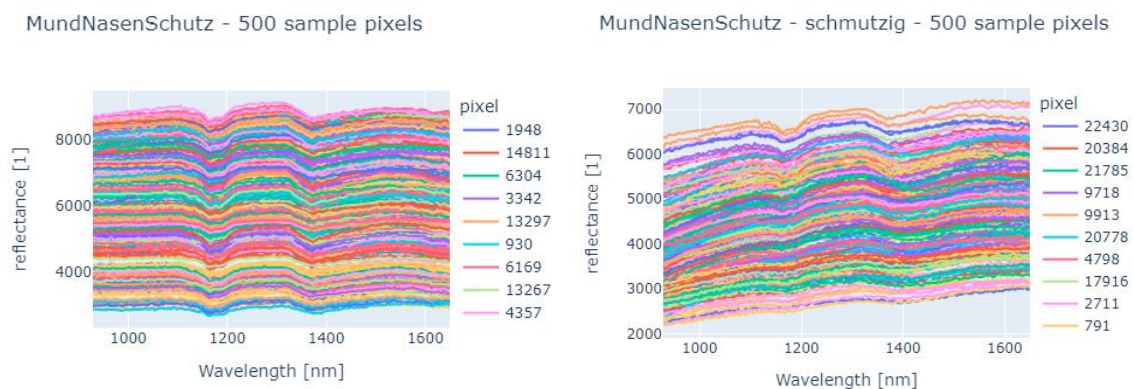


Abbildung 15: Links: 500 Samples MNS (ROI 1), rechts: 500 Samples MNS schmutzig (ROI 2)

Der multiplikative Effekt wird deutlicher, wenn man die Mittelwert-Spektren der beiden ROIs betrachtet (Abbildung 16). Bei der sauberen Stelle ergibt sich zwischen der Reflektanz von Band 1 (929nm) und Band 210 (1650nm) ein Verhältnis von 1:1, beim schmutzigen ROI ist das Verhältnis der beiden äussersten Bänder 1:1.28.

Anhand der Mittelwert-Spektren ist es naheliegend, dass es sich um eine PP-Maske handelt, wie diese im Handel üblicherweise erhältlich sind. [5]

Durchschnitts-Spektrum ROI 1 und ROI 2 von MNS

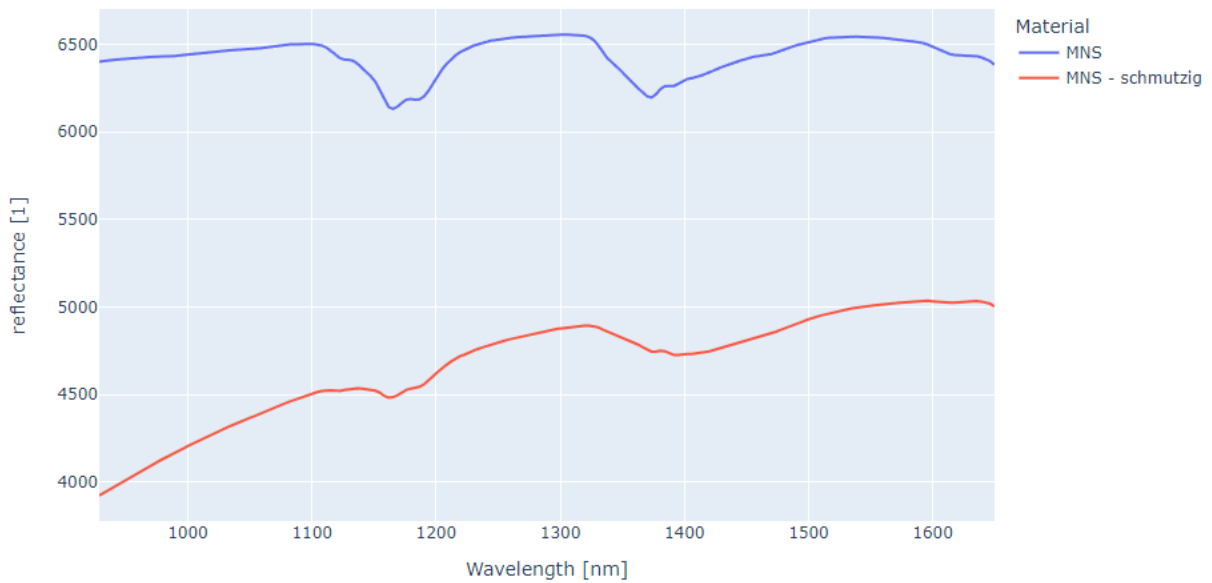


Abbildung 16: Durchschnitts-Spektren von ROI 1 (sauber) und ROI 2 (schmutzig) des Mund-Nasen-Schutzes

### 4.3.1.3 Plastiksäcke ohne Kompost

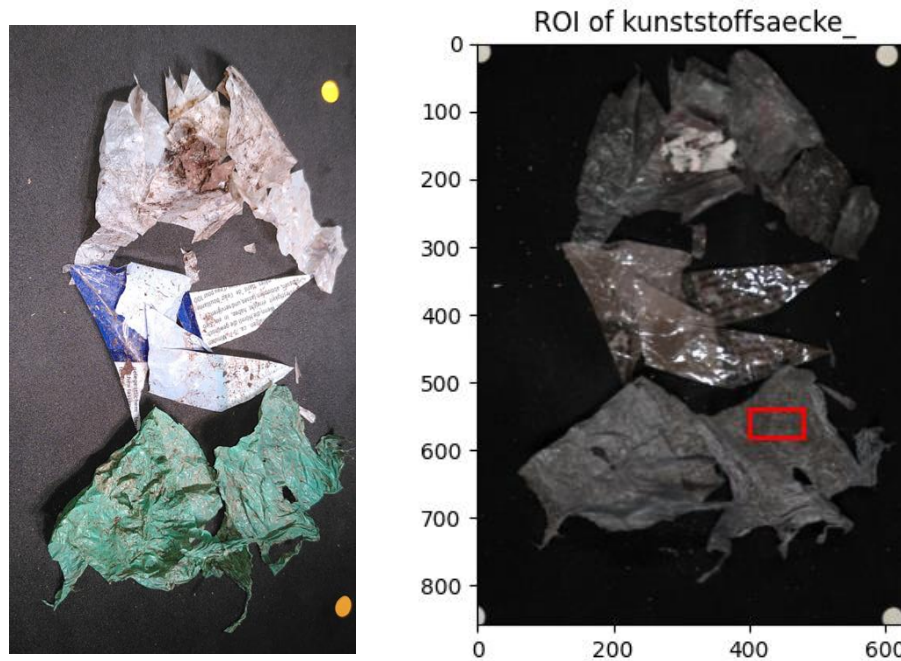


Abbildung 17: Links: RGB-Bild, rechts: False-RGB-Bild mittels HSI-Daten und Markierung ROI

Die Aufnahmen der Kunststoffsäcke zeigen ähnlich undeutliche Spektren wie die vorigen Aufnahmen, auch wenn die Plastiksäcke nicht überaus schmutzig sind. Dazu kommt, dass sie so dünn sind, dass ein Teil der Reflexion des darunterliegenden Materials gemessen wird, da das Licht die Kunststoffsäcke komplett durchdringt. Es lassen sich grundsätzlich noch weniger Features erkennen als bei den anderen Proben. Die Amplitude der einzelnen Spektren ist sehr gering mit Werten von oftmals unter 500 (Vgl. Referenzkunststoffe Amplitude von ca. 4000).

kunststoffsaecke\_ - 500 sample pixels

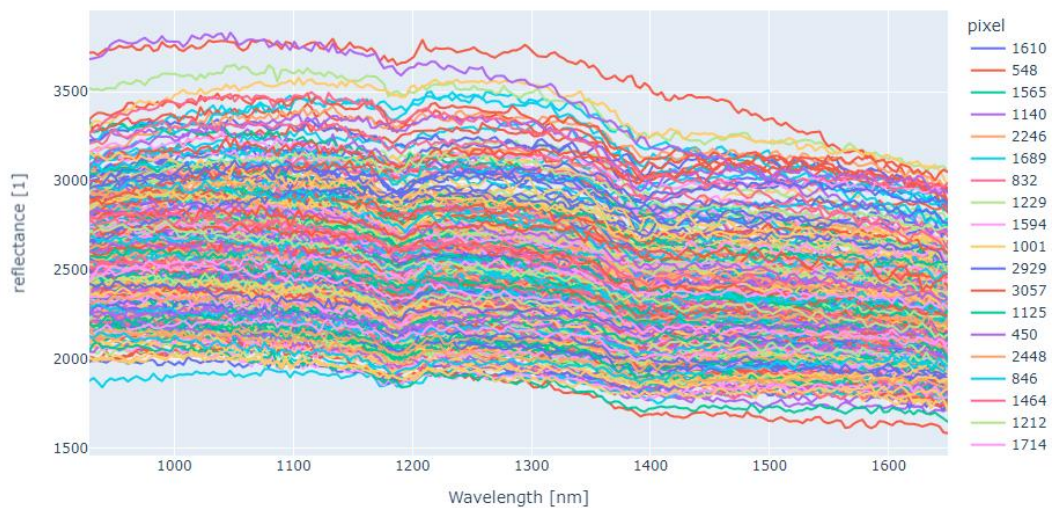


Abbildung 18: Unbearbeitete Spektren von 500 sample pixels eines Kunststoffsacks

Auch hier können beim Mittelwert-Spektrum mehr Informationen erkannt werden. Die beiden prominenten Minima im Mittelwert-Spektrum bei 1190 nm und 1399 nm des Plastiksacks passen zu den Minima von PE. Im Mittelwert-Spektrum wird ausserdem ein klarer linearer Trend sichtbar.

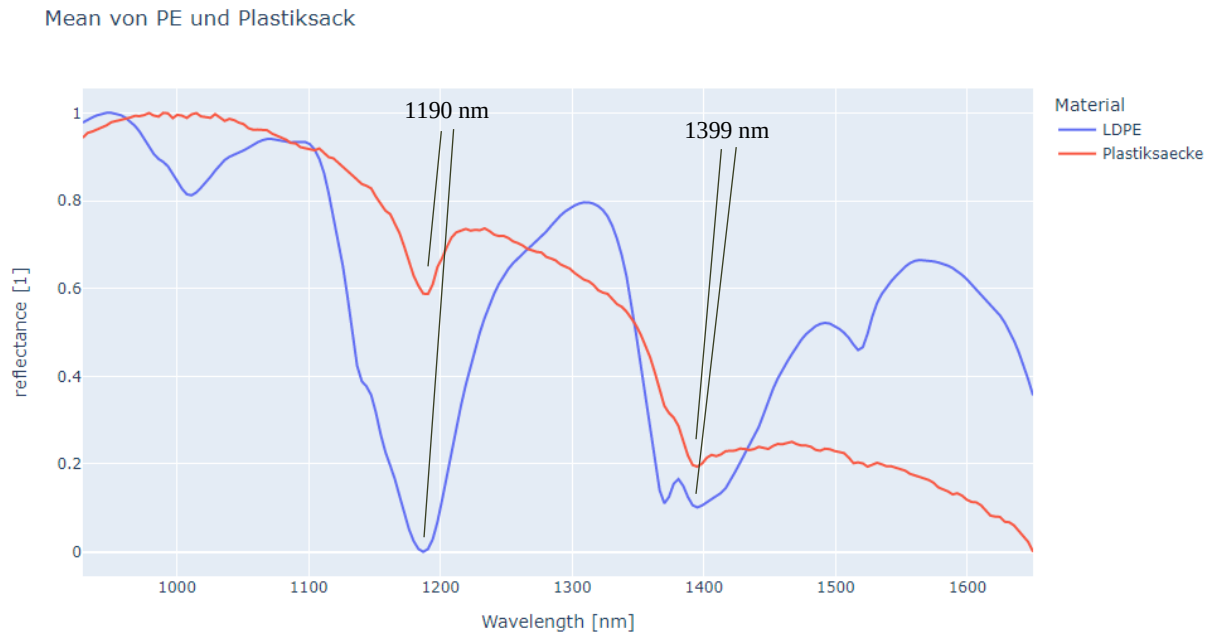


Abbildung 19: Mittelwert-Spektren von LDPE und einem Plastiksack. Korrelierende Minima markiert

#### 4.3.1.4 Plastiksäcke auf Kompost

Wie im vorigen Kapitel bereits erwähnt, wird durch die geringe Dicke der Plastiksäcke ein Teil des Lichts durch die Säcke transmittiert und kann vom darunterliegenden Material absorbiert/reflektiert werden. Das Spektrum verändert sich, je nachdem welcher Untergrund sich unter den Kunststoffsäcken befindet. Liegt der Sack auf dem Probenstisch ist dies nicht weiter problematisch, da dieser das Licht im betrachteten Spektralbereich fast komplett absorbiert. Dadurch wird zwar die gemessene Intensität der Reflexion geringer, aber die Features der Linie verändern sich nicht grundsätzlich. Befindet sich aber ein Untergrund mit eigenen spektralen Features darunter, kann es sein, dass der Kunststoff falsch klassifiziert wird. Beim Vergleich des Kunststoffes auf dem Probenstisch in Abbildung 17 und dem

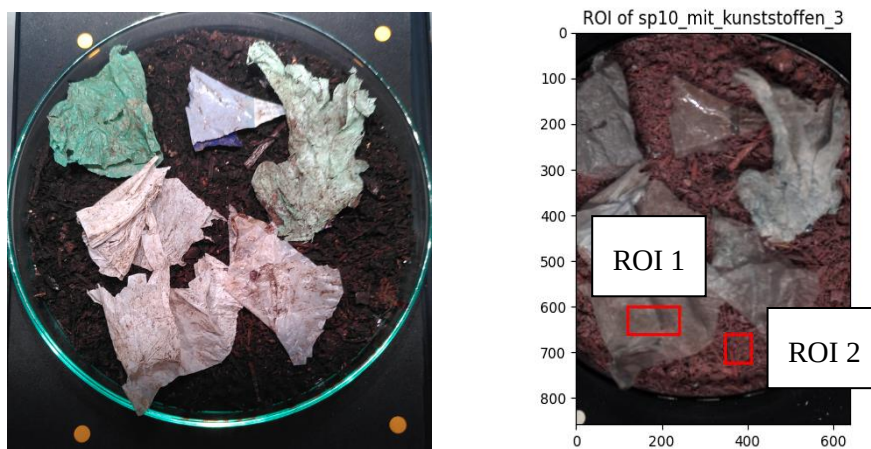


Abbildung 21: Links: RGB-Bild, Rechts: False-RGB-Bild anhand der HSI-Daten und ausgewählte ROIs

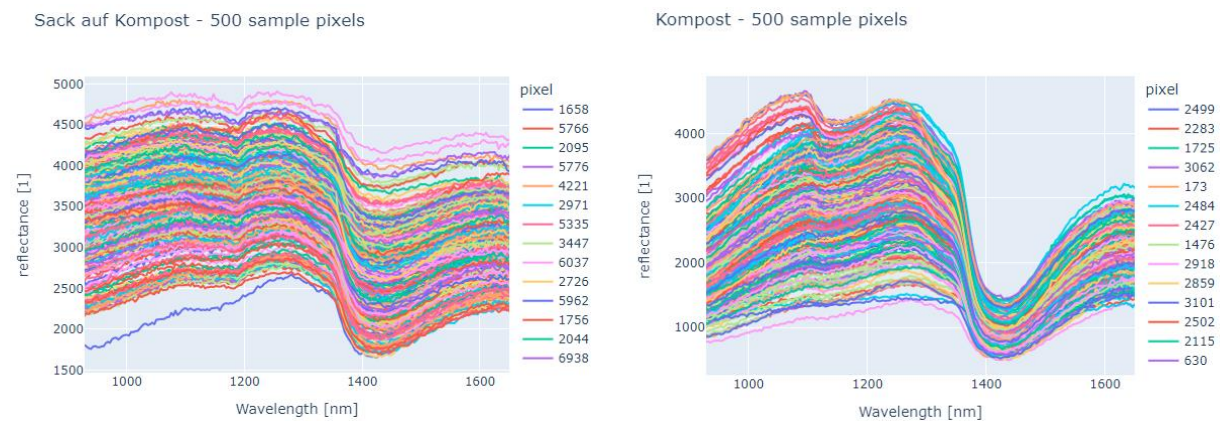


Abbildung 20: Links: 500 sample pixels von Plastiksack auf kompost (ROI 1), rechts: 500 sample pixels von Kompost (ROI 2)

Kunststoff auf dem Kompost-Hintergrund in Abbildung 21 (links), fällt vor allem das Minima bei 1430 nm auf, das nur beim Kunststoff auf Kompost-Hintergrund auftaucht. Wahrscheinlich wird teilweise die Reflexion des Komposts unter dem Plastiksack, anstelle derjenigen des Plastiksacks gemessen.

Beim Vergleich der Mittelwerte der Spektren der beiden ROIs fällt das Minimum bei 1430 nm noch stärker auf (Abbildung 22). Das Minimum des Komposts bei 1133 nm hat wahrscheinlich einen kleineren Einfluss auf das Plastiksack-Spektrum, da das Feature auch beim reinen Kompost weniger ausgeprägt ist. Das Minimum bei 1190 nm stammt wahrscheinlich vom Plastiksack und nicht vom darunterliegenden Kompost. Dies würde mit dem Minimum von PE übereinstimmen, aus dem viele Plastiksäcke bestehen (Vgl. «[Plastiksäcke 1](#)»).

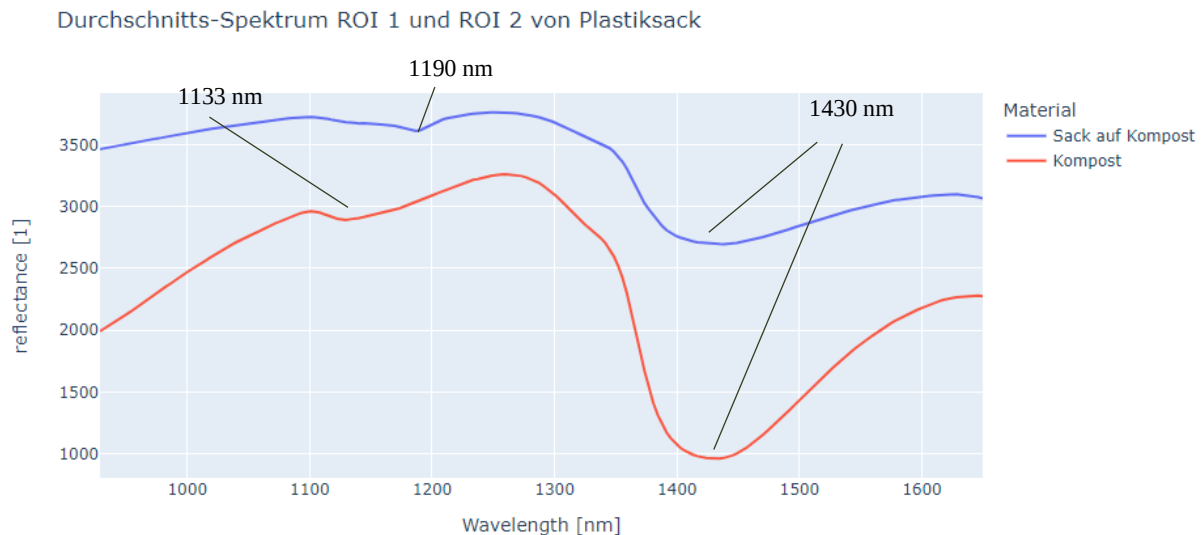


Abbildung 22: Durchschnitt-Spektren von Plastiksack auf Kompost und reinem Kompost

#### 4.3.2 Ursachen für Unterschiede gegenüber Referenzkunststoffen

Bei festen Proben entstehen ungewünschte systemische Variationen vor allem durch Streuung des Lichts und Unterschiede in der effektiven Länge des Pfads des Lichts. Es kommt oft vor, dass diese Effekte den Hauptteil der kompletten Variation in der Probe ausmachen und sie können entweder als multiplikative Phänomene (Baseline Shift), oder anderen Phänomenen, so genannten Non-Linearitäten beobachtet werden. Das Signal auf dem Kamera-Sensor besteht hauptsächlich aus dem indirekt reflektierten Licht und enthält dadurch zum einen Informationen zur chemischen Zusammensetzung, zum anderen aber auch zur Mikro-Struktur und der damit zusammenhängenden Streuung. Mögliche Einflüsse dafür sind Kleinstpartikel, Rauigkeit der Oberfläche, Tröpfchen, Blasen, kristalline Defekte und Dichte-Fluktuationen. [6]

Es ist anzunehmen, dass die bei den Kunststoffen aus der Kompostanlage beobachteten Effekte durch eine Kombination von Aufrauung der Oberfläche durch mechanische Einwirkung der Bodenpartikel, Streuung durch an dem Kunststoff haftende Partikel und der Transparenz einiger Kunststoffstücke erklärt werden können.

### 4.3.3 Erkenntnisse

Die Kunststoffe aus der Kompostanlage zeigen erhebliche Unterschiede gegenüber den Referenzkunststoffen. Die Spektren der Alltagskunststoffe zeigen eine betragsmässig kleinere Varianz und die Amplituden der Features sind ebenfalls um ein Vielfaches geringer. Dazu zeigt sich ein Rauschen, das die Erkennung von Features weiter erschwert. Ebenfalls zeigen die Alltagskunststoffe zum Teil multiplikative Effekte, die einen linearen Trend in die Spektren einbringen. Die additiven Effekte, die eine Verschiebung des Y-Achsabschnitts zur Folge haben, sind nicht auffällig stärker ausgeprägt als bei den Referenzkunststoffen. Für manuelle Untersuchungen und eventuell auch für die Klassifikation mit KNN wird eine Bearbeitung der Rohdaten nötig sein, um die Spektren zuverlässig auswerten zu können.

Viele der kleinen Features, die auf den Spektren der Referenzkunststoffen zu erkennen sind, verschwinden bei den Alltagskunststoffen im Rauschen oder werden vom Sensor gar nicht detektiert. Ein gutes Zeichen ist, dass bei den untersuchten Kunststoffen die sichtbaren Features wenig bis gar keine Verschiebung auf der X-Achse aufweisen ( $\leq 3\text{nm}$ ). Somit könnte es möglich sein, die Kunststoffe anhand vom Verhältnis zweier oder mehrerer Wellenlängen zu identifizieren, ohne dass komplexe neuronale Netzwerke nötig sind.

### 4.4 Einfluss Probenfeuchtigkeit

Wasser weist mehrere Absorptionslinien im Nah-Infrarot-Bereich auf. Diese haben besonders bei Materialien wie Kompost, welche Feuchtigkeit aufnehmen können, einen Einfluss auf die Spektrallinien. Im Aufnahmebereich der Specim FX17 (ca. 900-1700nm) ist der Bereich um 1400 nm

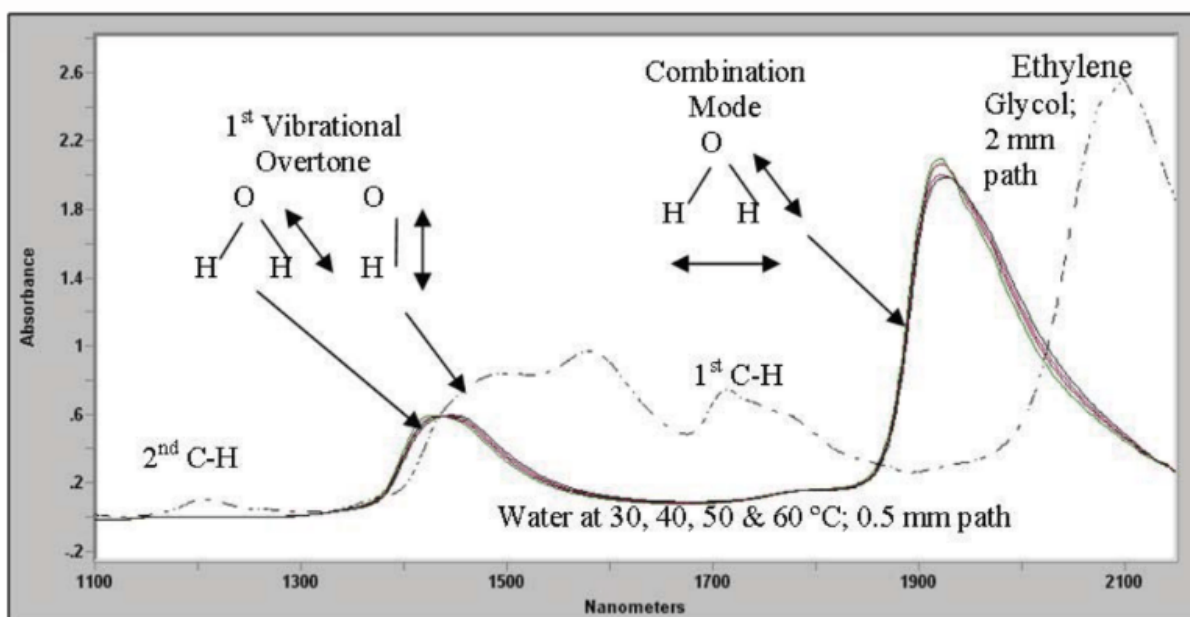


Abbildung 23: Absorbanz von Wasser zwischen 1100 nm und 2100nm

von der Absorptionslinie des Wassers betroffen (Vgl. Abbildung 23). Der Bereich um 1400 nm wird in der Industrie auch verwendet, um den Wassergehalt zu bestimmen. [7]

Auf der Abbildung 24 ist ein Vergleich des Mittelwerts-Spektrums einer Kompostprobe zu sehen. In Blau die Probe direkt aus der Kompostanlage (bei Berührung leicht feucht, Feuchte nicht gemessen) und in Rot dieselbe Probe nach einer Woche bei 40°C im Trocknungssofen.

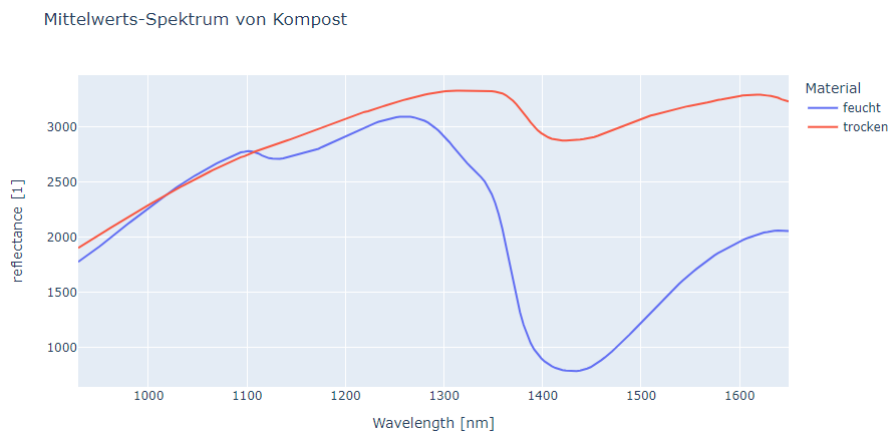


Abbildung 24: Mittelwerts-Spektrum von Kompost, feucht aus Kompostanlage und eine Woche bei 40°C getrocknet

Nebst dem deutlichen Minimum beim Bereich um 1400 nm entsteht bei der feuchten Probe ein kleineres Minimum bei 1126 nm. Da kein Kunststoff spektrale Features in ähnlichen Verhältnissen aufweist (z.B. Verhältnis Reflektanz bei 1126 nm zu Reflektanz bei 1420 nm), sollte der Feuchtegehalt einer Klassifikation nicht im Weg stehen – ausser das einzige Feature einer Aufnahme läge beim Bereich 1400 nm. Für das Training eines KNN wird es aber wichtig sein, Kompostproben mit verschiedenen Feuchtegehalten im Trainingsdatenset zu integrieren.

## 4.5 Preprocessing

Bei den Alltags-Kunststoffen tritt durch verschiedene physikalische Effekte (Kapitel: [Ursachen für Unterschiede gegenüber Referenzkunststoffen](#)) deutliches Rauschen im spektralen Signal auf. Um die explorative Auswertung, wie auch die Klassifikation durch KNN zu verbessern, bietet es sich an, die Spektren vorgängig zu bearbeiten. So können Informationen zu physikalischen Parametern wie z.B. Partikelgrösse oder Verschmutzung eliminiert werden. In diesem Abschnitt werden einige gängige Preprocessing-Techniken betrachtet und ein Vorschlag zu einer Preprocessing-Routine unterbreitet.

Grundsätzlich können die am weitesten verbreiteten Preprocessing-Techniken in zwei Kategorien eingeteilt werden: Techniken zur Korrektur von Streuung (scatter-correction) oder spektrale Derivative. Die Streuungs-Korrektur-Techniken dienen alle dazu, die physische Variabilität der Proben aus den Spektren auszuschliessen und die chemischen Informationen dadurch hervorzuheben. Betrachtet werden die drei Streuungs-Korrektur Techniken Multiplicative-Scatter-Correction (MSC), Standard Normal Variate (SNV) und Normalisierung und spektrale Derivative. Die Techniken dienen alle dazu additive

und/oder multiplikative Effekte aus den Spektren zu entfernen und sind in der analytischen Spektroskopie etabliert. [6]

Die Techniken werden mit 15 Pixel eines Kunststoffsacks aus dem Fremdstoff-Paket der Kompostanlage evaluiert und präsentiert. Abbildung 25 zeigt ein False-RGB Bild in dem der ROI markiert ist, aus dem die 15 Pixel gewählt wurden.

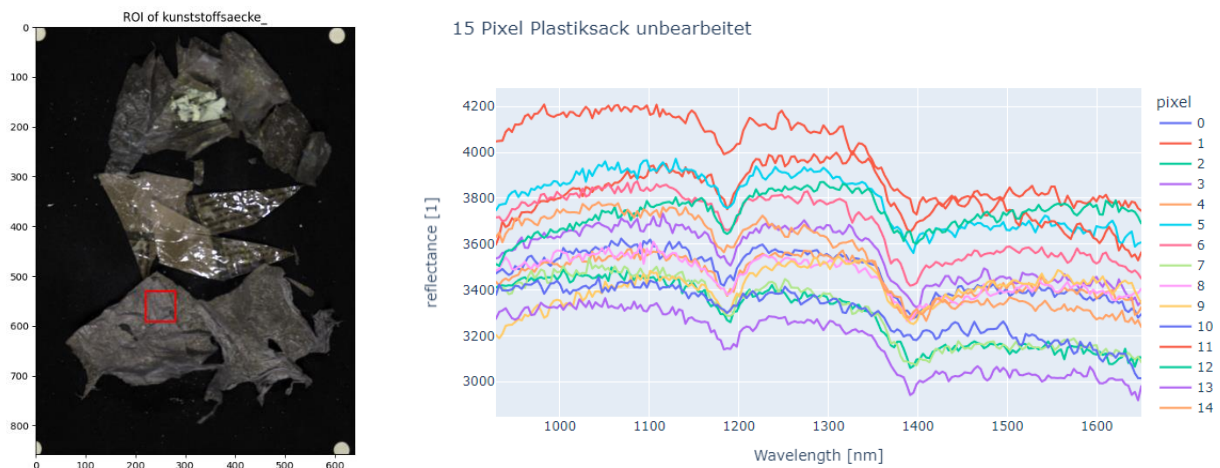


Abbildung 25: links: ROI des Plastiksacks, der zur Evaluation der Preprocessing-Techniken verwendet wird; rechts: 15 unbearbeitete Spektren aus dem gewählten ROI

Die ausgewählte Pixel weisen verschiedene Streuungseffekte auf. Während die meisten Pixel eher einen linearen Abwärtstrend aufweisen, zeigen Pixel 9 (gelb), Pixel 1 (rot) und Pixel 12 (türkis) einen Aufwärtstrend. Die Minima bei 1190 nm und 1399 nm sind bei allen Linien enthalten, aber unterschiedlich ausgeprägt und durch das Rauschen zum Teil schlecht erkennbar.

#### 4.5.1 Spectral Binning

Transformationen können auf bereits fertige Aufnahmen angewandt werden (siehe unten), es empfiehlt sich aber auch, die Auswirkungen von «Spectral Binning» direkt in der Kamera-Software auszuwerten. Dabei werden vor/während der Aufnahme mehrere Bänder zu einem zusammengefasst. Da bei Spektren die nebeneinanderliegenden Datenpunkte im Normalfall ähnliche Werte aufweisen, gehen im Vergleich zum möglichen Gewinn an Klarheit des Signals durch das Zusammenfassen nur wenige Informationen verloren. Die Kamera bietet die Möglichkeit Bins der Grösse 1, 2 oder 4 anzulegen, wobei die Grösse 1 mit 224 Bändern Standard ist. Bei 2 Bins wären es also 112 und bei 4 Bins dementsprechend 56 Bänder, die separat aufgenommen werden. Durch Binning würden auch die Files kleiner. Die Specim FX17 bietet ausserdem die Möglichkeit, räumliche Bins anzulegen, also 2 oder 4 Pixel zu einem zusammenzuschliessen. Die Binning-Parameter wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht evaluiert.

## 4.5.2 Scatter-Correction bzw. Streuungs-Korrektur

Die betrachteten Techniken MSC, SNV und Normalisierung dienen alle dazu die Variabilität einzelner Pixel oder Samples zu reduzieren und einen Baseline-Shift auszugleichen. Es sind die drei am häufigsten eingesetzten Verfahren.

### 4.5.2.1 Multiplicative Scatter Correction (MSC)

Mit MSC sollen additive und multiplikative Effekte kompensiert und damit Informationen, welche keine chemische Relevanz tragen, aus den Spektren ausgeschlossen werden. Das Verfahren wird reihenweise (sprich: pixelweise) durchgeführt. Für die MSC-Transformation ist ein Referenzspektrum nötig – am besten eines, welches keine unerwünschten Effekte beinhaltet. Wenn kein «sauberes» Spektrum als Referenz vorliegt, wird oftmals mit dem Mittelwert der Daten gearbeitet. Grundsätzlich ist die mathematische Transformation durch folgende Gleichung gegeben [8]:

$$x_{ik(\text{neu})} = \frac{|x_{ik(\text{alt})} - a_i|}{b_i}$$

$x_{ik}$ : Reflexionswerte bei Punkt  $i$  und Wellenlänge  $k$

$a_i$ : Geschätzter Effekt von direkter Spiegelung

$\frac{1}{b_{i_i}}$  : Geschätzter Effekt von Streuung

Dabei werden die Koeffizienten  $a_i$  und  $b_i$  mittels der Methode der kleinsten Quadrate (Least-Squares Regression) mit dem Vergleich des zu transformierenden Spektrums mit dem Referenzspektrum bestimmt. Die Python-Methode für MSC befindet sich im Anhang unter «python/data\_handling.py» als `msc_transform()`.

Das Resultat der MSC-Transformation auf die 15 Punkte des Plastiksacks ist in Abbildung 26 zu sehen. Für die 13 Pixel, die einen Abwärtstrend in der Spektrallinie zeigen, liefert die Transformation ein zufriedenstellendes Ergebnis: Die Linien sind zueinander gerückt und die Minima sind besser ersichtlich. Die drei Pixel, die anstelle des Abwärtstrends, der im Mittelwert vorhanden ist, einen Aufwärtstrend aufweisen, wurden nicht schön transformiert und zeigen sich als grosse Ausreisser zum Rest der Daten.

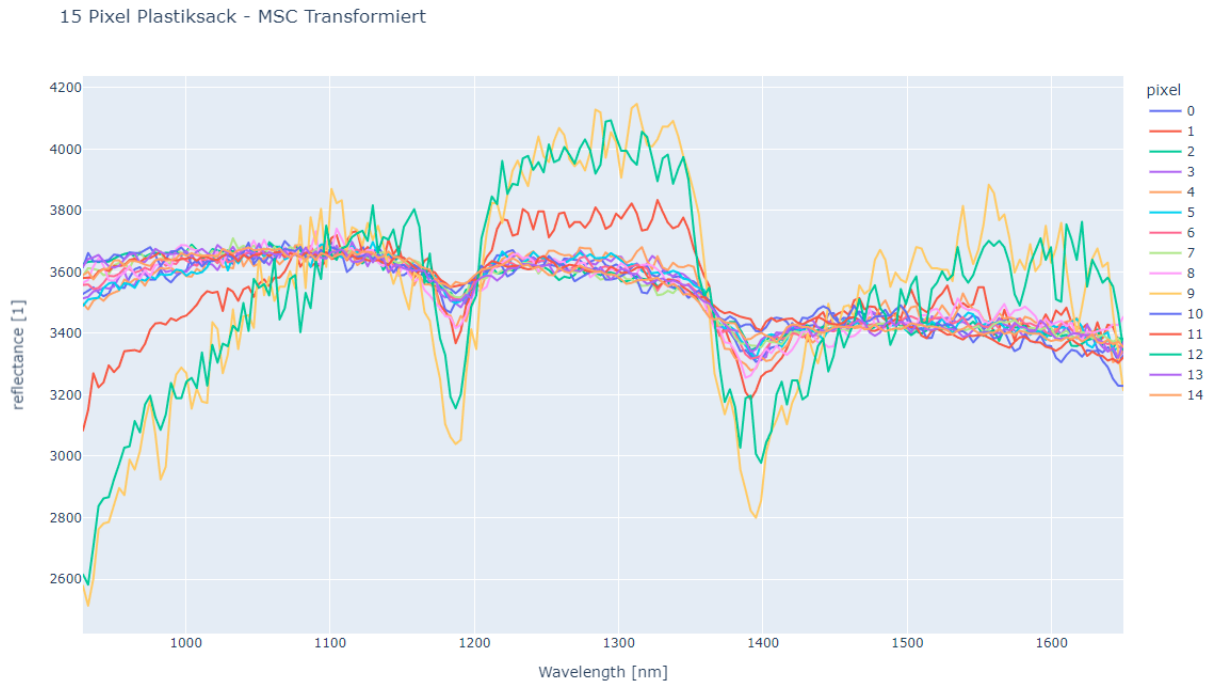


Abbildung 26: Plastiksack-Samples nach MSC-Transformation

Durch die Abhängigkeit zum Referenz-Spektrum der MSC-Transformation empfiehlt sich die Technik vor allem bei Anwendungen, wo im Voraus klar ist, welches Spektrum zu erwarten ist. Dies zum Beispiel bei der Analyse eines bestimmten Lebensmittels, bei dem klar ist, dass alle Spektren nahezu dieselben sind. Da bei der Kunststoff-Sortierung das Material jedes Pixels nicht bekannt ist, empfiehlt sich die MSC-Transformation hier nicht.

#### 4.5.2.2 Standard Normal Variate (SNV)

Anders als bei der MSC wird bei der SNV jede Spektrallinie individuell bearbeitet, ohne dass ein Referenzspektrum benötigt wird. Die SNV-Transformation wurde von Barnes et al. eingeführt, um die multiplikativen Effekte durch Streuung und Partikelgröße zu eliminieren. [9]

Die Transformation ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$x_{ik}(neu) = \frac{x_{ik}(original) - \bar{x}_i}{\sqrt{\sum_{k=1}^p \frac{(x_{ik}(original) - \bar{x}_i)^2}{p-1}}}$$

Wobei gilt:

$x_{ik}$ : Entspricht der Reflektanz bei Punkt  $i$  und Wellenlänge  $k$

$\bar{x}_i$ : Mittelwert des Spektrums von Punkt  $i$

$p$ : Anzahl der Wellenlängen im gegebenen Spektrum

Grundsätzlich werden die Spektren alle einzeln beim Mittelwert = 0 zentriert, in dem der Mittelwert des Spektrums von dem zu transformierenden Spektrum subtrahiert wird. Das Spektrum mit Mittelwert = 0 wird anschliessend durch die Standardabweichung des Spektrums dividiert. Das Resultat ist ein Spektrum mit Mittelwert = 0 und Standardabweichung = 1.

**Vor- und Nachteile von SNV [10]**

- + SNV korrigiert Baseline-Shift und globale Intensitätsabweichungen
- + Modelle von Verfahren wie PLS (Partial Least Squares) erzielen bessere Resultate mit SNV-transformierten Daten
- Daten sind nach SNV bei 0 zentriert und haben positive und negative Werte, was die Interpretation ggf. schwieriger machen könnte.
- SNV nimmt an, dass multiplikative Effekte über das ganze Spektrum dieselben sind. Dies muss nicht immer der Fall sein und es könnten dadurch sogenannte Artefakte in das Spektrum eingeführt werden.

15 Pixel Plastiksack - SNV Transformiert

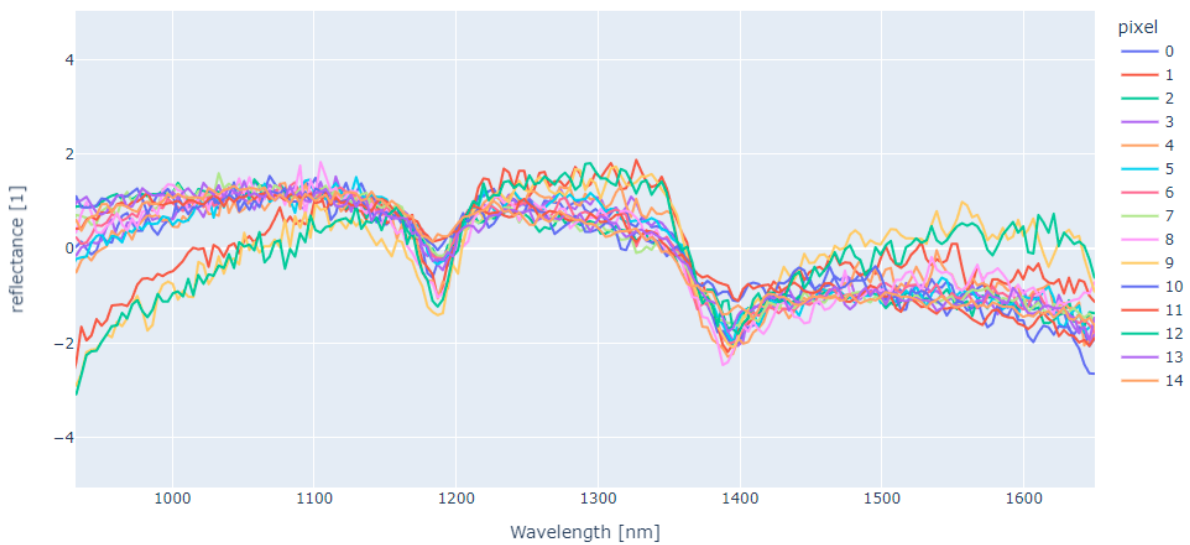


Abbildung 27: Plastiksack-Samples nach SNV-Transformation

Das Resultat der SNV-Transformation auf die 15 ausgewählten Pixel ist in der Abbildung 27 zu sehen. Die Transformation schafft ein nahezu uniformes Bild der 15 Spektren. Ähnlich wie bei der MSC-Transformation stechen auch hier die Pixel 1, 9 und 12 heraus, bei denen die Abweichungen in den beiden Bereiche von 900-1100 nm und 1400-1650 nm nicht gänzlich eliminiert werden konnten. Die Ausreisser sind aber hier nicht so gross, dass sie von dem Datensatz eliminiert werden müssten.

### 4.5.2.3 Normalisierung

Die Konzepte hinter Normalisierung (und auch SNV) sind grundsätzlich dieselben wie für MSC, abgesehen davon, dass bei beiden kein Referenz-Spektrum nötig ist. Die Grundformel für SNV und Normalisierung sieht auch gleich aus:

$$x_{ik}(neu) = \frac{x_{ik}(alt) - a_0}{a_1}$$

Wobei bei SNV  $a_0$  dem Mittelwert der Probe und  $a_1$  der Standardabweichung der Probe entspricht, ist  $a_0$  hier gleich 0 und  $a_1$  eine Vektor-Norm. Gängige Vektor-Normen sind die totale Summe der Beträge aller Elemente (Taxicab oder L1 norm) oder die Wurzel der Summe aller Quadrate (Euklidische oder L2 Norm). Andere Möglichkeit sind auch mit der maximalen Reflexion (verwendet in P5) oder zum Wert einer spezifischen Wellenlänge zu normalisieren. Bei Gebrauch dieser beiden Methoden gilt aber Vorsicht, da sie bei der Anwendung bei Datensätzen mit grossem Rauschen ungewollte Nebeneffekte mit sich bringen können. [6]

Die transformierten Datensätze mit den 15 Pixel der Plastiksäcken sind in der Abbildung 28 zu sehen.

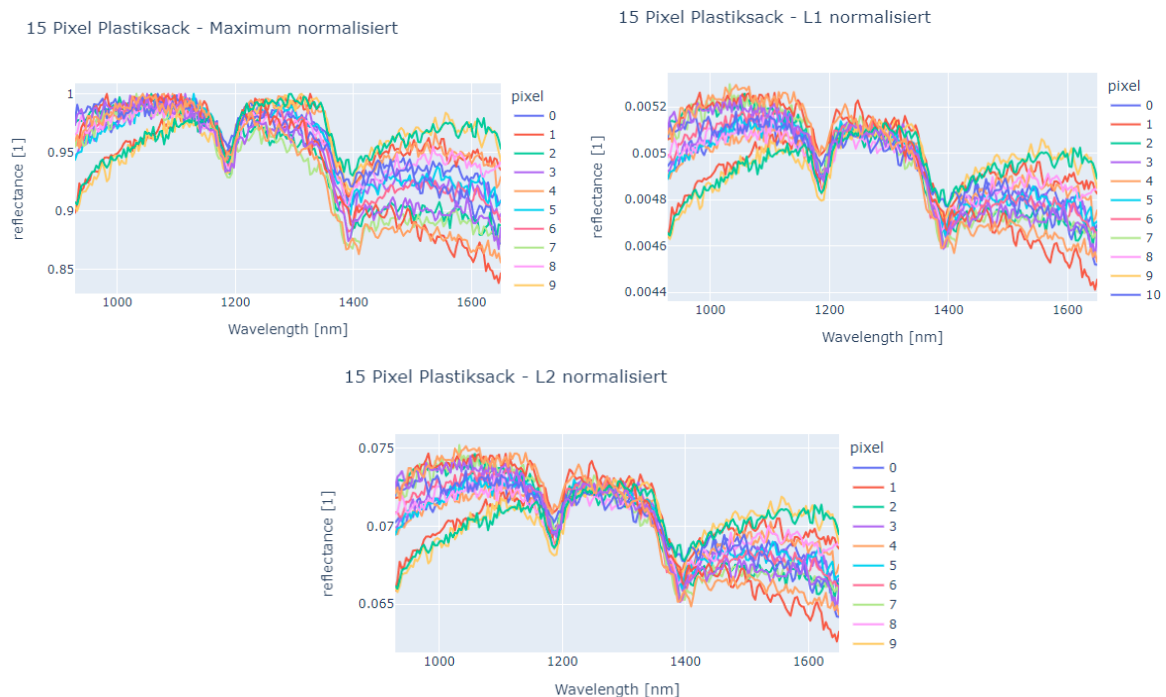


Abbildung 28: Graphen der normalisierten Spektren von 15 Pixel Plastiksack. oben links: Maximums-Norm, oben rechts: L1-Norm, unten: L2-Norm

### 4.5.3 Glättung

Ziel der Glättung ist es, hochfrequentes Rauschen zu unterdrücken, um spektrale Features besser erkennen zu können. Dabei besteht die Gefahr, dass nicht nur Rauschen, sondern auch nützliche hochfrequente Informationen durch die Glättung entfernt werden. Deswegen ist es wichtig, bei der Fensterbreite für die Glättung einen Kompromiss zwischen der Stärke der Glättung und dem Beibehalten nützlicher Informationen zu wählen. Zwei gängige Möglichkeiten zur Glättung von Spektren sind der Savitzky-Golay-Filter und der gleitende Mittelwert. Beim gleitenden Mittelwert mit Fensterbreite  $j$  wird für jeden Punkt  $i$  der Mittelwert der Punkte  $i-j$  bis  $i+j$  ausgerechnet, um das neue Spektrum zu bilden.

Bei dem Savitzky-Golay-Filter wird mithilfe polynomialer Regression ein geglätteter Wert für jeden Punkt bestimmt. Ein Vorteil des Filters gegenüber dem gleitenden Mittelwert ist, dass relative Minima und Maxima besser erhalten bleiben. Für den Filter wird ebenfalls eine Fensterbreite und die Ordnung des Polynoms bestimmt. Ausserdem ist es möglich, direkt mit dem Filter eine geglättete Ableitung zu bilden. [11]

Abbildung 29 zeigt das Resultat der SNV-Transformation (Abbildung 27), wenn die Spektren zuvor mit einer Fensterbreite von 15 (54 nm) und einem Polynom 2. Ordnung mit dem Savitzky-Golay-Filter

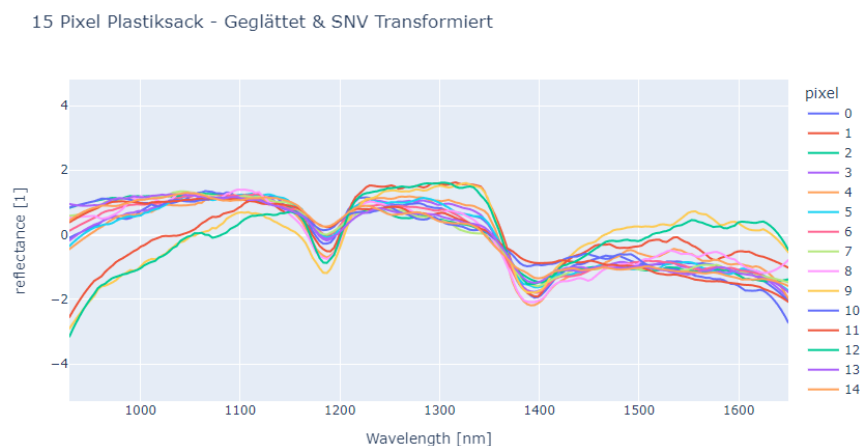


Abbildung 29: Spektren mit Savitzky-Golay-Filter geglättet und anschliessend mit SNV transformiert

geglättet wurden.

### 4.5.4 Spektrale Derivative

In der Derivativ-Spektrometrie (auch Ableitungs-Spektrometrie) werden die ersten oder höheren Ableitungen der Reflexions-Spektren für die Analyse verwendet. In den Derivativ-Spektren sind im Vergleich zum Ausgangsspektrum deutliche Signal-Änderungen besser sichtbar. Dafür werden breit verlaufende Effekte unterdrückt, was für die Erkennung der Kunststoffe anhand ihrer eher schmalen Features hilfreich sein könnte. Ausserdem werden additive oder lineare Baseline-Shifts durch die Ableitung ausgeschlossen. Ein Nachteil der spektralen Derivative ist die Verschlechterung des Signal-

zu-Rauschen-Verhältnisses. Deswegen werden bei den gängigen Methoden die Derivative zu erstellen zuvor die Kurve geglättet.

Angewandt auf die Plastiksack-Proben entstehen die Ableitungs-Spektren (1. Grades) in Abbildung 30. Links wurde das Spektrum mit einer Fensterbreite von 15 (54 nm) und Polynom 2. Ordnung transformiert, rechts mit einer Fensterbreite von 30 (108 nm) und Polynom 2. Ordnung.

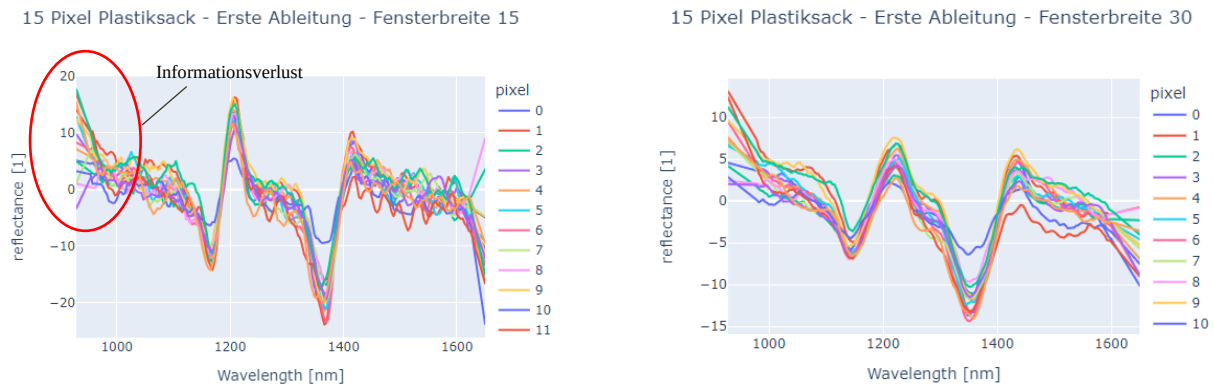


Abbildung 30: Ableitung 1. Grades der Spektren des Plastiksacks mittels Savitzky-Golay-Filter.  
links: Fensterbreite von 15 (54 nm); rechts: Fensterbreite von 30 (108 nm)

Durch die Ableitung müssten weitere der äussersten Bänder entfernt werden, da diese keine relevanten Informationen mehr enthalten. Es zeigt sich, dass durch die Erhöhung der Fensterbreite zwar das Rauschen unterdrückt wird, aber auch die Intensität der Minima/Maxima beschränkt wird und die Peaks breiter werden.

Abbildung 31 zeigt den Unterschied zwischen den Mittelwerten der Ableitungs-Spektren von Plastiksack und PE-Referenzprobe (ein Vergleich zwischen den Mittelwerten der Ausgangsspektren ist in Abbildung 19 zu sehen). Mit der gewählten Fensterbreite von 15 ergibt sich eine Verschiebung auf der X-Achse gegenüber der Referenz, was hier durch ein breiteres Fenster des Filters verhindert werden könnte.

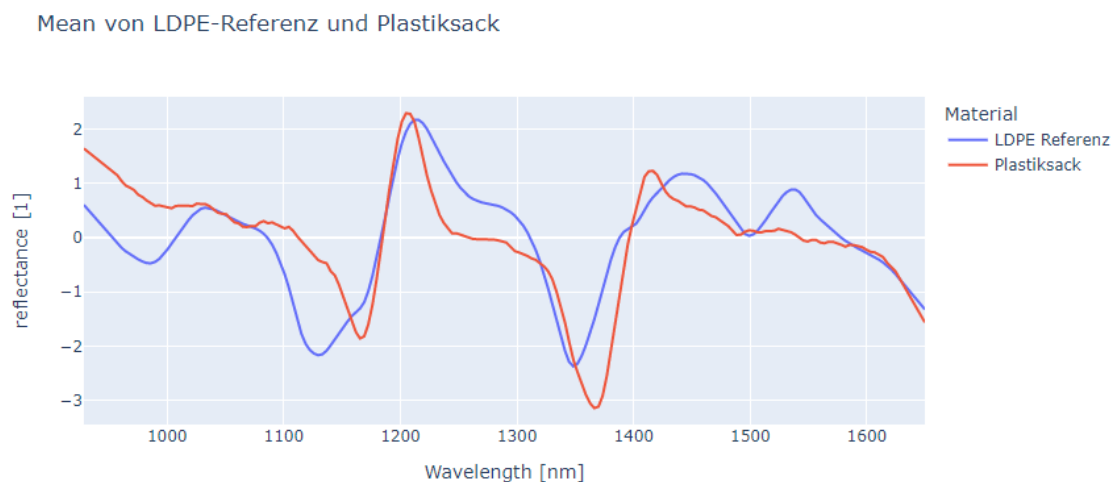


Abbildung 31: Mittelwert von 1. Ableitung der Spektren des Plastiksacks und der LDPE-Referenz

### 4.5.5 Preprocessing-Routine

Es werden zwei verschiedene Preprocessing-Routinen vorgeschlagen: eine zur manuellen explorativen Analyse, die zum Ziel hat, den Kunststofftyp von Auge zu erkennen und einer für das Training von KNN.

#### 4.5.5.1 Explorative Analyse (manuell)

Der Vorschlag zu einer Preprocessing-Routine bezieht sich hier auf die explorative Analyse. Die Preprocessing-Routine hat zum Ziel, anhand der Spektren möglichst gut von Auge erkennen zu können, um welchen Typ Kunststoff es sich handelt.

Durch die unterschiedlichen Einflüsse auf jede einzelne Probe und Aufnahme ist es nicht empfehlenswert, eine starre Preprocessing-Routine zu definieren, welche unter allen Umständen so durchgeführt wird. Die besten Ergebnisse konnten erzielt werden, wenn bei jeder Probe mit einer schmalen Preprocessing-Routine begonnen wurde und bei Schwierigkeiten oder Unsicherheiten bei der Erkennung des Materials weitere Schritte hinzugezogen wurde.

Von den Streuungskorrektur-Methoden (scatter-correction) kommen SNV und MSC in Frage, da diese bei multiplikativen Effekten bessere Resultate zeigten als die Normalisierung. MSC benötigt ein bekanntes Referenzspektrum. Ein solches liegt hier normalerweise nicht vor, da von den Pixeln nicht bekannt ist welchem Material sie angehören und somit auch nicht welches Spektrum zu erwarten ist. Die Ergebnisse von MSC mit dem Mittelwert als Referenzspektrum waren bei den Tests nicht besser als diejenigen von SNV. Aus diesen Gründen liegt die Empfehlung vor, SNV zur Streuungs-Korrektur zu verwenden.

Glättung lässt sich in jedem Fall empfehlen. Als Startparameter für den Savitzky-Golay-Filter hat sich eine Fensterbreite von 7 und ein Polynom 3. Grades bewährt. Bei unzufriedenstellender Glättung kann die Fensterbreite in 2er-Schritten oder der Grad des Polynoms erhöht werden. Damit diese Anpassungen einfach von der Hand gehen, wurde die Methode `get_variable_savgol_plot()` geschrieben. Die Methode gibt einen interaktiven Plot zurück, der die übergebenen Daten sowie die Daten mit einem angewandten Savitzky-Golay-Filter darstellt. Dabei werden die ursprünglichen Daten in diversen Farben und die gefilterten jeweils in grün angezeigt (Abbildung 32). Für ein stark verrauschtes Signal, wie die Kunststoffproben aus der Kompostanlage, hat sich ein Savitzky-Golay-Filter mit den Parametern Fensterlänge = 15 und Polynomgrad = 3 bewährt.

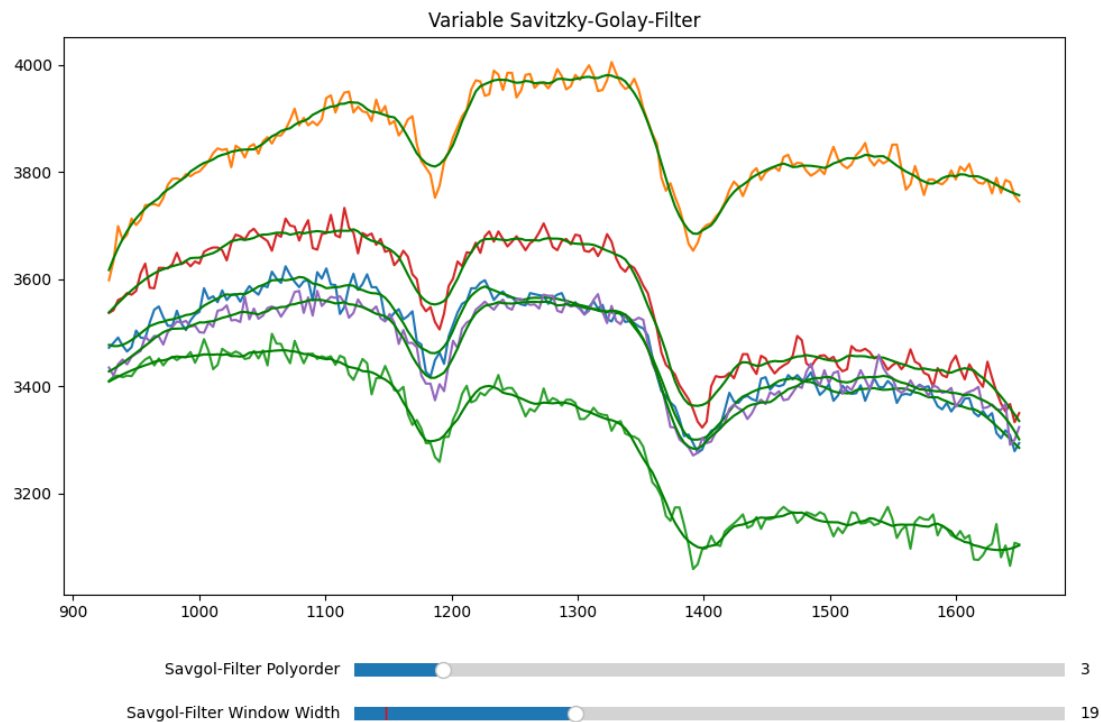


Abbildung 32: Plot mit variablen Savitzky-Golay-Parametern

Die empfohlenen Preprocessing-Schritte zur manuellen Betrachtung der Daten sind:

- SNV in jedem Fall anwenden
- Falls Spektrum stark verrauscht: Variabler Savitzky-Golay und passende Parameter finden
- Falls so noch unklar um welchen Kunststoff es sich handelt, 1. / 2. Ableitung der Spektren mit Savitzky-Golay-Filter betrachten.

#### 4.5.5.2 Preprocessing für KNN

Es wurde untersucht, welchen Einfluss die Preprocessing-Routine auf die Unterscheidung von Kunststoff und Nicht-Kunststoff hat. Dafür wurden drei KNN mit dem gleichen Layout trainiert. Bei einem Netz wurde kein Preprocessing vorgenommen, beim zweiten SNV und Glätten und beim dritten SNV und die erste Ableitung via Savitzky-Golay-Filter. Die Rohdaten des Trainingsdatensets befinden sich im Anhang im Ordner «raw\_data» als «mixed\_compost.csv», «mixed\_plastics.csv» und «background.csv». Die Files «select\_background\*», «select\_compost\*», und «select\_plastic\*» beinhalten den Code, in dem die Trainingsdaten ausgewählt wurden. Die Netze wurden mit 359'806 Spektren Plastik aus der Kompostanlage und Referenzkunststoffen, 400'654 Spektren von Kompostproben unterschiedlicher Feuchte und 218'750 Spektren Hintergrund trainiert. Zur Evaluation wurden ca. 90'000 Spektren ausgewählt, die aus Aufnahmen stammen, an denen nicht trainiert wurde (davon rund 70'000 Kunststoffe, 15'000 Kompost, 5'000 Hintergrund). In der Datei

«select\_eval\_data.ipynb» ist zu sehen, aus welchen Aufnahmen die Evaluationsdaten ausgewählt wurden.

Die drei Netze wurden alle mit denselben Parametern trainiert:

*Tabelle 1: Trainingsparameter für KNN*

Parameter	Wert
Loss-Function	Categorical crossentropy
Optimizer	SGD, stochastic gradient descent
Learning Rate	0.002
Early Stopping	Monitor="val_loss", patience=3, restore_best_weights=True
Batch Size	512
Epochs	100

Der Code zu der Trainingskonfiguration, in dem auch das Layout des Netzes zu sehen ist, befindet sich in der Datei «compare\_preprocessing\_ann.ipynb».

### Ergebnisse Training KNN

*Tabelle 2: Resultate KNN: SNV und Glättung mit Savitzky-Golay: kein Preprocessing*

Messgröße	Wert
Training Accuracy	97.51 %
Training Loss	0.0783
Evaluation Accuracy	97.4 %
Evaluation Loss	0.0845
Epochs	23

*Tabelle 3: Resultate KNN: SNV und Glättung mit Savitzky-Golay*

Messgröße	Wert
Training Accuracy	97.10 %
Training Loss	0.0892
Evaluation Accuracy	95.71 %
Evaluation Loss	0.1180
Epochs	37

*Tabelle 4: Resultate KNN: SNV und 1. Ableitung mit Savitzky-Golay*

Messgröße	Wert
Accuracy	96.45 %
Loss	0.1172
Evaluation Accuracy	96.17 %
Evaluation Loss	0.1347
Epochs	13

Grundsätzlich liegen die Resultate aller drei Netzwerke sehr nahe beieinander. Über mehrere Trainingsversuche hinweg hat das KNN, in dem die Datensätze zuvor nicht bearbeitet wurden, konstant die besten Resultate geliefert. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass die Preprocessing-Operationen primitiver sind als die Verknüpfungen, die vom KNN gemacht werden. Somit gehen für das KNN wichtige Informationen durch das Preprocessing verloren. In Quelle 10 wird die Verwendung von

convolutional neural networks (CNN) ohne Preprocessing als Alternative zu Preprocessing und klassischen Machine Learning Algorithmen vorgeschlagen. [12] Obwohl hier keine CNN eingesetzt werden, erscheint dies als wahrscheinliche Erklärung. Eine andere Möglichkeit ist, dass das Netz mit den konfigurierten Parametern per Zufall am besten auf die unverarbeiteten Daten passt und durch Anpassung von Layout und Trainingsparametern der Erfolg bei den anderen Versionen verbessert werden könnte. Da der Fokus der Arbeit nicht darauf lag, ein möglichst genaues Netz zu trainieren, wurde dies nicht weiterverfolgt.

## 4.6 Modell zur Segmentierung von Kompost und Kunststoff

Es folgen einige Visualisierungen zu Resultaten von der Segmentierung, die das KNN liefert, welches ohne Preprocessing trainiert wurde. Dabei wird das hyperspektrale Bild pixelweise an das Modell übergeben und es wird pro Pixel eine Zuweisung an die Klassen Kunststoff, Kompost und Hintergrund vorgenommen. Dabei ist Kunststoff pink, Kompost grün und Hintergrund grau eingefärbt.

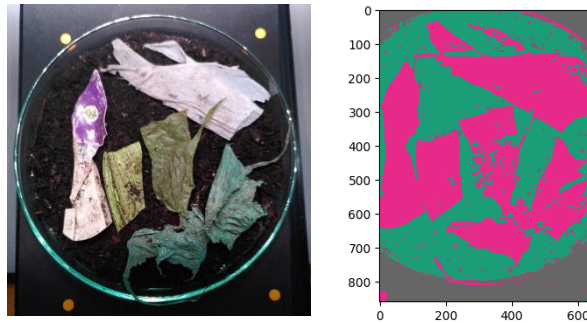


Abbildung 33: Segmentierung von diversen Kunststoffstücken auf Kompost; links: Foto, rechts: Segmentierung mit keras Modell

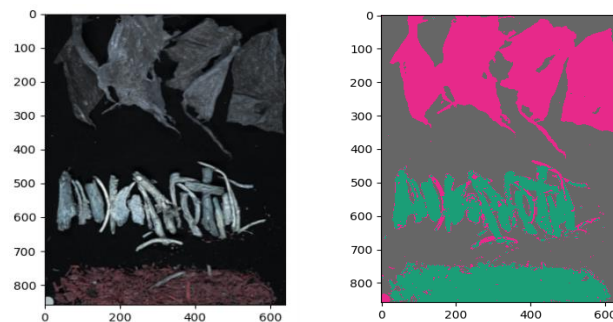


Abbildung 34: Segmentierung von Kunststoffstücken und Kompost sortiert; links: False-RGB Bild, rechts: Segmentierung mit keras Modell

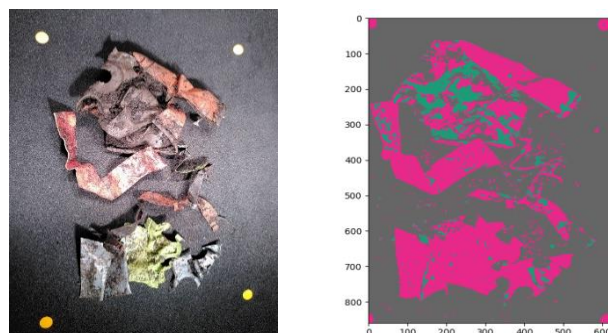


Abbildung 35: Segmentierung von Blumentopfstücken; links: Foto, rechts: Segmentierung mit keras Modell

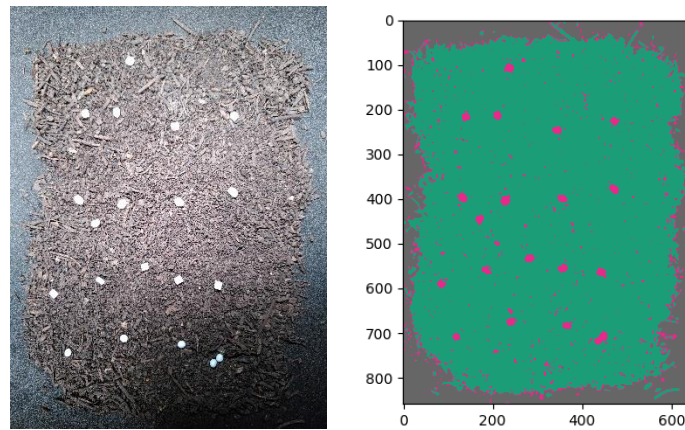


Abbildung 36: Segmentierung von Referenzkunststoffkörnern; links: Foto, rechts: Segmentierung mit keras Modell

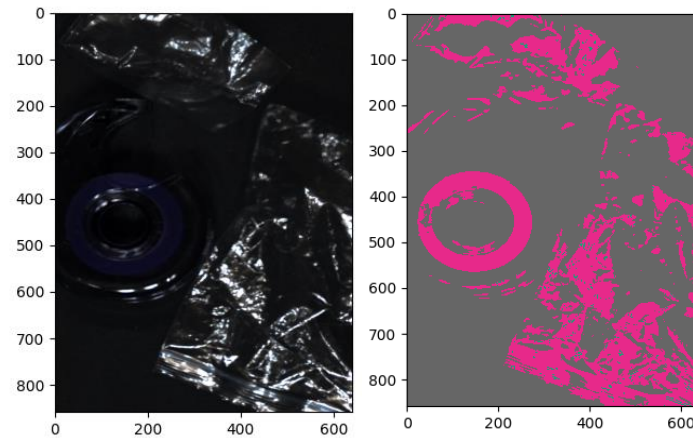


Abbildung 37: Segmentierung von Plastiksäcken und Klebebandrollen; links: false-RGB, rechts: Segmentierung mit keras Modell

Die pixelweise Segmentierung sieht vielversprechend aus. Schwierigkeiten hat das Modell bei einigen Kompoststücken, die fälschlicherweise als Kunststoff klassifiziert werden und mit dunklen und durchsichtigen Kunststoffen, welche als Hintergrund erkannt werden.

## 5 Zusammenfassung / Schlussfolgerung

Zusätzlich zu den vier Kunststoffen aus dem P5 (PE, PP, PS, PET) wurden PC, PVC und PLA untersucht. PLA zeigt im Aufnahmebereich von 900-1700 nm einige deutliche Features, die sich stark von den anderen Kunststofftypen unterscheiden. PC zeigt ein sehr ähnliches Spektrum wie PS, mit kleinen Verschiebungen (10 – 40 nm) der Minima/Maxima und einigen kleinen Features.

Braunes Recycling-PVC zeigte bei der konfigurierten Beleuchtungszeit kaum Signal, dasselbe wurde bei schwarzem PVC-Rohr beobachtet. Bei Erhöhung der Beleuchtungszeit wird auch Signal des Hintergrundmaterials aufgenommen, was bei dünnem/durchsichtigen Kunststoff (z.B. Plastiksack) dazu führte, dass das Signal des Hintergrundmaterials anstelle desjenigen des Plastiksacks aufgenommen wurde. Unterschiedliche Typen von PE (LDPE, LLDPE, HDPE) zeigen im Aufnahmebereich keine deutlich unterschiedlichen Features.

Die Chance ist sehr gross, dass PLA von den anderen Kunststoffen unterschieden werden kann. Bei PC besteht die Gefahr, dass dieses nicht von PS unterschieden werden kann. Anhand der Eintragspfade von Kunststoff ist allerdings davon auszugehen, dass PC einen verschwindend geringen Anteil an Kunststoff im Boden ausmacht. [2] Gemäss den Daten in Quelle 4 sollte PVC grundsätzlich von den anderen Kunststoffen zu unterscheiden sein, insofern es nicht eine zu dunkle Farbe hat – was dazu führen könnte, dass überhaupt keine signifikante Reflexion gemessen werden kann.

Wasser zeigt eine Absorptionslinie im Bereich um 1400 nm. Dies macht sich bei feuchten Kompostproben als deutliches Tal im Spektrum bemerkbar. Da die Feuchtigkeit primär vom Kompost aufgenommen wird und sich weniger auf der Oberfläche der Kunststoffe ansammelt, sollte der Feuchtigkeitsgehalt einer Probe keinen negativen Einfluss auf die Kunststofferkennung haben. Für das Training von neuronalen Netzen wird es wichtig sein, Spektren von Kompostproben mit diversen Feuchtigkeitsgehalten im Trainingsdatensatz aufzunehmen.

Die Spektren der Kunststoffe aus der Kompostanlage zeigen deutliche Unterschiede gegenüber diejenigen der Referenzkunststoffe. Konkret haben die Proben aus der Kompostanlage im Verhältnis zum Signal deutlich mehr Rauschen und die Amplituden der Minima und Maxima sind geringer. Dazu zeigen sich stärkere additive und multiplikative Effekte, die eine Verschiebung auf der Y-Achse und lineare Trends in den Spektren zur Folge haben. Die Features, die trotz des schlechteren Signals gut zu erkennen sind, weisen auf der spektralen Achse eine geringe Abweichung von  $\pm 1$  Band (3.5 nm) gegenüber den Referenzproben auf, was sich positiv auf die Erkennungschance auswirkt.

Anhand des Mittelwerts der Spektren mehrerer Pixel eines einzelnen Objekts lässt sich von Auge in vielen Fällen das Material erkennen, wo es bei einzelnen Spektren nicht möglich wäre. Für eine automatisierte Klassifikation mit künstlicher Intelligenz könnte es sich anbieten, zuerst Objekte zu erkennen und anschliessend die Kunststoff über die Mittelwerte der erkannten Objekte zu klassifizieren.

Von den betrachteten Preprocessing-Optionen bewähren sich SNV zur Streuungskorrektur und Savitzky-Golay-Filter mit und ohne Derivative zur Glättung. Die Preprocessing-Transformationen vereinfachen die Analyse von Menschengen, in dem sie Rauschen unterdrücken und Features einfacher erkennbar machen.

Beim Training von neuronalen Netzwerken hat sich keine Preprocessing-Option bewährt. Die Netzwerke, die mit nicht-transformierten Daten trainiert wurden, erzielten bei Trainings- wie auch Validierungsdatenset bessere Resultate als Netzwerke, die mit SNV-transformierten und geglätteten Daten oder mit Derivativen trainiert wurden.

## 6 Glossar

<b>Begriff / Abkürzung</b>	<b>Erklärung</b>
KNN	Künstliches Neuronales Netzwerk
HSI	Hyperspectral Imaging
PE	Polyethylen
PET	Polyethylenterephthalat
PS	Polystyrol
PC	Polycarbonat
PLA	Poly-lactate-acid (Polylaktatsäure)
PVC	Polyvinylchlorid
PP	Polypropylen
P5	Vorhergehende Projektarbeit EUT-P5bb-20HS-RS
SNV	Standard normal variate
MSC	Multiplicative scatter correction

## 7 Verzeichnisse

### 7.1 Abbildungen

Abbildung 1: Fremdstoffe aus der Kompostieranlage der AVAG .....	6
Abbildung 2: Beispiel: Einlesen einer HSI-Datei .....	9
Abbildung 3: Darstellen von HSI als False-RGB.....	10
Abbildung 4: Zwei Beispiele für ROIs und die daraus resultierende Trainingsmatrix .....	11
Abbildung 5: Klassifikation der vier Laborkunststoffe .....	12
Abbildung 6: Spektren unterschiedliche PE-Typen (HDPE, LDPE und LLDPE).....	13
Abbildung 7: Polycarbonat und Polystyrol Mittelwert-Spektren, abweichende Features eingekreist ..	14
Abbildung 8: Links: Vergleich zwischen schwarzem und weissem PVC, Rechts: Vergleich zwischen HDPE und PVC [4] .....	14
Abbildung 9: Links: PLA Absorptions-Spektrum aus Publikation [3]; Rechts: Gemessenes PLA Reflexions-Spektrum.....	15
Abbildung 10: Durchschnittliche Spektren der sechs Referenzkunststoffe, SNV transformiert.....	16
Abbildung 11: Links: RGB-Bild, Rechts: HSI-Bild mit ausgewähltem ROI.....	17
Abbildung 12: Spektren von 500 zufälligen Pixel aus dem ausgewählten ROI des Blumentopf-Stücks .....	17
Abbildung 13: Durchschnitts-Spektren von PP und Blumentopf, skaliert zwischen 0 und 1 .....	18
Abbildung 14: Links: RGB-Bild, Rechts: False-RGB-Bild anhand der HSI-Daten und ausgewählte ROIs .....	19
Abbildung 15: Links: 500 Samples MNS (ROI 1), rechts: 500 Samples MNS schmutzig (ROI 2) .....	19
Abbildung 16: Durchschnitts-Spektren von ROI 1 (sauber) und ROI 2 (schmutzig) des Mund-Nasen-Schutzes.....	20
Abbildung 17: Links: RGB-Bild, rechts: False-RGB-Bild mittels HSI-Daten und Markierung ROI...	21
Abbildung 18: Unbearbeitete Spektren von 500 sample pixels eines Kunststoffsacks .....	21
Abbildung 19: Mittelwert-Spektren von LDPE und einem Plastiksack. Korrelierende Minima markiert .....	22
Abbildung 20: Links: RGB-Bild, Rechts: False-RGB-Bild anhand der HSI-Daten und ausgewählte ROIs .....	23

Abbildung 21: Links: 500 sample pixels von Plastiksack auf kompost (ROI 1), rechts: 500 sample pixels von Kompost (ROI 2)..... 23

Abbildung 22: Durchschnitt-Spektren von Plastiksack auf Kompost und reinem Kompost ..... 24

Abbildung 23: Absorbanz von Wasser zwischen 1100 nm und 2100nm ..... 25

Abbildung 24: Mittelwerts-Spektrum von Kompost, feucht aus Kompostanlage und eine Woche bei 40°C getrocknet..... 26

Abbildung 25: links: ROI des Plastiksacks, der zur Evaluation der Preprocessing-Techniken verwendet wird; rechts: 15 unbearbeitete Spektren aus dem gewählten ROI..... 27

Abbildung 27: Plastiksack-Samples nach MSC-Transformation ..... 29

Abbildung 28: Plastiksack-Samples nach SNV-Transformation ..... 30

Abbildung 29: Graphen der normalisierten Spektren von 15 Pixel Plastiksack. oben links: Maximums-Norm, oben rechts: L1-Norm, unten: L2-Norm ..... 31

Abbildung 29: Spektren mit Savitzky-Golay-Filter geglättet und anschliessend mit SNV transformiert32

Abbildung 31: Ableitung 1. Grades der Spektren des Plastiksacks mittels Savitzky-Golay-Filter. links: Fensterbreite von 15 (54 nm); rechts: Fensterbreite von 30 (108 nm) ..... 33

Abbildung 32: Mittelwert von 1. Ableitung der Spektren des Plastiksacks und der LDPE-Referenz .. 33

Abbildung 33: Plot mit variablen Savitzky-Golay-Parametern..... 35

Abbildung 34: Klassifikation von diversen Kunststoffstücken auf Kompost; links: Foto, rechts: Output KNN ..... 38

Abbildung 35: Klassifikation von Kunststoffstücken und Kompost sortiert; links: False-RGB Bild, rechts: Output KNN..... 38

Abbildung 36: Klassifikation von Blumentopfstücken; links: Foto, rechts: Output KNN..... 38

**7.2 Tabellen**

Tabelle 1: Trainingsparameter für KNN ..... 36

Tabelle 2: Resultate KNN: SNV und Glättung mit Savitzky-Golay: kein preprocessing..... 36

Tabelle 3: Resultate KNN: SNV und Glättung mit Savitzky-Golay ..... 36

Tabelle 4: Resultate KNN: SNV und 1. Ableitung mit Savitzky-Golay ..... 36

### 7.3 Literatur

- [1] A. Kalberer, D. Kawecki-Wenger, und T. Bucheli, «Stand des Wissens und Handlungsempfehlungen für die landwirtschaftliche Forschung, Praxis, Industrie und Behörden», *Agroscope*, S. 57.
- [2] EBP Schweiz AG, «Plastik in der Schweizer Umwelt». Bundesamt für Umwelt BAFU, 15. April 2020.
- [3] Bundesamt für Umwelt BAFU, «Kunststoffe in der Umwelt: Böden». 5. Dezember 2020.
- [4] Hamed Masoumi, Seyed Mohsen Safavi, «Identification and Classification of Plastic Resins using Near Infrared Reflectance Spectroscopy», *Int. J. Mech. Ind. Eng.*, Bd. 6, Jan. 2012.
- [5] «Mund-Nasen-Schutz - Fraunhofer IPT», *Fraunhofer-Institut für Produktionstechnologie IPT*.  
<https://www.ipt.fraunhofer.de/de/profil/geschaeftsfelder/life-sciences-engineering/gemeinsam-gegen-das-corona-virus/lifebelt/mns-maske.html> (zugegriffen 25. Juli 2022).
- [6] «Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra», *TrAC Trends Anal. Chem.*, Bd. 28, Nr. 10, S. 1201–1222, Nov. 2009, doi: 10.1016/j.trac.2009.07.007.
- [7] «An Introduction to Online NIR Water Measurements in Liquid Samples», *AZoM.com*, 23. Januar 2019. <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=17511> (zugegriffen 29. Juli 2022).
- [8] H. Martens, S. Jensen, und P. Geladi, «Multivariate linearity transformation for near-infrared reflectance spectrometry», in *Proceedings of the Nordic symposium on applied statistics*, 1983, S. 205–234.
- [9] R. J. Barnes, M. S. Dhanoa, und S. J. Lister, «Standard Normal Variate Transformation and De-Trending of Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectra», *Appl. Spectrosc.*, Bd. 43, Nr. 5, S. 772–777, Juli 1989, doi: 10.1366/0003702894202201.
- [10] S. D. Brown, *Comprehensive chemometrics: chemical and biochemical data analysis*. Amsterdam: Elsevier, 2009.
- [11] «Savitzky-Golay-Filter».  
[http://www.statistics4u.info/fundstat\\_germ/cc\\_filter\\_savgolay.html](http://www.statistics4u.info/fundstat_germ/cc_filter_savgolay.html) (zugegriffen 3. August 2022).
- [12] M. Kazemzadeh, C. L. Hisey, K. Zargar-Shoshtari, W. Xu, und N. G. R. Broderick, «Deep convolutional neural networks as a unified solution for Raman spectroscopy-based classification in biomedical applications», *Opt. Commun.*, Bd. 510, S. 127977, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2022.127977>.

## 8 Anhang

Inhalt «EUT-P6bb-21HS-RS\_Anhang.zip»

<b>File-/Foldername</b>	<b>Beschreibung</b>
/Specim-FX17-Datasheet.pdf	Datenblatt zu der Hyperspektralkamera
/python/*	Alle Dateien die irgendetwas mit python-code zu tun haben.
/python/gitignore	<a href="https://git-scm.com/docs/gitignore">https://git-scm.com/docs/gitignore</a>
/python/compare_preprocessing_ann.ipynb	Code um die drei verschiedene keras Modelle zu trainieren
/python/data_handling.py	Deklaration diverser Methoden, die in anderen Files verwendet werden.
/python/display_ann_prediction.ipynb	Darstellung von Resultaten der Segmentierung der Modelle aus «compare_preprocessing_ann»
/python/display_mean_references.ipynb	Darstellung von Mittelwert-Spektrum der Referenzkunststoffe
/python/documentation.ipynb	Erstellung der Bilder, die in dem Bericht verwendet werden
/python/pipfile und /python/pipfile.lock	File zur Erstellung des virtuellen python-envs
/python/rebuild_matlab_classifier.ipynb	Nachbilden des Segmentierungsnetzwerks aus dem P5
/python/select_*_samples.ipynb	Auswahl von Spektren des Hintergrunds zum Export nach /raw_data/*
/python/select_eval_data.ipynb	Auswahl von Spektren zur Evaluation der neuronalen Netze. Export nach /raw_data/*
/python/logs/*	Tensorflow logs der Trainings der neuronalen Netze
/python/models	Keras-Modelle
/python/scalers	Pickled Scalers für Input in die neuronalen Netze