

## Objektive Beurteilung von Wein mit NIR-Spektrometrie



Prof. Dr. Urs Mürset,  
Leiter Fachstelle Daten-  
analyse und Statistik,  
urs.muerset@zhaw.ch



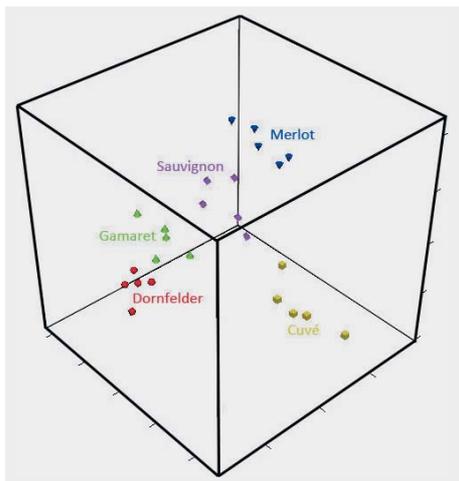
Prof. Dr. Thomas Ott,  
Leiter Forschung  
Neuroinformatik,  
thomas.ott@zhaw.ch



Christina Wäfler,  
Assistentin Getränke-  
analytik, Zentrum für  
Inhaltsstoff- und  
Getränkforschung,  
christine.waefler@zhaw.ch

**Die Beurteilung von Weinen beruht bislang auf dem Urteil (geschulter) Sensorik-Panels. Aufbau, Organisation und Arbeit solcher Panels sind aufwendig und dennoch bleiben die Resultate angreifbar. Eine objektivere, maschinelle Bewertung und Klassifikation wäre daher wünschenswert. Das Institut für Angewandte Simulation (IAS) sucht in enger Zusammenarbeit mit dem Institut für Lebensmittel- und Getränkeinnovation (ILGI) nach einer entsprechenden Technik.**

Als objektives Sensorium für die Analyse verschiedener Eigenschaften von Lebensmitteln bietet sich die NIR-Spektroskopie an, die in den letzten Jahren erschwinglicher geworden ist. Mit dem FT-IR-Spektrometer am Wädenswiler Zentrum für Getränke- und Aromaforschung wurden die Spektren einer Anzahl Weinproben im Spektral-Bereich zwischen  $350\text{ cm}^{-1}$  und  $4000\text{ cm}^{-1}$  (Wellenzahlen) gemessen. Das ALPHA FT-IR-Spektrometer der Firma Bruker macht die Messungen dabei mittels der ATR-Technik (attenuated total reflection). Gleichzeitig wurden chemische Parameter der Weine



Nach der Bearbeitung mit Machine-Learning-Algorithmen erscheinen die NIR-Spektren als Punkte in einem hochdimensionalen Raum. Hier sind Resultate von 5 Weinsorten dreidimensional dargestellt (drei wichtigste Hauptkomponenten). Bild: Dr. Robert Rohrkemper

bestimmt, um die Spektren sinngemäss interpretieren zu können. Diese sind geprägt durch Absorptionsbänder diverser Inhaltsstoffe, die für den Charakter eines Weines mitprägend sind.

### Das NIR als Schatzkiste voller Informationen

Von Auge beurteilt, sehen sich die Spektren alle recht ähnlich. Systematische, interpretierbare Unterschiede stechen keine heraus. Viel Information bleibt also vorerst in den Spektren verborgen und es bedarf raffinierter Analyse-Verfahren, um den Spektren ihre Geheimnisse zu entreissen. Auch die Spektrometer-eigene Analyse-Software reicht dafür nicht aus.

### Neuroinformatik als Schlüssel zur Schatzkiste

An der Fachstelle Datenanalyse und Statistik des IAS beschäftigt sich eine Gruppe mit Neuroinformatik, Machine-Learning und Naturinspirierten Algorithmen. Neuste Verfahren aus diesem Bereich wurden auf die Wein-Spektren zugeschnitten und angewendet und auch mit den Methoden der klassischen multivariaten Statistik kombiniert. Wie die Abbildung an den Tag legt, fallen erste Resultate vielversprechend aus. Es handelt sich aber erst um eine Vorstudie. Wesentlich umfangreichere Messreihen werden nötig sein, um die Aussagemöglichkeiten im Detail auszuloten. Natürlich lockt dabei auch die Anwendung auf andere Lebensmittel.



Das Fourier-Transform-NIR-Spektrometer ALPHA von Bruker.

### Visualisierung als Herausforderung

Eine besondere Schwierigkeit liegt auch in der Visualisierung der Resultate. In einem Teil der angesprochenen Verfahren wird jeder Frequenzpunkt als Dimension interpretiert, so dass man sich gewissermassen in einem Raum mit mehreren hundert Dimensionen bewegt. Zwar kann eine Hauptkomponentenanalyse die zwei bis drei wichtigsten Dimensionen bzw. Dimensionenkombinationen herausfiltern, so dass eine abbildbare Projektion entsteht, dennoch kann sich viel Essentielles in den unberücksichtigten Dimensionen verbergen. Am IAS wurden deshalb bereits Algorithmen entwickelt, die eine Clusteranalyse eng mit dem Abbildungsverfahren verknüpfen. Damit wird sichergestellt, dass die Abbildung auch wirklich die inhärente Struktur sichtbar macht.