

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第4044659号
(P4044659)

(45) 発行日 平成20年2月6日(2008.2.6)

(24) 登録日 平成19年11月22日(2007.11.22)

(51) Int. Cl.		F I	
GO 1 J	3/45 (2006.01)	GO 1 J	3/45
GO 1 J	3/02 (2006.01)	GO 1 J	3/02 R
GO 1 N	21/35 (2006.01)	GO 1 N	21/35 Z
GO 1 N	30/74 (2006.01)	GO 1 N	30/74 E
GO 1 N	30/86 (2006.01)	GO 1 N	30/86 G

請求項の数 31 外国語出願 (全 17 頁)

(21) 出願番号 特願平9-353748
 (22) 出願日 平成9年12月22日(1997.12.22)
 (65) 公開番号 特開平10-206236
 (43) 公開日 平成10年8月7日(1998.8.7)
 審査請求日 平成16年9月6日(2004.9.6)
 (31) 優先権主張番号 60/033726
 (32) 優先日 平成8年12月20日(1996.12.20)
 (33) 優先権主張国 米国(US)

前置審査

(73) 特許権者 591047822
 ビーイー コーポレーション (エヌワイ
)
 PE Corporation (NY)
 アメリカ合衆国 カリフォルニア州 94
 404 フォスターシティ, リンカーン
 センター ドライブ 850
 850 Lincoln Centre
 Drive, Foster City, C
 A 94404, USA
 (74) 代理人 100061815
 弁理士 矢野 敏雄
 (74) 代理人 100094798
 弁理士 山崎 利臣

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 分析情報を変換するための方法及び装置及びスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読み取り可能な記憶媒体

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

第2の分光測定装置の分析情報との比較のために第1の分光測定装置の分析情報を変換するための方法において、

前記第1の分光測定装置のための分析プロファイルの第1の標準関数を選択するステップと、前記第2の分光測定装置のための分析プロファイルの第2の標準関数を選択するステップと、前記第1の標準関数を第2の標準関数に変換する変換係数をコンピュータ計算するステップと、第1の試料のための第1の分光測定装置により第1の分析情報を得るステップと、第2の試料のための第2の分光測定装置により第2の分析情報を得るステップと、変換された情報を生成するために前記第1の分析情報に前記変換係数を適用するステップと、前記変換された情報を前記第2の分析情報と比較するステップとを有し、

ここで、前記第1の標準関数は或るスペクトル線源に対する第1の分光装置固有のプロファイルを表すスペクトル情報を近似する矩形関数であり、前記第2の標準関数は前記スペクトル線源に対する第2の分光装置固有のプロファイルを表すスペクトル情報を近似するガウス関数である、

ことを特徴とする分析情報を変換するための方法。

【請求項2】

分光測定装置がクロマトグラフ装置であることを特徴とする請求項1に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項3】

1つの選択されたスペクトルレンジ内で第2の分光測定装置のスペクトル情報との比較のために第1の分光測定装置の分析情報を変換するための方法において、

前記第1の分光測定装置のためのスペクトル線形状のための第1の標準関数を選択するステップと、前記第2の分光測定装置のためのスペクトル線形状のための第2の標準関数を選択するステップと、前記第1の標準関数を前記第2の標準関数に変換する変換係数をコンピュータ計算するステップと、第1の試料のための前記第1の分光測定装置により第1のスペクトル情報を得るステップと、第2の試料のための前記第2の分光測定装置により第2のスペクトル情報を得るステップと、変換された情報を生成するために前記第1のスペクトル情報に前記変換係数を適用するステップと、前記変換された情報を前記第2のスペクトル情報と比較するステップとを有し、

10

ここで、前記第1の標準関数は或るスペクトル線源に対する第1の分光装置固有のプロファイルを表すスペクトル情報を近似する矩形関数であり、前記第2の標準関数は前記スペクトル線源に対する第2の分光装置固有のプロファイルを表すスペクトル情報を近似するガウス関数である、

ことを特徴とする分析情報を変換するための方法。

【請求項4】

それぞれの標準関数を、スペクトル線源のための相応する固有の装置プロファイルを表すものとして選択することを特徴とする請求項3に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項5】

第1の分光測定装置が干渉FTIR装置から成り、第2の分光測定装置が分散形分光測定装置から成ることを特徴とする請求項3に記載の分析情報を変換するための方法。

20

【請求項6】

第1の標準関数が、アポダイゼーション係数によって変形された矩形関数であり、第2の標準関数がガウス関数であり、それぞれのこのような関数が、スペクトル線源のための相応する固有の装置プロファイルを表すことを特徴とする請求項5に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項7】

第1の標準関数が波数に依存し、変換係数が、スペクトルレンジにわたり選択された波数増分において一連のサブ係数を含み、前記サブ係数が前記波数に依存することを特徴とする請求項6に記載の分析情報を変換するための方法。

30

【請求項8】

第2のスペクトル情報を、第2の標準関数により標準化することを特徴とする請求項3に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項9】

それぞれの標準関数を、スペクトル線源のための相応する固有の装置プロファイルを表すものとして選択し、第2の分光測定装置が、スペクトル線に対する固有幅を有するスペクトル線形状の特徴的な固有プロファイルを有し、前記第2の分光測定装置が、前記固有幅より狭幅な関連する線幅を有する狭幅スペクトル線の線源を有し、

分析情報を変換するための方法が更に、プロファイルデータが前記固有プロファイルを表すように前記狭幅スペクトル線のためのプロファイルデータを生成するために前記線源で前記第2の分光測定装置を最初に操作するステップと前記プロファイルデータを第2の標準関数に変換するための変換フィルタをコンピュータ計算するステップとにより標準化された第2のスペクトル情報を生じさせることを含み、

40

第2のスペクトル情報を得るステップが、試料スペクトルを表す試料データを生成するために試料で前記第2の分光測定装置を通常に操作することと、前記第2のスペクトル情報を生成するために前記試料データに前記変換フィルタを適用することとを含むことを特徴とする請求項8に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項10】

少なくとも1つの標準関数が波数に依存し、変換係数が、スペクトルレンジにわたり選択された波数増分において一連のサブ係数から成り、サブ係数が波数に依存することを特

50

徴とする請求項 9 に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項 1 1】

第 1 の分光測定装置が干渉 F T I R 装置から成り、第 2 の分光測定装置が分散形分光測定装置から成り、第 1 の標準関数が、波数に依存する、アポダイゼーション係数によって変形された矩形関数であり、第 2 の標準関数がガウス関数であることを特徴とする請求項 1 0 に記載の分析情報を変換するための方法。

【請求項 1 2】

比較のために分析情報を変換するための装置において、

分析プロファイルのための選択された第 1 の標準関数を有する第 1 の分光測定装置と、分析プロファイルのための選択された第 2 の標準関数を有する第 2 の分光測定装置と、第 1 の標準関数を前記第 2 の標準関数に変換する変換係数をコンピュータ計算する手段と、第 1 の試料のための第 1 の分光測定装置により第 1 の分析情報を得る手段と、第 2 の試料のための第 2 の分光測定装置により第 2 の分析情報を得る手段と、変換された情報を生成するために前記第 1 の分析情報に前記変換係数を適用する手段と、前記変換された情報を前記第 2 の分析情報と比較する手段とを有し、

ここで、前記第 1 の標準関数は或るスペクトル線源に対する第 1 の分光装置固有のプロファイルを表す スペクトル情報を近似する矩形関数 であり、前記第 2 の標準関数は前記スペクトル線源に対する第 2 の分光装置固有のプロファイルを表す スペクトル情報を近似するガウス関数 である、

ことを特徴とする分析情報を変換するための装置。

【請求項 1 3】

分光測定装置がクロマトグラフ装置であることを特徴とする請求項 1 2 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 1 4】

選択されたスペクトルレンジ内で比較のために分析情報を変換する装置において、

スペクトル線形状のための選択された第 1 の標準関数を有する第 1 の分光測定装置と、スペクトル線形状のための選択された第 2 の標準関数を有する第 2 の分光測定装置と、前記第 1 の標準関数を前記第 2 の標準関数に変換する変換係数をコンピュータ計算する手段と、第 1 の試料のための前記第 1 の分光測定装置により第 1 のスペクトル情報を得る手段と、第 2 の試料のための前記第 2 の分光測定装置により第 2 のスペクトル情報を得る手段と、変換された情報を生成するために前記第 1 のスペクトル情報に前記変換係数を適用する手段と、前記変換された情報を前記第 2 のスペクトル情報と比較する手段とを有し、

ここで、前記第 1 の標準関数は或るスペクトル線源に対する第 1 の分光装置固有のプロファイルを表す スペクトル情報を近似する矩形関数 であり、前記第 2 の標準関数は前記スペクトル線源に対する第 2 の分光装置固有のプロファイルを表す スペクトル情報を近似するガウス関数 である、

ことを特徴とする分析情報を変換するための装置。

【請求項 1 5】

それぞれの標準関数が、スペクトル線源のための相応する固有の装置プロファイルを表すことを特徴とする請求項 1 4 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 1 6】

第 1 の分光測定装置が干渉 F T I R 装置から成り、第 2 の分光測定装置が分散形分光測定装置から成ることを特徴とする請求項 1 4 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 1 7】

第 1 の標準関数が、アポダイゼーション係数によって変形された矩形関数であり、第 2 の標準関数がガウス関数であり、それぞれのこのような関数が、スペクトル線源のための相応する固有の装置プロファイルを表すことを特徴とする請求項 1 6 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 1 8】

第 1 の標準関数が波数に依存し、変換関数が、スペクトルレンジにわたり選択された波

10

20

30

40

50

数増分において一連のサブ増分から成り、前記サブ係数は前記波長に依存することを特徴とする請求項 17 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 19】

第 2 のスペクトル情報を第 2 の標準関数により標準化することを特徴とする請求項 14 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 20】

それぞれの標準関数が、スペクトル線源のための相応する固有の装置プロフィールを表し、第 2 の分光測定装置が、スペクトル線のための固有幅を有するスペクトル線形状の特徴的固有プロフィールを有し、第 2 の分光測定装置が、前記固有幅に比して狭幅な関連する線幅を有する狭幅スペクトル線の線源を有し、

10

分析情報を変換するための装置が更に、標準化された第 2 のスペクトル情報を生成する手段を有し、前記生成手段が、プロフィールデータが前記固有プロフィールを表すように前記狭幅スペクトル線のためのプロフィールデータを生成するために前記線源で前記第 2 の分光測定装置を最初に操作する手段と、前記プロフィールデータを前記第 2 の標準関数に変換する変換フィルタをコンピュータ計算する手段とを有し、

第 2 のスペクトル情報を得る手段が、試料スペクトルを表す試料データを生成するために試料で前記第 2 の分光測定装置を通常に操作する手段と、前記第 2 のスペクトル情報を生成するために前記試料データに前記変換フィルタを適用する手段とを有することを特徴とする請求項 19 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 21】

20

少なくとも 1 つの標準関数が波数に依存し、変換係数が、スペクトルレンジにわたり選択された波数増分において一連のサブ係数から成り、前記サブ係数は前記波数に依存することを特徴とする請求項 20 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 22】

第 1 の分光測定装置が干渉 FTIR 装置から成り、第 2 の分光測定装置が分散形分光測定装置から成り、第 1 の標準関数が、波数に依存する、アポダイゼーション係数によって変形された矩形関数であり、第 2 の標準関数がガウス関数であることを特徴とする請求項 21 に記載の分析情報を変換するための装置。

【請求項 23】

分析プロフィールのための選択された第 1 の標準関数を有する第 1 の分光測定装置により得られた第 1 のスペクトル情報と、分析プロフィールのための選択された第 2 の標準関数を有する第 2 の分光測定装置により得られた第 2 の分析情報との間の比較のためのスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体において、

30

前記記憶媒体が、変換を実現するコンピュータ計算手段において利用可能であり、前記記憶媒体は、前記コンピュータ計算手段により読取り可能なようにデータコード及びプログラムコードを格納して有し、前記データコードは、前記第 1 の標準関数を前記第 2 の標準関数に変換する変換係数から成り、前記プログラムコードは、比較のために変換された情報を生成するために第 1 の分析情報に前記変換係数を適用する手段を有し、

ここで、前記第 1 の標準関数は或るスペクトル線源に対する第 1 の分光装置固有のプロフィールを表す スペクトル情報を近似する矩形関数 であり、前記第 2 の標準関数は前記スペクトル線源に対する第 2 の分光装置固有のプロフィールを表す スペクトル情報を近似するガウス関数 である、

40

ことを特徴とするスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

【請求項 24】

分光測定装置がクロマトグラフ装置であることを特徴とする請求項 23 に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

【請求項 25】

選択されたスペクトルレンジ内での比較のためにスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体において、

50

前記比較を、スペクトル線形状のための選択された第1の標準関数を有する第1の分光測定装置により得られた第1のスペクトル情報と、スペクトル線形状のための選択された第2の標準関数を有する第2の分光測定装置により得られた第2のスペクトル情報との間で行い、前記記憶媒体は、前記変換を実現するコンピュータ手段において利用可能であり、前記記憶媒体は、コンピュータ計算手段により読取り可能なようにデータコード及びプログラムコードを格納しており、前記データコードは、前記第1の標準関数を前記第2の標準関数に変換する変換係数を有し、前記プログラムコードは、比較のために変換された情報を生成するために前記第1の情報に前記変換係数を適用する手段を有し、

ここで、前記第1の標準関数は或るスペクトル線源に対する第1の分光装置固有のプロファイルを表すスペクトル情報を近似する矩形関数であり、前記第2の標準関数は前記スペクトル線源に対する第2の分光装置固有のプロファイルを表すスペクトル情報を近似するガウス関数である、

10

ことを特徴とするスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

【請求項26】

プログラムコードが更に、変換された情報を第2のスペクトル情報と比較する手段を有することを特徴とする請求項25に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

【請求項27】

それぞれの標準関数が、スペクトル線形状のための相応する固有の装置プロファイルを表すことを特徴とする請求項25に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

20

【請求項28】

第1の分光測定装置が、干渉FTIR装置から成り、第2の分光測定装置が分散形分光測定装置から成ることを特徴とする請求項25に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

【請求項29】

第1の標準関数が、アポダイゼーション係数によって変形された矩形関数であり、第2の標準関数がガウス関数であり、それぞれのこのような関数が、スペクトル線形状のための相応する固有の装置プロファイルを表すことを特徴とする請求項28に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

30

【請求項30】

第1の標準関数が波数に依存し、変換係数が、スペクトルレンジにわたり選択された波数増分における一連のサブ係数から成り、前記サブ係数は前記波数に依存することを特徴とする請求項29に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

【請求項31】

第2のスペクトル情報を第2の標準関数により標準化することを特徴とする請求項25に記載のスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体。

40

【発明の詳細な説明】

【0001】

本発明は、分光測定装置のような分析装置および分析情報を変換するための方法および装置ならびにそのような分光測定装置間でのスペクトル情報の変換において利用するためのコンピュータ読取り可能な記憶媒体に関する。

【0002】

【従来の技術】

分析装置は、材料の分析に一般的に関連する種々の用途に使用される。1つのクラスのような装置は分光測定装置から成り、分光測定装置においてスペクトルが、試料に特徴的であり光検出器に入射するスペクトルビームを生成するために、試料材料との相互作用

50

において生成される。最近の装置は、材料に相応するスペクトル情報を生成及び比較するために検出器からのスペクトルデータを受取るコンピュータを含む。1つのタイプの分光測定装置においてはスペクトルはプリズム又はホログラフィ格子等の分散素子により生成され、分散素子は、試料を通過したか又は放射された光、又は試料材料を含むプラズマ又はその他の励起源から受光した光をスペクトル分散する。別のタイプは、時間変化する光学干渉システムを内蔵し、このシステムにおいて光の干渉パターンが生成され、光はパターンを変形する試料材料を通過する。フーリエ変換コンピュータ計算が、変形された光パターンをスペクトルデータに変換するために検出器信号に適用される。フーリエ変換装置は、赤外線領域内で一般的に操作され、" F T I R " 装置として知られている。

【 0 0 0 3 】

光学装置、検出器及びコンピュータ化における改善と共に、非常に正確な測定を行うための能力が発展した。例は、吸収スペクトロメータ、ポリクロメータ又はガソリンにおけるオクタン価を測定するために化学測定材料分析を使用する F T I R 装置である。オクタン価における差は、近赤外線 (I R) 吸収スペクトルにおける微妙な差に対応する。スペクトル特性における非常に小さい変化を、実際の上で人員により直接的に検出することは不可能であり、コンピュータ化された自動化が必要である。このようなスペクトル測定が、通常は吸収分光光度計により連続的にオンラインで実現されることが望ましく、これに対して F T I R 装置はしばしば実験室装置と見なされる。このようにして、分析化学のためと、より特定的には1つのタイプの装置からの情報と別のタイプの装置からの情報との正確な比較のためとに進歩した分光測定法を利用することに対する関心が存在する。

【 0 0 0 4 】

比較の1つの態様は、装置が、スペクトルプロファイルに関連する固有特性を有することにある。このような特性はそれぞれの装置に固有であり、時間と共に変換することもある。装置の固有特性はデータを歪ませ、比較を不正確にする。分散格子を有するポリクロメータのような装置において固有特性は、非常に狭幅であり鮮鋭なスペクトル線を表すスペクトルデータのプロファイルを典型的に有する。このようなプロファイルは、装置の中の光学装置及び(より低い程度で)電子装置における基本的光学デザイン及び回折効果及びその他の不完全性に起因して固有形状と、実際の線に比してより広い線幅とを有する。実際の固有プロファイルは対称ではないこともある。ポリクロメータ及び類似の装置において狭幅線源からの装置プロファイルはガウスプロファイルに類似である。F T I R のようなその他の装置において干渉計分解能のリミットにおける固有プロファイルはより矩形状である。

【 0 0 0 5 】

本譲受人所有の米国特許第 5 3 0 3 1 6 5 号明細書 (G a n z 等) は、選択されたスペクトルレンジ内の仮定的に細いスペクトル線のためのスペクトル線形状の特徴的固有プロファイルを有する分光測定装置を標準化するための方法及び装置を開示している。標準化されたデータは、任意の類似の装置により同一の試料材料から得られたデータ及びある時間にわたり同一の装置により繰返し得られたデータと実質的に同一である。

【 0 0 0 6 】

従来の F T I R 装置は P . R . G r i f f i t h s 及び J . A . d e H a s e t h 著 " フーリエ変換赤外線分光測定法 " 等の教科書に教示されている。これらの装置においては光の干渉パターンは、白色光を2つのビームに分割する部分リフレクタであるビームスプリッタを含むマイケルソン又は類似の干渉計により生成される。これらのビームは反射されて戻されてビームスプリッタで再結合される。ビームのうちの1つのビームの光路長は、時間変化する干渉パターンを生成するために時間と共に変化する。この光パターンは、パターンを変形する試料材料を通過してガイドされる。フーリエ変換コンピュータ計算は、変形されたパターンを、強度対波数を表すスペクトルデータに変換する。

【 0 0 0 7 】

別のクラスの分析装置はクロマトグラフのためのものであり、クロマトグラフには2つの通常のクラスが存在する、すなわちガスクロマトグラフ (G C) と液体クロマトグラフ (L C) である。例えば米国特許第 5 5 4 5 2 5 2 号明細書及び米国仮特許出願第 6 0 / 0

10

20

30

40

50

06017号明細書に説明されているようなガスクロマトグラフは本質的に分離の物理的方法であり、この場合、キャリアガスの中のテスト試料の成分がコラムの中の定常相材料により吸着及び脱着される。試料のパルスがキャリアガスの定常流の中に噴射される。コラムの端で個々の成分が時間により種々の程度で分離される。熱伝導性等のガステ性の検出は、時間スケール化されたパターンを提供し、このパターンは、校正及び既知の試料との比較によりテスト試料の成分を質的及び量的に示す。このようなシステムの主構成要素はコラム、試料をキャリアガスの中に導入するための混合室を有するインジェクタ、コラムの外側端部におけるガステ性検出器、ガス制御器、検出器の出力を処理及び表示するコンピュータである。異なるタイプのコラム又は異なるタイプの操作条件を有するGC装置の間の比較が重要である。

10

【0008】

液体クロマトグラフは例えば米国特許第4886356号明細書(Paradis)及び特許第5173742号明細書(Young)に説明されているものに類似である。試料のパルスは、キャリア液体の定常流の中に噴射され、キャリア液体はコラムを通過し、次いでウィンドウを有する1つのセル(又は2つのセル)を通過する。光ビームはそれぞれのセルを通過して光検出器に達し、光検出器は、コンピュータへ供給される出力信号を生成する。この信号は試料成分に従って時間と共に変化する。ガスクロマトグラフの場合のようにコンピュータ処理及び校正又は既知試料との比較によりテスト試料の成分を示すことが可能である。異なるタイプのコラム又は異なる操作条件を有するLC装置の間の比較が重要である。

20

【0009】**【発明の概要】**

前述及びその他の目的は、第2の分光測定装置のスペクトル情報との比較のために第1の分光測定装置のスペクトル情報を変換する方法及び代替的に装置により少なくとも部分的に達成される。いずれの場合にも第1の標準関数が、第1の分光測定装置のためのスペクトル線形状のために選択され、スペクトル線形状のための第2の標準関数が第2の分光測定装置のために選択される。有利にはそれぞれの標準関数は、仮定的に細いスペクトル線源のための相応する固有の装置プロフィールを一般的に表すものとして選択される。変換係数は、第1の標準関数を第2の標準関数に変換するためにコンピュータ計算される。

30

【0010】

通常操作において第1のスペクトル情報は、第1の試料のための第1の分光測定装置により得られ、第2のスペクトル情報は、(第1の試料と同一であるか又は類似であることもある)第2の試料のための第2の分光測定装置により得られる。変換係数が、変換された情報を生成するために第1のスペクトル情報に適用され、変換された情報が第2のスペクトル情報と比較される。

【0011】

1つの有利な態様では第1の分光測定装置は干渉FTIR装置から成り、第2の分光測定装置は分散形分光測定装置から成る。このような状態では第1の標準関数は、変形された矩形関数でなければならず、第2の標準関数はガウス関数でなければならず、それぞれのこのような関数は、仮定的に細いスペクトル線源のための相応する固有の装置プロフィールを一般的に表す。FTIRのような装置において第1の標準関数は波数に依存することもあり、この場合、変換係数は、スペクトルレンジにわたり選択された増分における一連のサブ係数から成るべきであり、サブ係数は波数に依存している。

40

【0012】

目的はより広くは、第2の分析装置の分析情報との比較のために第1の分析装置の分析情報を変換する方法又は装置により達成される。このような装置は(前述のように)分光測定装置、(ガス又は液体)クロマトグラフ装置、又は分析プロフィールを生成するその他のこのような装置であることもある。分析プロフィールの第1の標準関数が第1の装置のために選択され、分析プロフィールの第2の標準関数が第2の装置のために選択され、変換係数が、第1の標準関数を第2の標準関数に変換するためにコンピュータ計算される。第1の

50

分析情報は第1の試料のための第1の分光測定装置により得られ、第2の分析情報は第2の試料のための第2の分光測定装置により得られる。変換係数が、変換された情報を生成するために第1の分析情報に適用され、変換された情報は第2の分析情報と比較される。

【0013】

目的は、本明細書に説明されている変換を実現するために既存装置のコンピュータにおいての使用のための適切なデータコード及びプログラムコードを有する（例えばディスク等の）コンピュータ読取り可能な記憶媒体によっても達成される。

【0014】

【実施の形態】

1つの実施の形態では本発明は、同一の選択されたスペクトルレンジ内で操作される2つの分光測定装置のスペクトル出力情報の比較に関する。1つのこのような分光測定装置（図1）は例えば、引用により本明細書に参照されている米国特許第5303165号明細書の中に開示されているタイプの分散形分光測定装置である。このような分光測定装置10は光検出器11を有し、光検出器11のために標準化及び波長校正が行われる。このような分光測定装置は例えば、ガソリンのオクタン価を測定するために近赤外線における高い感度及び安定性を必要とするオンラインケモメトリックスペクトログラフィックポリクロメータであることもある。安定しているがその他の点では通常の白熱光源12は光13を放射し、光13はリレーレンズ14を通過する。リレーレンズ14は、光ファイバー16の入力端にフォーカシングされている。ファイバーは光をプローブアセンブリ18へガイドし、プローブアセンブリ18は、テストされるガソリン等の液体の中に浸漬されている。ストレートスループローブとして示されているけれども、このプローブの代わりに、光を戻りファイバーに戻すために反射素子を有する折返し光学装置を用いることも可能である。

【0015】

プローブの中に液体のための試料空間20が設けられ、これにより光22は液体を通過し、この個所で光の一部は選択的にフィルタリングされる。フィルタリングされた光は第2の光ファイバー24に入射される。オプティカルスイッチ28を有するバイパスファイバー26が設けられ、バイパスファイバー26は、ファイバーを通過する光に液体をバイパスさせ、これによりフィルタリングされた光を比較する標準が形成される。第2のファイバー24は、凹ホログラフィ格子33を利用してスペクトロメータ32に光をガイドし、凹ホログラフィ格子33は光35を検出器11に分散する。スペクトルを表す検出器からの信号はコンピュータ37に供給されて、ディスク又はその他のメモリに記憶され、処理される。

【0016】

コリメーションゾーン44が、いくつかの開口を有するディスク43を挿入するために複数のファイバーのうちの1つのファイバーの中に設けられている。対応する対のレンズ45（1つが図示）は、コリメートされた光を、ファイバー端部とファイバー端部との間の選択された開口を通過させる。1つの開口47は、試料又はバックグラウンドを測定するために分光測定装置の通常の操作のためにフィルタリングされない光を通過させるために空のままにされている。その他の開口は、校正及び標準化に使用される光学フィルタ素子46, 48, 50を収容する。ディスクは、選択された開口又はフィルタに対して線53を介して（例えば再校正のための選択されたインターバルで）手動で又はコンピュータ34により自動的にモータ52により位置決め可能である。

【0017】

本発明で利用される他方の分光測定装置は通常は第1の分光測定装置とは異なるタイプである。1つの有利な実施の形態（図2）では第2の分光測定装置は従来の干渉FTIRである。この分光測定装置110においてオプティカルトレース112により干渉縞パターンが従来のマイケルソン干渉計114により生成される。マイケルソン干渉計114は、干渉ビームと干渉ビームとの間の光路差を振動することにより時間と共に縞パターンを変化させる。縞パターンビーム116はレンズ及びアパーチャ122を通過し、次いで、試料

10

20

30

40

50

118を通過することによりビーム120に変形されて検出器に到達し、検出器は、対応するスペクトルデータを生成する。フーリエ変換コンピュータ計算がコンピュータ128によりデータに適用され、これにより、強度対波数を表すスペクトル情報が生成され、スペクトル情報は試料を表す。(FTIRにおいて通常使用される波数は波長の逆数であり周波数に比例する。)

前述の分光測定装置のそれぞれにおいて使用されるコンピュータは例えばDigital model DEC PC 590等の従来のコンピュータでよく、通常はそのメーカーにより分光測定装置の中に組込まれる。例えばFTIRのコンピュータ128等のコンピュータは通常は、線126で検出器124から信号を受取るA/D変換器132を有する中央演算装置(CPU)130を含む。コンピュータメモリ134のセクションは通常は内部ハードディスクと、例えばフロッピーディスク、CD-ROM、及び/又は適切なコードが埋込まれているテープとを含む。キーボード136が通常はオペレータ入力のために設けられている。スペクトル情報は、モニター133に表示される及び/又はプリントされる。コンピュータは、干渉計114を制御するためにD/A変換器138を介して信号を供給することもある。1つ以上の付加的な専用チップ処理ユニットがある特定のステップのために利用されることもある。例えばFTIRにおいて1つの別個のチップがフーリエ変換コンピュータ計算のために使用され、別の1つのチップはアライメント等の制御のために使用される。本発明は有利には、本発明を実施するためのステップ及び手段を表すデータ及びプログラムコードを利用して、少なくとも第1の分光測定装置に対応する1つのコンピュータ又は双方の分光測定装置と共働するコンピュータの主CPUにより実施される。このようなコードは有利には、例えばコンピュータのハードディスク又はその他の点では従来の分光測定装置のコンピュータにおいて利用することが可能であるフロッピーディスク等のコンピュータ読取り可能な記憶媒体の中に格納されている。

【0018】

プログラミングは、通常は従来の操作のためにコンピュータ又は分光測定装置のメーカーによりコンピュータの中に組込まれている"C++"等の従来のものである。本明細書のフローチャートからのプログラミング及び記述は従来のものであり、当業者により容易に実行できる。このようなプログラミングの詳細は本発明に重要でない。コンピュータ計算は大量のデータを処理し、従って長時間かかるので、少なくとも100MHzのIntel Pentium™等の高性能プロセッサが推奨されるが、しかし486プロセッサで充分である。

【0019】

前述の分光測定装置のそれぞれは、不完全であるスペクトル情報を生成する。非常に狭幅の線を生成するスペクトル源においてスペクトル情報は、有限幅を有するプロファイルに広げられた線である。分散素子の場合にはプロファイルは、分光測定装置分解能を表す半値全幅(FWHM: full width at half the maximum peak height)を有するガウス関数に近似できる。

【0020】

FTIR分光測定装置の場合には狭幅線源からのスペクトル情報を、分解能を表す幅を有する変形された矩形に近似させることが可能である。矩形幅を例えば次式1により理論的に(従来のように)近似させることにより求められる。

【0021】

$$= \frac{\lambda^2}{8} \quad \text{式 1}$$

ただし $\lambda = \sin^{-1}(d/f)$ であり、dは干渉計と試料との間にあるアパーチャの直径であり、fは、アパーチャ122を試料に結像するレンズ123の焦点距離である(例えばd = 4.2 mm及びf = 120 mm)。

【0022】

矩形の変形は、アポダイゼーション係数のフーリエ変換に関連する。干渉計からの干渉ビームにおける任意の1つの波長に対応する強度は、変化する光路長を表す時間に依存する正弦波の形を有する。正弦波の端部は、干渉計の中の光路変化のリミットすなわちリフレ

10

20

30

40

50

クタ回転によりカットされる。コンピュータ処理は波形を無限長として扱うので歪が端部カットにより導入される。良好に解釈できるようにするために、現在のFTIR分光測定装置におけるデータは、データベクトルに、“アポダイゼーション”係数Aとして知られるマトリクス補正係数を乗算している。この係数は、数学的関数として理論的考慮により予選択され、干渉計鏡のサイクルリミットから既知である、正弦波の端部のカットオフに対応する計算された幅を有する。波数空間において、変形され矩形関数Tは次式により表される。

【0023】

$$T = R * A \quad \text{式 2}$$

ただしRは、幅 (式2) を有する矩形関数であり、矩形関数は例えばsinc関数 $A = \sin(2L_m) / (2L_m)$ 等のアポダイゼーション係数と乗算され、ただし L_m は干渉計における分割された干渉ビームの光路長における最大差である。この変形された関数は、消失した正弦状尾部を有する中央ピークの形を有する。

【0024】

(本明細書及び請求の範囲の中で使用されるようにマトリクス演算における“乗算”の表現及びそれに対応する記号“*”は、直接的な乗算を意味するか、又は畳込み等の関連するプロシージャを意味する。同様にマトリクス演算における“除算”、“比”との表現及びそれらの対応する記号“/”は、直接的な除算を意味するか、又は例えば逆畳込み等の関連するプロシージャを意味する。)

狭幅線源の有限幅に加えて、それぞれの分光測定装置のためのスペクトル情報において固有の歪が存在する。歪は、仮定的に細いスペクトル線源のためのスペクトル線形状の特徴的な固有プロフィールの中に表されている。前述の米国特許第5303165号明細書に開示されているように分光測定装置又はそのデータを、仮定的に鮮鋭なスペクトル線のために選択されたターゲットプロフィールの選択によりこの歪から標準化することが可能である。分光測定装置は、固有歪を表すプロフィールデータを生成するために狭幅線源で操作される。変換フィルタが、プロフィールデータをターゲットプロフィールに変換するためにコンピュータ計算される。次いで分光測定装置は、試料スペクトルを表す試料データを生成するために試料源で通常に操作され、変換フィルタは、スペクトル情報を生成するために試料データに適用され、スペクトル情報はこれにより、同一のタイプの任意の分光測定装置からの類似の標準化された情報との比較のために標準化される。

【0025】

FTIRにおいても固有歪が存在する。そのスペクトル情報は、例えば本譲受人所有の(弁理士事件整理番号ID-4440)同時係属米国特許出願明細書に開示されているような標準化により変形することが可能である。しかしこのスペクトル情報のこのような標準化は、本発明に鑑みて不要であり、情報をフーリエ変換から直接的に利用することが可能である。

【0026】

図3は、前述の分光測定装置において本発明を適用するための方法及び手段を示す。テスト試料204での第1の分光測定装置の通常操作202(例えばFTIR)は、測定されたスペクトルデータ D_{m1} の集合206を生成する。同様に、同一の又は別の(通常は類似の)テスト試料210での第2の分光測定装置の通常操作(例えば分散)は、スペクトルデータ D_{m2} の別の集合211を生成する。有利には第2の分光測定装置のデータ D_{m2} は、要約して前述したように前述の米国特許第5303165号明細書に記載のように、スペクトル情報 P_m の集合212に標準化される214。第1の分光測定装置のための対応するデータ206を標準化することが可能であるが、しかし(図示のように)必要不可欠ではない。

【0027】

通常は分光測定装置のこれらの操作の前に第1の標準関数Tが、第1の分光測定装置のためのスペクトル線形状のために選択される216。これは例えばFTIRのための前述の変形された矩形関数等の理想化されたプロフィールでなければならない。プロフィールは、一

10

20

30

40

50

般的に、仮定的に細いスペクトル線源のための相応する固有プロフィールを表す。(本明細書の中での”一般的に表す”との表現は、関数は有利には数学的に適切な関数を使用して固有のプロフィールに近似するだけでよいことを意味する。)第1の分光測定装置のデータが標準化されている場合には標準化の理想関数又はターゲットプロフィールが有利には選択される。データが標準化されていない場合には式2の関数が、FTIRが第1の分光測定装置である本ケースの場合には適切である。

【0028】

第2の標準関数Gも、第2の分光測定装置のためのスペクトル線形状のために選択される218。これも、例えば分散形分光測定装置のためのガウス関数等の理想化されたプロフィールでなければならない。これも有利には、一般的に、仮定的に細いスペクトル線源のための相応する固有歪プロフィールを表す。有利には標準関数Gは、第2の分光測定スペクトル情報 P_m の標準化214において利用されるターゲットプロフィールのために選択される標準関数と同一である。

10

【0029】

変換係数Fが、次式3を使用して第1の標準関数を第2の標準関数に変換するためにコンピュータ計算される220。

【0030】

$$G = T * F \quad \text{式 3}$$

ただしFは、コンピュータ計算された変換係数であり、Tは第1の標準関数(例えば変形された矩形)であり、Gは第2の標準関数(例えばガウス関数)である。コンピュータ演算のために標準関数及びスペクトル情報は、選択されたスペクトルレンジにわたり選択されたインターバルに対して記憶されたデータにより定まるベクトルとして表される。このようにして変換係数Fは1つのマトリクス(又は以下に説明されるように一連のマトリクス)の形を有し、マトリクスのデータは、スペクトル情報での常套的使用のためにディスクに恒久的に記憶される222。

20

【0031】

単位の変換が、変換Fを定められる式において必要であるので含まなければならない。このようにして係数Fは有利には、第2の分光測定装置の単位への変換を含む。例えば、FTIRデータは通常は波数(cm^{-1})であり、分散形分光測定装置データは波長である場合には波数は波長に変換されなければならない。標準関数もそれぞれ、単位領域に対して正規化されなければならない。本明細書及び請求の範囲に記載のように、式3により表される式はこのような変換を単位変換及び正規化として含む。

30

【0032】

測定されたスペクトル情報 D_{m1} が第1の分光測定装置(例えばFTIR)のために得られ、測定され標準化された第2のスペクトル情報 P_m が第2の分光測定装置(例えば分散形分光測定装置)のために得られる。次式4から変換された情報 P_c をコンピュータ計算するために、変換係数Fが第1のスペクトル情報 D_{m1} に乘算される224。

【0033】

$$P_c = D_{m1} * F \quad \text{式 4}$$

変換された情報 P_c は格納され226、測定されたスペクトル情報 P_m と比較される228。このような比較は、可視的に又は例えばそれぞれの波長増分に対して差 $P_m - P_c$ を計算し表示する230コンピュータにより行うことが可能である。

40

【0034】

式1に示されているようにFTIRの特徴は、アパーチャに帰することが可能である分解能のリミット(最小線幅)がスペクトル波数の関数であり、特に、より大きい波数においてより広い線幅を有する波数に比例する。これにより第1の標準関数Fは波数に依存する。(第2の標準関数、すなわちガウス関数は波数に依存することもあるが、しかし必要不可欠ではない。)このような依存性は、スペクトルレンジにわたりそれぞれの選択された波数増分 i において標準サブ関数 T_i を選択することにより扱われる。増分は、第2の分光測定装置のために使用される増分に相応するように選択される。例えば800~

50

1100 nmの波長レンジ内では0.5 nmインターバルで601ポイントが存在する。関数レンジは、実際のレンジに対するコンピュータ計算を取扱うために例えばそれぞれの端部において5 nmだけ延長されなければならない。図4は一連のサブ関数 T_i を示し、それぞれのサブ関数 T_i は波長増分に対する波数の関数である。このようにして第1の標準関数 T の選択は、一連のサブ関数 T_i の選択を含む。

【0035】

係数 F のコンピュータ計算を実現するためにサブ係数 F_i が、(この実施の形態では波長と無関係である)第2の関数 G を使用して式3からの $G = T_i * F_i$ によりそれぞれのサブ関数 T_i に対して計算され、これにより、変換係数を定める一連のサブ係数 F_i が得られる。サブ係数の集合が図5に示されている。(順次の波長のための波数軸線は、グラフの中のサブ係数をより明瞭に示すためにシフトされている。実際には、順次のサブ係数は図4のサブ関数に比してより大きくオフセットされている。)この一連のコンピュータ計算は長時間かかり、例えばGateway™486-50コンピュータで2.5時間かかる。しかしこれはただ一度行うだけでよく、それぞれの対の分光測定装置タイプに対して記憶される。この記憶されたデータは個々の分光測定装置にセンシティブでなく、従って汎用的に利用できる。波数増分は、例えば望ましくは1つの分解能あたり2つのポイント、例えば 1.0 cm^{-1} の分解能に対して 0.5 cm^{-1} である分散形分光測定装置のための選択された増分に対応しなければならない。

10

【0036】

サブ係数マトリクス F_i が、変換されたスペクトル情報を生成するために第1の(F T I R)分光測定装置の通常操作から得られる通常スペクトル情報に適用される。これを行うためにそれぞれのマトリクス F_i が、対応する波数 i の回りのスペクトルデータと乗算される。サブ係数はそれぞれの波数増分の回りのいくつかのポイント、例えばそれぞれの波数増分の回りの $+/-5$ ポイント(全部で11ポイント)に適用されなければならない。サブ係数は比較的簡単であり、変換畳込みコンピュータ計算は迅速に例えば1~2秒で通常疎行列法によりGateway™486-50を使用して行うことが可能である。

20

【0037】

第1の(F T I R)分光測定装置の正確な波数校正が、第2の分光測定装置の標準化されたスペクトル情報との精度比較のために実現されなければならない。これは通常は標準試料により行われ、使用中の分光測定装置において定期的に(例えば毎週又は毎月)行われなければならない。

30

【0038】

前述の説明は特に、分散形スペクトロメータの標準化されたスペクトル情報との比較のための干渉F T I R形スペクトロメータの変換する未標準化スペクトル情報に関して行われた。一般的にこれらの分光測定装置の使用は、低い分解能データとの比較のための高い分解能データの変換を行うことであり、標準化されていない分光測定装置から標準化された分光測定装置への変換を行うことである。これらのタイプの変換は双方共に有利である。

【0039】

F T I Rは、生産において使用されるオンライン分散形スペクトロメータと比較される実験室装置として使用可能である。この対の分光測定装置の選択は特に、本発明の適用に有利である。しかし本発明の適用においてこのような制限は存在しない。例えば前述のようにF T I Rスペクトル情報は標準化可能であるか、又はいずれの分光測定装置も標準化を有しないものでよい。本例のスペクトロメータは赤外線領域内で動作するが、しかし可視光線及び紫外線のその他のスペクトルレンジも適用可能である。本発明を利用することが可能であるその他のスペクトロメータは、例えば誘導プラズマタイプ等の原子放射分光光度計、原子吸光スペクトロメータ、蛍光装置、ラマン装置及び光学フィルタ装置を含む。これらのうちの任意の装置又はその他の所望の分光測定装置が本発明により使用され、対として用いることが可能である。本例ではF T I R分光測定装置のための分解能及び変換は波数に依存する。しかしより一般的に分光測定装置のうち的一方又は双方が波数に

40

50

依存することも、双方共に依存しないこともある。

【0040】

本発明は、第1のタイプ及び第2のタイプの分光測定装置が実質的に同一である、例えば双方共にFTIRであるか双方共に格子タイプである環境の中で変換するために利用されることもある。これの1つの利点は、第1の分光測定装置が実際にはそれぞれ異なる装置であり、従って選択された関数とその都度異なる場合に第2の分光測定装置を標準として選択することにある。別の利点は、FTIR（又はその他の）分光測定装置に固有であり、すなわち、分解能が波長と共に変化し（例えば波長に比例し）、従って変換されたデータが、波長に依存する分解能を有することが可能であることにある。別の1つの態様では第2の分光測定装置は仮定的であり、いかなる特定の分光測定装置にも特に関連しないか、又はいずれの任意のタイプの分光測定装置にさえも関連しない。この場合には1つ以上のタイプの第1の分光測定装置が、一般的比較のための共通のデータタイプに変換される。

10

【0041】

別の1つの実施の形態では、例えばフロッピーディスク、CD-ROM又はテープ等のコンピュータ読取り可能記憶媒体により図3に示されているように前述の変換を実現するために分光測定装置ユーザのための手段を提供するために有益である。記憶媒体はデータコード及びプログラムコードを格納し、従ってコンピュータ計算手段により読取り可能である。データコードは、予選択されたタイプの分光測定装置の第1の標準関数216及び第2の標準関数218から予コンピュータ計算された変換係数222を含む。プログラムコードは、比較のための変換された情報226を生成するために変換係数を第1のスペクトル情報206に適用する224手段を含む。プログラムコードにより単に、比較のための変換された情報が表示されることもあり、又はプログラムコードは更に、変換された情報226を第2のスペクトル情報212と比較する218手段を含むこともある。この実施の形態のより詳細な態様は前述の通りである。

20

【0042】

異なるタイプの分光測定装置のスペクトルデータの比較のために以上説明したにもかかわらず本発明は、例えば分散形タイプか又はFTIR形タイプ等の同一のタイプの分光測定装置のスペクトルデータを比較するために適用可能であり、この場合、分光測定装置は、操作条件において異なるか又は異なるモデルにより異なる。例えばFTIRでは1つの分光測定装置は4つの波数分解能又は8つの波数分解能を有することもある。

30

【0043】

本発明は例えばガスクロマトグラフ(GC)等のその他のクラスの分析装置にも適用可能であり、この場合、これらの装置はスタイル、コラム特性及び/又は操作条件において異なる。異なるスタイルの装置の例は前述の米国特許第5545252号明細書及び仮特許出願第60/006017号明細書(Hinsshaw)に開示され、これらの装置はキャリアガス流制御及び試料トランスファ方法において異なり、このような装置及びそれらの操作の説明は引用文献を参照することとし、本明細書での詳細な説明は省略する。"ジェネリック"GCが図6に概略的に示されている。キャリアガスはその源302からインジェクタ304に供給され、このガスの一部及び大部分は(図示されていない選択された背圧により)インジェクタのポート306から排出される。試料308は瞬時にインジェクタの中に導入され、そこで試料308はキャリアガスの中に混入される。結果の混合ガスの少なくとも一部はインジェクタから流出してコラム310を貫流し、コラム310は異なるレートで試料の成分を吸着及び溶離する。コラムから流出するキャリアガス混合気は検出器312を通過する。検出器312は例えば熱伝導率等のガスの物理特性における時間変化を測定する。検出器信号は分析情報の出力パターンの解析のために線314を介してCPU318及びプログラム320並びにメモリ322を有するコンピュータ316に供給される。分析情報の出力パターンをモニター324に表示することも可能である。

40

【0044】

(2つのHinsshaw特許に開示されているような又は異なるコラム又は操作条件を有

50

する) 2つの異なるGC装置からの分析情報が、図3に関連して説明したように比較される。GCの場合には、標準関数T及びGへ導く線形状又はプロファイルが溶離プロファイルである。有利にはこれらの関数のそれぞれが通常は、(スペクトロメータのための仮定的に細いスペクトル線に類似に) 試料の仮定的な瞬時の簡潔な導入のための相応する固有の装置溶離プロファイルを表す。このようなプロファイルは、D. H. Burns, J. B. Callis及びG. D. Christian著の論文" 2次元(クロマトグラフィック/スペクトル) データ集合の定性分析のためのロバストな方法" (Anal. Chem. 誌58, 1475-1420 (1986)) に開示されているような指数関数的に変形されたガウス関数により定められる。スペクトロメータに関しては、適切なデータ及びプログラムコードを、存在するクロマトグラフ装置のコンピュータにおいての使用のためのディスク又はその他のコンピュータ読取り可能な媒体に記憶することが可能である。

10

【0045】

本発明は同様に、異なる液体クロマトグラフ装置の間の比較のために適用され、これらの装置は、異なるコラム又は操作条件を有する同一の装置であり、このような装置は例えば、前述の米国特許第4886356号明細書(Paradis)及び特許第5173742号明細書(Young)に開示され、これらの明細書は本明細書に引用により取込まれている。コラム特性はこの場合にも、次元及び吸着剤を含み、操作条件はキャリアガスのタイプ及び流速、及び入口圧力及び出口圧力を含む。"ジェネリック" LCが図7に概略的に示されている。液体キャリアがポンプ326からコラム328へ供給される。試料はインジェクタ330から、ポンプとコラムとの間のパイプの中に瞬時に導入され、この個所で試料は液体キャリアの中に混入される。結果の混合液はコラムを通過し、コラムは、異なるレートで試料の成分を吸着及び溶離する。コラムから流出する混合液は、ウィンドウ334を有するセル332を通過する。光源338からの光ビーム336はレンズ340又はその他の適切な光学装置によりコリメートされ、セルの中の液体341を通過して検出器340に達する。検出器340は、光吸収において現れる時間変化を測定する。検出器信号は線342を介して、CPU346及び記憶されているプログラム348及びメモリ350を有するコンピュータ344に出力パターンへの解析のため供給される。出力パターンは、モニター352に表示可能である。GCの場合と同様に比較は、標準関数に対して指数関数的に変形されたガウス関数を使用して図3に関連して説明されたように行うことも可能である。

20

30

【0046】

本発明に適切なその他のクラスの装置は質量スペクトロメータ、X線分析装置、及び物質の分析において分析的プロファイルを生成するその他の分析装置である。

【0047】

本明細書及び請求の範囲において使用されるように"分析プロファイル"との用語は、スペクトル線形状と、クロマトグラフ又は、波長及び時間等の関数のようなプロファイルを生成するその他の分析装置により生ずるプロファイルを含む。同様に"分析情報"はスペクトル情報と、クロマトグラフ及びこのようなその他の分析装置に関連する類似の情報とを含む。

【0048】

本発明を特定の実施の形態を参照して詳細に説明したが、本発明の精神及び添付の請求の範囲を逸脱することなく種々の変化及び変更は当業者には自明である。従って本発明は添付請求の範囲及びそれらの等価のみにより制限される。

40

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明において利用される1つのタイプの分光測定装置の1つの例としての分散形スペクトロメータの概略図である。

【図2】本発明において利用される別の1つのタイプの分光測定装置の1つの例としてのFTIR形スペクトロメータの概略図である。

【図3】図1及び2の装置のような2つの装置に関連して本発明の適用を示すフローチャートである。

50

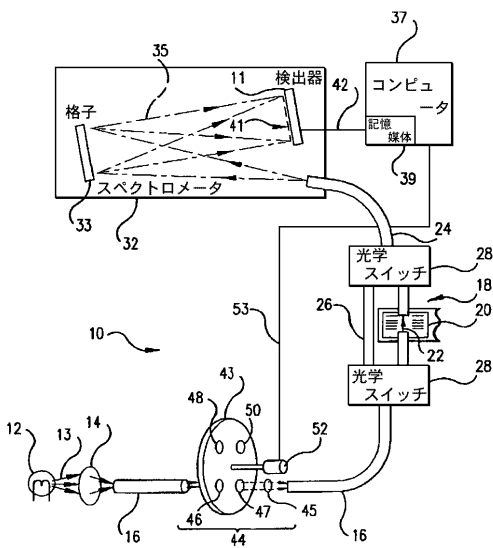
【図4】図3のフローチャートを参照してコンピュータ計算された一連のサブ関数を示す略線図である。

【図5】図4のサブ関数からコンピュータ計算された一連のサブ係数を示す略線図である。

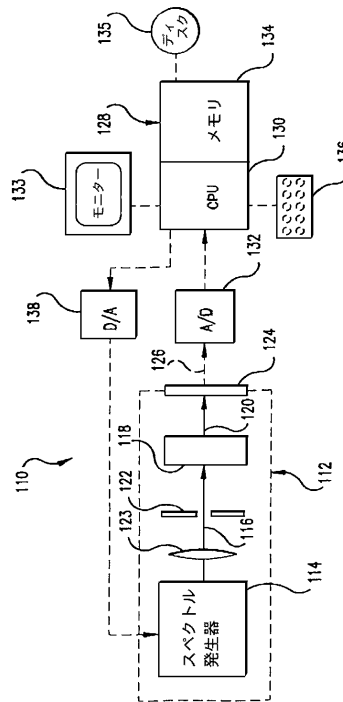
【図6】本発明において利用される1つのタイプの分析装置の1つの例としてのガスクロマトグラフの概略図である。

【図7】本発明において利用される別の1つのタイプの分析装置の1つの例としての液体クロマトグラフの概略図である。

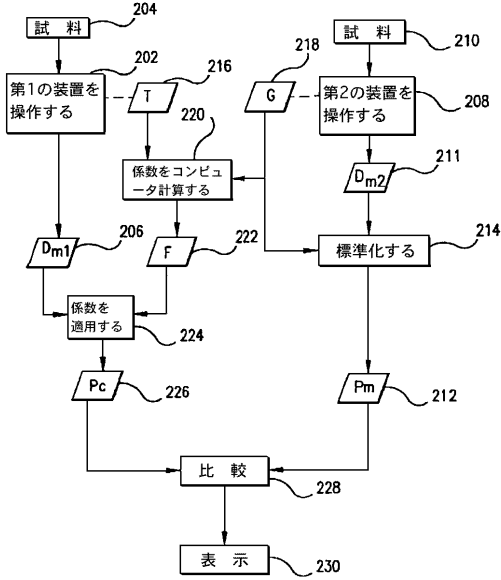
【図1】



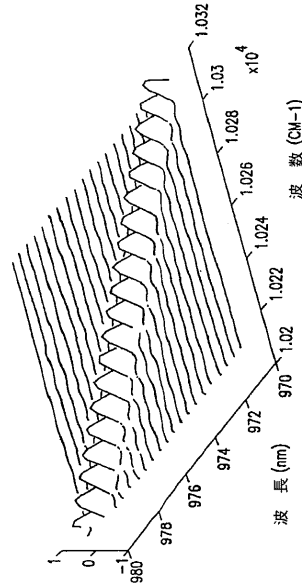
【図2】



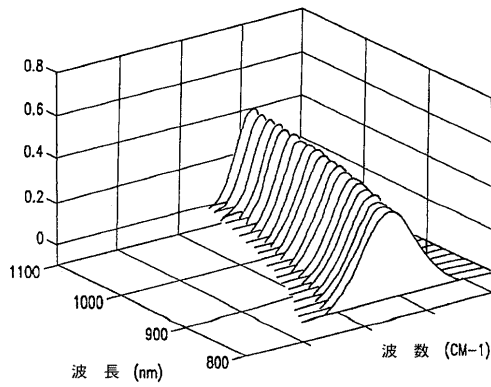
【図3】



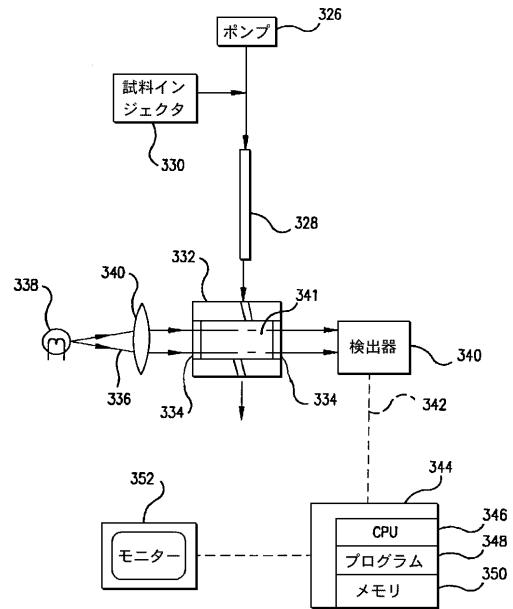
【図4】



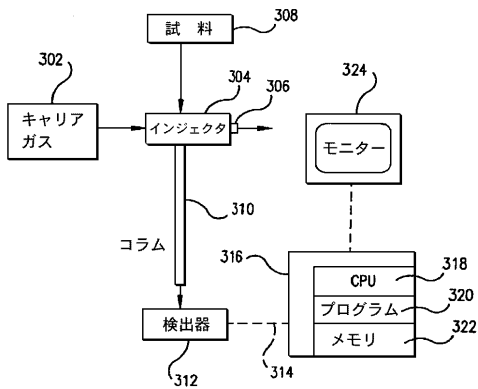
【図5】



【図7】



【図6】



フロントページの続き

(74)代理人 100099483

弁理士 久野 琢也

(72)発明者 ヨンドン ワン

アメリカ合衆国 コネチカット ウィルトン モリアリティ ドライヴ 73

(72)発明者 アラン エム ガンズ

アメリカ合衆国 コネチカット トランブル ステアリング ロード 145

(72)発明者 デイヴィッド エイチ トレイシー

アメリカ合衆国 コネチカット ノーウォーク ベルデン ヒル ロード 581

(72)発明者 デイヴィッド エー ハプラー

アメリカ合衆国 ウィスコンシン マディソン ハマーズリー ロード 5806

(72)発明者 ジョン ピー コーツ

アメリカ合衆国 コネチカット ニュータウン ノース ブランチ ロード 12

審査官 高 場 正光

(56)参考文献 Y. Wang 外 2 名, "Multivariate Instrument Standardization", Analytical Chemistry, 1

991年12月 1日, Vol.63, No.23, pp.2750-2756

(58)調査した分野(Int.Cl., D B名)

G01N21/00-21/61

G01J 3/00- 3/52