

(12) **Österreichische Patentanmeldung**

(21) Anmeldenummer: A 50611/2020
(22) Anmeldetag: 14.07.2020
(43) Veröffentlicht am: 15.02.2021

(51) Int. Cl.: **G01J 3/28** (2006.01)

(30) Priorität:
07.08.2019 DE 102019121304.5 beansprucht.

(71) Patentanmelder:
Endress+Hauser Conducta GmbH+Co. KG
70839 Gerlingen (DE)

(72) Erfinder:
Weber Frank
70182 Stuttgart (DE)
Krätschmer Thilo
70839 Gerlingen (DE)
Seichter Felicia
71642 Ludwigsburg (DE)

(74) Vertreter:
Patentanwaltskanzlei Matschnig & Forsthuber
OG
1010 Wien (AT)

(54) **Verfahren zur Kompensation in einem Messsystem**

(57) Die Erfindung offenbart ein Verfahren zur Kompensation unterschiedlicher Sensitivitäten bei verschiedenen Wellenlängen bei einem spektrometrischen Messsystem (10), umfassend die Schritte: Kalibrierung des Messsystems (10) in einem Wellenlängenbereich bezüglich eines oder mehreren bekannten Referenzstandards; Erstellen eines wellenlängenabhängigen Kompensationsalgorithmus zur Linearisierung; und Justierung des Messsystems (10) mit dem Kompensationsalgorithmus. Die Erfindung offenbart weiter ein entsprechendes Messsystem (10).

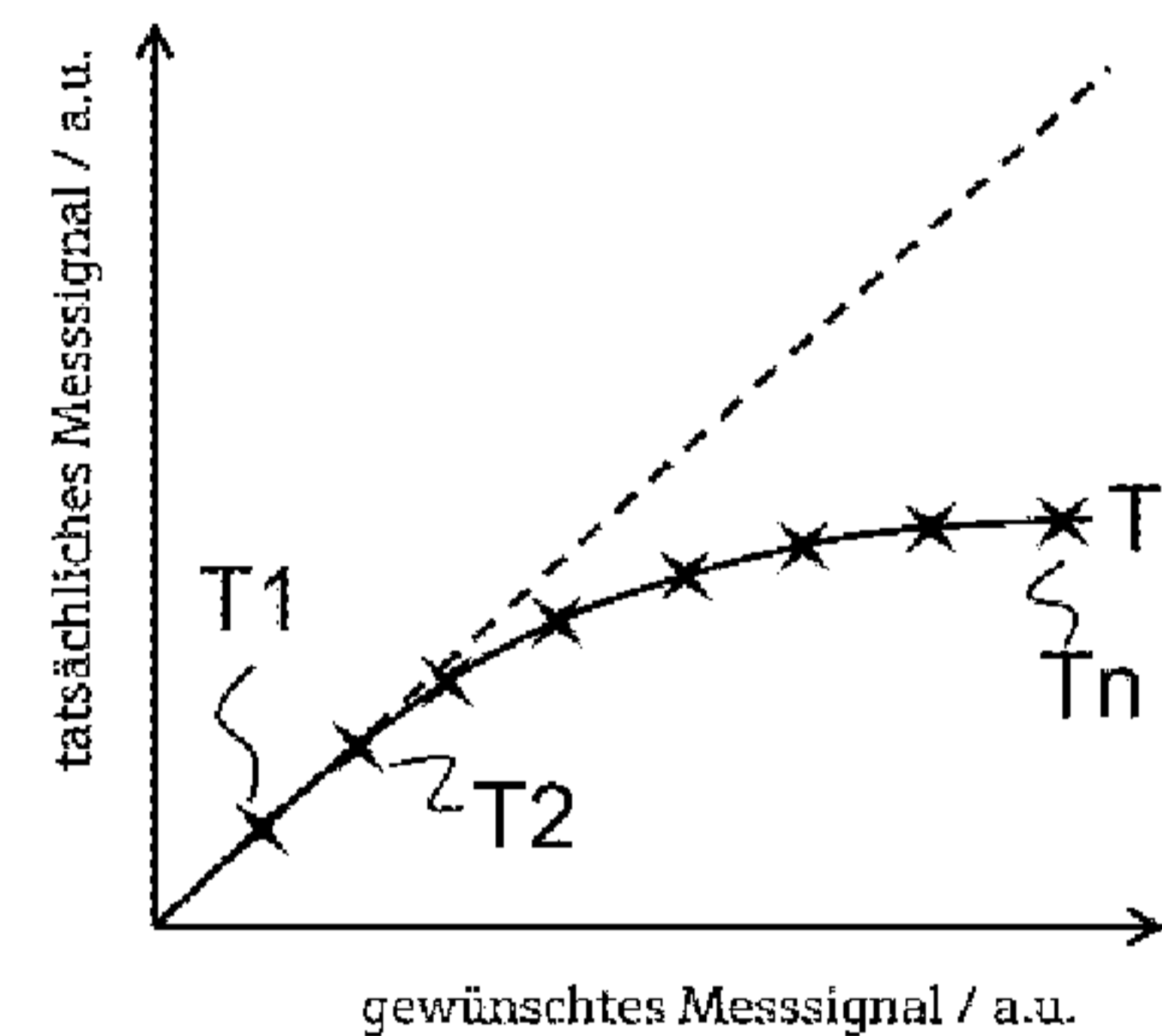


Fig. 5

Zusammenfassung

Die Erfindung offenbart ein Verfahren zur Kompensation unterschiedlicher
Sensitivitäten bei verschiedenen Wellenlängen bei einem spektrometrischen
5 Messsystem (10), umfassend die Schritte: Kalibrierung des Messsystems (10) in
einem Wellenlängenbereich bezüglich eines oder mehreren bekannten
Referenzstandards; Erstellen eines wellenlängenabhängigen
Kompensationsalgorithmus zur Linearisierung; und Justierung des
Messsystems (10) mit dem Kompensationsalgorithmus. Die Erfindung offenbart
10 weiter ein entsprechendes Messsystem (10).

(Fig. 5)

Verfahren zur Kompensation in einem Messsystem

Verfahren zur Kompensation unterschiedlichen Sensitivitäten bei verschiedenen Wellenlängen bei einem spektrometrischen Messsystem, ein solches Messsystem, ein Computerprogramm und ein computerlesbares Medium.

Anhand der Sensitivität der Absorption in der optischen Spektroskopie in der Prozessautomatisierung soll das der Erfindung zugrunde liegende Problem beschrieben werden. Es lässt sich ebenso auf die Sensitivität der Transmission, der Reflexion oder der Trans-Reflexion von Spektrometern anwenden.

Ein Messsystem umfasst zumindest eine Lichtquelle, ein angesprochenes Spektrometer, und eine Datenverarbeitungseinheit. Das Messsystem besitzt eine wellenlängenabhängige Sensitivität der Absorption, die durch das eingebaute Spektrometer, die Lichtquelle, aber auch alle strahlformenden optischen Komponenten des Systems und deren Ausrichtung zueinander charakterisiert ist. Dadurch entstehen für unterschiedliche Wellenlängen unterschiedliche Sensitivitätsverläufe, was den Effekt hat, dass die Absorption für unterschiedliche Wellenlängen früher oder später von der idealen Ursprungsgeraden abweicht. Fig. 1 zeigt für einzelne Wellenlänge dieses Verhalten, also das Verhältnis des Soll-Messsignals zum Ist-Messsignal. Im Idealfall ist das eine Winkelhalbierende mit Steigung „1“, in Fig. 1 ist diese ideale Korrelationskurve mit dem Bezugszeichen „I“ gekennzeichnet. Im realen Fall knickt diese Kurve allerdings früher ab, die tatsächliche Korrelationskurve (Bezugszeichen T) weicht von der idealen ab. Bei einem spektrometrischen Messsystem tritt dieses Problem für jede Wellenlänge separat auf.

Somit hat jedes Messsystem aufgrund des wellenlängenabhängigen Brechungsindex, wellenlängenabhängigen Sensitivitätskurven von elektrooptischen Bauteilen, unterschiedlicher Güteklassen der optischen Bauteile, Fertigungstoleranzen beim Aufbau der Sonde, etc. einen etwas anderen Absorptionsverlauf für jede Wellenlänge, was bei Interpretation mit

chemometrischen Verfahren zu einem unterschiedlichen Messwert (z.B. Farbe) führt, insbesondere bei hohen Absorptionen.

5 Der Erfindung liegt die Aufgabe zugrunde, die Sensitivität eines spektralen Messsystems über einen gewünschten Wellenlängenbereich gleich zu haben.

10 Die Aufgabe wird gelöst durch ein Verfahren umfassend die Schritte: Kalibrierung des Messsystems in einem Wellenlängenbereich bezüglich eines oder mehreren bekannten Referenzstandards, Erstellen eines Kompensationsalgorithmus zur Linearisierung, und Justierung des Messsystems mit dem Kompensationsalgorithmus.

15 Die oben genannten Nachteile werden also damit vermieden, dass mittels einer Kalibrierung und anschließender Justage auf mindestens einen bekannten Standard durch einen Kompensationsalgorithmus linearisiert wird. Dieser Algorithmus ist wellenlängenabhängig.

20 Durch die Linearisierung ergibt sich auch eine Erweiterung des Messbereichs bei Verwendung eines linearen Regressionsmodells und eine Erhöhung der Robustheit auf Fertigungstoleranzen des Messsystems.

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass es sich bei den Referenzstandards um Festkörperstandards, insbesondere um Graufilter, handelt.

25 Eine Ausgestaltung sieht vor, dass der Referenzstandard wellenlängenunabhängig ausgestaltet ist.

30 Als „bekannter“ Referenzstandard soll ein Referenzstandard angesehen werden, dessen spektrale Eigenschaften bekannt sind, d.h. dessen Absorption, Transmission, Reflexion über den Wellenlängenverlauf ist bekannt. Dies ist beispielsweise der Fall bei Graufiltern.

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass die Kompensationsfunktion für eine zu linearisierende Wellenlänge in geschlossener Form oder als Punkttabelle ausgestaltet ist.

5 Eine Ausgestaltung sieht vor, dass im Falle der Punkttabelle zwischen den Punkten linear interpoliert wird.

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass die Kalibrierung und Justierung beim Hersteller des Messsystem durchgeführt wird.

10

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass das Erstellen des Kompensationsalgorithmus ein Bestimmen einer tatsächlichen Korrelationskurve umfasst, wobei die tatsächliche Korrelationskurve bestimmt wird durch eine Vielzahl an Kalibrierpunkten mittels den Referenzstandards.

15

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass das Erstellen des Kompensationsalgorithmus ein Bestimmen einer tatsächlichen Korrelationskurve umfasst, wobei die tatsächliche Korrelationskurve bestimmt wird mittels Transformation einer ursprünglichen Korrelationskurve durch eine geringe Zahl, insbesondere ein, zwei oder maximal drei, an Kalibrierpunkten, wobei die ursprünglichen Korrelationskurve durch eine Vielzahl an Kalibrierpunkten mittels den Referenzstandards und einer Vielzahl an Messsystemen erstellt wird. Eine Ausgestaltung sieht vor, dass zur Bestimmung der ursprünglichen Korrelationskurve ein Flüssigstandard verwendet wird. Eine Ausgestaltung sieht vor, dass zur Bestimmung der tatsächlichen Korrelationskurve aus der ursprünglichen Korrelationskurve ein Festkörperstandard verwendet wird.

20

25

Die Aufgabe wird weiter gelöst durch ein Messsystem, umfassend zumindest eine Lichtquelle, ein Spektrometer, und eine Datenverarbeitungseinheit, welche dazu ausgestaltet ist, die Schritte des Verfahrens wie oben beschrieben auszuführen.

30

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass das Spektrometer zumindest ein strahlformendes Element, insbesondere einen Spiegel, ein dispersives Element,

insbesondere ein Gitter oder ein Prisma, einen Empfänger, insbesondere ein CCD-Sensor oder einen Zeilenarray-Detektor, und einen Eintrittspalt umfasst.

5 Eine Ausgestaltung sieht vor, dass die Lichtquelle als Xenon-Blitzlampe, Gasentladungslampe, Glühlampe oder Leuchtstofflampe ausgestaltet ist.

Eine Ausgestaltung sieht vor, dass die Lichtquelle als LED ausgestaltet ist.

10 Die Aufgabe wird weiter gelöst durch ein Computerprogramm, umfassend Befehle, die bewirken, dass das Messsystem wie oben beschrieben die Verfahrensschritte wie oben beschrieben ausführt.

15 Die Aufgabe wird weiter gelöst durch ein computerlesbares Medium, auf dem das Computerprogramm wie oben beschrieben gespeichert ist.

Dies wird anhand der nachfolgenden Figuren näherer erläutert.

Fig. 2 zeigt das beanspruchte Messsystem.

20 Fig. 3 zeigt eine linearisierte Korrelationsfunktion.

Fig. 4 zeigt ein Absorptionsspektrum zur Kompensation.

25 Fig. 5 zeigt eine tatsächliche Korrelationsfunktion in einer Ausgestaltung.

Fig. 6 zeigt eine tatsächliche Korrelationsfunktion in einer Ausgestaltung.

30 Das beanspruchte Messsystem in seiner Gesamtheit hat das Bezugszeichen 10 und ist in Fig. 2 dargestellt.

Das Messsystem 10 umfasst zumindest eine Lichtquelle 1, ein Spektrometer 3 und eine Datenverarbeitungseinheit 4, welche dazu ausgestaltet ist, die Schritte

des beanspruchten Verfahrens auszuführen, also beispielsweise die Lichtquelle 1 ein- und auszuschalten oder die Datenverarbeitung durchzuführen.

Das Spektrometer 3 ist in Fig. 2 nur symbolisch dargestellt und umfasst
5 beispielsweise zumindest ein strahlformendes Element, etwa einen Spiegel 5, ein Gitter 6 (im Allgemeinen ein dispersives Element, beispielsweise auch ein Prisma) und einen Empfänger 7. Spiegel 5 und Gitter 6 können als ein einzelnes Bauteil ausgestaltet sein. Der Empfänger ist als CCD-Sensor oder Zeilenarray-Detektor ausgestaltet. Am Eingang des Spektrometers 3 befindet sich ein Eintrittspalt 8.
10 Grundsätzlich funktioniert der erfindungsgemäße Gedanke mit allen spektrometrischen Messsystemen, unabhängig davon ob etwa ein Prisma oder Gitter verwendet wird.

Licht von der Lichtquelle 1, die etwa als Xenon-Blitzlampe ausgestaltet ist, wird
15 von der Lichtquelle 1 ausgehend in Richtung Messmedium 2 gesendet. Während des Verfahrens zur Kalibrierung des Spektrometers 3 wird das Messmedium 2 durch ein Referenzmedium wie eines Festkörperstandard, etwa ein Graufilter ersetzt. Der Filter ist also zwischen Lichtquelle 1 und Spektrometer 3 angeordnet.

20 Die Lichtquelle 1 kann auch als LED ausgestaltet sein. Ist das Emissionsspektrum der Lichtquelle 1 temperaturabhängig, umfasst das Messsystem 10 einen Temperatursensor 9, welche bei, in oder zumindest in der Nähe der Lichtquelle 1 angeordnet ist. Dadurch kann das Emissionsspektrum gegebenenfalls bezüglich der Temperatur korrigiert werden.

25 Dargestellt ist eine Transmissionsmessung. Dazu umfasst die Lichtquelle 1 ein oder mehrere Fenster, die für das ausgesendete Licht zumindest teiltransparent sind. Über die Fenster ist das Messmedium 2 abgetrennt von den optischen und elektronischen Komponenten des Messsystems 10.

30 Wie erwähnt ist die Herausforderung der vorliegenden Anmeldung, dass bei unterschiedlichen Messsystemen mit Spektrometern aufgrund der optischen Bauteile etc. bei gleichen Wellenlängen wegen der unterschiedlichen

Sensitivitäten bzw. unterschiedlichem Ansprechverhalten unterschiedliche Messwerte erzielt werden, siehe dazu auch die Fig. 1.

5 Dieser negative Effekt kann mittels einer Kalibrierung und anschließender Justage auf einen oder mehreren bekannten Standards durch einen
 10 Kompensationsalgorithmus linearisiert werden. Dies zeigt Fig. 3. Ist die tatsächliche Korrelationskurve T (siehe Fig. 1) bekannt (siehe unten), wird nun anspruchsgemäß mittels des Kompensationsalgorithmus linearisiert. Die ideale Korrelationskurve I (gestrichelt gezeichnet) wird annähernd perfekt durch die
 15 linearisierte Korrelationskurve L (durchgezogen gezeichnet; in Fig. 3 sind die beiden Kurven der Sichtbarkeit halber versetzt eingezeichnet) getroffen. Der lineare Messbereich wird somit erweitert. Die Einheiten sind willkürlich und mit „a.u.“ bezeichnet.

15 Dieser Kompensationsalgorithmus ist wellenlängenabhängig, um die verschiedenen Sensitivitätskurven bei unterschiedlichen Wellenlängen zu kompensieren, siehe Fig. 4. Gezeigt sind Absorptionsspektren in willkürlichen Einheiten „a.u.“ gegenüber der Wellenlänge in Nanometer (nm).

20 Das Referenzspektrum R ist beispielsweise mit einem idealisierten Graufilter realisiert. Das mit dem Messsystem 10 aufgenommene Messspektrum M weicht davon ab, besonders bei hohen oder niedrigen Wellenlängen. Das Referenzspektrum R kann auch wellenlängenunabhängig ausgestaltet sein.

25 Zur Linearisierung des Messsystems (des Messspektrums M) und damit zur Kompensation der unterschiedlichen Sensitivitäten bei verschiedenen Wellenlängen, erfolgt zunächst eine Kalibrierung des Messsystem bezüglich des Referenzstandards, also des Referenzspektrums R. Dann wird ein wellenlängenabhängiger Kompensationsalgorithmus zur Linearisierung erstellt.
 30 Schließlich erfolgt eine Justierung des Messsystems 10 mit diesem Kompensationsalgorithmus.

Für jede Wellenlänge kann die Realisierung des Kompensationsalgorithmus zum Beispiel als geschlossene Form oder als Punktetabelle erfolgen. Im Fall der Punktetabelle wird zwischen den Punkten linear oder nichtlinear interpoliert.

5 Das Erstellen des wellenlängenabhängigen Kompensationsalgorithmus umfasst das Feststellen der tatsächlichen Abweichung vom idealen Verhalten I, also das Bestimmen der tatsächlichen Korrelationskurve T. Die tatsächliche Korrelationskurve T wird bestimmt durch viele Kalibrierpunkte T_1, T_2, \dots, T_n (gekennzeichnet mit einem Stern) mit den Referenzstandards, bzw. dem
10 Referenzspektrum R. Dies ist gezeigt in Fig. 5.

Um den Realisierungsaufwand gering zu halten, ist er erstrebenswert, wenn die Kalibrierung und darauffolgende Justierung nur an wenigen Punkten durchgeführt wird (z.B. an einem oder an zwei Absorptionpunkten).

15 Diese Variante zeigt Fig. 6. Ausgehend von einer ursprünglichen Korrelationskurve U wird mit einem (wie hier gezeigt als Stern mit dem Bezugszeichen T_1^*), oder zwei oder drei, aber insgesamt wenigen Punkten justiert und die tatsächliche Korrelationskurve T ermittelt.

20 Die ursprünglichen Korrelationskurve U wird aus vielen Kalibrierpunkten, ähnlich der Ausführung im Fig. 5, mit vielen Kalibrierpunkten für viele Wellenlängen und auch mit vielen verschiedenen Sensoren einmalig bestimmt. Dabei ergibt sich eine große Kalibrierpunktezahl. Es ist somit ein einmalig hoher Aufwand erforderlich, da viele Kalibrierpunkte mit viele Sensoren ermittelt werden. Dieser Schritt erfolgt
25 üblicherweise vorab am Werk des Herstellers. Hier kommen bevorzugt Flüssigstandards zum Einsatz.

30 Diese ursprüngliche Korrelationskurve U wird später, beispielsweise bei der Auslieferung oder direkt beim Einsatz „im Feld“ mit einem oder zwei Kalibrierpunkten T_1 auf den jeweiligen Sensoren übertragen bzw. die ursprüngliche Korrelationskurve U durch T_1^* auf die tatsächliche Korrelationskurve T transformiert, etwa gestreckt, gestaucht, ein Offset abgezogen oder addiert, etc. Hier kommt bevorzugt ein Festkörperstandard zum Einsatz.

Es wird davon ausgegangen, dass der ermittelte Kompensationsalgorithmus, also die kalibrierte Korrelationskurve, der tatsächlichen Korrelationskurve T entspricht.

5 Der Einsatz von Festkörperstandards (z.B. einem Graufilter) zur Kalibrierung und Justierung minimiert den Realisierungsaufwand. Bei einer Kalibrierung / Justierung mit einer oder mehreren Flüssigkeiten (z.B. Tuschelösungen) werden zusätzlich Pfadlängenvariationen korrigiert, sofern diese im Messsystem vorhanden sind, allerdings ist gegebenenfalls der Kalibrieraufwand mit Flüssigkeiten höher als mit Festkörperstandards.

10

Bezugszeichenliste

	1	Lichtquelle
	2	Messmedium
5	3	Spektrometer
	4	Datenverarbeitungseinheit
	5	Spiegel
	6	Gitter
	7	Empfänger
10	8	Eintrittspalt
	9	Temperatursensor
	10	Messsystem
	I	ideale Korrelationskurve
	L	linearisierte Korrelationskurve
15	T	tatsächliche Korrelationskurve
	U	ursprüngliche Korrelationskurve
	M	Messspektrum
	R	Referenzspektrum
	T _n	Kalibrierpunkte
20	T ₁ *	Kalibrierpunkt

Patentansprüche

1. Verfahren zur Kompensation unterschiedlicher Sensitivitäten bei verschiedenen Wellenlängen bei einem spektrometrischen Messsystem (10),
5 umfassend die Schritte:
 - Kalibrierung des Messsystems (10) in einem Wellenlängenbereich bezüglich eines oder mehreren bekannten Referenzstandards,
 - Erstellen eines wellenlängenabhängigen Kompensationsalgorithmus zur Linearisierung, und
 - 10 – Justierung des Messsystems (10) mit dem Kompensationsalgorithmus.
2. Verfahren nach Anspruch 1,
wobei es sich bei den Referenzstandards (R) um Festkörperstandards, insbesondere um Graufilter, handelt.
15
3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2,
wobei der Kompensationsalgorithmus für eine zu linearisierende Wellenlänge in geschlossener Form oder als Punktetabelle ausgestaltet ist.
- 20 4. Verfahren nach Anspruch 3,
wobei im Falle der Punktetabelle zwischen den Punkten linear interpoliert wird.
- 25 5. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche,
wobei die Kalibrierung und Justierung bei einer oder zwei Wellenlängen durchgeführt werden.
- 30 6. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche,
wobei das Erstellen des Kompensationsalgorithmus ein Bestimmen einer tatsächlichen Korrelationskurve (T) umfasst,
wobei die tatsächliche Korrelationskurve (T) bestimmt wird durch eine Vielzahl an Kalibrierpunkten (T1, T2, ..., Tn) mittels den Referenzstandards (R).

7. Verfahren nach einem der vorherigen Ansprüche,
wobei das Erstellen des Kompensationsalgorithmus ein Bestimmen einer
tatsächlichen Korrelationskurve (T) umfasst,
wobei die tatsächliche Korrelationskurve (T) bestimmt wird mittels
5 Transformation einer ursprünglichen Korrelationskurve (U) durch eine
geringe Zahl, insbesondere ein, zwei oder maximal drei, an
Kalibrierpunkten (T1*),
wobei die ursprünglichen Korrelationskurve (U) durch eine Vielzahl an
Kalibrierpunkten (T1, T2, ..., Tn) mittels den Referenzstandards (R) und
10 einer Vielzahl an Messsystemen (10) erstellt wird.
8. Messsystem (10),
umfassend zumindest eine Lichtquelle (1), ein Spektrometer (3), und eine
Datenverarbeitungseinheit (4), welche dazu ausgestaltet ist, die Schritte des
15 Verfahrens nach einem der vorherigen Ansprüche auszuführen.
9. Messsystem (10) nach dem vorherigen Anspruch,
wobei die Lichtquelle (1) als Xenon-Blitzlampe, Gasentladungslampe oder
Leuchtstofflampe ausgestaltet ist.
20
10. Computerprogramm,
umfassend Befehle, die bewirken, dass das Messsystem einem der
vorherigen Ansprüche die Verfahrensschritte nach einem der
vorhergehenden Ansprüche ausführt.
25
11. Computerlesbares Medium,
auf dem das Computerprogramm nach dem vorhergehenden Anspruch
gespeichert ist.
30

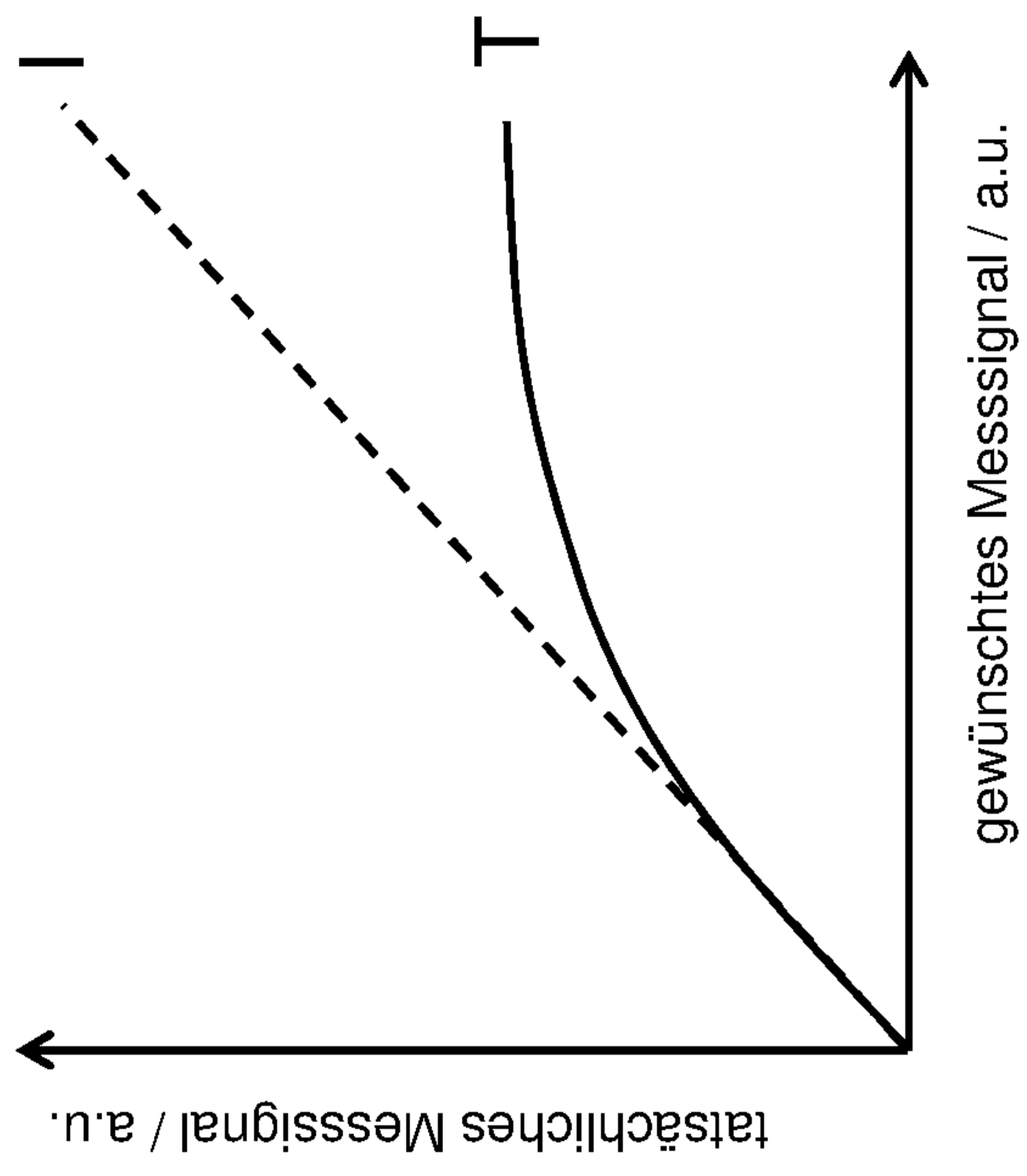
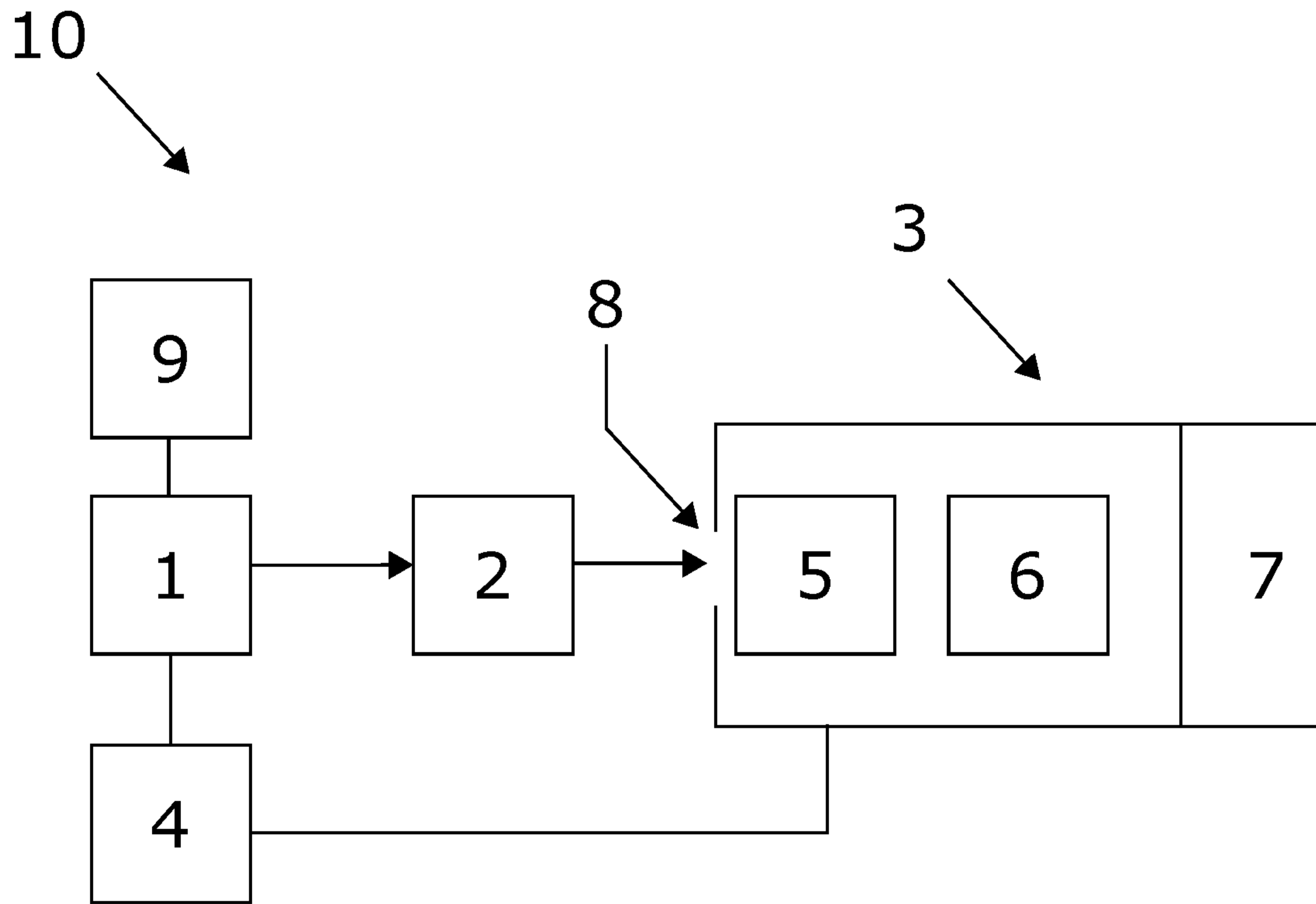


Fig. 1

Fig. 2



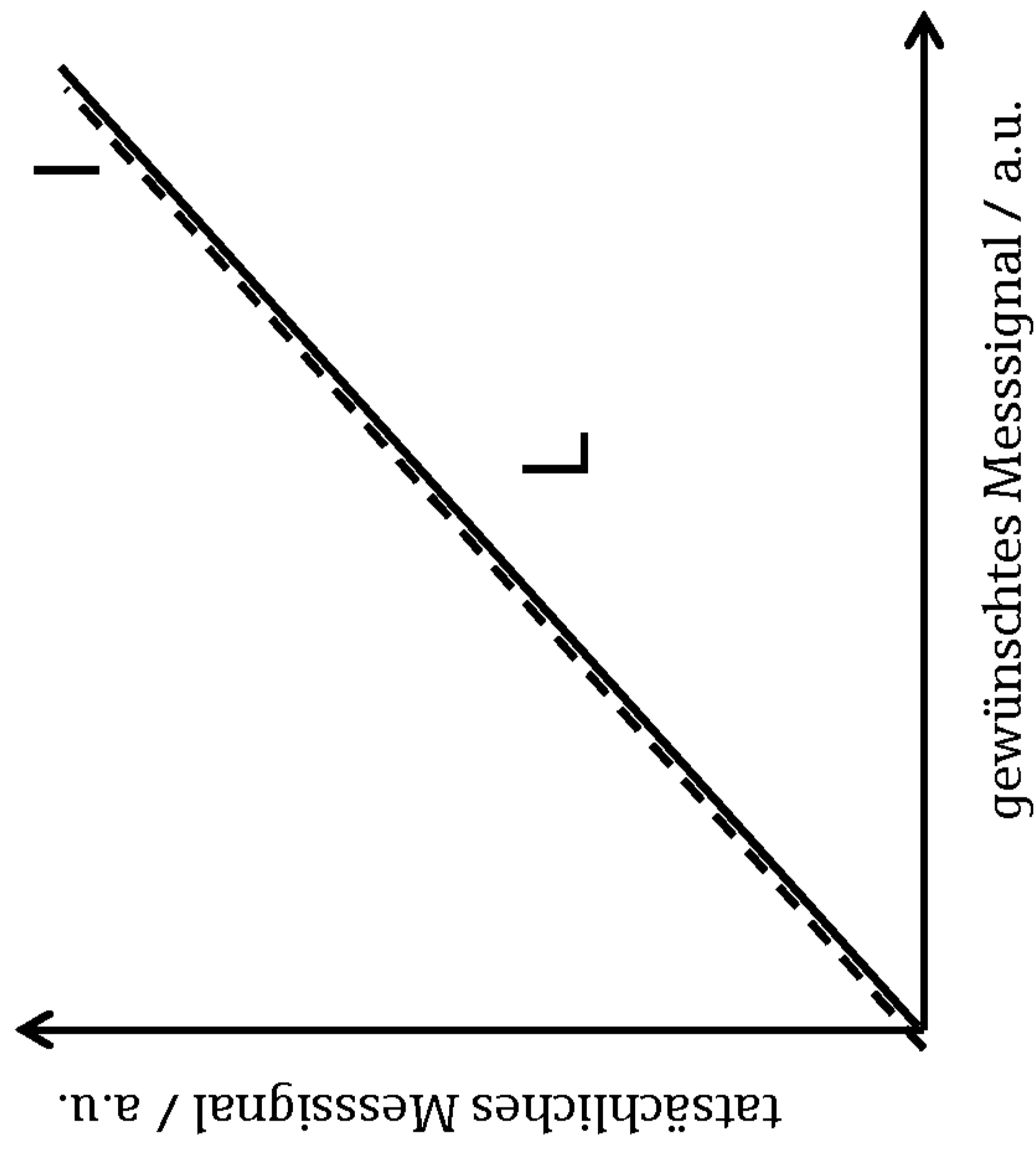
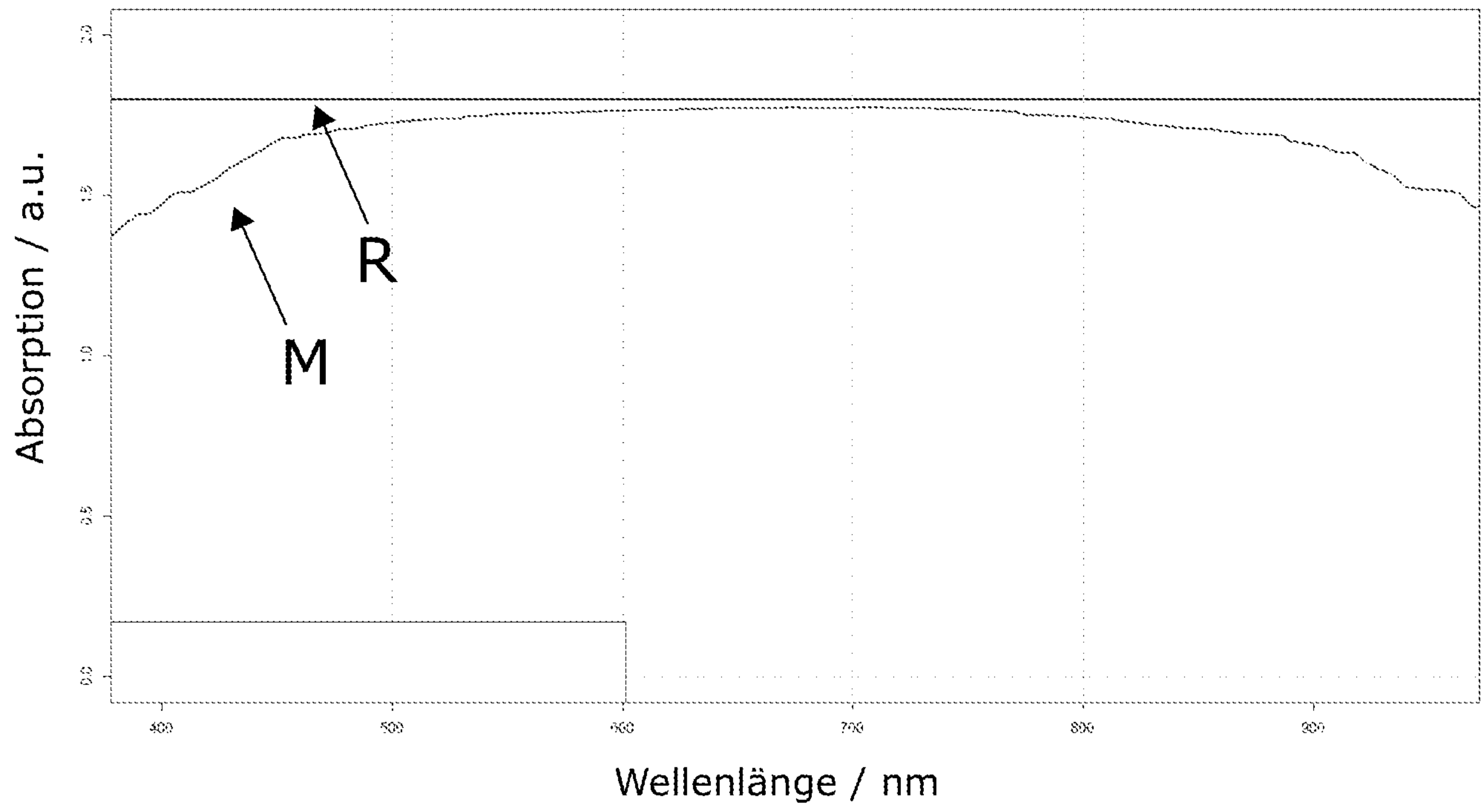


Fig. 3

Fig. 4



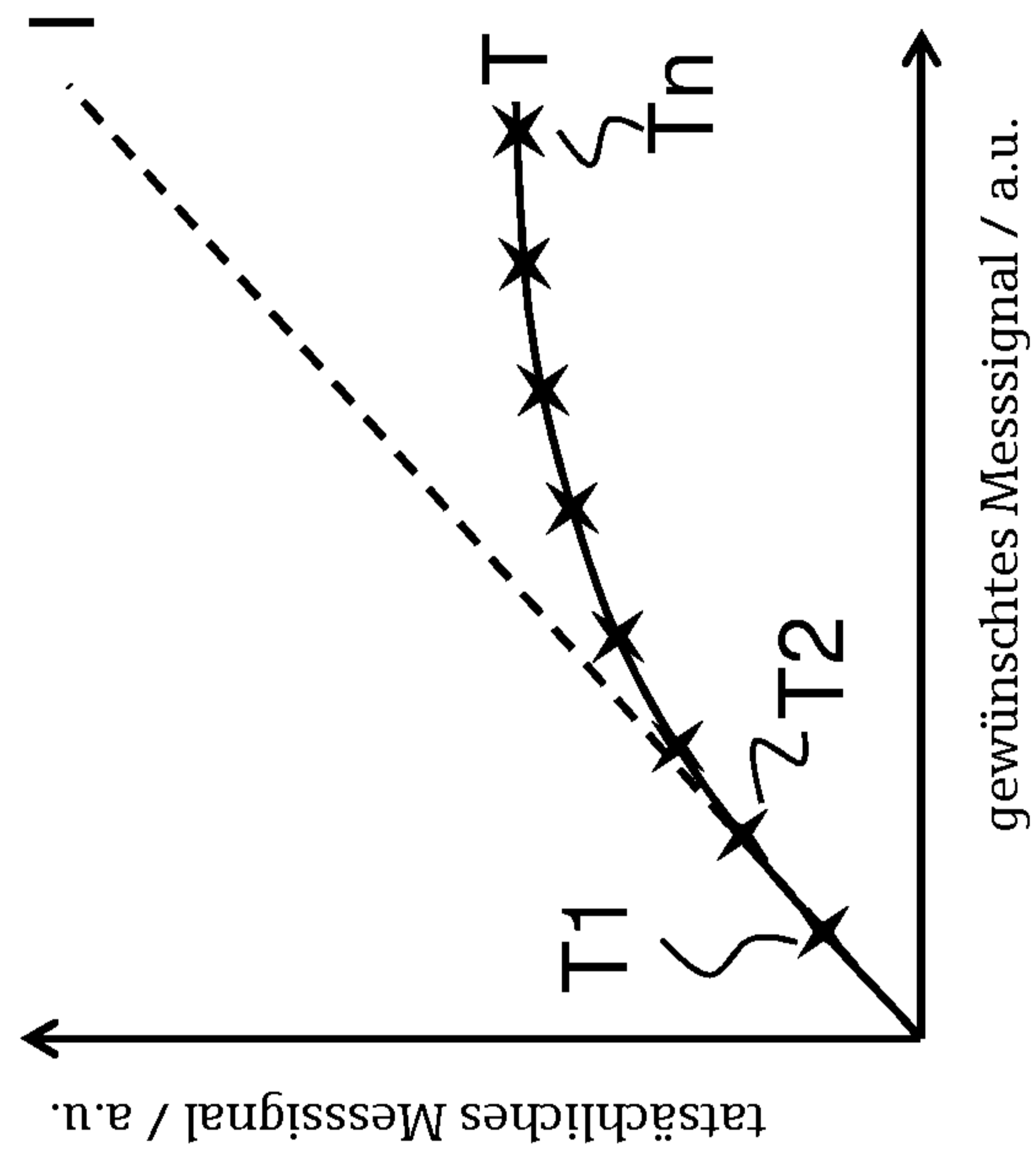


Fig. 5

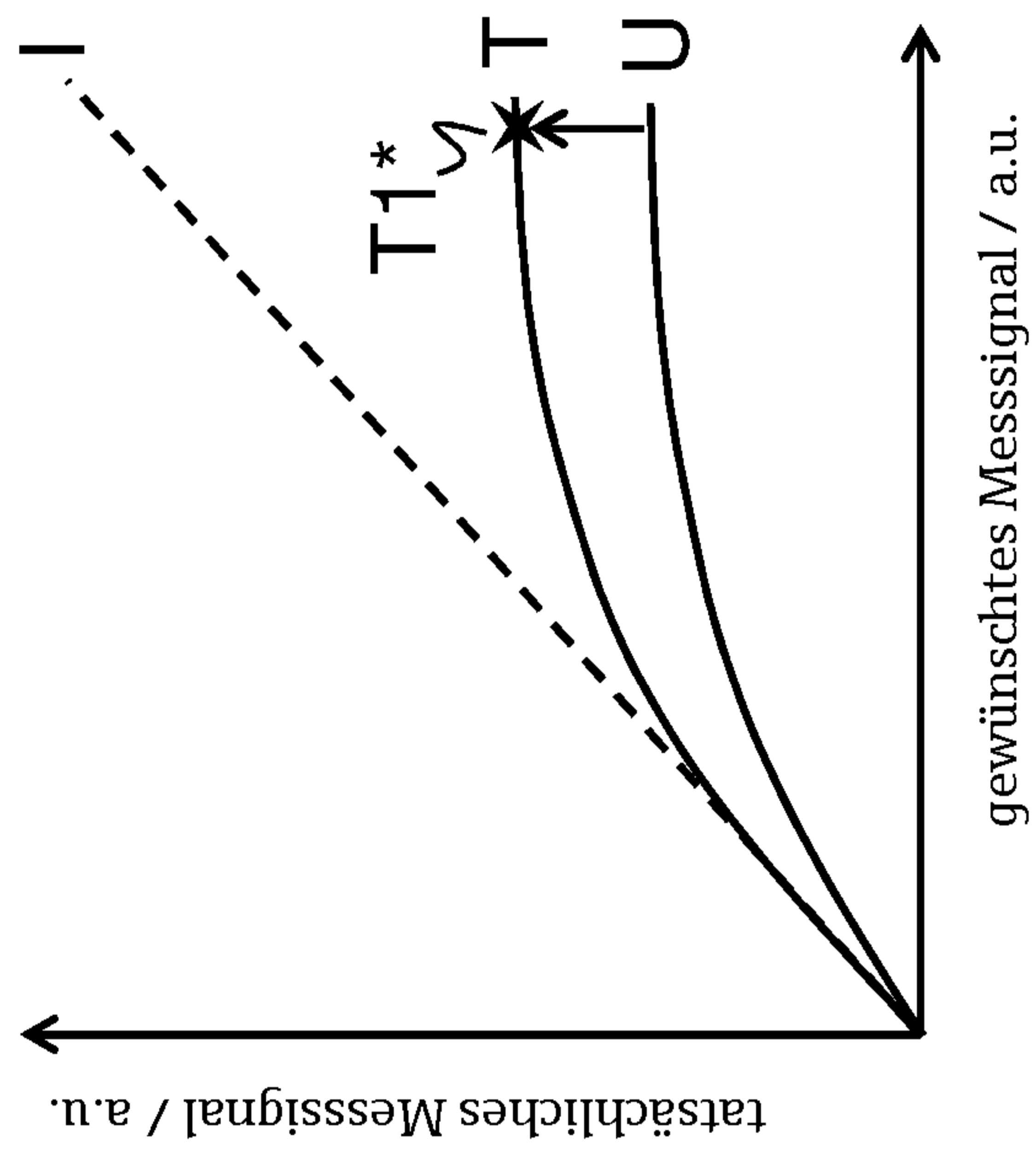


Fig. 6