



(12) **Offenlegungsschrift**

(21) Aktenzeichen: **10 2022 130 044.7**
 (22) Anmeldetag: **14.11.2022**
 (43) Offenlegungstag: **16.05.2024**

(51) Int Cl.: **G01J 3/02 (2006.01)**
G01N 21/25 (2006.01)
G06N 3/08 (2023.01)

(71) Anmelder:
Carl Zeiss Spectroscopy GmbH, 07745 Jena, DE

(74) Vertreter:
PATENTSCHUTZengel, 98527 Suhl, DE

(72) Erfinder:
Freytag, Alexander, Dr., 99092 Erfurt, DE; Rodner, Erik, Dr., 15749 Mittenwalde, DE; Lindig, Karsten, 99084 Erfurt, DE; Brachmann, Anselm, Dr., 07745 Jena, DE

(56) Ermittelter Stand der Technik:

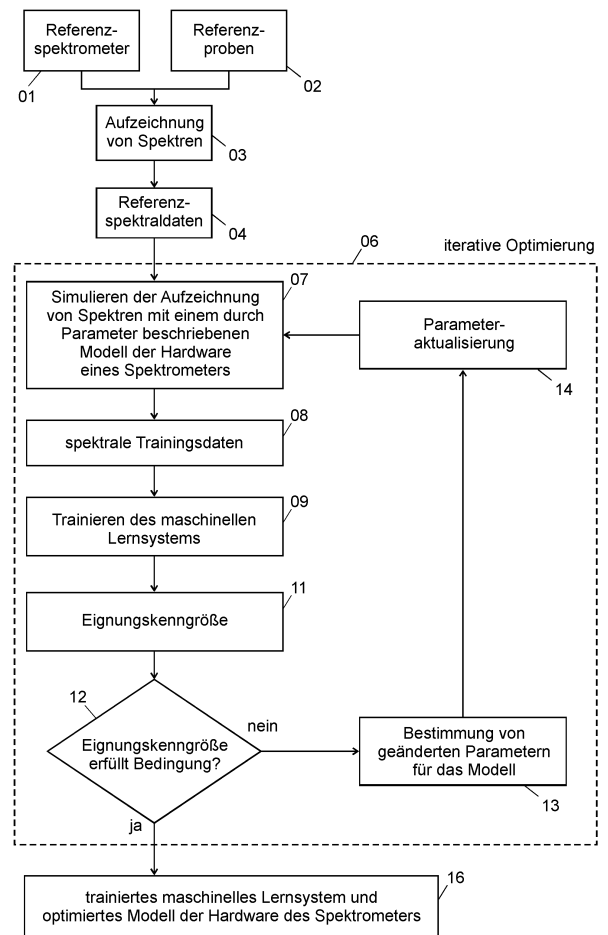
DE	10 2008 002 355	A1
US	5 435 309	A

Prüfungsantrag gemäß § 44 PatG ist gestellt.

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen.

(54) Bezeichnung: **Technischer Entwurf eines Analysegerätes zur spektralen Analyse**

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung betrifft ein Verfahren zum technischen Entwurf eines Analysegerätes zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Das Analysegerät umfasst ein Spektrometer und ist zur Anwendung eines durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration des Inhaltsstoffes ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert. Es erfolgt ein iteratives Ausführen (06) mehrerer Schritte. Diese Schritte umfassen ein Anwenden (07) einer jeweils aktuellen Konfiguration einer Repräsentation einer Hardware des Spektrometers, wodurch spektrale Trainingsdaten (08) erhalten werden. Das chemometrische Modell wird mit den spektralen Trainingsdaten (08) trainiert (09). Das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell wird angewendet, um einen Wert einer Eignungskenngröße (11) für die jeweils aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers zu bestimmen. Die jeweils aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers wird modifiziert (13). Im Weiteren betrifft die Erfindung ein Computerprogrammprodukt, ein trainiertes maschinelles Lernsystem sowie ein Analysegerät.



Beschreibung

[0001] Die vorliegende Erfindung betrifft zunächst ein Verfahren zum technischen Entwurf eines Analysegerätes zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Das Analysegerät umfasst ein Spektrometer zur spektralen Vermessung der Probe. Das Analysegerät ist zur Anwendung eines durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert. Bei dem Inhaltsstoff handelt es sich beispielsweise um ein Protein oder um Stärke. Bei dem Inhaltsstoff handelt es sich beispielsweise um Wasser, sodass durch das Analysegerät eine Feuchte bestimmbar ist. Im Weiteren betrifft die Erfindung ein Computerprogrammprodukt und ein trainiertes maschinelles Lernsystem sowie ein Analysegerät zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe.

[0002] Die DE 10 2020 116 094 A1 betrifft ein Verfahren zum Kalibrieren einer Mehrzahl an baugleichen Spektrometern zur Inhaltsstoffanalyse. Mit einem mathematischen Modell der baugleichen Spektrometer wird eine Vielzahl an Fehlerspektren erzeugt, um ein Regressionsmodell zu verbessern.

[0003] Die WO 2021/198247 A1 zeigt ein Verfahren zum Co-Design von Hardware und Software zur virtuellen Färbung einer Gewebeprobe. Das Verfahren umfasst ein iteratives Gewinnen von mehreren Sätzen von Trainings-Bildgebungsdaten in Bezug auf eine oder mehrere Gewebeproben. Jeder Satz der mehreren Sätze von Trainings-Bildgebungsdaten wurde unter Verwendung einer anderen Bildmodalität einer Gruppe von Bildmodalitäten erfasst. Es werden mehrere Referenzbilder gewonnen, welche die einen oder mehrere chemische Farbstoffe umfassenden Gewebeproben darstellen. Die mehreren Sätze der Trainingsbilddaten werden in einer Maschinenlernlogik verarbeitet.

[0004] Die US 11,062,481 B2 betrifft ein tragbares Gerät zum Bestimmen eines Zustandes einer oder mehrerer Pflanzen. Die Vorrichtung umfasst eine digitale Farbkamera zur Aufnahme eines Farbbildes der Pflanzen innerhalb eines Sichtfeldes sowie eine Lichtquelle zum Bereitstellen einer Breitbandbeleuchtung für die Pflanzen innerhalb des Sichtfeldes. Eine Verarbeitungseinheit dient zum Steuern der Kamera und der Lichtquelle während der Aufnahme eines ersten Bildes der Pflanzen, während die Lichtquelle die Pflanzen mit der Breitbandbeleuchtung beleuchtet, und während der Aufnahme eines zweiten Bildes der Pflanzen, während die Lichtquelle die Pflanzen nicht beleuchtet.

[0005] Die DE 10 2021 105 869 A1 zeigt ein Spekt-ralsensorsystem mit einem Array von optischen Sensoren, die auf einer integrierten Schaltung angeordnet sind, sowie mit einer Schnittstelle zwischen der Vielzahl von optischen Sensoren und einer ersten Verarbeitungsvorrichtung. Eine Vielzahl von Sätzen von optischen Filtern ist als eine Schicht konfiguriert, die auf einer Vielzahl von optischen Sensoren angeordnet ist. Jeder Satz von optischen Filtern enthält eine Vielzahl von optischen Filtern. Jedes optische Filter ist konfiguriert, um Licht in einem anderen Wellenlängenbereich durchzulassen. Das Spekt-ralsensorsystem umfasst eine Verarbeitungsvorrichtung, die ein künstliches neuronales Netzwerk enthält, das konfiguriert ist, um eine durch die Vielzahl von optischen Sensoren erzeugte Spektralantwort zu korrigieren.

[0006] Die US 2021/0172800 A1 betrifft Techniken zum Analysieren unbekannter Probenzusammensetzungen unter Verwendung eines Vorhersagemodells basierend auf optischen Emissionsspektren. Es werden erste Emissionsspektren empfangen, die einer Trainingsprobe entsprechen, welche mehrere reine Elemente bekannter Konzentrationen umfasst. Darauf basierend wird eine Vielzahl von Spektralbereichen bestimmt, die der Vielzahl von reinen Elementen bekannter Konzentrationen entsprechen. Es werden Merkmale bestimmt, die einem Maximum des Spektralbereiches zugeordnet sind. Ein Vorhersagemodell wird trainiert, um unbekannt Konzentrationen einer Vielzahl von Bestandteilen einer unbekannt Probe basierend auf einem Emissionsspektrum der unbekannt Probe vorher-zusagen.

[0007] Die EP 3 842 788 A1 betrifft einen Spektral-sensor für die Nahinfrarotspektroskopie, welcher zur Unterscheidung und/oder Erkennung von Objekten und/oder Materialien dient. Der Spekt-ralsensor ist ausgebildet, in einem Lernmodus und in einem Betriebsmodus zu arbeiten. In dem Lernmodus werden Messungen von Intensitätswerten eines ersten Spektrums von Wellenlängen durchgeführt. In dem Betriebsmodus werden Messungen von Intensitäts-werten eines zweiten Spektrums von Wellenlängen durchgeführt. Die Wellenlängen des zweiten Spek-trums werden unter Zuhilfenahme eines Maschinen-lernverfahrens ausgewählt.

[0008] Die US 10,020,900 B2 zeigt eine Systemar-chitektur zum Bereitstellen von Spektralinformati-onen für ein oder mehrere Geräte sowie zum Bereit-stellen und Verwenden der Spektralinformationen in einem Gerät. Ein Spektralinformationsserver führt einen Serverprozess aus, der eine Bibliothek von spektrumsbezogenen Funktionen aufweist; ein-schließlich Funktionen zum Abrufen von Spektralda-ten von Spektraldatenquellen oder zum Verarbeiten von abgerufenen Spektraldaten.

[0009] Die genannten Lösungen aus dem Stand der Technik zur spektralen Analyse sehen ein Spektrometer und eine Auswertung der mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerte vor. Sowohl das Spektrometer als auch das Verfahren zur Auswertung der spektralen Messwerte müssen in einem hohen Maße an die gegebene Analyseaufgabe angepasst sein, um zu genauen Ergebnissen führen zu können. Eine solche spektrale Analyse wird beispielsweise zur Bestimmung von Inhaltsstoffen von landwirtschaftlichen Produkten und Nahrungsmitteln durchgeführt. Zur Auswertung der spektralen Messwerte dient ein chemometrisches Modell, welches beispielsweise unter Anwendung von maschinellem Lernen entwickelt wird. Für das Spektrometer muss festgelegt werden, welche spektralen Empfindlichkeiten es aufweisen soll; insbesondere wie die mittleren Wellenlängen und Bandbreiten von Messkanälen des Spektrometers dimensioniert sein sollen. Die Auswahl eines nicht optimal konfigurierten Spektrometers verschlechtert die Auswertung durch das chemometrische Modell. Das Spektrometer kann beispielsweise zu wenige oder unpassende spektrale Empfindlichkeiten besitzen, was die Bestimmung der Inhaltsstoffe beschränkt. In anderen Fällen kann es dazu kommen, dass das Spektrometer für die gegebene Analyseaufgabe überdimensioniert ist, d. h. dass es spektrale Empfindlichkeiten aufweist, die für die Analyseaufgabe nicht benötigt werden. Hierdurch wird das Spektrometer zu teuer.

[0010] Die Aufgabe der vorliegenden Erfindung besteht ausgehend vom Stand der Technik darin, den technischen Entwurf eines Analysegerätes zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe genauer an die jeweils gegebene Analyseaufgabe anpassen zu können, wodurch das Analysegerät weniger aufwändig ausgeführt werden kann.

[0011] Die genannte Aufgabe wird gelöst durch ein Verfahren gemäß dem beigefügten Anspruch 1, durch ein Computerprogrammprodukt gemäß dem beigefügten nebengeordneten Anspruch 13, durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gemäß dem beigefügten nebengeordneten Anspruch 14 und durch ein Analysegerät gemäß dem beigefügten nebengeordneten Anspruch 15.

[0012] Das erfindungsgemäße Verfahren dient zum technischen Entwurf eines Analysegerätes zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Das technisch zu entwerfende Analysegerät soll optimal für eine gegebene Analyseaufgabe geeignet sein. Durch die spektrale Analyse wird die Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von an der Probe gemessenen spektralen Informationen bestimmt. Die Probe stammt von einem Material oder einem Produkt, wel-

ches durch die Analyse hinsichtlich seines Inhaltes untersucht werden soll. Die Probe kann beispielsweise dem Material bzw. dem Produkt entnommen werden oder das Material bzw. das Produkt wird dem Analysegerät als Probe zugeführt. Bei dem Material bzw. dem Produkt handelt es sich bevorzugt um ein landwirtschaftliches Produkt, um ein Lebensmittel oder um ein Nahrungsmittel. Bei dem landwirtschaftlichen Produkt handelt es sich bevorzugt um ein Erntegut. Bei dem Erntegut handelt es sich bevorzugt um ein Getreide wie Mais oder Weizen oder um Raps, um Zuckerrüben oder um Soja. Bei dem Erntegut kann es sich aber auch bevorzugt um Fruchtpflanzen, wie Paprika, Tomaten, Erdbeeren u. ä. oder um Fruchtbäume wie Mandelbäume handeln. Die Probe kann durch das Erntegut als solches gebildet sein, wie beispielsweise im Falle von Getreidekörnern. Die Probe kann aber auch durch einen Teil einer Pflanze gebildet sein, welche das Erntegut hervorbringt, sodass beispielsweise das Blatt einer Getreidepflanze die Probe bildet. Der Inhaltsstoff ist bevorzugt durch Wasser, durch ein Protein, durch ein Öl, durch Zucker, durch Salz, durch Stärke oder durch eine Rohfaser gebildet. Der Inhaltsstoff ist bevorzugt durch ein einzelnes chemisches Element, wie Stickstoff, Phosphor, Kalium, Kalzium, Magnesium, Bor, Molybdän, Kupfer, Mangan, Zink, Eisen, Chlor oder Schwefel gebildet. Von besonderer Relevanz für das Wachstum jeder Kulturpflanze ist die geeignete Versorgung mit Stickstoff, da Stickstoff das wichtigste Element des Chlorophylls ist und somit essenziell für einen optimalen Metabolismus ist. Neben Stickstoff sind auch andere Makronährstoffe relevant, wie Phosphor und Kalium, welche zusammen mit Stickstoff häufig als sogenannter NPK-Dünger den Böden zugeführt werden. Weiterhin relevant sind Kalzium und Magnesium, wobei letzteres das zentrale Element im Chlorophyll-Ring bildet. Zusätzlich sind oft in Abhängigkeit vom Pflanzentyp auch weitere Nährstoffe für ein optimales Wachstum und einen optimalen Ertrag relevant, welche jedoch oft in deutlich kleineren Mengen benötigt werden und daher auch als Mikronährstoffe bezeichnet werden. Beispiele hierfür sind Bor, Molybdän, Kupfer, Mangan, Zink, Eisen, Chlor und Schwefel. Die Messung der Konzentration von Wasser stellt eine Feuchtigkeitsmessung dar. Bei dem Inhaltsstoff kann es sich auch um eine im zu untersuchenden Produkt bzw. Erntegut unerwünschte Komponente, wie ein Pestizid oder ein Fungizid handeln.

[0013] Das Analysegerät umfasst ein Spektrometer zur spektralen Vermessung der Probe. Bei dem Spektrometer kann es sich um ein NIR-Spektrometer, ein VIS/NIR-Spektrometer, ein VIS - Spektrometer oder ein Full-Range Spektrometer handeln. Das Spektrometer kann einen Transmissions-, einen Reflexions- oder einen Reflexionsaufbau aufweisen. Das Spektrometer ist bevorzugt kompakt als ein Spektrometersensor ausgeführt.

[0014] Das Analysegerät ist weiterhin zur Anwendung eines durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert. Das Spektrometer nimmt spektrale Messwerte der Probe auf, welche durch die Inhaltsstoffe der Probe bestimmt werden. Durch das Anwenden des chemometrischen Modells wird von den spektralen Messwerten auf die Konzentration des mindestens einen zu analysierenden Inhaltsstoffes geschlossen. Im Ergebnis liegt ein Wert für die Konzentration des mindestens einen Inhaltsstoffes der Probe vor. Das chemometrische Modell ist durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildet. Das Training erfolgt bei der Ausführung des erfindungsgemäßen Verfahrens. Das maschinelle Lernsystem umfasst bevorzugt ein künstliches neuronales Netzwerk oder ein lineares Modell, welches bevorzugt durch ein Regressionsmodell der partiellen kleinsten Quadrate (Partial Least Squares Model) gebildet ist.

[0015] Durch das erfindungsgemäße Verfahren werden das Spektrometer und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell technisch entworfen bzw. entwickelt, sodass diese die Gegenstände eines technischen Entwicklungsvorganges bilden, in dessen Ergebnis das technisch spezifizierte Spektrometer und das trainierte maschinelle Lernsystem vorliegen.

[0016] In einem Schritt des Verfahrens wird eine initiale Konfiguration einer Repräsentation einer Hardware des Spektrometers ausgewählt. Diese Repräsentation kann insbesondere durch ein Modell oder durch ein physisches Testexemplar der Hardware des Spektrometers gebildet sein. Die Konfiguration legt die spektralen Empfindlichkeiten des Spektrometers fest. Die initiale Konfiguration stellt einen Ausgangspunkt für den technischen Entwicklungsvorgang dar, die während des technischen Entwicklungsvorganges verändert wird. Im Ergebnis des technischen Entwicklungsvorganges liegt eine finale Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers vor, die als technische Vorgabe dazu dient, mindestens ein Spektrometer herzustellen, welche eine Komponente des herzustellenden Analysegerätes bildet.

[0017] Die initiale Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers ist bevorzugt durch eine Konfiguration der Repräsentation der Hardware eines Referenzspektrometers gebildet. Bei dem Referenzspektrometer handelt es sich um ein hochauflösendes Spektrometer, bei welchem man davon ausgeht, dass es alle für die gegebene Analyseaufgabe notwendigen spektralen Informationen misst.

Das Referenzspektrometer bildet hierfür einen Gold-Standard.

[0018] Im Folgenden erfolgt ein iteratives Ausführen mehrerer Schritte, welche computerimplementiert sind. Diese mehreren Schritte werden iterativ ausgeführt. Diese mehreren Schritte werden bei einfachen bevorzugten Ausführungsformen so oft wiederholt, bis eine vorgegebene Anzahl an Iterationen erreicht ist. Diese mehreren Schritte werden bei weiteren bevorzugten Ausführungsformen so oft wiederholt, bis ein Wert einer Eignungskenngröße einen vorbestimmten Grenzwert zumindest erreicht hat, was je nach Definition der jeweiligen Eignungskenngröße ein Überschreiten oder ein Unterschreiten einschließt. Die eine Eignungskenngröße oder die mehreren Eignungskenngrößen beschreiben jeweils die Eignung der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers einschließlich des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells für die gegebene Analyseaufgabe. Die mindestens eine Eignungskenngröße ist bevorzugt durch eine Gütemaß oder besonders bevorzugt durch ein Fehlermaß bzw. eine Verlustfunktion gebildet. Ist die jeweilige Eignungskenngröße durch ein Gütemaß gebildet, so steigt deren Wert, wenn die Eignung steigt. Ist die jeweilige Eignungskenngröße durch ein Fehlermaß bzw. Verlustfunktion gebildet, so sinkt deren Wert, wenn die Eignung steigt. Der vorbestimmte Grenzwert definiert, wie groß bzw. wie klein die Eignungskenngröße zumindest sein muss, damit die aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers als für die gegebene Analyseaufgabe geeignet angesehen wird, sodass das Spektrometer gemäß der aktuellen Konfiguration für das Analysegerät hergestellt werden kann. Besonders bevorzugt ist eine erste der Eignungskenngrößen durch ein Fehlermaß bzw. eine Verlustfunktion gebildet, während eine zweite der Eignungskenngrößen durch eine Metrik zur Auswahl aus den Konfigurationen gebildet ist.

[0019] In einem der iterativ auszuführenden Schritte erfolgt ein Anwenden der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers, wodurch spektrale Trainingsdaten erhalten werden. Wird dieser iterativ auszuführende Schritt das erste Mal ausgeführt, so ist die aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers durch die initiale Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers gebildet. Beim Anwenden erfolgt ein spektrales Vermessen von Referenzproben oder ein spektrales Vermessen von Referenzproben wird mit einem Modell des Spektrometers simuliert, um die spektralen Trainingsdaten zu erhalten. Die spektralen Trainingsdaten stellen spektrale Messdaten dar, die mit der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers für die Referenz-

proben durch eine reale Durchführung der Messung oder durch eine Simulation der Messung erhalten werden.

[0020] In einem weiteren der iterativ auszuführenden Schritte erfolgt ein Trainieren des durch ein maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells mit den aktuellen spektralen Trainingsdaten. Dieses Trainieren ist ein Vorgang des maschinellen Lernens, wodurch das maschinelle Lernsystem angelernt wird und im Ergebnis das trainierte maschinelle Lernsystem vorliegt. Das maschinelle Lernen erfolgt mit dem Ziel, dass das durch das maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell aus den spektralen Trainingsdaten die Konzentration des mindestens einen Inhaltsstoffes gemäß der gegebenen Analyseaufgabe bestmöglich bestimmt. Für das Trainieren des durch das maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells können unterschiedlichste Methoden des maschinellen Lernens angewendet werden. Bei bevorzugten Ausführungsformen erfolgt das Trainieren des durch ein maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells bei jeder Iteration der iterativ auszuführenden Schritte beginnend in einem untrainierten Zustand des maschinellen Lernsystems. Es werden also keine Informationen aus vorherigen Iterationen genutzt. Bei alternativ bevorzugten Ausführungsformen erfolgt das Trainieren des durch ein maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells bei den einzelnen Iterationen der iterativ auszuführenden Schritte jeweils beginnend in einem vortrainierten Zustand des maschinellen Lernsystems. Es können somit Informationen bzw. Trainingserfahrungen aus vorherigen Iterationen oder auch aus vorherigen Trainings von unabhängigen, vorherigen Modelloptimierungsaufgaben genutzt werden. Der vortrainierte Zustand des maschinellen Lernsystems kann beispielsweise aus einem Training resultieren, welches auf der Basis der gleichen spektralen Trainingsdaten aber zur Bestimmung einer Konzentration eines anderen Inhaltsstoffes der Probe erfolgte. In ähnlicher Weise kann der vortrainierte Zustand des maschinellen Lernsystems beispielsweise aus einem Training resultieren, welches auf der Basis von anderen spektralen Trainingsdaten aber zur Bestimmung einer Konzentration des gleichen Inhaltsstoffes der Probe erfolgte.

[0021] In einem weiteren der iterativ auszuführenden Schritte erfolgt ein Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells, um einen Wert der mindestens einen Eignungskenngröße zu bestimmen. Das Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells erfolgt auf die spektralen Trainingsdaten. Durch dieses Anwenden wird die Konzentration des mindestens einen Inhaltsstoffes für die aktuellen spektralen Trainingsdaten bestimmt. Durch einen Vergleich mit

Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten kann der Wert der mindestens einen Eignungskenngröße bestimmt werden. Der Wert der mindestens einen Eignungskenngröße kann je nach Ausführungsform unmittelbar nach dem Anwenden des chemometrischen Modells einzeln in jeder Iteration oder nach dem Ausführen sämtlicher Iterationen der iterativ auszuführenden Schritte für sämtliche angewendete Konfigurationen der Repräsentation der Hardware des Spektrometers bestimmt werden.

[0022] In einem weiteren der iterativ auszuführenden Schritte erfolgt ein Modifizieren der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers. Dieses Modifizieren erfolgt, um eine sich unterscheidende Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers zu erhalten, welche in der nächsten Iteration angewendet wird. Das iterative Modifizieren erfolgt mit dem Ziel, eine Konfiguration zu finden, welche bestmöglich für die gegebene Analyseaufgabe geeignet ist. Die Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers wird bevorzugt jeweils innerhalb eines vordefinierten Rahmens modifiziert. Dieser Rahmen ist bevorzugt durch mindestens ein Intervall gebildet, innerhalb welchem ein durch die Konfiguration definierter Parameter des Spektrometers verändert wird. Bei einfachen bevorzugten Ausführungsformen werden der iterativ auszuführende Schritt des Modifizierens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers und die weiteren iterativ auszuführenden Schritte so oft wiederholt, bis die modifizierten Konfigurationen den vordefinierten Rahmen mit einer vordefinierten Dichte ausfüllen. Dies kann beispielsweise dadurch erfolgen, dass bei jeder Iteration ein durch die Konfiguration definierter Parameter des Spektrometers mit einer bestimmten Schrittweite beginnend an einer unteren Grenze des Intervalls geändert wird, bis eine obere Grenze des Intervalls erreicht ist, was auch für mehrere durch die Konfiguration definierte Parameter des Spektrometers vollzogen werden kann. Dies stellt eine Rastersuche zum Finden der bestmöglich geeigneten Konfiguration dar. Alternativ kann bei jeder Iteration ein durch die Konfiguration definierter Parameter des Spektrometers zufällig geändert werden, bis ein hierfür vordefiniertes Budget erschöpft ist. Das Budget ist durch eine Anzahl der durchzuführenden Iterationen und/oder durch eine Zeitdauer zur Durchführung der Iterationen definiert. Bei jeder Iteration wird ein durch die Konfiguration definierter Parameter des Spektrometers zufällig geändert, sodass nach einer durch das Budget definierten Anzahl an Iterationen der vordefinierte Rahmen mit einer vordefinierten Dichte abgedeckt wird und/oder bis die durch das Budget definierte Zeitdauer abgelaufen ist. Unter der Dichte ist hier zu verstehen, dass in einem Konfigurationsbereich eine Gesamtzahl an Konfigurationen in diesem Konfigurationsbereich gegeben ist, wobei jedoch die

Konfigurationen nicht notwendigerweise gleichmäßig über den Konfigurationsbereich verteilt sein müssen. Die Anzahl der Iterationen beträgt bevorzugt mindestens 100 und weiter bevorzugt mindestens 1.000. Nach dem Ausführen der iterativ auszuführenden Schritte wird bevorzugt diejenige der angewendeten Konfigurationen der Repräsentation der Hardware des Spektrometers ausgewählt, deren Wert der Eignungskenngröße einer bestmöglichen Eignung entspricht, sodass die von den angewendeten Konfigurationen am besten geeignete ausgewählt wird. Somit wird nach den Iterationen entschieden, welche der angewendeten Konfigurationen diejenige ist, welche das Ergebnis des technischen Entwurfes der Hardware des Spektrometers darstellt. Dies kann bei der beschriebenen Rastersuche eine Konfiguration sein, welche beispielsweise bei den zuerst durchgeführten Iterationen oder auch bei den zuletzt durchgeführten Iterationen durch Modifikation erzeugt wurde. Die Eignungskenngröße kann beispielsweise so definiert sein, dass sie mit der Eignung der Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers sinkt, sodass diejenige der angewendeten Konfigurationen der Repräsentation der Hardware des Spektrometers ausgewählt wird, deren Wert der Eignungskenngröße minimal ist. Dies muss selbstverständlich nicht die in der zuletzt durchgeführten Iteration angewendete Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers sein. Wie bereits oben erläutert wurde, wird besonders bevorzugt eine zweite der Eignungskenngrößen zum Auswählen aus den angewendeten Konfigurationen als Metrik verwendet. Die erste der Eignungskenngrößen und die zweite der Eignungskenngrößen werden bevorzugt unter Anwendung unterschiedlicher Teile der spektralen Trainingsdaten bestimmt.

[0023] Bei bevorzugten Ausführungsformen erfolgt der iterativ auszuführende Schritt des Modifizierens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers unter Nutzung mindestens eines der zuvor bestimmten Werte der mindestens einen Eignungskenngröße. Der mindestens eine Wert der mindestens einen Eignungskenngröße wird genutzt, um die jeweils aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers so zu verbessern, dass sie für die gegebene Analyseaufgabe besser geeignet sein kann, sodass mit dieser die Konzentration des mindestens einen Inhaltsstoffes genauer bestimmbar ist. Die modifizierte Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers stellt für die nächste Iteration die dann aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers dar. Bei dieser Ausführungsform werden die iterativ auszuführenden Schritte bevorzugt so oft wiederholt, bis der Wert der Eignungskenngröße einen vorbestimmten Grenzwert zumindest erreicht hat.

[0024] Insofern wie oben beschrieben wurde, diese Eignungskenngröße auch als Metrik zum Auswählen genutzt wird, weist die in der zuletzt durchgeführten Iteration angewendete Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers somit die beste Eignung von allen angewendeten Konfigurationen auf und stellt das Ergebnis des technischen Entwurfes der Hardware des Spektrometers dar. Insofern wie oben beschrieben wurde, eine zweite der Eignungskenngrößen als Metrik zum Auswählen genutzt wird, stellt die dadurch ausgewählte Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers das Ergebnis des technischen Entwurfes der Hardware des Spektrometers dar.

[0025] Wie oben bereits erläutert wurde, ist die mindestens eine Eignungskenngröße bevorzugt durch ein Gütemaß oder besonders bevorzugt durch ein Fehlermaß bzw. Verlustfunktion gebildet. Die Metrik zum Auswählen aus den angewendeten Konfigurationen ist bevorzugt durch dieses Gütemaß, dieses Fehlermaß bzw. diese Verlustfunktion gebildet. Besonders bevorzugt ist diese Metrik durch eine zweite der Eignungskenngrößen gebildet. Bei bevorzugten Ausführungsformen wird eine erste der Eignungskenngrößen zum Modifizieren der jeweils aktuellen Konfiguration unter Anwendung eines bevorzugt vorab festgelegten Teiles der spektralen Trainingsdaten bestimmt, während eine zweite der Eignungskenngrößen zum Auswählen aus den angewendeten Konfigurationen unter Anwendung eines bevorzugt vorab festgelegten anderen Teiles der spektralen Trainingsdaten bestimmt wird.

[0026] Alternativ bevorzugt werden die iterativ auszuführenden Schritte so oft wiederholt, bis ein hierfür vordefiniertes Budget erschöpft ist, welches durch eine Anzahl der durchzuführenden Iterationen und/oder durch eine Zeitdauer zur Durchführung der Iterationen definiert ist. Nach dem Ausführen der iterativ auszuführenden Schritte wird bevorzugt diejenige der angewendeten Konfigurationen der Repräsentation der Hardware des Spektrometers ausgewählt, deren Wert der betreffenden Eignungskenngröße einer bestmöglichen Eignung entspricht, sodass die von den angewendeten Konfigurationen am besten geeignete ausgewählt wird.

[0027] Besonders bevorzugt erfolgt das Modifizieren der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers unter Nutzung des jeweils aktuellen Wertes der mindestens einen Eignungskenngröße.

[0028] Bei einer weiteren bevorzugten Ausführungsform wird bei jeder Iteration ein durch die Konfiguration definierter Parameter des Spektrometers zufällig und/oder unter Nutzung mindestens eines der zuvor bestimmten Werte der mindestens einen Eignungskenngröße geändert. Es handelt sich somit um eine

Mischform der oben beschriebenen Ausführungsformen. Nach dem Ausführen der iterativ auszuführenden Schritte wird bevorzugt diejenige der angewendeten Konfigurationen der Repräsentation der Hardware des Spektrometers ausgewählt, deren Wert der Eignungskenngröße einer bestmöglichen Eignung entspricht, sodass die von den angewendeten Konfigurationen am besten geeignete ausgewählt wird. Dies muss selbstverständlich nicht die in der zuletzt durchgeführten Iteration angewendete Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers sein.

[0029] Das erfindungsgemäße Verfahren zeichnet sich dadurch aus, dass das Spektrometer und das durch das maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell gemeinsam technisch entworfen bzw. entwickelt werden. Das Spektrometer und das chemometrische Modell bilden gemeinsam die Gegenstände eines einzigen technischen Entwicklungsvorganges. Die das Spektrometer bildende Hardware und die das chemometrische Modell bildende Software werden gemeinsam entwickelt, was als Co-Design der Hardware und der Software des Analysegerätes bezeichnet werden kann. Dieses Co-Design stellt einen wesentlichen Unterschied zum Stand der Technik dar, gemäß welchem zunächst das Spektrometer einzeln technisch entworfen wird, wofür das zur Verfügung stehende Wissen bestmöglich genutzt wird. Im nächsten Schritt wird auf Basis des technisch fertig entworfenen Spektrometers das chemometrische Modell entwickelt, was beispielsweise unter Anwendung von maschinellem Lernen erfolgt. Hingegen werden bei dem erfindungsgemäßen Verfahren das Spektrometer und das chemometrische Modell gemeinsam entwickelt, wodurch gewährleistet werden kann, dass das Spektrometer und das chemometrische Modell bestmöglich synergetisch die gegebene Analyseaufgabe lösen.

[0030] Ein besonderer Vorteil des erfindungsgemäßen Verfahrens besteht darin, dass das entworfene Analysegerät mit seinen Komponenten dem Spektrometer und dem chemometrischen Modell sehr genau an die gegebene Analyseaufgabe angepasst ist. Dadurch ist zum einen gewährleistet, dass das entworfene Analysegerät die gegebene Analyseaufgabe sehr genau erfüllen kann. Zum anderen kann das Spektrometer weit weniger aufwändig als ein Referenzspektrometer gemäß dem Gold-Standard ausgeführt werden. Das im Ergebnis des Verfahrens entworfene Spektrometer ist optimiert und weist insbesondere nur solche Messkanäle mit den jeweiligen Bandbreiten und mittleren Wellenlängen auf, welche für die gegebene Analyseaufgabe benötigt werden. Viele Analyseaufgaben erfordern nur eine geringe Anzahl an Messkanälen, sodass diese Anzahl gegenüber der Anzahl an Messkanälen des Referenzspektrometers gemäß dem Gold-Standard deutlich reduziert ist. Dadurch sinken die Kosten für die

Herstellung der Hardware des Analysegerätes. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass die Analysen mit dem Analysegerät aufgrund der reduzierten Anzahl an Messkanälen schneller durchgeführt werden können und weniger Energie erfordern. Entsprechend müssen weniger Daten übertragen werden.

[0031] Das Trainieren des durch das maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells erfolgt bevorzugt durch ein überwachtes Lernen. Das überwachte Lernen beruht bevorzugt auf einer Regression und/oder einer Klassifikation. Die Regression wird bevorzugt für sich kontinuierlich verändernde Werte von Konzentrationen eines Inhaltsstoffes verwendet. Ein Beispiel hierfür ist die Konzentration von Wasser zur Bestimmung der Feuchtigkeit. Die Klassifikation wird bevorzugt für abgestufte Werte von Konzentrationen eines Inhaltsstoffes verwendet. Ein Beispiel hierfür ist die Konzentration von Salz, die entweder als ausreichend oder nicht ausreichend klassifiziert wird. Auch kann die Konzentration des Salzes in Stufen klassifiziert sein; beispielsweise als: < 1,2 g/kg; 1,2 g/kg; 1,4 g/kg; 1,6 g/kg; 1,8 g/kg; 2,0 g/kg und > 2,0 g/kg.

[0032] Die Regression erfolgt bevorzugt für die partiellen kleinsten Quadrate, was als Partielle Kleinst-Quadrate-Regression (Partial Least Squares PLS) bezeichnet wird. Diese Regression ist robust und geeignet, wenn nur wenige latente Variablen zu berücksichtigen sind.

[0033] Das maschinelle Lernsystem umfasst in einer weiteren bevorzugten Ausführungsform ein Artificial Neural Network, welches bevorzugt durch ein Convolutional Neural Network (CNN) gebildet ist. Dabei werden bevorzugt folgende Parameter angewendet: 1D-Convolutions, nicht-lineare Aktivierungen, 1D-pooling Operationen und/oder Layer-Normalisierungen. Es kann eine finale Vorhersage von kontinuierlichen Werten von Konzentrationen eines Inhaltsstoffes unter Anwendung einer Regression erfolgen. Es kann eine finale Vorhersage von abgestuften Werten von Konzentrationen eines Inhaltsstoffes unter Anwendung einer Klassifikation, beispielsweise ausgeführt als eine Mehr-Klassen-Klassifikation, dies beispielsweise durch eine Vorhersage einer diskreten Klassenzahl oder durch eine Vorhersage eines Mehr-Klassen-Wahrscheinlichkeitsvektors. Das Training kann beispielsweise so ausgeführt werden, dass ein Mehr-Klassen-Vertauschungsfehler für diskrete Entscheidungen oder eine Mehr-Klassen-Kreuzentropie für Wahrscheinlichkeitsvektoren über mehrere Klassen minimiert wird. In einer anderen Ausführung kann ein ordinaler Charakter der Klassen berücksichtigt werden, was beispielsweise durch eine Minimierung des gewichteten Cohen-Kappa-Verlustwertes erfolgt. Convolutional Neural Networks sind geeignet, wenn eine

große Menge an Trainingsdaten erzeugt wird und komplexe Zusammenhänge vorliegen.

[0034] Das Modifizieren der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers bevorzugt unter Nutzung des jeweils aktuellen Wertes der mindestens einen Eignungskenngröße stellt eine Optimierung der Repräsentation dar. Für diese Optimierung wird bevorzugt eine oder mehrere Optimierungstechniken aus der folgenden Gruppe ausgewählt und genutzt: Bayessche Optimierung, Rastersuche, Zufallssuche, gradientenfreie Optimierung wie das Nelder-Mead-Verfahren, optimale Versuchsplanung, Methoden des maschinellen Lernens, Greedy-Algorithmen, evolutionäre Algorithmen, Biologieinspirierte Optimierungsverfahren wie eine Particle-Swarm Optimierung und eine FireFly-Optimierung. Besonders bevorzugt erfolgt eine gradientenfreie Optimierung.

[0035] Bei einer ersten Gruppe bevorzugter Ausführungsformen ist die Repräsentation der Hardware des Spektrometers durch ein Modell der Hardware des Spektrometers gebildet. Das Verfahren umfasst dann bevorzugt einen weiteren Schritt, bei welchem Referenzdaten bereitgestellt werden, die zum Anwenden des Modells der Hardware des Spektrometers genutzt werden. Die Referenzdaten umfassen eine Reihe von Referenzspektraldaten, denen mindestens eine Reihe von Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten zugeordnet ist. Die Referenzspektraldaten würden idealerweise von einer Probe aufgenommen, welche den Inhaltsstoff gemäß den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten enthält. Der iterativ auszuführende Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration des Modells der Hardware des Spektrometers umfasst eine Simulation eines spektralen Vermessens der Probe mit dieser jeweils aktuellen Konfiguration des Modells der Hardware des Spektrometers. Bei den Simulationen wird die jeweilige Konfiguration des Modells der Hardware des Spektrometers auf die Referenzspektraldaten angewendet, wodurch spektrale Simulationsmesswerte erhalten werden, welche die spektralen Trainingsdaten bilden. Somit werden durch das Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells Simulationsmesswerte der Konzentrationen des Inhaltsstoffes erhalten, die mit den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten verglichen werden, um jeweils den Wert der mindestens einen Eignungskenngröße zu bestimmen. Ziel ist es, dass die Simulationsmesswerte der Konzentrationen des Inhaltsstoffes den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten möglichst nahe kommen. Ein besonderer Vorteil der ersten Gruppe bevorzugter Ausführungsformen besteht darin, dass das Spektrometer für dessen iterative Verbesserung nicht physisch vorhanden sein muss, da das Spektrometer durch das Modell repräsentiert und iterativ optimiert wird.

[0036] Insofern die Referenzdaten nicht aus anderen Quellen bereits vorliegen, erfolgt der Schritt des Bereitstellens der Referenzdaten bevorzugt dadurch, dass zunächst Referenzproben bereitgestellt werden, für welche die Werte der Konzentration des mindestens einen Inhaltsstoffes bekannt sind, sodass diese Werte die Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten bilden. Hierfür können die Werte der Konzentration des Inhaltsstoffes durch ein chemisches Analyseverfahren ermittelt werden. Auch können diese Werte durch ein nicht-chemisches Analyseverfahren ermittelt werden; beispielsweise mit einem spektralen Analysegerät mit einer hohen Genauigkeit. Weiterhin erfolgt ein Vermessen der Referenzproben mit einem Referenzspektrometer, um die Referenzspektraldaten zu erhalten.

[0037] Bei der ersten Gruppe der bevorzugten Ausführungsformen umfasst das Verfahren bevorzugt weitere Schritte, durch welche berücksichtigt wird, dass der Prozess der Herstellung der Hardware des Spektrometers nicht ideal ist. Prinzipbedingt wird die Hardware des Spektrometers, welche gemäß einem Modell der Hardware des Spektrometers hergestellt wurde, nicht vollständig diesem Modell gleichen, sondern es wird eine Abweichung zum Modell bestehen. Beispielsweise können die mittlere Wellenlängen von Messkanälen der hergestellten Hardware des Spektrometers von den mittleren Wellenlängen der Messkanäle des Modells der Hardware des Spektrometers abweichen. Daher wird in einem Schritt zunächst eine herstellungsbedingte Hardwareabweichung zwischen dem Modell der Hardware des Spektrometers und einer gemäß dem Modell der Hardware des Spektrometers hergestellten Hardware des Spektrometers bestimmt. Die ermittelte herstellungsbedingte Hardwareabweichung wird bei dem iterativ auszuführenden Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers berücksichtigt, sodass die spektralen Trainingsdaten genauer den mit der hergestellten Hardware des Spektrometers erfassbaren Messdaten entsprechen. Die ermittelte herstellungsbedingte Hardwareabweichung wird aber bei den Iterationen bevorzugt nicht verändert.

[0038] Bei der ersten Gruppe der bevorzugten Ausführungsformen umfasst das Verfahren bevorzugt weitere Schritte, durch welche sich verändernde Messbedingungen berücksichtigt werden, um erweiterte spektrale Trainingsdaten zu erhalten, durch welche die spektralen Trainingsdaten in ihrer Gesamtheit realitätsnäher werden. Solche Messbedingungen sind beispielsweise der Abstand zwischen der Probe und dem Spektrometer sowie Umgebungsbedingungen, wie Luftfeuchte und Temperatur im Bereich der Probe und/oder des Spektrometers. Die sich verändernden Messbedingungen werden bei dem iterativ auszuführenden Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration des

Modells der Hardware des Spektrometers berücksichtigt, sodass die spektralen Trainingsdaten genauer den mit der hergestellten Hardware des Spektrometers unter realistischen Messbedingungen erfassbaren Messdaten entsprechen. Dabei werden die Messbedingungen variiert, um zu berücksichtigen, dass unterschiedliche realistische Messbedingungen auftreten können. So kann beispielsweise die Änderung der Amplitude eines Messkanales in Abhängigkeit von der Umgebungstemperatur verändert werden. Diese Amplitude repräsentiert die Empfindlichkeit des Messkanales.

[0039] Bei einer zweiten Gruppe bevorzugter Ausführungsformen ist die Repräsentation der Hardware des Spektrometers durch ein Testexemplar der Hardware des Spektrometers gebildet. Somit muss die Hardware des Spektrometers für jede der Iterationen physisch in Form des Testexemplars erneut bereitgestellt werden; nämlich gemäß der jeweils aktuellen Konfiguration. Das Verfahren umfasst dann bevorzugt einen Schritt, bei welchem Referenzproben bereitgestellt werden. Für die Referenzproben sind jeweils die Werte der Konzentration des Inhaltsstoffes bekannt, sodass diese Werte Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten bilden. Der iterativ auszuführende Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration des Testexemplars umfasst Messungen der Referenzproben mit der jeweils aktuellen Konfiguration des Testexemplars der Hardware des Spektrometers, wodurch spektrale Messwerte erhalten werden, welche die spektralen Trainingsdaten bilden. Die Messungen werden somit physisch mit dem Testexemplar in der jeweils aktuellen Konfiguration für die physisch vorhandenen Referenzproben durchgeführt. Durch das iterativ ausgeführte Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells werden Messwerte der Konzentrationen des Inhaltsstoffes erhalten, die mit den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten verglichen werden, um jeweils den Wert der mindestens einen Eignungskenngröße zu bestimmen.

[0040] Bei jeder der Iterationen ist ein neues bzw. angepasstes Testexemplar der Hardware bereitzustellen. Dies kann durch ein Herstellen des Testexemplars erfolgen. Hierfür kann das Testexemplar aus der vorherigen Iteration wiederverwendet werden. In einem einfachen Fall werden lediglich die Filter der Messkanäle des Testexemplars modifiziert, um ein neues bzw. verändertes Testexemplar für die nächste Iteration bereitzustellen.

[0041] Bevorzugt wird das jeweilige Testexemplar auch dazu genutzt, um Referenzproben zu vermessen, wodurch spektrale Messwerte erhalten werden. Diese spektralen Messwerte werden als spektrale Trainingsdaten in weiteren Iterationen der iterativ auszuführenden Schritte verwendet. Hierdurch wer-

den Fertigungstoleranzen berücksichtigt, die beim Fertigen des Spektrometers auftreten.

[0042] Für alle Gruppen der bevorzugten Ausführungsformen gilt, dass die jeweilige Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers bevorzugt mindestens einen Parameter des Spektrometers definiert. Die jeweilige Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers definiert bevorzugt mehrere der Parameter des Spektrometers. Der bzw. die Parameter spezifizieren bevorzugt mindestens einen Messkanal des Spektrometers; weiter bevorzugt mindestens zwei Messkanäle des Spektrometers und nochmals weiter bevorzugt mindestens 16 Messkanäle. Der bzw. die Parameter sind bevorzugt jeweils durch eine Peakwellenlänge, eine Schwerpunktwellenlänge, eine mittlere Wellenlänge, eine Bandbreite, eine Halbwertsbreite, einen Kurvenformparameter und/oder einen Spitzenwert des mindestens einen Messkanales gebildet. Bei dem Spitzenwert handelt es sich um eine Peakhöhe. Der eine Messkanal bzw. die mehreren Messkanäle werden bevorzugt jeweils durch ein spektrales Eingangsfiler bestimmt. Die spektralen Eingangsfiler weisen jeweils einen Übertragungsbereich auf, welcher durch einen oder mehrere der oben genannten Parameter definiert ist. Bei dem iterativ durchzuführenden Schritt des Modifizierens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers werden einer oder mehrere der oben genannten Parameter verändert. Hierfür werden bevorzugt die oben angegebenen Optimierungstechniken genutzt. Ergänzend oder alternativ wird bei dem iterativ durchzuführenden Schritt des Modifizierens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers eine Anzahl der Messkanäle verändert. So kann die Anzahl der Messkanäle beispielsweise von 16 auf 8 oder auf 4 oder auch umgekehrt geändert werden.

[0043] Die Repräsentation der Hardware des Spektrometers definiert bevorzugt mindestens eine Beschränkung, welche durch eine minimale Peakwellenlänge, durch eine maximale Peakwellenlänge, durch eine minimale Schwerpunktwellenlänge, durch eine maximale Schwerpunktwellenlänge, durch eine minimale mittlere Wellenlänge, durch eine maximale mittlere Wellenlänge, durch eine minimale Bandbreite, durch eine maximale Bandbreite, durch eine minimale Halbwertsbreite, durch eine maximale Halbwertsbreite, durch einen minimalen Kurvenformparameter, durch einen maximalen Kurvenformparameter, durch einen minimalen Spitzenwert, durch einen maximalen Spitzenwert, durch eine minimale Wellenlängendifferenz zwischen einem Wellenlängenparameter eines der Messkanäle und einem entsprechenden Wellenlängenparameter eines anderen der Messkanäle oder durch eine maximale Wellenlängendifferenz zwischen einem Wellenlängenpara-

meter eines der Messkanäle und einem entsprechenden Wellenlängenparameter eines anderen der Messkanäle gebildet ist. Die minimale bzw. maximale Wellenlängendifferenz ist insbesondere zwischen Wellenlängenparametern von zwei benachbarten der Messkanäle definiert. Der betreffende Wellenlängenparameter ist bevorzugt durch die Peakwellenlänge oder durch die minimale oder maximale Halbwertsbreite gebildet. Die genannten Beschränkungen sind bevorzugt auch jeweils mehrfach definiert, beispielsweise Beschränkungen der minimalen oder maximalen Peakwellenlänge in mehreren Intervallen. Auch können die genannten Beschränkungen jeweils auf eine Gruppe oder auf einen Anteil der Messkanäle bezogen sein. So kann beispielsweise für einen Anteil von einem Drittel der Messkanäle vorgegeben werden, dass deren Peakwellenlänge im nahen Infrarot-Bereich liegt. Die genannten Beschränkungen beschränken jeweils die mögliche Veränderung des betreffenden Parameters beim iterativ durchzuführenden Schritt des Modifizierens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers. Diese eine Beschränkung bzw. diese mehreren Beschränkungen werden beim iterativ durchzuführenden Schritt des Modifizierens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers aber bevorzugt nicht verändert. Diese eine Beschränkung bzw. diese mehreren Beschränkungen werden bevorzugt aus einem Testexemplar der Hardware des Spektrometers ausgelesen. Bevorzugt umfasst die Repräsentation der Hardware des Spektrometers mehrere dieser Beschränkungen.

[0044] Die Repräsentation der Hardware des Spektrometers definiert bevorzugt weiterhin mindestens einen Geräteparameter des Spektrometers, welcher ein Signalrauschen, ein Bandbreite-Rauschen, ein Halbwertsbreite-Rauschen, eine Messabweichung oder eine Toleranz des Spektrometers repräsentiert. Die Messabweichung kann beispielsweise temperaturabhängig sein. Bei dem genannten Bandbreite-Rauschen handelt es sich um eine Abweichung einer erzielten Mittelwert-Bandbreite von einem vorgegebenen Wert für die Bandbreite. Die eine Toleranz bzw. mehreren Toleranzen sind insbesondere durch die Fertigung der Hardware des Spektrometers bedingt. Der bzw. die Geräteparameter werden beim iterativ durchzuführenden Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers berücksichtigt, wodurch die Optimierung des Spektrometers und des chemometrischen Modells verbessert wird. Dies erfolgt bevorzugt durch eine Augmentierung während des Trainings, wofür in mindestens einer Iteration die Simulation des Spektrums unter Einbezug des mindestens einen Geräteparameters verändert wird. Die Geräteparameter werden beim iterativ durchzuführenden Schritt des Modifizie-

rens der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers aber bevorzugt nicht verändert.

[0045] Das erfindungsgemäße Computerprogrammprodukt dient zum technischen Entwurf bzw. Entwickeln eines Analysegerätes zur Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Das Computerprogrammprodukt umfasst ein Computer-lesbares Speichermedium, welches darauf gespeicherte Programminstruktionen aufweist. Die Programminstruktionen sind durch einen oder mehrere Computer oder Steuereinheiten ausführbar und veranlassen den einen oder die mehreren Computer oder Steuereinheiten dazu, das erfindungsgemäße Verfahren oder eine der beschriebenen bevorzugten Ausführungsformen des erfindungsgemäßen Verfahrens auszuführen. Die Programminstruktionen umfassen u. a. Algorithmen zum maschinellen Lernen; nämlich zum Trainieren des durch ein maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells mit den spektralen Trainingsdaten. Das Speichermedium kann durch ein elektronisches Medium, ein magnetisches Medium, ein optisches Medium, ein elektromagnetisches Medium, ein Infrarot-Medium oder ein Halbleitermedium, wie ein SSD gebildet sein. Die Programminstruktionen können durch maschinenabhängige oder maschinenunabhängige Instruktionen, Microcode, Firmware, Status-definierende Daten oder jeglichen Source-Code oder Objektcode gebildet sein, der beispielsweise in C++, Java oder ähnlichen bzw. in konventionellen prozeduralen Programmiersprachen geschrieben ist. Auch können elektronische Schaltkreise, wie beispielsweise programmierbare Logikschaltkreise, Feld-programmierbare Gate Arrays (FPGA) oder programmierbare Logik-Arrays (PLA) ausgebildet sein, die die Programminstruktionen ausführen. Das resultierende Modell der Hardware des Spektrometers und das resultierende durch das maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell werden bevorzugt als Programmcode abgespeichert, um für spätere Anwendungen zur Verfügung zu stehen.

[0046] Das erfindungsgemäße trainierte maschinelle Lernsystem bildet ein chemometrisches Modell zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe ausgehend von mit einem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe. Das erfindungsgemäße maschinelle Lernsystem wurde durch das erfindungsgemäße Verfahren oder durch eine bevorzugte Ausführungsform des erfindungsgemäßen Verfahrens trainiert. Es liegt in Form eines Programmcodes vor.

[0047] Das erfindungsgemäße Analysegerät dient zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Das Analysegerät umfasst ein Spektrometer zur spektralen Vermessung der

Probe. Das Analysegerät ist zur Anwendung eines durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert. Das Spektrometer und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell sind aus dem erfindungsgemäßen Verfahren oder einer der beschriebenen bevorzugten Ausführungsformen des erfindungsgemäßen Verfahrens hervorgegangen. Das Analysegerät wurde also mit dem erfindungsgemäßen Verfahren technisch entworfen bzw. entwickelt. Die Optimierung des Spektrometers und das Anlernen des durch das maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells erfolgten gemeinsam durch das Durchführen des erfindungsgemäßen Verfahrens. Das Analysegerät weist bevorzugt auch weitere Merkmale auf, die im Zusammenhang mit dem erfindungsgemäßen Verfahren beschrieben sind.

[0048] Bei bevorzugten Ausführungsformen umfasst das Analysegerät mehrere Komponenten, welche mechanisch voneinander unabhängig sind und eigene Gehäuse aufweisen können. Bevorzugt ist das Spektrometer als ein Handgerät ausgebildet, welches eine der mechanisch voneinander unabhängigen Komponenten bildet. Eine weitere der mechanisch voneinander unabhängigen Komponenten des Analysegerätes ist bevorzugt durch eine Recheneinheit gebildet, welche zur Anwendung des durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells konfiguriert ist. Das Spektrometer und die Recheneinheit sind bevorzugt über eine drahtlose Datenverbindung miteinander verbunden. Bei der Recheneinheit kann es sich beispielsweise um ein Smartphone handeln.

[0049] Weitere Einzelheiten und Weiterbildungen der Erfindung ergeben sich aus der nachfolgenden Beschreibung bevorzugter Ausführungsformen der Erfindung, unter Bezugnahme auf die Zeichnung. Es zeigen:

Fig. 1: einen Ablaufplan einer ersten bevorzugten Ausführungsform eines erfindungsgemäßen Verfahrens; und

Fig. 2: einen Ablaufplan einer zweiten bevorzugten Ausführungsform des erfindungsgemäßen Verfahrens.

[0050] Fig. 1 zeigt einen Ablaufplan einer ersten bevorzugten Ausführungsform eines erfindungsgemäßen Verfahrens. Das Verfahren dient zum technischen Entwurf eines Analysegerätes (nicht gezeigt) zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Das Verfahren führt dazu, dass das zu entwickelnde Analysegerät für eine gegebene Analyseaufgabe optimiert ist. Das Analysegerät

umfasst ein Spektrometer (nicht gezeigt) zur spektralen Vermessung der Probe. Das Analysegerät ist weiterhin zur Anwendung eines chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert. Gemäß dem Verfahren werden das Spektrometer und das durch ein maschinelles Lernsystem gebildete chemometrische Modell gemeinsam entwickelt und optimiert. Bei dieser ersten bevorzugten Ausführungsform wird ein Modell der Hardware des Spektrometers verwendet, um das Spektrometer zu entwickeln und zu optimieren.

[0051] In einem vorbereitenden Schritt 01 wird ein Referenzspektrometer bereitgestellt, welches hochauflösend ist und einen Gold-Standard repräsentiert. Das Referenzspektrometer wird so gewählt, dass es jedenfalls eine größere Bandbreite und eine höhere spektrale Auflösung zur Verfügung stellt, als diese für die gegebene Analyseaufgabe notwendig sind. Das zu entwickelnde Spektrometer wird also hinsichtlich seiner Bandbreite und/oder spektralen Auflösung gegenüber dem Referenzspektrometer reduziert sein.

[0052] In einem weiteren vorbereitenden Schritt 02 werden Referenzproben bereitgestellt, welche gemäß der gegebenen Analyseaufgabe ausgewählt werden. Für die Referenzproben sind Werte von Konzentrationen mindestens eines Inhaltsstoffes der Referenzprobe bekannt. Dabei handelt es sich um den mindestens einen Inhaltsstoff, dessen Konzentration gemäß der gegebenen Analyseaufgabe zu bestimmen ist. Diese für die Referenzproben bekannten Werte stellen Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten dar. In einem weiteren vorbereitenden Schritt 03 werden die Referenzproben 02 mit dem Referenzspektrometer 01 spektral vermessen, sodass in einem nächsten Schritt 04 mehrere Referenzspektraldaten vorliegen, welche später für eine Simulation von spektralen Messungen genutzt werden.

[0053] Das Verfahren umfasst mehrere iterativ auszuführende Schritte 06, durch welche eine gemeinsame iterative Optimierung des Modells der Hardware des Spektrometers und des chemometrischen Modells in Form des maschinellen Lernsystems erfolgen.

[0054] In einem iterativ auszuführenden Schritt 07 erfolgt ein Simulieren des spektralen Vermessens von Proben mit dem Spektrometer. Hierzu wird ein Modell der Hardware des Spektrometers genutzt. Das Modell beschreibt die Hardware des Spektrometers durch eine Spezifikation s (nicht gezeigt) in Form von Parametern. Die Spezifikation s (nicht gezeigt) ist bevorzugt durch einen Vektor gebildet. Eine

erste beispielhafte Definition des Vektors ist nachfolgend beschrieben: Ein erster Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine mittlere Wellenlänge eines ersten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein zweiter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine Bandbreite des ersten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein dritter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine mittlere Wellenlänge eines zweiten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein vierter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine Bandbreite des zweiten Messkanales des Spektrometers gebildet. Diese Folge der Werte wird entsprechend fortgesetzt. Eine zweite beispielhafte Definition des Vektors ist nachfolgend beschrieben: Ein erster Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine mittlere Wellenlänge eines ersten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein zweiter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine Bandbreite des ersten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein dritter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine Amplitude des ersten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein vierter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine mittlere Wellenlänge eines zweiten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein fünfter Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine Bandbreite des zweiten Messkanales des Spektrometers gebildet. Ein sechster Wert des Vektors s (nicht gezeigt) ist durch eine Amplitude des zweiten Messkanales des Spektrometers gebildet. Diese Folge der Werte wird entsprechend fortgesetzt. Das Simulieren der Messungen zur Aufzeichnung von Spektren mit dem jeweils aktuellen Modell der Hardware des Spektrometers erfolgt dadurch, dass der jeweils aktuelle Vektor s (nicht gezeigt) auf die Referenzspektraldaten 04 angewendet wird, wodurch in einem nächsten Schritt 08 spektrale Trainingsdaten vorliegen. Bei dem erstmaligen Simulieren der Messungen zur Aufzeichnung von Spektren wird von einer initialen Konfiguration des Modells der Hardware des Spektrometers ausgegangen, welche durch einen initialen Vektor s_0 (nicht gezeigt) repräsentiert wird.

[0055] Die im Schritt 08 vorgelegten spektralen Trainingsdaten werden in einem Schritt 09 zum Trainieren des durch das maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells verwendet. Nach jeder Durchführung des Schrittes 09 ist das maschinelle Lernsystem trainiert und wird dazu genutzt, aus den spektralen Trainingsdaten den Wert der Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Referenzprobe zu präzisieren. Abweichungen der prädierten Werte von den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten stellen einen Fehler dar, welcher das jeweils aktuelle Modell der Hardware des Spektrometers kennzeichnet. Es wird daher eine objektive Funktion definiert, welche für den jeweiligen Vektor s (nicht gezeigt) die genannten Abweichungen angibt. Aus den genannten Abweichungen ergibt sich in einem Schritt 11 der

Wert einer Eignungskenngröße, welcher in einem Schritt 12 auf eine Bedingung geprüft wird. Diese Bedingung bildet die Abbruchbedingung für die iterativ auszuführenden Schritte 06. Diese bevorzugt vorab festgelegte Abbruchbedingung definiert, ab wann das Modell der Hardware des Spektrometers und das durch das maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell als ausreichend optimiert angesehen werden, um die gegebene Analyseaufgabe zu erfüllen.

[0056] Ergibt die Prüfung in dem Schritt 12, dass die Eignungskenngröße die Bedingung noch nicht erfüllt, so werden in einem Schritt 13 geänderte Parameter für das Modell der Hardware des Spektrometers bestimmt, um die oben beschriebene objektive Funktion und somit auch die Eignungskenngröße zu verbessern. Entsprechend wird in einer t -ten Iteration 06 ein Vektor s_t (nicht gezeigt) bestimmt, wofür bevorzugt nicht lediglich der unmittelbar zuvor bestimmte Vektor s_{t-1} (nicht gezeigt) sondern sämtliche zuvor bestimmte Vektoren s_0 bis s_{t-1} (nicht gezeigt) berücksichtigt werden.

[0057] Das im Schritt 13 erfolgende Bestimmen von modifizierten Parametern für das Modell der Hardware des Spektrometers stellt eine Optimierung dieser Parameter dar, wofür bevorzugt eine oder mehrere Optimierungstechniken aus der folgenden Gruppe ausgewählt werden: Nelder-Mead-Verfahren, Bayessche Optimierung, Rastersuche, Zufallsuche, gradientenfreie Optimierung, optimale Versuchsplanung, Methoden des maschinellen Lernens, Greedy-Algorithmen und evolutionäre Algorithmen. Das Modell des Spektrometers umfasst bevorzugt mehrere Beschränkungen, wie eine minimale Bandbreite, eine maximale Bandbreite, eine minimale Wellenlänge und eine maximale Wellenlänge, welche bei der Optimierung der Parameter im Vektor s_t (nicht gezeigt) berücksichtigt werden.

[0058] In einem Schritt 14 werden die veränderten Parameter des Modells der Hardware des Spektrometers, d. h. der Vektor s_t (nicht gezeigt) für den erneut auszuführenden Schritt 07 des Simulierens des spektralen Vermessens aktualisiert.

[0059] Ergibt die Prüfung in dem Schritt 12, dass die Eignungskenngröße die Bedingung erfüllt, so sind die iterativ ausgeführten Schritte 06 abgeschlossen. In einem Schritt 16 liegen nun das optimierte Modell der Hardware des Spektrometers und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell vor, sodass das Verfahren insgesamt abgeschlossen ist. Zum Herstellen des Analyserätes ist ein Spektrometer gemäß dem optimierten Modell der Hardware des Spektrometers herzustellen und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell ist in dem herzustellenden Analyserät zu imple-

mentieren. Das so hergestellte Analysegerät ist besonders für die gegebene Analyseaufgabe geeignet und das Spektrometer ist weit weniger aufwändig als das Referenzspektrometer gemäß dem Gold-Standard, sodass das Analysegerät kostengünstig herstellbar ist.

[0060] Fig. 2 zeigt einen Ablaufplan einer zweiten bevorzugten Ausführungsform des erfindungsgemäßen Verfahrens. Diese zweite bevorzugte Ausführungsform dient ebenso wie die erste bevorzugte Ausführungsform zum technischen Entwurf eines Analysegerätes (nicht gezeigt) zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe. Diese zweite bevorzugte Ausführungsform führt ebenso dazu, dass das zu entwickelnde Analysegerät für eine gegebene Analyseaufgabe optimiert ist. Das zu entwickelnde Analysegerät ist in gleicher Weise aufgebaut, wie dies für die erste bevorzugte Ausführungsform beschrieben wurde. Im Unterschied zur ersten bevorzugten Ausführungsform wird bei der zweiten bevorzugten Ausführungsform die Hardware des Spektrometers in jeder Iteration physisch jeweils als ein Testexemplar bereitgestellt, um das Spektrometer zu entwickeln und zu optimieren.

[0061] In einem vorbereitenden Schritt 21 werden Referenzproben bereitgestellt, welche gemäß der gegebenen Analyseaufgabe ausgewählt werden. Für die Referenzproben sind Werte von Konzentrationen mindestens eines Inhaltsstoffes der Referenzprobe bekannt. Dabei handelt es sich um den mindestens einen Inhaltsstoff, dessen Konzentration gemäß der gegebenen Analyseaufgabe zu bestimmen ist. Diese für die Referenzproben bekannten Werte stellen Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten dar.

[0062] Auch die zweite bevorzugte Ausführungsform des Verfahrens umfasst mehrere iterativ auszuführende Schritte 22, durch welche eine gemeinsame iterative Optimierung der Hardware des Spektrometers und des chemometrischen Modells in Form des maschinellen Lernsystems erfolgen.

[0063] In einem iterativ auszuführenden Schritt 23 erfolgt ein Herstellen eines Testexemplars der Hardware des Spektrometers. Das Testexemplar ist durch eine Spezifikation s (nicht gezeigt) in Form von Parametern definiert. Die Spezifikation s (nicht gezeigt) ist bevorzugt durch einen Vektor gebildet, wie er für die erste bevorzugte Ausführungsform beschrieben ist. Die Spezifikation umfasst bevorzugt auch Geräteparameter für ein Signalrauschen und Toleranzen des Spektrometers, die aber durch die iterativ auszuführenden Schritte 22 nicht verändert werden. Im Ergebnis der Herstellung liegt in einem Schritt 24 das jeweilige Testexemplar der Hardware des Spektrometers physisch vor. Das erste herzustellende Testexemplar

der Hardware des Spektrometers wird gemäß einem initialen Vektor s_0 hergestellt.

[0064] In einem nächsten Schritt 26 wird das aktuelle Testexemplar der Hardware des Spektrometers verwendet, um die Referenzproben spektral zu vermessen, wodurch spektrale Messwerte erhalten werden, welche die in einem Schritt 27 vorliegenden spektralen Trainingsdaten bilden.

[0065] Die im Schritt 27 vorgelegten spektralen Trainingsdaten werden in einem Schritt 28 zum Trainieren des durch das maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells verwendet. Nach jeder Durchführung des Schrittes 28 ist das maschinelle Lernsystem trainiert und wird dazu genutzt, aus den spektralen Trainingsdaten den Wert der Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Referenzproben zu präzisieren. Abweichungen der präzisierten Werte von den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten stellen einen Fehler dar, welcher das jeweils aktuelle Testexemplar der Hardware des Spektrometers kennzeichnet. Es wird daher eine objektive Funktion definiert, welche für den jeweiligen Vektor s (nicht gezeigt) die genannten Abweichungen angibt. Aus den genannten Abweichungen ergibt sich in einem Schritt 29 der Wert einer Eignungskenngröße, welcher in einem Schritt 31 auf eine Bedingung geprüft wird. Diese Bedingung bildet die Abbruchbedingung für die iterativ auszuführenden Schritte 22. Diese bevorzugt vorab festgelegte Abbruchbedingung definiert, ab wann das Testexemplar der Hardware des Spektrometers und das durch das maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell als ausreichend optimiert angesehen werden, um die gegebene Analyseaufgabe zu erfüllen.

[0066] Ergibt die Prüfung in dem Schritt 31, dass die Eignungskenngröße die Bedingung noch nicht erfüllt, so werden in einem Schritt 32 geänderte Parameter für das nächste herzustellende Testexemplar der Hardware des Spektrometers bestimmt, um die oben beschriebene objektive Funktion und somit auch die Eignungskenngröße zu verbessern. Entsprechend wird in einer t -ten Iteration 22 ein Vektor s_t (nicht gezeigt) bestimmt, wofür bevorzugt nicht lediglich der unmittelbar zuvor bestimmte Vektor s_{t-1} (nicht gezeigt) sondern sämtliche zuvor bestimmte Vektoren s_0 bis s_{t-1} (nicht gezeigt) berücksichtigt werden.

[0067] Das im Schritt 32 erfolgende Bestimmen von modifizierten Parametern für das nächste herzustellende Testexemplar der Hardware des Spektrometers stellt eine Optimierung dieser Parameter dar, wofür bevorzugt eine oder mehrere Optimierungstechniken aus der folgenden Gruppe ausgewählt werden: Nelder-Mead-Verfahren, Bayessche Optimierung, optimale Versuchsplanung, Methoden des

maschinellen Lernens, Greedy-Algorithmen und evolutionäre Algorithmen. Für das Testexemplar sind bevorzugt mehrere Beschränkungen definiert; wie eine minimale Bandbreite, eine maximale Bandbreite, eine minimale Wellenlänge und eine maximale Wellenlänge, welche bei der Optimierung der Parameter im Vektor s_t (nicht gezeigt) berücksichtigt werden.

[0068] In einem Schritt 33 werden die veränderten Parameter, d. h. der Vektor s_t (nicht gezeigt) für den erneut auszuführenden Schritt 23 des Herstellens eines Testexemplars der Hardware des Spektrometers aktualisiert.

[0069] Ergibt die Prüfung in dem Schritt 31, dass die Eignungskenngröße die Bedingung erfüllt, so sind die zuvor iterativ ausgeführten Schritte 22 abgeschlossen. In einem Schritt 34 liegen nun das optimierte Testexemplar der Hardware des Spektrometers und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell vor, sodass das Verfahren insgesamt abgeschlossen ist. Zum Herstellen des Analysegerätes ist ein dem optimierten Testexemplar gleichendes Spektrometer herzustellen und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell ist in dem herzustellenden Analysegerät zu implementieren. Das so hergestellte Analysegerät ist bestens für die gegebene Analyseaufgabe geeignet und das Spektrometer ist weit weniger aufwändig als ein Referenzspektrometer gemäß dem Gold-Standard, sodass das Analysegerät kostengünstig herstellbar ist.

16	trainiertes Lernsystem und optimiertes Modell
17	-
18	-
19	-
20	-
21	Referenzproben
22	iterative Optimierung
23	Herstellen eines Testexemplars
24	Testexemplar
25	-
26	Messung von Spektren
27	spektrale Trainingsdaten
28	Trainieren
29	Eignungskenngröße
30	-
31	Bedingung
32	Bestimmen von geänderten Parametern
33	Parameteraktualisierung
34	trainiertes Lernsystem und optimiertes Testexemplar

Bezugszeichenliste

01	Referenzspektrometer
02	Referenzproben
03	Aufzeichnung von Spektren
04	Referenzspektraldaten
05	-
06	iterative Optimierung
07	Simulieren der Aufzeichnung
08	spektrale Trainingsdaten
09	Trainieren
10	-
11	Eignungskenngröße
12	Bedingung
13	Bestimmen von geänderten Parametern
14	Parameteraktualisierung
15	-

ZITATE ENTHALTEN IN DER BESCHREIBUNG

Diese Liste der vom Anmelder aufgeführten Dokumente wurde automatisiert erzeugt und ist ausschließlich zur besseren Information des Lesers aufgenommen. Die Liste ist nicht Bestandteil der deutschen Patent- bzw. Gebrauchsmusteranmeldung. Das DPMA übernimmt keinerlei Haftung für etwaige Fehler oder Auslassungen.

Zitierte Patentliteratur

- DE 102020116094 A1 [0002]
- WO 2021198247 A1 [0003]
- US 11062481 B2 [0004]
- DE 102021105869 A1 [0005]
- US 20210172800 A1 [0006]
- EP 3842788 A1 [0007]
- US 10020900 B2 [0008]

Patentansprüche

1. Verfahren zum technischen Entwurf eines Analysegerätes zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe, wobei das Analysegerät ein Spektrometer zur spektralen Vermessung der Probe umfasst, wobei das Analysegerät weiterhin zur Anwendung eines durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert ist; und wobei das Verfahren folgende Schritte umfasst:

- Auswahl einer initialen Konfiguration einer Repräsentation einer Hardware des Spektrometers;
- iteratives Ausführen der folgenden Schritte:
 - Anwenden (07; 26) der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers, wodurch spektrale Trainingsdaten (08; 27) erhalten werden;
 - Trainieren (09; 28) des durch ein maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells mit den spektralen Trainingsdaten (08; 27);
 - Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells, um einen Wert mindestens einer Eignungskenngröße (11; 29) für die jeweils aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers zu bestimmen, und
 - Modifizieren (13; 32) der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers.

2. Verfahren nach Anspruch 1, **dadurch gekennzeichnet**, dass nach dem Ausführen der iterativ auszuführenden Schritte diejenige der angewendeten Konfigurationen der Repräsentation der Hardware des Spektrometers ausgewählt wird, deren Wert von einer der mindestens einen Eignungskenngröße (11, 29) einer bestmöglichen Eignung entspricht.

3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, **dadurch gekennzeichnet**, dass bei dem iterativ auszuführenden Schritt des Modifizierens (13; 32) der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers die Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers innerhalb eines vordefinierten Rahmens modifiziert wird, wobei dieser iterativ auszuführende Schritt so oft wiederholt wird, bis ein hierfür vordefiniertes Budget erschöpft ist, welches durch eine Anzahl der durchzuführenden Iterationen und/oder durch eine Zeitdauer zur Durchführung der Iterationen definiert ist.

4. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, **dadurch gekennzeichnet**, dass die iterativ auszuführenden Schritte so oft wiederholt werden, bis der Wert der

Eignungskenngröße (11, 29) für die jeweils aktuelle Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers einen vorbestimmten Grenzwert zumindest erreicht hat.

5. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 4, **dadurch gekennzeichnet**, dass das Modifizieren (13; 32) der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers unter Nutzung mindestens eines der zuvor bestimmten Werte der mindestens einen Eignungskenngröße (11; 29) erfolgt.

6. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 5, **dadurch gekennzeichnet**, dass die Repräsentation der Hardware des Spektrometers durch ein Modell der Hardware des Spektrometers gebildet ist, wobei das Verfahren folgenden weiteren Schritt umfasst:

- Bereitstellen von Referenzdaten, welche eine Reihe von Referenzspektraldaten (04) umfassen, denen eine Reihe von Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten zugeordnet ist; wobei der iterativ auszuführende Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration des Modells der Hardware des Spektrometers eine Simulation (07) eines spektralen Vermessens der Probe umfasst, wobei bei den Simulationen (07) die jeweilige Konfiguration des Modells der Hardware des Spektrometers auf die Referenzspektraldaten (04) angewendet wird, wodurch spektrale Simulationsmesswerte erhalten werden, welche die spektralen Trainingsdaten (08) bilden, sodass durch das Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells Simulationsmesswerte der Konzentrationen des Inhaltsstoffes erhalten werden, die mit den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten verglichen werden, um jeweils den Wert der mindestens einen Eignungskenngröße (11) zu bestimmen.

7. Verfahren nach Anspruch 6, **dadurch gekennzeichnet**, dass es folgende weitere Schritte umfasst:

- Bestimmen einer herstellungsbedingten Hardwareabweichung zwischen dem Modell der Hardware des Spektrometers und einer gemäß dem Modell der Hardware des Spektrometers hergestellten Hardware des Spektrometers; und
- Berücksichtigen der herstellungsbedingten Hardwareabweichung bei dem iterativ auszuführenden Schritt des Anwendens (07) der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers.

8. Verfahren nach Anspruch 6 oder 7, **dadurch gekennzeichnet**, dass bei der iterativ durchzuführenden Simulation (07) des spektralen Vermessens der Probe sich verändernde Messbedingungen berücksichtigt werden, um erweiterte spektrale Trainingsdaten (08) zu erhalten, wobei die sich verändernden Messbedingungen einen Abstand zwischen

der Probe und dem Spektrometer, eine Luftfeuchte und/oder eine Temperatur im Bereich der Probe und/oder des Spektrometers umfassen.

9. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 5, **dadurch gekennzeichnet**, dass die Repräsentation der Hardware des Spektrometers durch ein Testexemplar (24) der Hardware des Spektrometers gebildet ist, wobei das Verfahren folgenden weiteren Schritt umfasst:

- Bereitstellen von Referenzproben (21), für welche die Werte der Konzentration des Inhaltsstoffes jeweils bekannt sind, sodass diese Werte Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten bilden; wobei der iterativ auszuführende Schritt des Anwendens der jeweils aktuellen Konfiguration des Testexemplars (24) Messungen (26) der Referenzproben mit der jeweils aktuellen Konfiguration des Testexemplars (24) der Hardware des Spektrometers umfassen, wodurch spektrale Messwerte erhalten werden, welche die spektralen Trainingsdaten (27) bilden, sodass durch das Anwenden des durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells Messwerte der Konzentrationen des Inhaltsstoffes erhalten werden, die mit den Referenzinhaltsstoffkonzentrationsdaten verglichen werden, um jeweils den Wert der mindestens einen Eignungskenngröße (29) zu bestimmen.

10. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 9, **dadurch gekennzeichnet**, dass die jeweilige Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers mindestens einen Parameter des Spektrometers definiert; wobei die Parameter mindestens einen Messkanal des Spektrometers spezifizieren; wobei der mindestens eine Parameter durch eine Peakwellenlänge, eine Schwerpunktwellenlänge, eine mittlere Wellenlänge, eine Bandbreite, eine Halbwertsbreite, einen Kurvenformparameter oder einen Spitzenwert des mindestens einen Messkanales gebildet ist; und wobei beim Modifizieren (13; 32) der jeweils aktuellen Konfiguration der Repräsentation der Hardware des Spektrometers einer oder mehrere der Parameter und/oder eine Anzahl der Messkanäle verändert wird.

11. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 10, **dadurch gekennzeichnet**, dass die Repräsentation der Hardware des Spektrometers mindestens eine Beschränkung definiert, welche durch eine minimale Peakwellenlänge, durch eine maximale Peakwellenlänge, durch eine minimale Schwerpunktwellenlänge, durch eine maximale Schwerpunktwellenlänge, durch eine minimale mittlere Wellenlänge, durch eine maximale mittlere Wellenlänge, durch eine minimale Bandbreite, durch eine maximale Bandbreite, durch eine minimale Halbwertsbreite, durch eine maximale Halbwertsbreite, durch einen minimalen Kurvenformparameter, durch einen maxi-

malen Spitzenwert, durch einen maximalen Spitzenwert, durch eine minimale Wellenlängendifferenz zwischen einem Wellenlängenparameter eines der Messkanäle und einem entsprechenden Wellenlängenparameter eines anderen der Messkanäle oder durch eine maximale Wellenlängendifferenz zwischen einem Wellenlängenparameter eines der Messkanäle und einem entsprechenden Wellenlängenparameter eines anderen der Messkanäle gebildet ist.

12. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 11, **dadurch gekennzeichnet**, dass die Repräsentation der Hardware des Spektrometers weiterhin mindestens einen Geräteparameter definiert, welcher ein Signalrauschen, ein Bandbreite-Rauschen, ein Halbwertsbreite-Rauschen, eine Messabweichung oder eine Toleranz des Spektrometers repräsentiert.

13. Computerprogrammprodukt zum technischen Entwurf eines Analysegerätes zur Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe, wobei das Computerprogrammprodukt ein Computerlesbares Speichermedium umfasst, welches darauf gespeicherte Programminstruktionen aufweist, wobei die Programminstruktionen durch einen oder mehrere Computer oder Steuereinheiten ausführbar sind und den einen oder die mehreren Computer oder Steuereinheiten dazu veranlasst, das Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 12 auszuführen.

14. Trainiertes maschinelles Lernsystem, welches durch ein Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 12 trainiert wurde.

15. Analysegerät zur spektralen Analyse mindestens eines Inhaltsstoffes einer Probe, welches ein Spektrometer zur spektralen Vermessung der Probe umfasst und zur Anwendung eines durch ein trainiertes maschinelles Lernsystem gebildeten chemometrischen Modells zur Bestimmung einer Konzentration mindestens eines Inhaltsstoffes der Probe ausgehend von mit dem Spektrometer aufgenommenen spektralen Messwerten der Probe konfiguriert ist, **dadurch gekennzeichnet**, dass das Spektrometer und das durch das trainierte maschinelle Lernsystem gebildete chemometrische Modell aus dem Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 12 hervorgegangen sind.

Es folgen 2 Seiten Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen

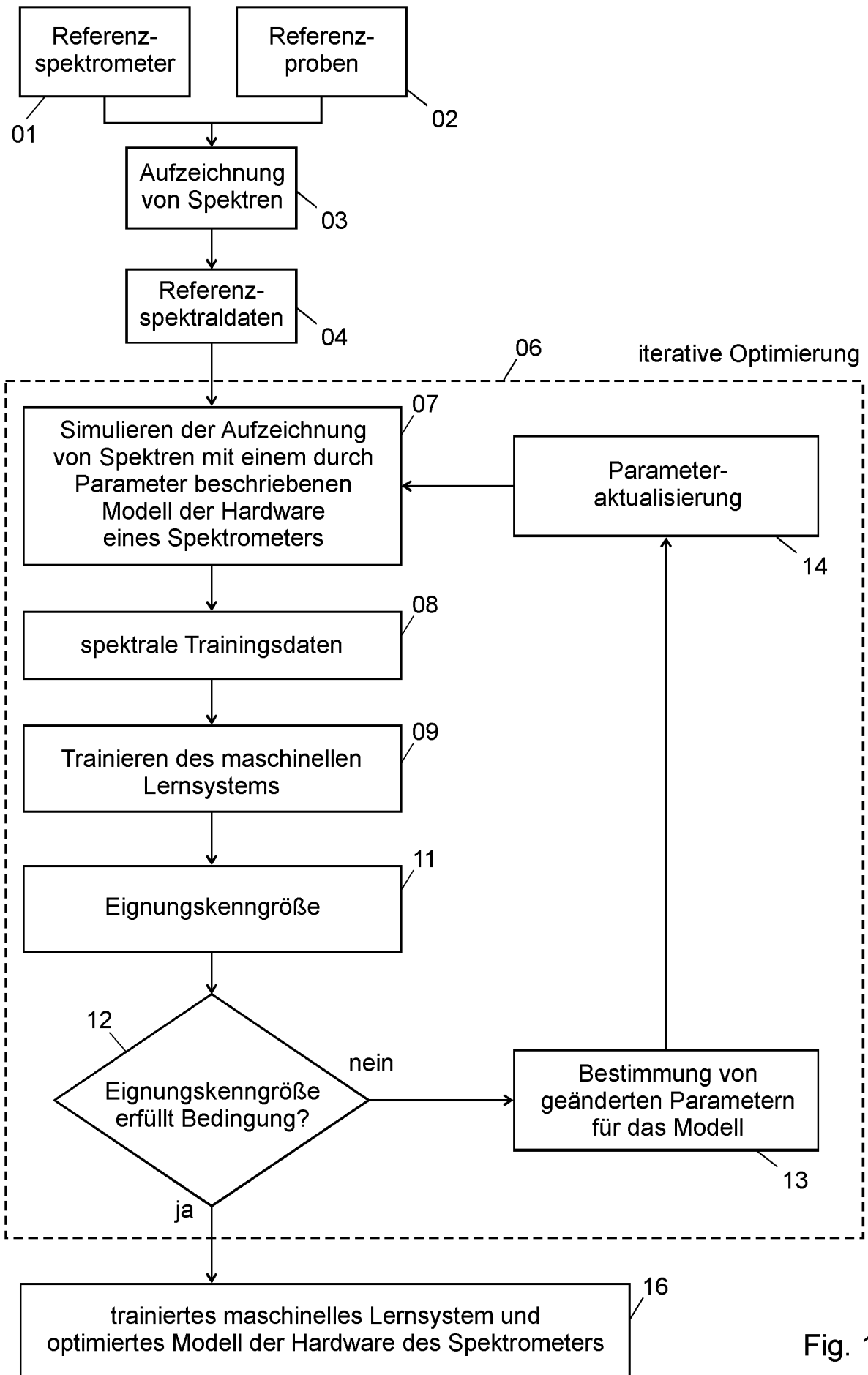


Fig. 1

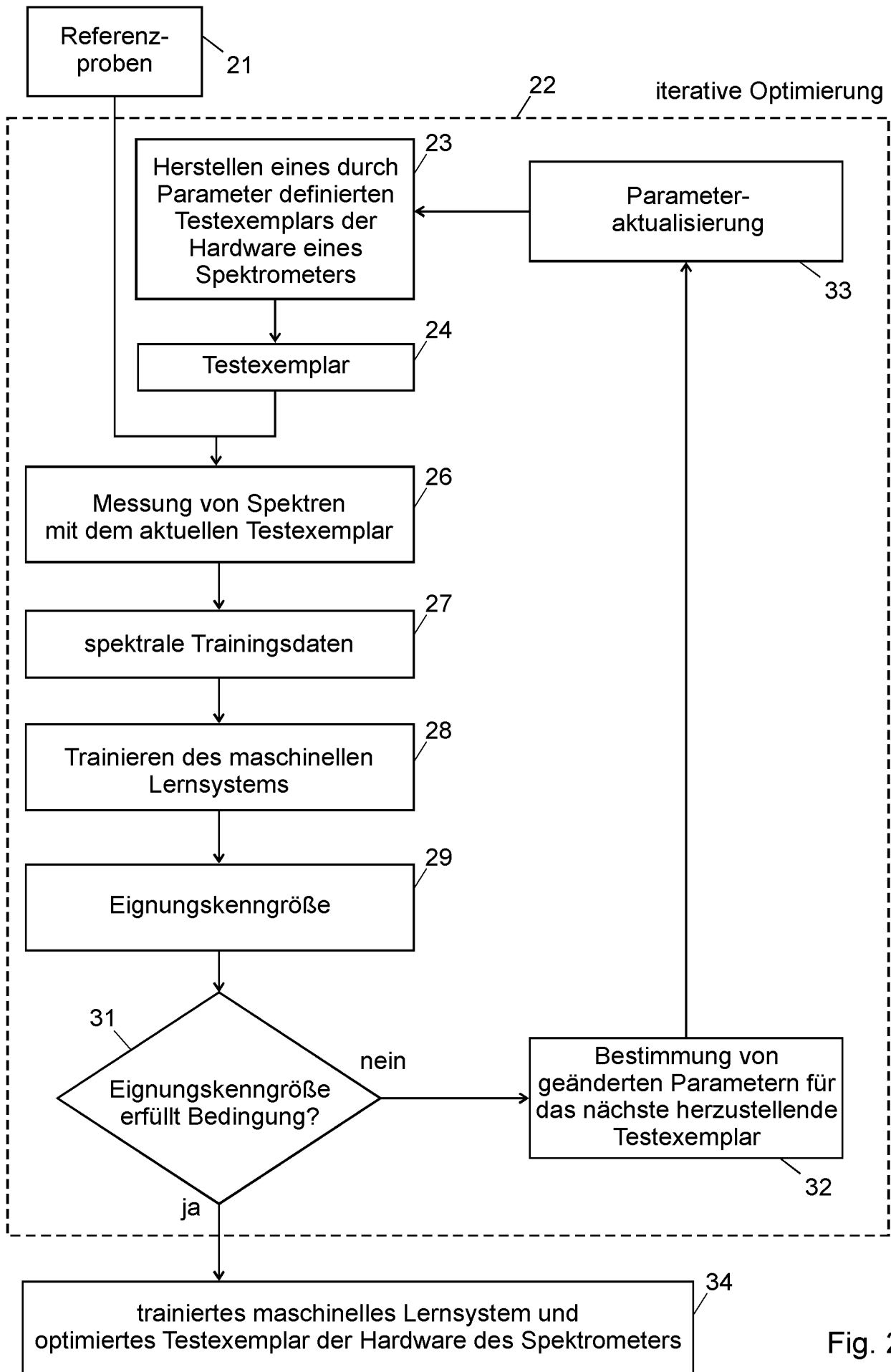


Fig. 2