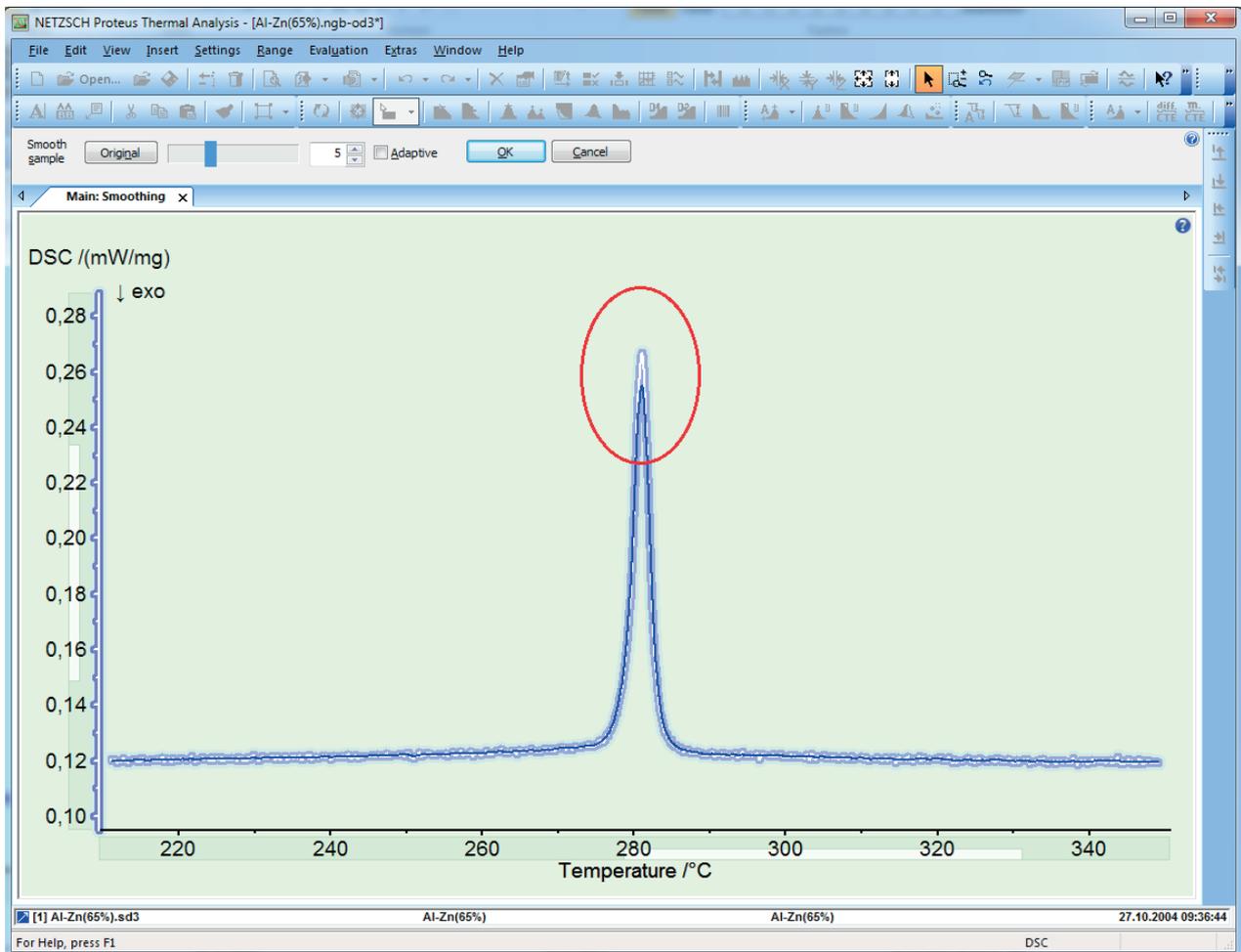


Adaptives Glätten für DSC und TG

Dr. Alexander Schindler

Sinnvolles Glätten thermoanalytischer Daten ist seit Jahrzehnten eine Herausforderung. Ein häufiger Nachteil von konventionellem Glätten ist in Abbildung 1 illustriert. DSC-Daten wurden mit dem Faktor* 5 geglättet,

um das Rauschen vor und nach dem Peak zu reduzieren. Dadurch wurde jedoch die Peakhöhe verringert – ein durch das Glätten entstandenes Artefakt.

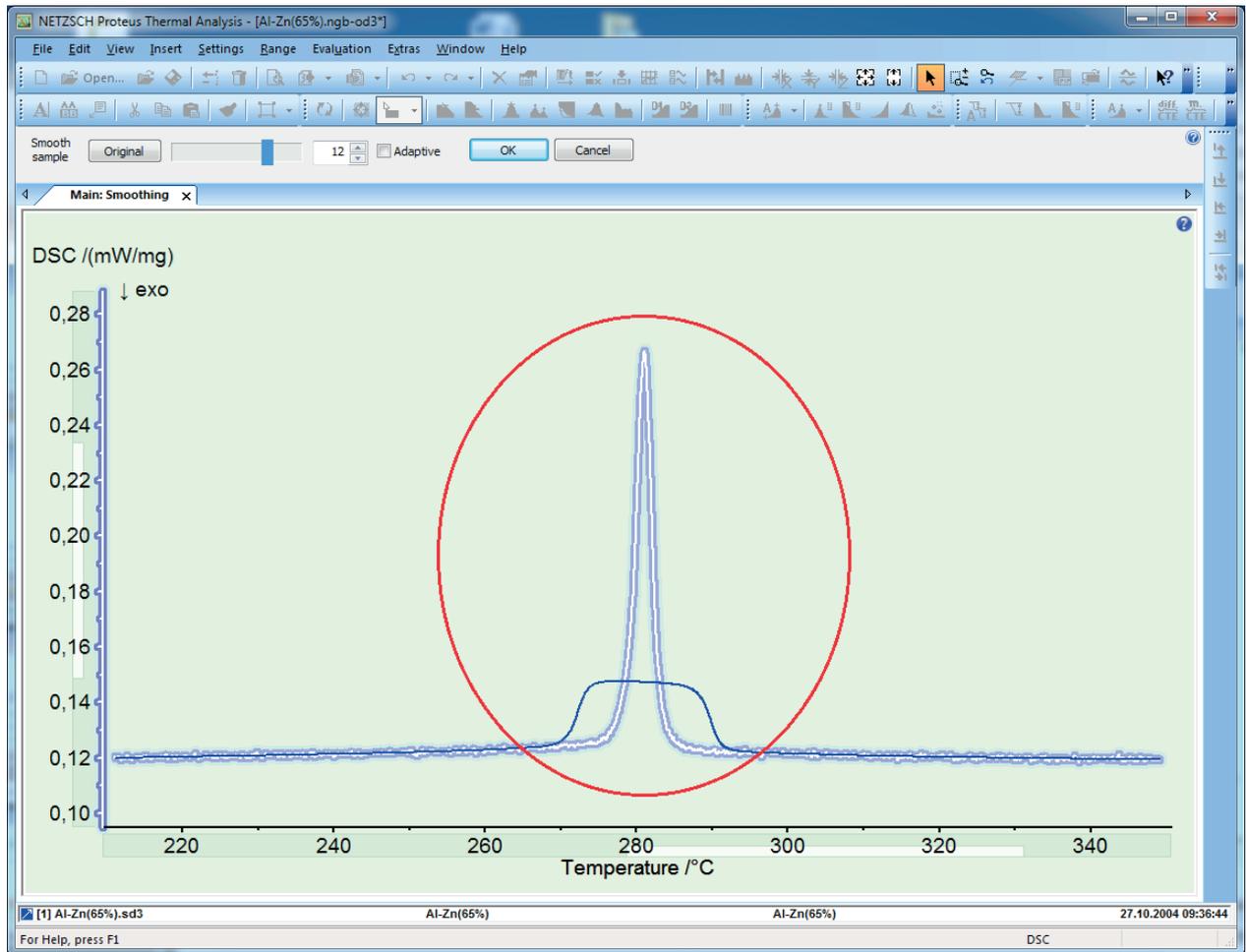


1 Konventionelles Glätten von DSC-Daten in der *Proteus*®-Analysesoftware mit Glättungsfaktor 5. Die weiße Kurve stellt die Original-DSC-Daten, die blaue Kurve die geglätteten DSC-Daten dar (siehe Text).

*In der *Proteus*®-Analyseversion 7.2 und höher können die Glättungsfaktoren 1...16 gewählt werden, die die früheren Glättungsfaktoren 1...8, A ...H repräsentieren.

Bei einem höheren Glättungsfaktor von 12 ist der DSC-Peak aufgrund des Glättens erheblich verfälscht (siehe Abbildung 2). Dieser Effekt wird durch das breite Intervall, in dem die Daten bei hohen Glättungsfaktoren

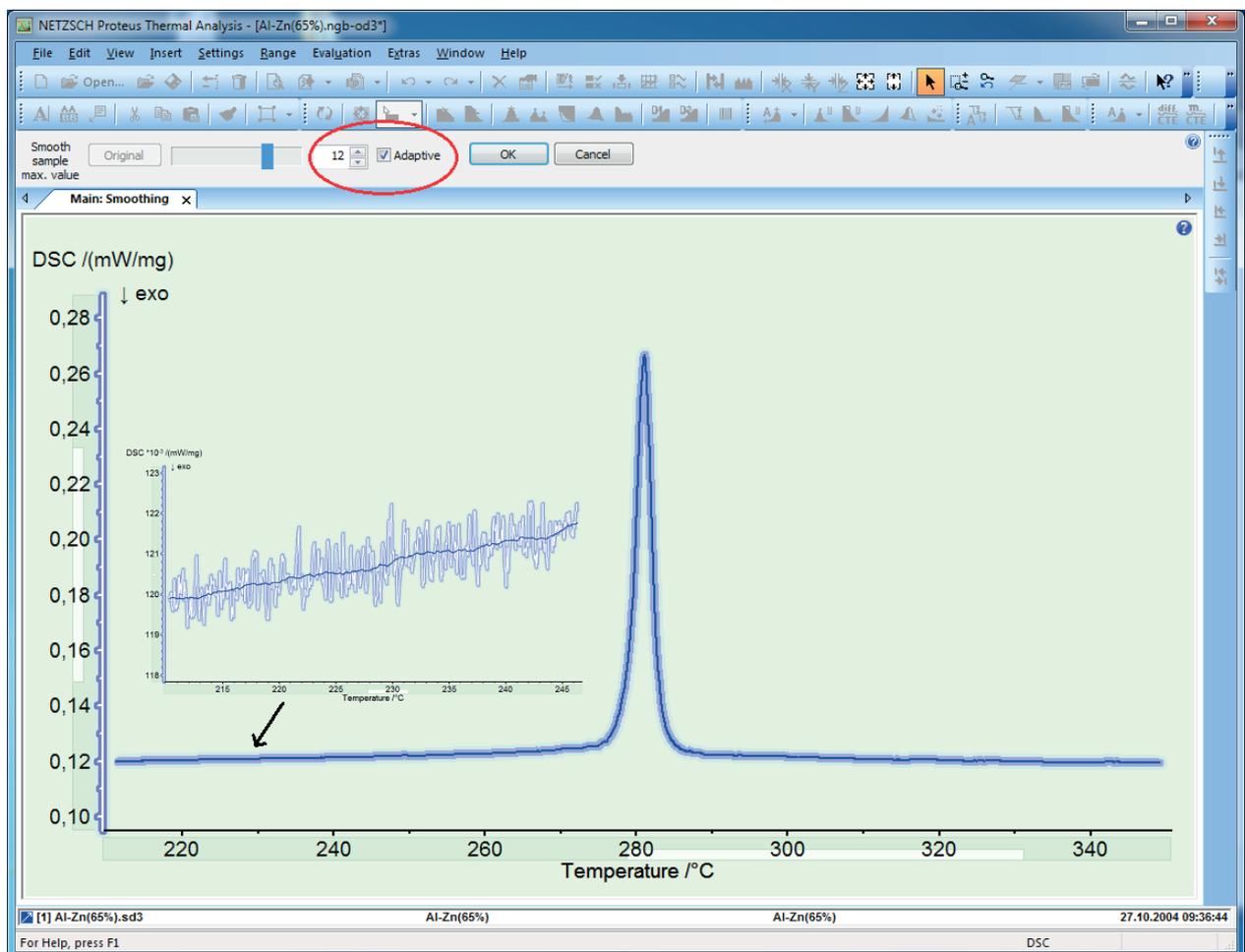
gemittelt werden, verursacht. Demzufolge musste der Anwender bisher einen entsprechend niedrigeren Glättungsfaktor wählen, um die von der Probe stammenden kalorischen Effekte nicht zu verfälschen.



2 Konventionelles Glätten von DSC-Daten in der *Proteus*® Analysesoftware mit Glättungsfaktor 12. Die weiße Kurve stellt die Original-DSC-Daten, die blaue Kurven die geglättete DSC-Daten dar (siehe Text).

Diese Situation wird durch das neuartige Adaptive Glätten, erhältlich ab *Proteus*®-Analyseversion 7.2 oder höher, wesentlich verbessert. Adaptives Glätten kann durch Anwählen von „Adaptive“ auf der Benutzeroberfläche (siehe Abbildung 3) aktiviert werden. Infolgedessen werden die DSC-Daten mit ausgewähltem Glättungsfaktor nur in den Bereichen geglättet, in denen keine DSC-Peaks auftreten, wohingegen der Glättungsfaktor während DSC-Peaks automatisch verringert wird. So bleiben DSC-Peaks unverändert – selbst bei hohen

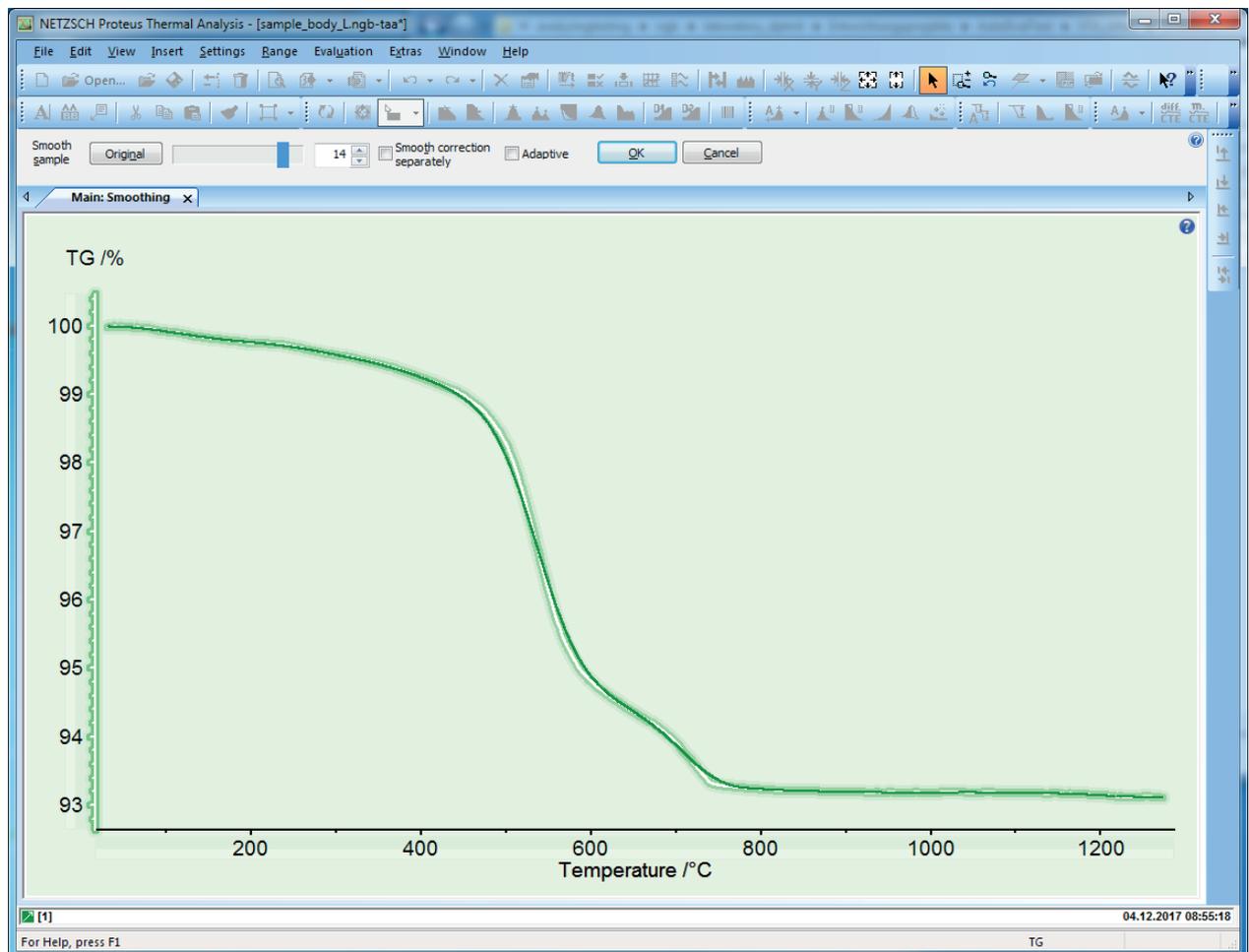
(maximalen) Glättungsfaktoren. Es ist offensichtlich, dass der angewandte Glättungsfaktor beim Adaptiven Glätten flexibel ist – im Gegensatz zum konventionellen Glätten, wo er für alle Datenpunkte konstant ist. Adaptives Glätten kann auch auf DSC-Kurven, die mehrere endo- oder exotherme Effekte zeigen, angewandt werden. Das Signal-/Rauschverhältnis der in Abbildung 3 gezeigten exemplarischen Daten wird durch Adaptives Glätten um eine Größenordnung verbessert.



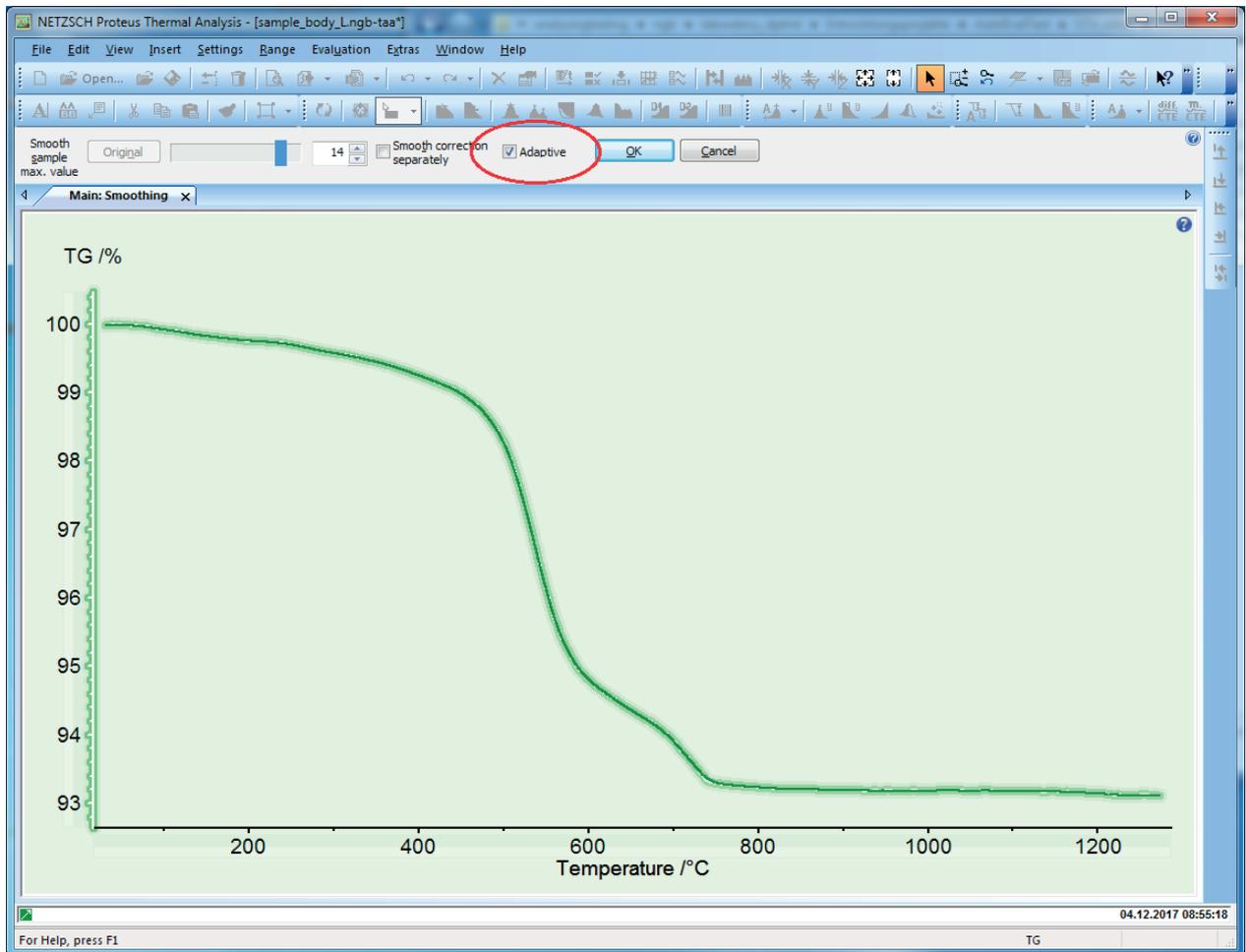
3 Adaptives Glätten von DSC-Daten in der *Proteus*®-Analysesoftware mit maximalem Glättungsfaktor 12. Die weiße Kurve stellt die Original-DSC-Daten, die blaue Kurve die geglätteten DSC-Daten dar (siehe Text).

Abbildungen 4a und 4b illustrieren, dass Adaptives Glätten auch auf TG-Signale angewandt werden kann, die von TG- oder STA-Geräten stammen können. Im Fall von konventionellem Glätten bei hohem Glättungsfaktor (siehe Abbildung 4a) sind die Massenverluststufen verfälscht – im Gegensatz zu den Kurven, bei denen Adaptives Glätten verwendet wurde (siehe Abbildung 4b).

Adaptives Glätten reduziert den Glättungsfaktor während signifikanter Massenänderungen, wohingegen in Bereichen, in denen keine Massenänderungen auftreten, der maximale Glättungsfaktor angewandt wird. Adaptives Glätten erlaubt auch hier maximale Glättungsfaktoren, die im Fall von konventioneller Glättung meist nicht empfohlen werden.



4a Konventionelles Glätten von TG in der *Proteus*®-Analysesoftware mit Glättungsfaktor 14. Die weiße Kurve stellt die Original-DSC-Daten, die grüne Kurve die geglätteten TG-Daten dar (siehe Text).



4b Adaptive Glätten von TG in der Proteus®-Analysesoftware mit maximalem Glättungsfaktor 14. Die weiße Kurve stellt die Original-TG-Daten, die grüne Kurve die geglätteten TG-Daten dar (siehe Text).

Zusammenfassung

Das neuartige Adaptive Glätten passt den Glättungsfaktor innerhalb einer Messung automatisch an, sodass

DSC-Peaks oder Massenänderungen (detektiert mittels TG) nicht verfälscht werden – selbst bei Verwendung hoher maximaler Glättungsfaktoren.