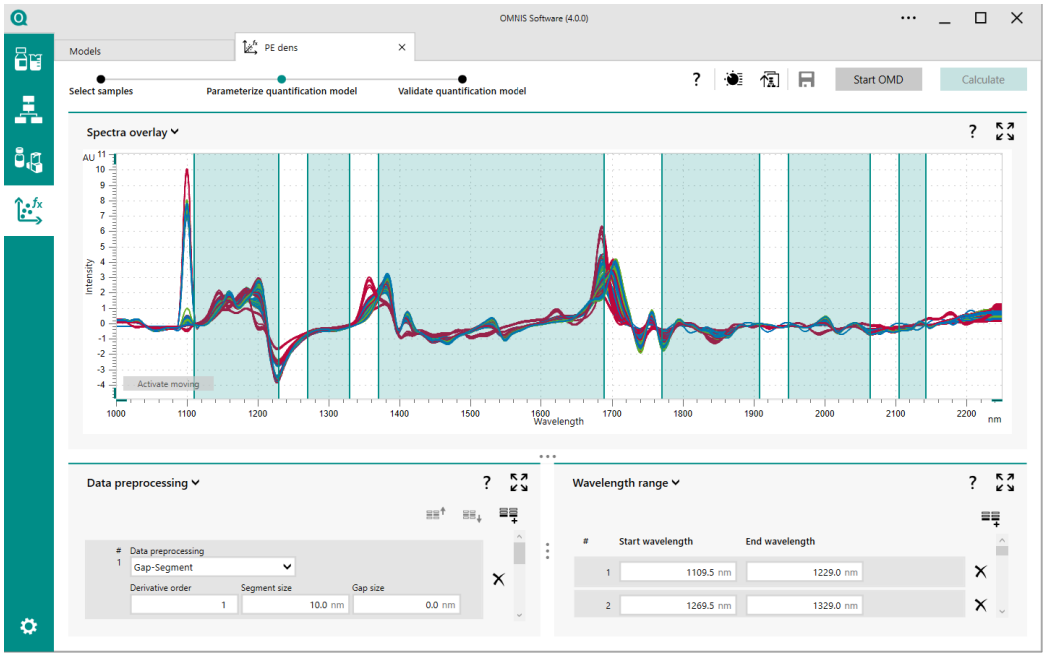
OMNIS NIR (Lab)



OMNIS 光谱分步说明

教程

8.0600.8202CN / v7 / 2026-02-17

Metrohm

Metrohm AG
Ionenstrasse
CH-9100 Herisau
Switzerland
+41 71 353 85 85
info@metrohm.com
www.metrohm.com

OMNIS NIR (Lab)

OMNIS Software 版本 4.7

教程

8.0600.8202CN / v7 /
2026-02-17

Technical Communication
Metrohm AG
CH-9100 Herisau

本文献受版权保护。本公司保留所有权利。

本文献为原件。

本文献经认真起草制定。但并不能完全排除会有错误存在。若有此类提示请联系上述地址。

免责条款

并非 Metrohm 造成的故障情况，例如不按规定储存、不按规定使用等，则不属于保修范围。擅自变更产品（比如改装或加装）会排除生产厂家对由此造成的损失及其后果的责任。要严格遵守 Metrohm 产品文档中的说明和注意事项。否则排除 Metrohm 的责任。

目录

1 概览 1

1.1 引言 1

1.2 文献说明 1

1.3 OMNIS 许可证 1

1.4 用户权限 2

1.5 详细信息 2

2 关于 OMNIS Software 的简要概览 3

2.1 结构与功能 3

2.1.1 工作区 3

2.1.2 选项卡和子区域 3

2.1.3 样品工作区 5

2.1.4 进程工作区 6

2.1.5 设备工作区 7

2.1.6 校正和评估工作区 8

2.2 实用性引言 9

2.3 OMNIS 命令 15

2.3.1 光谱记录 16

2.3.2 预测 17

2.3.3 计算和统计 20

2.3.4 波长校正 21

2.3.5 仪器性能测试 22

2.4 预留与共享仪器 23

2.5 温度调节（Liquid Sample Presentation） 24

3 准备仪器 26

3.1 创建工作系统 26

3.2 波长校正 27

3.2.1 准备波长校正 27

3.2.2 启动波长校正 31

3.3 仪器性能测试 33

3.3.1 准备内部仪器性能测试 33

3.3.2 执行内部仪器性能测试 37

3.3.3 外部仪器性能测试（可选） 39

4 准备模型开发 41

4.1 准备光谱记录 42

4.2 记录光谱 51

5 量化模型 56

5.1 创建量化模型 ... 56

5.2 自动模型开发 – OMD ... 58

5.3 手动开发模型 ... 60

5.3.1 选择样品并划分数据组 ... 60

5.3.2 计算量化模型 ... 65

5.3.3 校验量化模型 ... 66

5.3.4 参数设置量化模型 ... 71

5.4 发布量化模型 ... 78

5.5 斜率/y 轴截距纠正 ... 79

6 识别模型 86

6.1 生成识别模型 ... 86

6.2 选择样品并划分数据组 ... 87

6.3 计算识别模型 ... 93

6.4 校验识别模型 ... 93

6.5 设置识别模型的参数 ... 95

6.5.1 波长选择 ... 96

6.5.2 数据预处理 ... 98

6.6 发布识别模型 ... 99

7 定性模型 101

7.1 创建定性模型 ... 101

7.2 选择样品并划分数据组 ... 102

7.3 计算定性模型 ... 108

7.4 校验定性模型 ... 108

7.5 定性模型参数设置 ... 109

7.5.1 波长选择 ... 110

7.5.2 数据预处理 ... 112

7.6 发布定性模型 ... 113

8 模型层级 114

8.1 开发模型层级 ... 115

8.1.1 开发模型 ... 115

8.1.2 将模型插入模型层级 ... 116

8.2 验证模型层级 ... 122

8.3 发布模型层级 ... 123

9 预测 **125**

9.1 准备预测 **125**

9.1.1 多个感兴趣的参数（量化） 131

9.2 开始预测 **132**

9.3 预测结果 **135**

10 测试和保养间隔时间 **138**

10.1 仪器性能测试 **138**

10.2 波长校正 **139**

10.3 仪器保养 **139**

11 附录 **140**

11.1 报告 **140**

11.2 处理表格 **140**

11.3 处理图表 **141**

11.4 PREDICT 命令变量 **144**

11.4.1 模型层级 - 量化模型的索引 148

11.5 导出和导入模型 **149**

11.6 更换 XDS/DS Analyzer（量化） **150**

11.7 OMNIS NIR Analyzer 工作流程 **153**

1 概览

1.1 引言

本教程介绍 **OMNIS NIR Analyzer** 产品系列仪器的操作，基于 OMNIS Software 版本 4.7。

本教程提供了 OMNIS Software 的简要概览，并介绍了仪器设置、模型开发和预测。

1.2 文献说明

文献中可能出现的图示：

(**1**)	参考图中的位置号
1	指导步骤
方法段	参数、菜单项、选项卡和对话框
过程 ▶ 操作过程	菜单路径
[下一步]	按钮或按键
i	有关说明文字的补充信息

1.3 OMNIS 许可证

OMNIS 是一个模块化平台。设备功能和软件模块可自由组合：

- 设备功能以许可证包的形式提供（参见 *Metrohm Knowledge Base*）。
  本教程需要以下功能许可证：
  - 功能许可证 Lab NIR Spectroscopy
- 软件模块可以单独许可和激活（参见 *Metrohm Knowledge Base*）。
  本教程需要以下软件许可证（OMNIS Stand-Alone 的示例）：
  - 软件许可证 OMNIS Stand-Alone
  - 用于开发量化模型：软件许可证 Quant Development
  - 用于开发识别模型和定性模型：软件许可证 Ident Development

i **有关许可证的附加信息可从 *Metrohm Knowledge Base* 或 Metrohm 区域代表处获取。**

1.4 用户权限

如果激活了用户管理，则管理员可以创建新的用户并分配用户权限。用户角色包含一系列的权限并因此简化了权限管理（参见 *Metrohm Knowledge Base*）。

如果激活了用户管理，则需要用户角色 **方法开发者** 或 **实验室主管** 完整执行本教程。

也可以在未激活用户管理的情况下使用 OMNIS Software。

1.5 详细信息

OMNIS 帮助可从 OMNIS Software 或通过浏览器调出。

从 OMNIS Software 调出帮助

- **确定在线访问或离线访问**
  - 在线访问（需要互联网接入）：在标题栏的 ••• 下激活 **Metrohm Knowledge Base** 选项。
  - 离线访问：在标题栏的 ••• 下取消激活 **Metrohm Knowledge Base** 选项。
- **调用帮助的主页**
  - 在标题栏的 ••• 中点击 **帮助**。
  - 或按下 **[F1]** 键。
- **调用上下文相关的帮助**
  - 在相关区域或窗口中点击 **?**。
    注意：离线访问时始终出现主页。

通过浏览器调用帮助

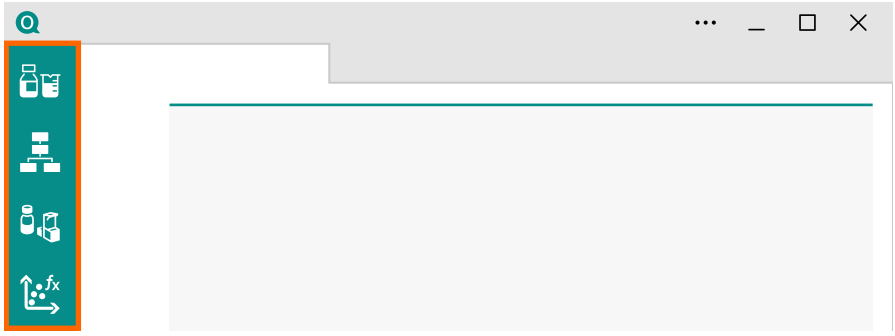
- 调用 *https://guide.metrohm.com/*。
- 点击 **OMNIS Software**。
- 在**版本**筛选器下选择所需的 OMNIS Software 版本。
- 对于最新的 OMNIS Software 版本和长期支持的版本，还有 PDF 帮助文档可用：使用筛选器**信息** ► **发布** ► **手册**。

2 关于 OMNIS Software 的简要概览

2.1 结构与功能

2.1.1 工作区

OMNIS Software 将用户界面分为多个工作区。点击屏幕左侧的图标能够打开相应的工作区。



工作区

	样品 工作区中可以组织样品并分析子样品。
	在 **过程** 工作区中可定义操作过程段和方法段用于样品分析。
	可在 **设备** 工作区中管理仪器和附件。
	可在 **校正和评估** 工作区中开发光谱模型。模型能够实现样品属性的预测。

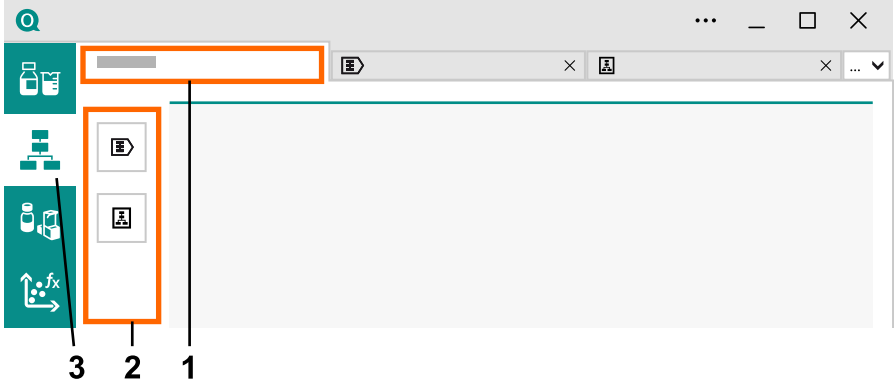
此外，还包含 **设置** 工作区。

根据系统的不同，同样包含 **用户管理** 和 **Audit Trail** 工作区。

2.1.2 选项卡和子区域

工作区包含一个或多个 **选项卡**。每个选项卡都有不同的用途。进程工作区中，选项卡可以实现例如对操作过程段的编辑。

每个工作区都有其特定的选项卡。最左侧的选项卡（**1**）用于组织所选的工作区。从这里可以打开用于执行特定任务的其它选项卡。



工作区分为不同的 **子区域**。最左侧的选项卡（**1**）显示所选工作区（**3**）的子区域（**2**）。

相关子区域

下*图 1* 显示了示意图。样品工作区包含一个样品列表。样品列表包含样品和子样品。每个子样品均分配有一个操作过程段。

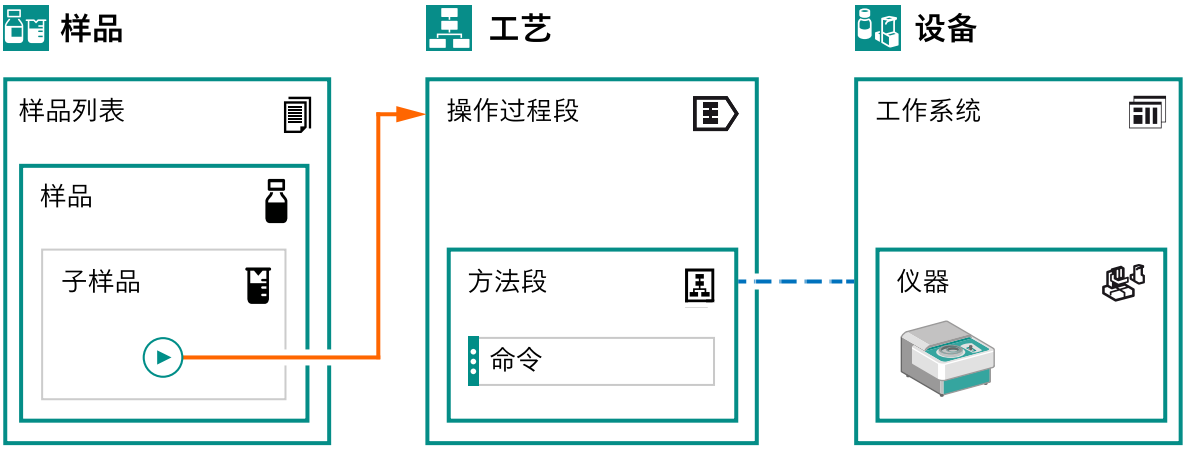


图 1　带相关子区域的 3 个工作区

→	一个子样品能够调用一个操作过程段。
- - - -	该方法段分配有一个工作系统。

如果分析子样品，OMNIS Software 会启动所分配的操作过程段并执行其中包含的方法段和命令。

该方法段分配有一个工作系统。由此可以访问工作系统和其中包含的功能单元。

2.1.3 样品工作区

样品为待分析的物质。一个样品分为一个或多个子样品。

一个**子样品**分配有一个操作过程段。分析子样品时将执行所分配的操作过程段。

一个**样品列表**负责组织样品和子样品。一个样品或子样品可能包含在一个或多个样品列表内。

样品信息格式是用于创建样品的模板。

样品 — 概览

样品 工作区中可以组织样品并分析子样品。

下*图 2* 显示了一个包含子样品的样品列表简化示例。

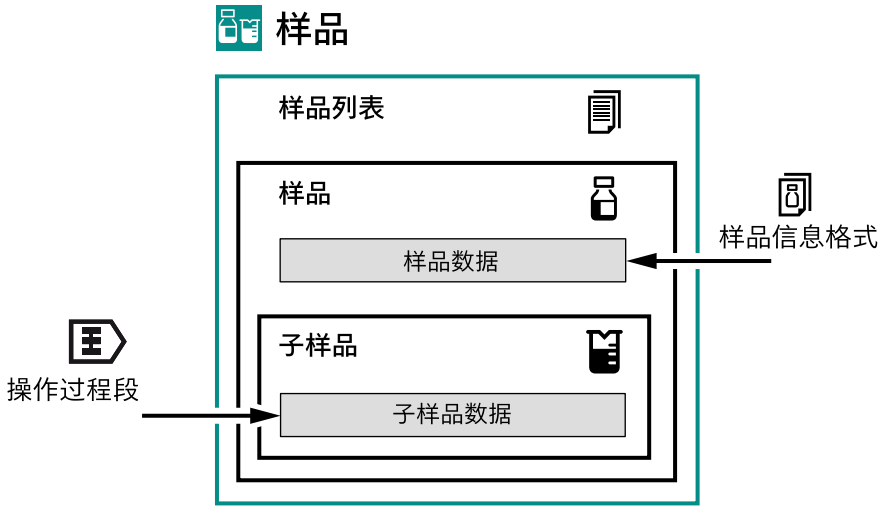


图 2 样品工作区

→ 数据栏规格。

对于样品和子样品可以创建数据栏。例如用于参考值的样品数据或用于分析结果的子样品数据。

图 2 也显示了如何创建数据栏：

- 通过样品信息格式可以设定样品数据。
- 通过操作过程段可以设定用于子样品数据的栏。

数据栏可以手动或自动（例如通过一个命令）填充数据。

样品 — 子区域

样品列表 子区域提供以下功能：

- 创建和管理样品列表。
- 样品列表内：
  - 添加新的样品或子样品。
  - 处理子样品，从而对每个子样品执行所分配的操作过程段。
    操作过程段可执行一个样品分析或一个波长校正。

在**搜索查询**子区域可根据不同标准使用搜索查询筛选数据库中所有的样品和子样品。

筛选标准可以保存为搜索查询。

找到的样品可以全部作为样品列表保存。

样品信息格式在 **样品信息格式** 子区域内对于一系列相似样品定义以下参数：

- 样品数据的结构，例如样品数据栏的数量和类型。
- 样品数据栏的标准值。
- 相当于特定子样品标准数量的一个或多个标准操作过程段。

2.1.4 进程工作区

进程 — 概览

在 **过程** 工作区中可定义操作过程段和方法段用于样品分析。

图 3 显示了进程模块：

- **操作过程**
- **方法**
- **命令**（例如 **MEAS SPEC**）

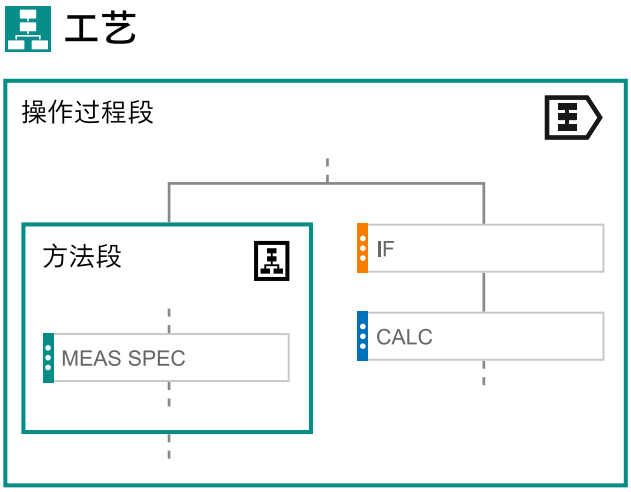


图 3　进程工作区

进程 — 子区域

	在 **操作过程** 子区域中可由方法段和命令组建操作过程段。方法段和命令可以针对顺序或同时执行进行排列。
	在 **方法** 子区域内可以由命令组建方法段。命令可以针对顺序或同时执行排序。 一个方法段可能包含多个用于控制工作系统行为的命令。这些命令将在分配给方法段的工作系统内执行。

2.1.5　设备工作区

设备 — 概览

	可在 **设备** 工作区中管理仪器和附件。

下*图 4* 显示了如何访问仪器：

1. 在 **仪器** 子区域的一个设备清单内列出所有可用的网络和 USB 设备。
2. 通过 **设备清单** 可以预留仪器。用户由此可使用仪器的功能单元。
3. 在 **工作系统** 子区域内可以为工作系统组件所有测定所需的功能单元。

设备

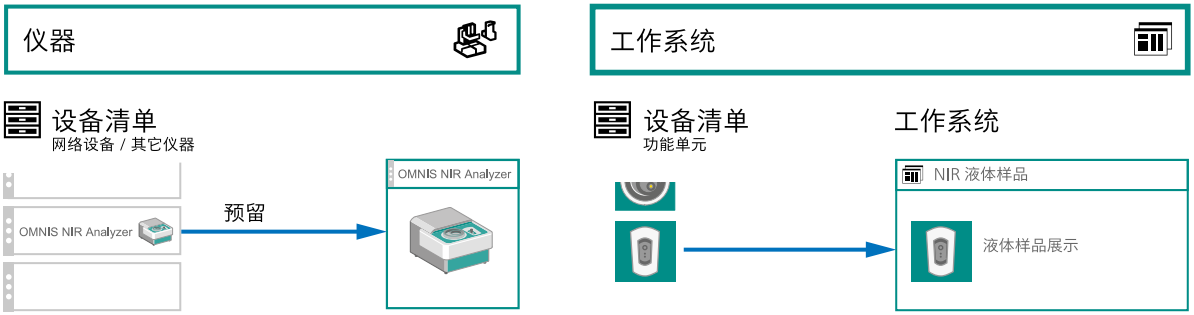


图 4　设备工作区

设备 — 子区域

	可在 **仪器** 子区域下预留并共享设备。若预留了一台仪器，则其功能单元可供用户使用。 分析后可以重新共享仪器，使其他用户也能够访问。
	在 **工作系统** 子区域中可以由一个或多个功能单元组建工作系统。相同功能单元可以包含在多个工作系统内。 分析样品时，一个方法段访问一个工作系统并使用其中包含的功能单元。工作系统可以包含多个方法段。 **注意**：工作系统中的功能单元可以在必要时改变地更换。通过这种方式可以在不同仪器上执行分析，无需更改方法段。

2.1.6　校正和评估工作区

可在 **校正和评估** 工作区中开发光谱模型。模型实现了基于吸收的光谱的样品分析：

- **量化模型**：预测 1 个量化感兴趣的参数（例如水份含量 5.1 %）
- **识别模型**：身份验证或校验样品（例如果糖）
- **定性模型**：定性样品（例如：样品符合规格说明书）

校正和评估 - 概览

	在 **校正和评估** 工作区中可开发模型和模型层级。

工作区包含不同子区域。

校正和评估 - 子区域

	在 **量化模型** 子区域内可以开发量化模型。 量化模型说明了量化感兴趣的参数与记录样品光谱的依赖性。

	在 **斜率/y 轴截距纠正** 子区域中可以创建斜率/y 轴截距校正。这样能够可以在应用特定量化模型时修正系统性错误。系统性错误可能在更改样品或样品处理时发生。
	在 **识别模型** 子区域中，可以开发用于身份验证和样品校验的模型。 识别模型根据不同产品（例如果糖、葡萄糖和乳糖）中记录的光谱来划分样品。
	在 **定性模型** 子区域中，可以开发样品定性的模型。 定性模型根据记录的光谱将样品划分为正（可用）样品和负（不可用）样品。
	在 **模型层级** 子区域中可以开发模型层级： ▪ 如果样品无法通过一个唯一的识别模型来区分，则一个模型层级可以分层级关联多个识别模型。 ▪ 如果要对识别到的样品进行量化分析，模型层级可以将量化模型与产品相关联。 ▪ 如果量化模型需要更精确的结果，可以创建并关联下级量化模型。针对其上级模型的部分参考值范围优化每个这样的下级模型。

2.2 实用性引言

以下引言能够让您对 OMNIS Software 获得初步的了解。

工作区

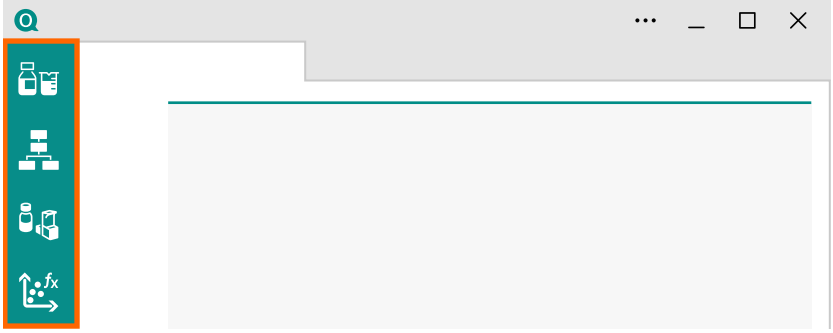
OMNIS Software 将用户界面分为多个工作区。工作区可能有多个子区域。

在本教程中，子区域通过 1 个菜单路径注明。示例：**过程** 工作区中的 **方法** 子区域标有 **过程** ▶ **方法**。

以下显示如何打开一个工作区的此类子区域。

1 打开一个工作区

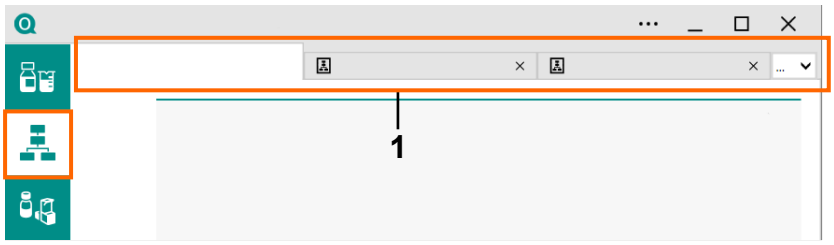
点击屏幕左侧的图标，以便在不同工作区之间切换。



对于以上示例可以通过点击相应的 图标打开 **过程** 工作区。

工具提示

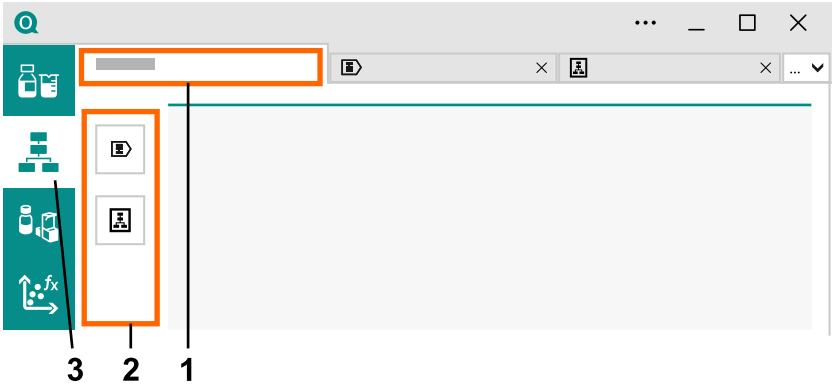
如果将光标放到图标上方，则会显示包含工作区名称、简要说明和其他信息链接的工具提示。以同样的方式，还可显示其他用户界面元素的工具提示。
如需在触摸屏上显示工具提示，请长时间触摸相关元素。



工作区可能包含一个或多个选项卡（**1**）。

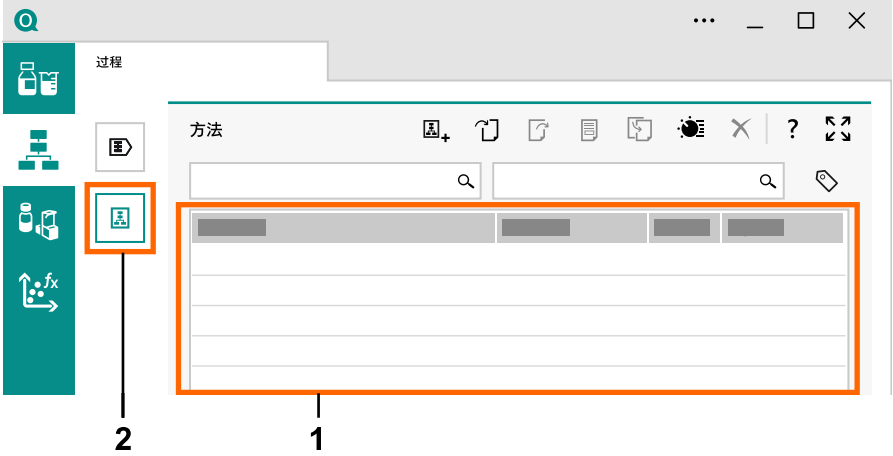
2 打开子区域选项卡

点击最左侧的选项卡（**1**），以便显示所选工作区（**3**）的子区域（**2**）。



3 打开一个子区域

点击 （**2**）打开**方法** 子区域。



方法 子区域包含一个包含所有数据库（**1**）中方法段的概览列表。

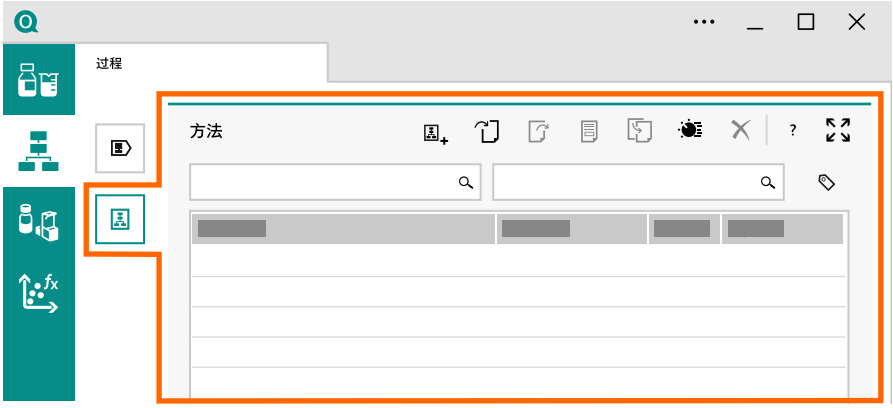
选项卡

如以上第 3 步骤中所示，一个工作区的子区域可能包含一个概览列表。如果打开了列表中的一个条目或一个新条目，则其将在专属的选项卡中显示。

以下对创建一个新方法段进行示例说明。

1 打开方法段子区域

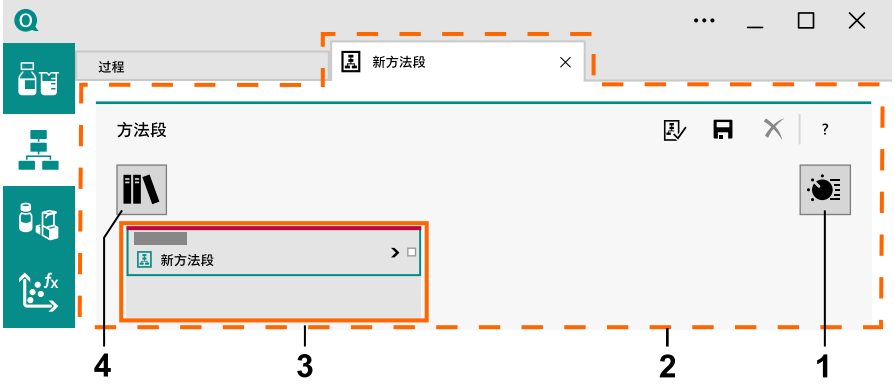
如上述方式打开**过程** ▶ **方法**。



2 创建方法段

- 点击 +。

将显示 1 个名为*新建方法段*（**2**）的新选项卡，可在其中创建方法段（**3**）。



图标（**1**）和（**4**）按以下方式提供访问其它当前隐藏窗口的方式。

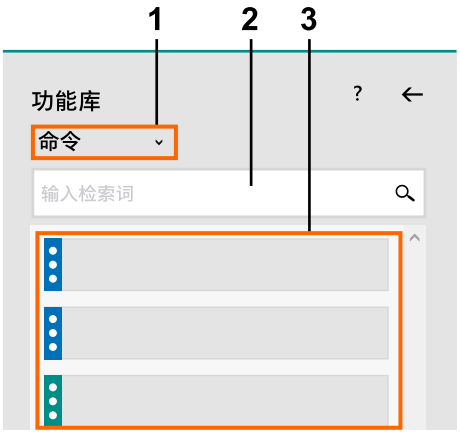
窗口

窗口是一个选项卡的一部分或选项卡中一个区域的一部分。一些窗口可见，另一些则被隐藏并且必须通过一个图标打开。

1 功能库窗口

一个功能库包含可以插入进程的元素。

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
  功能库窗口打开：



功能库窗口包含不同 **子区域**，这些子区域由选项列表（**1**）中选择，例如**功能库** ▶ **命令**。
搜索栏（**2**）能够实现对一个子区域元素的查找，例如查找命令（**3**）。

- 作为示例向方法段中插入 **CALC** 命令：
  - 在 **功能库** ▶ **命令** 下搜索 **CALC** 命令。
  - 通过拖放功能将 **CALC** 命令插入方法段中。

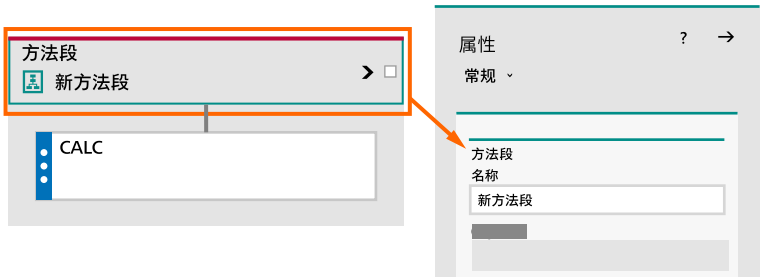
这时方法段中包含一条命令：

如有需要可插入更多命令。上下排列的命令将以连续方式执行。并列排布的命令将以平行方式执行。

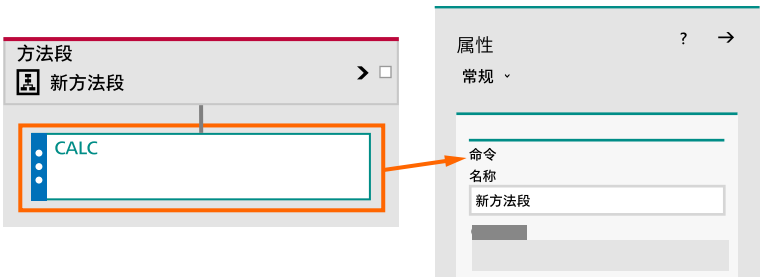
- 点击 ← 关闭功能库窗口。

2 属性窗口

- 点击 打开 **属性** 窗口。
  属性窗口的内容取决于所选的元素：
  - 点击 访问方法属性：



  - 点击 访问命令属性：



  - 双击一个元素打开 **属性** ▶ **参数** 子区域。

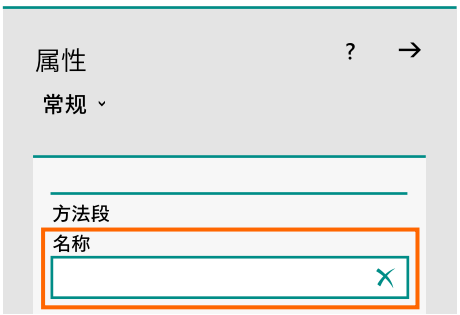
- 点击 → 关闭属性窗口。

引言结束

1 命名方法

- 点击

。
- **属性** ▶ **常规** 打开。
- 输入方法段的名称：



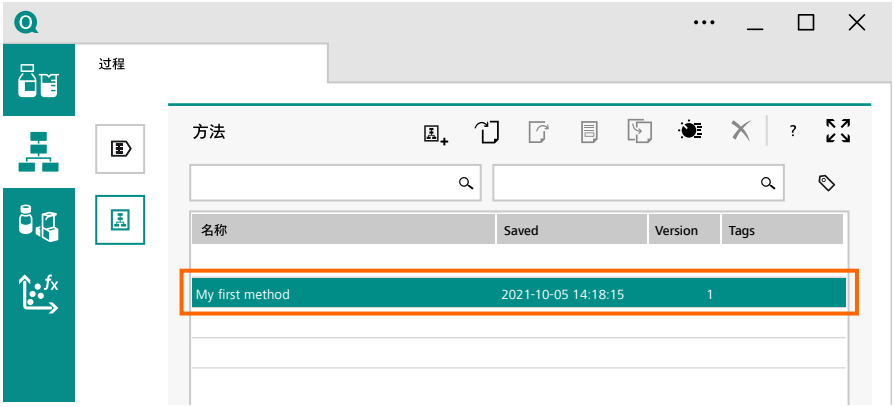
2 保存方法段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键保存方法段。

3 打开概览列表

- 关闭选项卡并切换返回子区域的选项卡（最左侧的选项卡）**过程** ▶ **方法**。

创建的方法段显示在概览列表中：



4 删除方法段

- 选择创建的方法段。
- 点击 删除所选的方法段。
  注意：一旦打开选项卡中的方法段，则无法将其删除。

- 显示确认信息。
  检查须删除方法段的名称。
- 点击 **删除** 确认。

方法段将从数据库和概览列表中删除。

2.3 OMNIS 命令

这些命令执行特定的任务。通过 **MEAS SPEC** 命令记录光谱。**MEAS SPEC** 命令用于方法段中并可以访问分配给方法段的工作系统。

在操作过程段中也可以插入一些命令，例如 **IF** 命令。

命令显示为两行。在第一行中列出命令类型的名称（例如 **MEAS SPEC**），在第二行中列出用户特定的命令名称。

这样可以将标准命令名称（例如：记录光谱 1）更改为一个特定名称。命令的交叉参考将被自动调整。

命令元素的左边缘具有不同的颜色，具体取决于命令的类型：

- 测量命令、校正命令和滴定命令

- 控制方法段流程的结构命令（例如分支和循环）

- 加液命令、自动装置命令及其他命令

命令变量

每个命令具有至少一个命令变量，该命令变量在流程中生成，并可以 '**变量名称**.*命令名称*' 的名称应用在一个公式中。

以下变量可用于所有命令：

'**Finished**.*命令名称*'

命令的状态。

- **无效**：该命令（尚）未启动。
- **0**：该命令仍在运行。
- **1**：该命令已成功结束。
- **2**：该命令未成功结束。出现错误或警告。
- **3**：该命令已通过 **SKIP** 命令或手动在 **实时数据** 中跳过命令。
- **4**：该命令已通过用户手动干预（停止或紧急停止）、**STOP** 命令或由于并行运行的命令出错而停止。

2.3.1 光谱记录

命令名称	说明	生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）
PREP SPEC 用于 **Liquid Sample Presentation** 类型的功能单元	准备液体样品分析： ▪ 确保所使用的样品支架适于指定的样品容器。否则测定已取消。 ▪ 确保使用了一个样品容器。否则将显示一个用于装入样品的要求。 ▪ 实现在样品容器或样品支架处进行温度调节 *（参见章节 2.5，第 24 页）*。	
MEAS REF SPEC	在所分配的功能单元上记录参考光谱。参考光谱保存在仪器上。 每个功能单元有 1 个参考光谱。每次执行 **MEAS REF SPEC** 命令将覆盖之前的参考光谱。 所保存并的参考光谱将被所有在相关功能单元上执行的 **MEAS SPEC** 命令使用。	▪ **Date.Result** 记录参考光谱的时间点。 另外对于 **Liquid Sample Presentation** 类型的功能单元而言： ▪ **TemperatureControlMode.Result** 温度调节位置 – **Inactive**：无温度调节。 – **Sample holder**：温度已在样品支架上调节。 – **Sample vessel**：温度已在样品容器上经过调节。 ▪ **CurrentTemperature.Result** 命令执行期间当前的温度。 单位：°C
MEAS SPEC	在所分配的功能单元上记录一个样品的光谱。 根据 guang'pu 和仪器上保存的用于相关功能单元的参考光谱计算样品的 **吸收光谱**。	用于 **Liquid Sample Presentation** 类型的功能单元： ▪ **TemperatureControlMode.Result** 温度调节位置 – **Inactive**：无温度调节。 – **Sample holder**：温度已在样品支架上调节。 – **Sample vessel**：温度已在样品容器上经过调节。 ▪ **CurrentTemperature.Result** 命令执行期间当前的温度。 单位：°C

命令名称	说明	生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）
VESSEL REMOVAL 用于 **Liquid Sample Presentation** 类型的功能单元	▪ 可以确保取出样品容器。程序段执行将被中止直至取出古样品容器。这样可以实现序列测定时程序段执行受控。 ▪ 如果在样品容器上调节温度，则温度传感器将从样品容器处移开。一旦显示取出样品容器的要求，则可以在不会造成温度传感器损坏的情况下将样品容器取下。 ▪ 温度调节可以取消激活或在样品支架中继续。	

2.3.2 预测

PREDICT – 量化

PREDICT 命令将模型应用于用 **MEAS SPEC** 命令记录的吸收率光谱。

量化模型提供量化感兴趣的参数的预测。可以选择应用斜率/y 轴截距校正。

生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）

- **Predicted.Quantification.Result**
  感兴趣的参数的预测结果。
- **Uncorrected.Quantification.Result**
  不应用斜率/y 轴截距校正的感兴趣的参数的预测值。
- **Unit.Quantification.Result**
  感兴趣的参数的单位。
- **IsOutlier.OutlierDetection.Result**
  注明光谱是否为离群值的评估。
  0：光谱**不**被视作离群值。
  1：光谱被视作离群值（Hotelling T^2 或 Q 检验残差）。
- **HotellingsT2.OutlierDetection.Result**
  光谱的 Hotelling T^2。
- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection.Result**
  用于标识为离群值的 Hotelling T^2 极限值。极限值取决于模型中规定的显著性水平。
- **QResiduals.OutlierDetection.Result**
  光谱的 Q 检验残差。
- **LimitQResiduals.OutlierDetection.Result**
  用于标识为离群值的 Q 检验残差极限值。极限值取决于模型中规定的显著性水平。

- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
  光谱的 Nearest Neighbor Distance（NND） *（参见"发布量化模型"，第 78 页）*。
  如果发布了无 NND 的模型：**无效**
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
  NND 极限值。
  如果发布了无 NND 的模型：**无效**

PREDICT - 身份验证和校验

PREDICT 命令将模型应用于用 **MEAS SPEC** 命令记录的吸收率光谱。

根据具体使用情况，识别模型对未知样品（例如果糖）进行身份验证或对样品的产品关联性进行校验。

生成的命令变量（后缀为 ***.命令名称***）

- **Product.Identification.Result**
  所确定的产品或确定的被识别样品的产品组。
  如果身份验证失败，则不显示结果。
- **Status.Identification.Result**
  - **Identified**：身份验证成功。可以确定一个产品或产品组。
  - **Ambiguous**：身份验证失败。多个产品的概率值超过了该概率阈值。
  - **Unidentified**：身份验证失败。一个产品没有概率值超过了该概率阈值。
- **Probability.Identification.Result**
  - **0.01 至 100**：百分比的概率表示样品数据产品或产品组的可信性。
  - **无效**：身份验证失败。

如果已将模型用于校验：

- **Status.Verification.Result**
  - **1**：校验成功。
  - **0**：校验失败。

PREDICT - 定性

PREDICT 命令将模型应用于用 **MEAS SPEC** 命令记录的吸收率光谱。

定性模型将 1 个样品定性为有效（可用）样品。

生成的命令变量（后缀为 ***.命令名称***）

- **Status.Qualification.Result**
  - **1**：定性成功。
  - **0**：定性失败。

PREDICT – 模型层级

PREDICT 命令将模型层级应用于用 **MEAS SPEC** 命令记录的吸收率光谱。

根据具体使用情况，模型层级对未知样品（例如果糖）进行身份验证或对样品的产品关联性进行校验，或对样品感兴趣的参数进行量化。

生成的命令变量（后缀为*.命令名称*）

- **模型层级（身份验证）**
  - **Product.Identification.Result**
    所确定的产品或确定的被识别样品的产品组。
    如果身份验证失败，则不显示结果。
  - **Status.Identification.Result**
    Identified：身份验证成功。可以识别一个产品或产品组。
    Ambiguous：身份验证失败。多个产品的概率值超过了该概率阈值。
    Unidentified：身份验证失败。一个产品没有概率值超过了该概率阈值。
  - **Probability.Identification.Result**
    0.01 至 100：百分比的概率表示样品数据产品或产品组的可信性。
    无效：身份验证失败。
- **模型层级（校验）**
  - **Status.Verification.Result**
    0：校验失败。
    1：校验成功。

- **模型层级（量化）**
  注意：**x = 量化模型的索引** *（参见章节 11.4.1，第 148 页）*
  如果无法引用量化模型，则以下变量提供*无效*数值。
  - **Predicted.Quantification{x}.Result**
    用于感兴趣的参数的预测终值。
  - **Uncorrected.Quantification{x}.Result**
    不应用斜率/y 轴截距校正的感兴趣的参数的预测值。
  - **Unit.Quantification{x}.Result**
    感兴趣的参数的单位。
  - **ParameterName.Quantification{x}.Result**
    参考参数的名称。
  - **IsOutlier.OutlierDetection{x}.Result**
    注明光谱是否为离群值的评估。
    0：光谱**不**被视作离群值。
    1：光谱被视作离群值（Hotelling T^2 或 Q 检验残差）。
  - **AnyOutlier.OutlierDetection.Result**
    0：没有量化模型将该光谱判定为离群值。
    1：至少有一个量化模型将该光谱判定为离群值（Hotelling T^2 或 Q 检验残差）。
  - **HotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
    光谱的 Hotelling T^2。
  - **LimitHotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
    用于标识为离群值的 Hotelling T^2 极限值。极限值取决于模型中规定的显著性水平。
  - **QResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
    光谱的 Q 检验残差。
  - **LimitQResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
    用于标识为离群值的 Q 检验残差极限值。极限值取决于模型中规定的显著性水平。
  - **NearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
    光谱的 Nearest Neighbor Distance（NND） *（参见"发布量化模型"，第 78 页）*。
    如果发布了无 NND 的模型：**无效**
  - **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
    NND 极限值。
    如果发布了无 NND 的模型：**无效**

2.3.3 计算和统计

命令名称	说明	生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）
CALC	执行计算，例如用于继续处理预测结果。可借助公式编辑器创建公式。	▪ '***结果名称*** 计算的结果值。 注意：'*结果名称*' 可以定义或在命令参数中计算。默认名称为 '*结果 1*'。 ▪ '**MeanValue**.*结果名称*' 利用相同版本的操作过程段和方法测定的所有结果的平均值。 ▪ '**StandardDeviation**.*结果名称*' 绝对标准偏差。计算需要使用最新的子样品数值及所有先前已利用相同版本的操作过程段和方法测定的子样品数值。
EVAL BASE STATISTICS	确定的一个光谱的基础静态数值。可以定义须使用的数据预处理和波长范围。	▪ **Mean.Result** 吸收量数值的平均值。 ▪ **StandardDeviation.Result** 吸收量数值的标准偏差。 ▪ **Minimum.Result** 吸收量数值的最小值。 ▪ **Maximum.Result** 吸收量数值的最大值。 ▪ **First.Result** 第一个吸收量数值 ▪ **Last.Result** 最后一个吸收量数值 ▪ **Integral.Result** 光谱的积分值。
此外，如 IF、LOOP、SKIP、STOP、SYNC 或 WAIT 等结构命令可用。 EXPORT 或 REPORT 命令可以用于创建输出测定数据。		

2.3.4 波长校正

命令名称	说明	生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）
CAL WL	执行仪器的波长校正。 波长校正对波长值进行标准化，例如光谱的 x 轴。	▪ **Date.Result** 执行波长校正的时间点。

命令名称	说明	生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）
VAL WL	校验波长校正。	▪ **Date.Result** 验证波长校正的时间点。 ▪ **OverallStatus.Result** **1**：校验成功。 **2**：校验失败。 ▪ **ExpectedWavelength.Peak{X}** 波峰的预期波长（单位：nm）。 ▪ **MeasuredWavelength.Peak{X}** 波峰 X 的测得波长（单位：nm）。 ▪ **ExpectedBandwidth.Peak{X}** 波峰 X 的预期波动幅度（单位：nm）。 ▪ **MeasuredBandwidth.Peak{X}** 波峰 X 的测得波动幅度（单位：nm）。 ▪ **Index.Peak{X}** 波峰 X 的波峰编号。 示例：'Index.Peak{2}' 表示结果 2。 如果 X 不存在波峰，则上述命令变量表示结果：*无效*

2.3.5 仪器性能测试

命令名称	说明	生成的命令变量（后缀为.*命令名称*）
TEST WL	波长测试检查波长准确度和波长精度。 **内部**（强制性）：使用内部波长标准版。 **外部**（可选）：使用外部波长标准版。	▪ **Date.Result** 执行波长测试的时间点。 ▪ **OverallStatus.Result** **1**：测试成功。 **2**：测试失败。
TEST NOISE	干扰测试检查信号干扰。 **内部**（强制性）：使用所用样品展示的参考路径。 **低通量测试**和**高通量测试**（可选）：使用外部参考标准样品。	▪ **Date.Result** 测试信号噪声的时间点。 ▪ **OverallStatus.Result** **1**：测试成功。 **2**：测试失败。
TEST PHOTOMETRIC LINEARITY	外部的可选测试借助外部参考标准样品检查光度线性度。	▪ **Date.Result** 已测试光度线性的时间。 ▪ **OverallStatus.Result** **1**：测试成功。 **2**：测试失败。

2.4 预留与共享仪器

一个特定仪器只能由 OMNIS 系统使用。

仪器在使用之前必须被预留。一旦仪器预留，则其它 OMNIS 系统无法访问它。

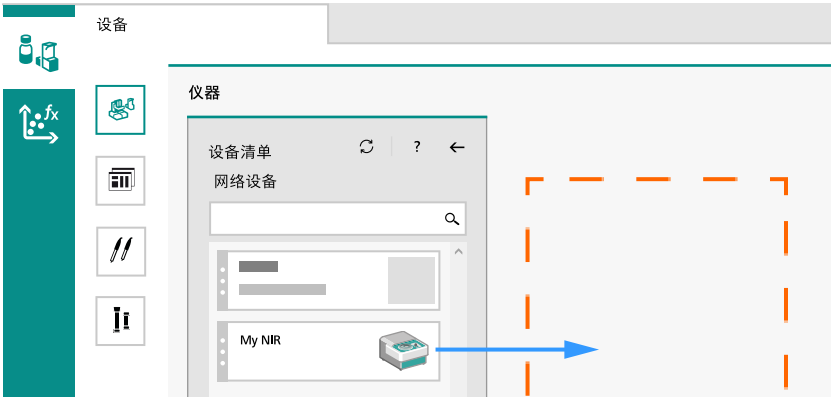
预留仪器

1 搜索可用设备

- **设备** ▶ **仪器** 打开。
- 点击 打开 **设备清单** 窗口。
- 搜索所需的仪器。
  注意：灰显图标的仪器无法使用。

2 预留仪器

使用拖放功能将该仪器放在与其相邻的工作面。



仪器被预留：

仪器旁的 1 个绿色状态指示灯显示可使用该仪器。

必要时可预留更多仪器。

仪器在退出 OMNIS Software 时也会被预留。
仪器在退出 Windows 时才会被共享。一旦重新接通计算机，则将重新预留仪器。是否是相同的用户或另一位用户登录没有区别。

共享仪器

如需长期共享预留仪器，请按照如下方式操作：

1 打开 仪器 子区域

- **设备** ▶ **仪器** 打开。

2 共享仪器

- 选择须共享的仪器。
- 通过点 ✕，移除所选仪器。

仪器将被共享并可重新被其他用户所使用。

2.5 温度调节（Liquid Sample Presentation）

温度调节可选择调节样品支架或样品内的温度。

样品支架中的温度调节

- 支持用于一次性样品瓶、比色皿和流通池的样品支架。
- 样品支架中的目标温度：25 °C 和 80 °C 之间（不低于环境温度 5.0 K）。
- 温度传感器的精确度：< 0.5 K

样品中的温度调节

- 支持一次性样品瓶。
- 样品的目标温度：25 °C 和 80 °C 之间（不低于环境温度 5.0 K）。
- 温度传感器的精确度：< 0.5 K
- 调节算法：
  - 调节算法考虑了样品的定义目标温度以及传感器处测得的温度。一旦样品中模拟的温度达到足够的稳定性，且与目标温度的偏差不超过 0.5 K，就可以开始光谱测量。必要时，光谱测量在装入一次性样品瓶后便开始。
  - 典型的精确度：1.0 K（已在样品温度从 25 °C 至 80 °C 和环境温度为 23 °C 的水样中检测）。

接通温度调节

- 通过一个 **PREP SPEC** 命令（**温度调节** 命令参数)。

- 在手动操作中（仅用于样品支架上的温度调节）：
  - 在 **设备** ▶ **仪器** 下双击预留的仪器打开 **手动操作**。
  - 在 **调节温度** 区域内的 **样品支架目标温度** 输入栏中输入希望的温度并点击 ▶。

关断温度调节

- 通过 **VESSEL REMOVAL** 命令（**取消激活** 选项）。
- 在手动操作时：
  - 在 **设备** ▶ **仪器** 下双击预留的仪器打开 **手动操作**。
  - 在 **调节温度** 区域点击 ■。无论测量样品支架中的温度还是测量样品中的温度，温度调节都可退出。
- 温度调节通常在 2 小时后或通过关断仪器退出非激活状态。

3 准备仪器

在仪器能够记录光谱之前，需要以下准备：

- 必须设置**工作系统**。

然后，以下任务确保光谱可以相互比较：

- **波长校正**校正光谱的 x 轴。
- **仪器性能测试**确保仪器性能满足要求。
  必须定期进行仪器性能测试 *（参见章节 10.1，第 138 页）*。

另外还必须在光谱的 y 轴上标准化吸收量数值。为此，在记录光谱之前均使用 1 个 MEAS REF SPEC 命令。

程序段执行在 OMNIS Software 中的图表说明请参见附录 *（参见“准备仪器”，第 153 页）*。

3.1 创建工作系统

前提：

- 光谱仪已预留 *（参见“预留与共享仪器”，第 23 页）*。

1 创建工作系统

- 在 **设备** ▶ **工作系统** 下点击 ⊞+。

新选项卡打开。

2 命名工作系统

- 选择**新的工作系统**子区域。
  子区域边框为绿色。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入一个合适的名称。

3 插入功能单元

- 点击 打开 **设备清单** 窗口。
- 通过拖放功能操作将 **Liquid Sample Presentation** 或 **Solid Sample Presentation** 功能单元插入到工作系统中。

OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid 类型的仪器提供 2 个功能单元。Metrohm 推荐使用两个功能单元的一个创建独立的工作系统。

功能单元可以从工作系统中重新移除：
- 选择须删除的功能单元。
- 点击 ✕ 或按压 **[Entf]** 键。

必要时可以更改功能单元的名称：
- 选择需更改名称的功能单元。
- 在**属性** ▶ **常规** ▶ **名称**下输入一个适当的名称。

4 保存工作系统

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

一个功能单元可分配给多个工作系统。

一旦创建了工作系统，则可以共享仪器并根据需要重新预留。

3.2 波长校正

波长校正确保了光谱波长值的可对比性。波长校正使用一个内部可追踪的计量学波长标准版。

波长校正分为 2 步：

1. **CAL WL** 命令对波长值进行标准化，例如光谱的 x 轴。
2. **VAL WL** 命令校验波长校正。
   校验必须在能够使用功能单元记录光谱之前成功执行。

OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid 类型的仪器提供 2 个功能单元。波长校正和校验必须对于两个功能单元分别执行。

3.2.1 准备波长校正

首次使用 OMNIS Software 时在继续之前请阅读引言 *（参见"实用性引言"，第 9 页）*。

按照以下指示使用 **CAL WL** 和 **VAL WL** 命令创建方法段。然后创建一个操作过程段、一个样品信息格式和一个样品列表。这样可以以与样品测定相同方式启动波长校正。

创建方法段

1 创建方法段

- 在 **过程** ▶ **方法** 下点击 +。

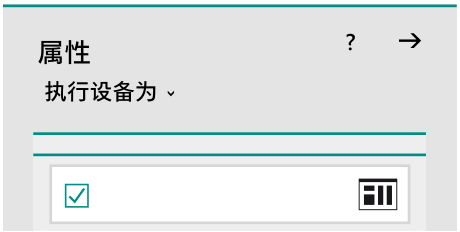
打开包含新创建的方法段和标题为**新建方法段**的选项卡。

2 命名方法

- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入以下名称：**Wavelength Cal/Val**。

3 为方法段分配工作系统

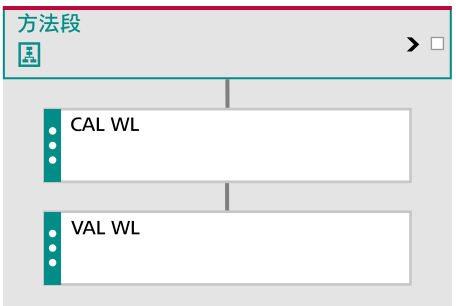
- 在 **属性** ▶ **执行设备为** 中选择须使用的工作系统。



对于该文档中的所有方法段使用相同的工作系统。

4 插入命令

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 在 **功能库** ▶ **命令** 下搜索 **CAL WL** 命令。
- 通过拖放功能将 **CAL WL** 命令插入方法段中。
- 查找 **VAL WL** 命令并将其归类至 **CAL WL** 命令。



命令的顺序很重要。上下排列的命令将以连续方式执行。首先执行 **CAL WL** 命令，然后是 **VAL WL** 命令。

这些命令会自动记录 1 个参考光谱。因此，不需要 **MEAS REF SPEC** 命令。

5 保存方法段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建操作过程段

1 创建操作过程段

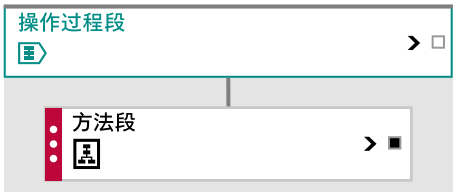
- 点击 然后点击 打开 **过程** ▶ **操作过程**。
- 点击 创建新的操作过程段。

2 操作过程段命名

- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入以下名称：**Wavelength Cal/Val**

3 插入方法

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 通过拖放功能 **功能库** ▶ **方法** 将创建的方法段插入操作过程段。



4 保存操作过程段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建样品信息格式

1 创建样品信息格式

- 在 **样品** ▶ **样品信息格式** 下点击 。

2 命名样品信息格式

- 在 **样品信息格式名称** 栏中输入以下名称：**Wavelength Cal/Val**

3 样品名称的输入栏

样品数据 区域包含一个样品名称栏：

- 输入用于样品名称的 **标准值**。

4 定义操作过程段和子样品数量

- 在 **操作过程 / 子样品** 区域中选择 **Wavelength Cal/Val** 操作过程段。
- **子样品数量** 确定对于每个样品将自动添加多少子样品。输入 **1**。

5 保存样品信息格式

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建样品列表

1 创建样品列表

- 在 **样品** ▶ **样品列表** 下点击 。

2 给样品列表命名

- 在 **名称** 栏中输入以下名称：**Wavelength Cal/Val**

按下 **[Enter]** 确认。

3 保存样品列表

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

样品之后将被添加。

3.2.2 启动波长校正

注意执行间隔时间 *（参见章节 10.2，第 139 页）*。

Metrohm 推荐在接通仪器之后开始波长校正之前等待 1 小时。

启动波长校正

前提：

波长校正已准备就绪 *（参见"准备波长校正"，第 27 页）*。

1 预留仪器

预留光谱仪 *（参见"预留与共享仪器"，第 23 页）*。

2 打开样品列表 'Wavelength Cal/Val'

- 打开**样品**工作区。
- 如果样品列表 **Wavelength Cal/Val** 已关闭，在 **样品** 选项卡中打开 **样品列表** 子区域并双击样品列表 **Wavelength Cal/Val**。

3 选择样品信息格式 'Wavelength Cal/Val'

- 在 + 图标左侧的选项列表内选择样品信息格式 **Wavelength Cal/Val**。

然后，添加的样品将根据规格在选择的样品信息格式创建。

4 添加样品

- 点击 + 将新样品添加至样品列表。

样品列表中显示了一个新条目。该条目包含一个标有 的样品，之后是标有 的子样品。

样品名称	编号	子样品名称
样品 1	1	子样品 1

根据样品信息格式，新的样品 1 包含使用 **Wavelength Cal/Val** 操作过程段的子样品。

- 根据需要编辑样品名称和子样品名称。
- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键保存样品列表。

5 执行波长校正

- 选择已添加的样品。
- 点击 执行波长校正。

  校正结束后，子样品的状态作为 显示。

6 检查结果

- 在右下区域内打开 **结果** ▶ **原始数据**。

校正和校验的结果将被显示。检查校验的整体情况：

整体情况
成功

状态警告：如果校验失败，子样品图标在样品列表中标记为红色：

最近所执行波长校正和波长校验的相关信息可在仪器属性中查看：

- 在 **设备** ▶ **仪器** 下选择预留的仪器。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- **特征数据** ▶ **校正数据和测试数据**

VAL WL 命令变量 **OverallStatus.Result** 显示校验的整体情况：
1：校验成功。
2：校验失败。

3.3 仪器性能测试

内部和外部仪器性能测试可用：

- **内部仪器性能测试（强制性）**
  内部仪器性能测试必须在能够使用相应功能单元记录光谱之前成功进行。
  - 波长测试通过 **TEST WL** 命令检查波长准确度和波长精度。波长测试使用内部可追踪的计量学波长标准版。
  - 干扰测试通过 **TEST NOISE** 命令检查光度噪声干扰、波峰对波峰干扰和干扰的基线偏差。
- **外部仪器性能测试（可选）**
  外部仪器性能测试支持根据例如 USP <856>、Ph.Eur 2.2.40 和 JP 2.27 等药典进行校验。使用以下命令：**TEST WL**（波长准确度和波长精度）、**TEST NOISE**（光度噪声干扰、波峰对波峰干扰和低和高光强度下干扰的基线偏差）和 **TEST PHOTOMETRIC LINEARITY**（光度线性）。
  这些外部仪器性能测试需要外部可追踪的计量学参考标准样品*（参见章节 3.3.3，第 39 页）*。

3.3.1 准备内部仪器性能测试

按照以下指示使用 **TEST WL** 和 **TEST NOISE** 命令创建方法段。然后创建一个操作过程段、一个样品信息格式和一个样品列表。这样可以以如同样品测定相同的方式启动仪器性能测试。

创建方法

1 创建方法段

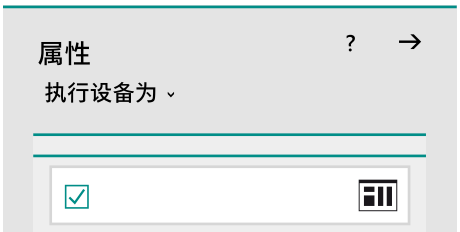
- 在 **过程** ▶ **方法** 下点击 。

2 命名方法

- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下的 **名称** 栏内输入以下名称：**仪器性能测试**。

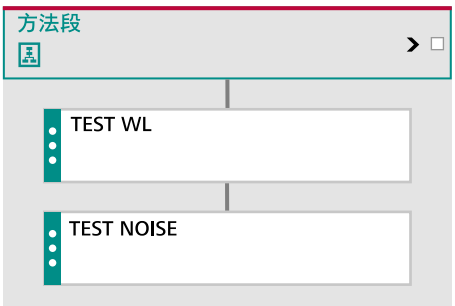
3 为方法段分配工作系统

- 在 **属性** ▶ **执行设备为** 中选择须使用的工作系统。



4 插入命令

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 在 **功能库** ▶ **命令** 下搜索 **TEST WL** 命令。
- 通过拖放功能将 **TEST WL** 命令插入方法段中。
- 查找 **TEST NOISE** 命令并将其归类至 **TEST WL** 命令。



这些命令会自动记录 1 个参考光谱。因此，不需要 **MEAS REF SPEC** 命令。

仪器性能测试根据样品展示使用相应的参考路径。波长测试使用内部可追踪的计量学波长标准版。
这些外部仪器性能测试（可选）需要外部参考标准样品 *（参见章节 3.3.3，第 39 页）*。

5 保存方法段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建操作过程段

1 创建操作过程段

- 在 **过程** ▶ **操作过程** 下点击 。

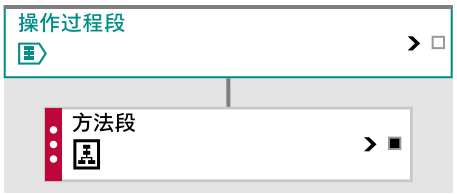
2 操作过程段命名

- 点击 打开 **属性** 窗口。

- 在 **属性** ▶ **常规** 下的 **名称** 栏内输入以下名称：**仪器性能测试**

3 插入方法

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 通过拖放功能 **功能库** ▶ **方法** 将创建的方法段插入操作过程段。



4 保存操作过程段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建样品信息格式

1 创建样品信息格式

- 在 **样品** ▶ **样品信息格式** 下点击 。

2 命名样品信息格式

- 在 **样品信息格式名称** 栏内输入以下名称：**仪器性能测试**。

3 样品名称的输入栏

样品数据 区域包含一个样品名称栏：

- 输入用于样品名称的 **标准值**。

4 **定义操作过程段和子样品数量**

- 在 **操作过程 / 子样品** 区域中选择创建的 **仪器性能测试** 操作过程段。
- **子样品数量** 确定对于每个样品将自动添加多少子样品。输入 **1**。

5 **保存样品信息格式**

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建样品列表

1 **创建样品列表**

- 在 **样品** ▶ **样品列表** 下点击 。

2 **给样品列表命名**

- 在 **名称** 栏内输入以下名称：**仪器性能测试**。

按下 **[Enter]** 确认。

3 保存样品列表

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

样品之后将被添加。

3.3.2 执行内部仪器性能测试

注意建议的执行间隔时间 *（参见章节 10.1，第 138 页）*。

执行仪器性能测试

前提：

仪器性能测试已准备就绪 *（参见"准备内部仪器性能测试"，第 33 页）*。

1 预留仪器

预留光谱仪 *（参见"预留与共享仪器"，第 23 页）*。

2 打开样品列表'仪器性能测试'

- 打开**样品**工作区。
- 如果已关闭 **仪器性能测试** 样品列表，则请在 **样品** 选项卡内打开 **样品列表** 子区域并双击 **仪器性能测试** 样品列表。

3 选择'仪器性能测试'样品信息格式

- 在 + 图标左侧的选项列表中选择 **仪器性能测试** 样品信息格式。

然后，添加的样品将根据规格在选择的样品信息格式创建。

4 添加样品

- 点击 + 将新样品添加至样品列表。

样品列表中显示了一个新条目。该条目包含一个标有 的样品，之后是标有 的子样品。

根据样品信息格式，新的样品 1 包含用于 **仪器性能测试** 操作过程段的子样品。

- 根据需要编辑样品名称和子样品名称。
- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键保存样品列表。

5 执行仪器性能测试

- 选择执行仪器性能测试的样品。
- 点击 开始测试。

仪器性能测试结束后，子样品的状态显示为 。

6 检查结果

- 在右下区域内打开 **结果** ▶ **原始数据**。

波长测试的结果和干扰测试将被显示。检查两个测试的整体情况：

整体情况
成功

状态警告：如果仪器性能测试失败，子样品图标在样品列表中标记为红色：

最近所执行仪器性能测试的相关信息可在仪器属性中查看：

- 在 **设备** ▶ **仪器** 下选择预留的仪器。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- **特征数据** ▶ **校正数据和测试数据**

TEST WL 和 **TEST NOISE** 命令的变量 **OverallStatus.Result** 显示测试的相应整体情况：

1：测试成功。

2：测试失败。

遵守测试失败时采取的错误排除步骤 *（参见章节 10.1，第 138 页）*。

3.3.3 外部仪器性能测试（可选）

外部仪器性能测试支持根据例如 USP <856>、Ph.Eur 2.2.40 和 JP 2.27 等药典进行校验。需要外部可追踪的计量学参考标准样品。对于每个外部参考标准样品，必须将相应的 OMNIS 标准样品文件（*.ostd）导入 OMNIS Software（参见 *Metrohm Knowledge Base*）。

为了可相互独立地执行内部和外部仪器性能测试：

- 创建单独的方法段、操作过程段和样品信息格式。
- 对于外部仪器性能测试，可参照内部仪器性能测试的操作步骤进行，但需进行以下修改和补充。

这些命令会自动记录 1 个参考光谱。因此，不需要 MEAS REF SPEC 命令。

TEST WL

- 在方法段中插入和选择 **TEST WL** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在**属性** ▶ **参数** ▶ **测量参数**下输入测量参数：
  - 选择测量模式 **外部**。
  - **Liquid Sample Presentation**：选择标准 **WL Standard Transmission OMNIS NIR**。
  - **Solid Sample Presentation**：选择标准 **WL Standard Reflection OMNIS NIR**。

TEST NOISE – 低通量测试

- 在方法段中插入和选择 **TEST NOISE** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在**属性** ▶ **参数** ▶ **测量参数**下输入测量参数：
  - 选择测量模式 **低通量测试**。
  - **Liquid Sample Presentation**：选择标准 **ND Standard Transmission 4 (OD 1.0) OMNIS NIR**。
  - **Solid Sample Presentation**：选择标准 **ND Standard Reflection 2 (R10) OMNIS NIR**。

TEST NOISE – 高通量测试

- 在方法段中插入和选择另一个 **TEST NOISE** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在**属性** ▶ **参数** ▶ **测量参数**下输入测量参数：
  - 选择测量模式 **高通量测试**。
  - **Liquid Sample Presentation**：选择标准 **ND Standard Transmission 0 (OD 0) OMNIS NIR**。
  - **Solid Sample Presentation**：选择标准 **ND Standard Reflection 5 (R99) OMNIS NIR**。

TEST PHOTOMETRIC LINEARITY

- 在方法段中插入和选择 **TEST PHOTOMETRIC LINEARITY** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **参数** ▶ **测量参数** 下输入参考标准样品：
  - **Liquid Sample Presentation**:
    ND Standard Transmission 1 (OD 0.1) OMNIS NIR
    ND Standard Transmission 2 (OD 0.3) OMNIS NIR
    ND Standard Transmission 3 (OD 0.6) OMNIS NIR
    ND Standard Transmission 4 (OD 1.0) OMNIS NIR
    ND Standard Transmission 5 (OD 1.7) OMNIS NIR
  - **Solid Sample Presentation**:
    ND Standard Reflection 1 (R05) OMNIS NIR
    ND Standard Reflection 2 (R10) OMNIS NIR
    ND Standard Reflection 3 (R40) OMNIS NIR
    ND Standard Reflection 4 (R80) OMNIS NIR
    ND Standard Reflection 5 (R99) OMNIS NIR

执行外部仪器性能测试

注意建议的执行间隔时间 *（参见章节 10.1，第 138 页）*。

可参照内部仪器性能测试的操作步骤进行测试。请遵循 **曲线和数据** ▶ **实时数据** 区域中的说明放置参考标准样品。

注意

错误的标准样品

如果放置的标准样品与相应命令中选择的标准样品不一致，则测试结果有误。

- **所放置标准样品的序列号必须与 曲线和数据 ▶ 实时数据 区域中所显示的序列号一致。**

4 准备模型开发

通过 **Liquid Sample Presentation** 类型的功能单元可以开发用于液体样品的模型。通过 **Solid Sample Presentation** 类型的功能单元可以对固体物质样品开发模型。

模型开发从收集校正样品和校验样品开始。

收集样品

谨慎收集样品用于开发模型：

- 样品应考虑典型、未来预计的样品变量以及季节性波动或环境条件。
- 样品应在整个变异宽度均匀分布。
- 首选分开收集用于校正和校验的样品集。
- 所有样品应以相同方式处理。

量化

Metrohm 推荐至少采用约 50 件样品或对于第一个模型采用约 20 件样品。需要考虑的条件、化学组分或颗粒大小变化越大，越需要更多的样品。

1. 对于每件样品都将记录光谱。
2. 对于每件样品将通过参考方法段测量感兴趣的参数的参考值，例如通过滴定。
   对于特定感兴趣的参数，如果每个样品具有多个参考值，应为每个样品计算参考值的算术平均值。平均值用作相关样品的参考值。每个平均值应由相同数量的参考值组成。在这种情况下，模型品质指标是以相对于特定数量的参考测量值来表示的。

如果参考测量时不更改或损坏样品，则测量也可以按照相反顺序进行。

身份验证

对于每件产品，样品都必须覆盖所期待的变量。产品与样品的数量可能不同，最小数量为 3 件。

- 对于每件样品都将记录光谱。
- 样品的身份必须明确。

定性

校准样品必须覆盖所预期的变异。校准数据集中的样品最小数量为 3 个。

可选择性地将校验样品分配给有效校验数据集或无效校验数据集。

- 对于每件样品都将记录光谱。

工作流

过程在 OMNIS Software 中的图表说明请参见附录：

- 记录校正样品的光谱 *（参见"记录校正样品的光谱"，第 155 页）*
- 获取参考值或产品名称 *（参见"获取参考值或产品名称"，第 154 页）*

4.1 准备光谱记录

每个校正样品和验证样品的光谱都必须记录。

对于每件样品记录光谱的数量仅为 1 个。对于不均匀固体物质使用 **多点测量** 选项（见下）。

对于光谱记录的准备请按如下方式创建一个方法段、一个操作过程段、一个样品信息格式和一个样品列表。

创建方法段

前提：

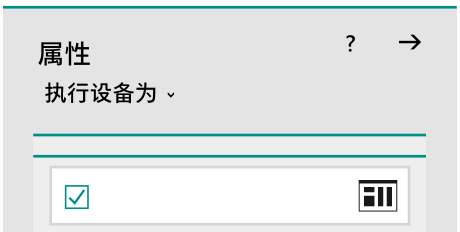
已创建一个合适的工作系统 *（参见"创建工作系统"，第 26 页）*。

1 创建和命名方法段

- 在 **过程** ▶ **方法** 下点击 +。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入一个合适的名称。

2 分配工作系统

- 在 **属性** ▶ **执行设备为** 中选择须使用的工作系统：
  - 对液体样品选择一个包含 **Liquid Sample Presentation** 类型功能单元的工作系统。
  - 对固体物质样品选择一个包含 **Solid Sample Presentation** 类型功能单元的工作系统。



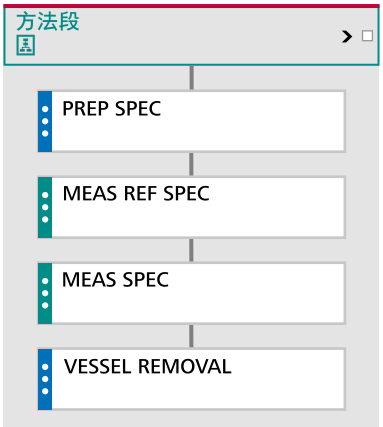
3 插入命令

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 在**功能库** ▶ **命令**下搜索以下命令并使用拖放功能插入到方法段中：
  - 仅液体样品展示：**PREP SPEC** 准备液体样品的分析。
  - **MEAS REF SPEC** 记录参考光谱。
  - **MEAS SPEC** 记录一个样品的光谱。
  - 仅用于液体样品展示：**VESSEL REMOVAL** 用于在受控方式下从液体样品展示的样品支架中取下样品容器。

注意命令的正确顺序：

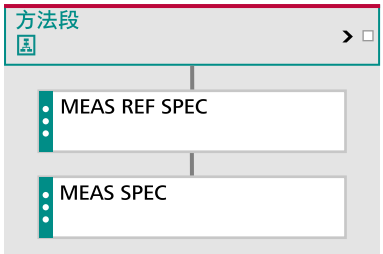
液态样品

基础结构



固体物质样品

基础结构



根据参考光谱和记录的样品光谱计算样品的吸收率光谱。

每个功能单元仅包含 1 个参考光谱。每次执行 **MEAS REF SPEC** 命令覆盖之前的参考光谱。
因此，**MEAS SPEC** 命令总是使用相应功能单元最后记录的参考光谱。

Metrohm 推荐在 **属性** ▶ **常规** 下为每个命令赋予具有说服力的名称。

4 配置 MEAS SPEC 命令参数（仅适于固体物质样品展示）

- 选择 **MEAS SPEC** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。

- 在**属性** ▶ **参数** ▶ **测量参数**下输入测量参数：
  - 选择用于样品测量的支架。
  - 选择用于样品测量的样品容器。
  - 选择测量模式：
    单点测量 用于均匀的固体物质。仪器在一个位置上执行一次测量。样品支架不旋转。
    多点测量 用于不均匀固体物质。有以下两个模式可用：
    (a) **五点测量**：仪器在 5 个不同的位置上执行测量。每次测量之后，样品支架旋转至下一个位置。
    (b) **连续测量**：仪器在样品支架旋转的过程中连续测量。

5 配置 PREP SPEC 命令参数（仅用于液体样品展示）

PREP SPEC 命令可实现温度调节。样品（仅对于一次性样品瓶）或样品支架的温度可以调节为 25 °C 至 80 °C 之间的一个数值 *（参见章节 2.5，第 24 页）*。

PREP SPEC 命令确保所使用的样品支架符合指定的样品容器。否则测定已取消。

如果样品容器识别发现未装入样品容器，则会显示装入样品的要求。

对于样品容器型号 流通池，样品容器识别未激活。

- 选择 **PREP SPEC** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
  打开 **参数** 子区域。
  - 在 **样品容器** 下选择所使用的类型或样品容器的准确名称。
  - 在 **温度调节** 下接通或关断温度调节装置。否则须指定温度调节的位置和目标温度。选择用于样品温度调节的 **样品容器** 选项。
    注意：目标温度最高允许低于环境温度 5.0 K。
  - 如果要求，请选择相关的 **VESSEL REMOVAL** 命令。

注意
温度传感器受损
一旦在样品容器处调节温度，则温度传感器与样品容器直接接触。为了不损坏温度传感器，在取下样品容器之前必须将温度传感器移离样品容器。该操作由 VESSEL REMOVAL 命令完成。

6 配置 VESSEL REMOVAL 命令参数（仅用于液体样品展示）

VESSEL REMOVAL 命令可以确保取出样品容器。程序段执行将被中止直至取出古样品容器。这样可以实现序列测定时程序段执行受控。

如果在样品容器上调节温度，则温度传感器将从样品容器处移开。一旦显示取出样品容器的要求，则可以在不会造成温度传感器损坏的情况下将样品容器取下。

温度调节可以取消激活或在样品支架中继续。

- 选择 **VESSEL REMOVAL** 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
  打开 **参数** 子区域。
  - 激活**确保取出样品容器**选项。该操作将中断进程并要求用户从样品支架中取出样品容器。一旦取出样品，则流程将继续。
  - 激活用于 **样品支架温度调节** 参数的 **继续** 选项。这样将继续已有的样品支架温度调节，无关温度调节之前的位置。

7 保存方法段

- 通过点击 校验方法段。
- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键保存方法段。

创建操作过程段

1 创建操作过程段

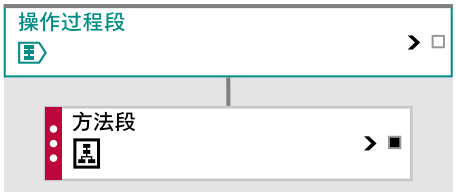
- 在 **过程** ▶ **操作过程** 下点击 。

2 操作过程段命名

- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入一个合适的名称。

3 插入方法

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 通过拖放功能 **功能库** ▶ **方法** 将创建的方法段插入操作过程段。



4 保存操作过程段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

创建样品信息格式

1 创建并命名样品信息格式

- 在 **样品** ▶ **样品信息格式** 下点击 。
- 在 **样品信息格式的名称样品信息格式的名称** 栏中输入一个适当的名称。

2 样品名称的输入栏

样品数据 区域包含一个样品名称栏：

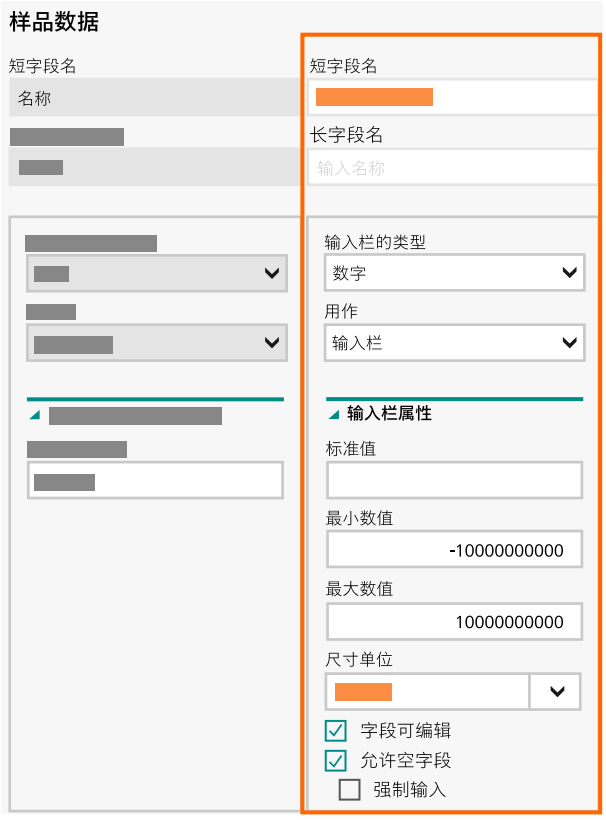
- 输入用于样品名称的 **标准值**。

3 用于量化：增加参考参数输入栏

仅样品数据可以用作参考参数，而非子样品数据。

- 点击 将输入栏增加至 **样品数据** 区域。
  在右侧新增输入栏。
- **短字段名**：输入用作样品列表中的列标题的名称。
- **长字段名**：可选择输入用作报告中的名称。
  注意： 如果 **长字段名** 栏为空，则将在报告中使用 **短字段名** 栏中的名称。
- **输入栏类型**: **数字**.

- **应用为**: **输入栏**
- **输入栏属性** 部分中:
  - 激活 **允许有空字段** 复选框。
    取消激活 **强制输入** 复选框。
  - 保持 **标准值** 栏的空白状态。
  - 输入其中注明了参考参数的 **单位**。
  - 可选更改用于输入栏的 **最小值** 和 **最大值**。
  - 必须激活该 **可编辑字段** 复选框，这样可编辑输入栏。



多个参考参数
如果必须预测一个以上感兴趣的参数，则要为每个参考参数增加一个单独的输入栏 *（参见"多个感兴趣的参数（量化）"，第 131 页）*。

右键点击删除 短字段名 输入栏并在上下文菜单中选择 [删除输入栏]。

4 对于身份验证和验证：添加产品参数的输入栏

仅样品数据可以用作产品参数，而非子样品数据。

- 点击 将输入栏增加至 **样品数据** 区域。
  在右侧新增输入栏。

- **短字段名**：输入用作样品列表中的列标题的名称。
- **长字段名**：可选择输入用作报告中的名称。
  注意：如果 **长字段名** 栏为空，则将在报告中使用 **短字段名** 栏中的名称。

产品名称可在样品列表中作为文本或列表选项输入。如果以后执行校验，请使用列表选择。

在文本框中写入产品名称：

- **输入栏类型**: **文本**.
- **应用为**: **产品**
- 根据需要填写 **输入栏属性** 部分。

从列表中选择产品名称：

- **输入栏类型**: **选项列表**.
- **应用为**: **产品**
- 在 **输入栏属性** 部分中从一个模型中选择或手动增加产品名称：
  - **选择元素**：点击 **选择元素**。选择识别模型或模型层级。点击 **选择** 应用模型中的产品名称。
  - **手动增加元素**：在 **列表元素** 下输入所需的产品名称并点击 **+** 增加输入的每个产品名称。
- 如果除了预定义的列表元件之外，还应能输入激活 **允许任意文本** 复选框的任意文本。
- 根据需要进行更多设置。

在文本框中写入产品名称

从列表中选择产品名称

5 定义操作过程段和子样品数量

- 在 **操作过程 / 子样品** 区域中选择创建的操作过程段。
- 子样品数量 确定对于每个样品将自动添加多少子样品。输入 **1**。

6 保存样品信息格式

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果需要更多的样品信息格式（例如用于不同产品）：

1. 在 **样品** ▶ **样品信息格式** 下选择已创建的样品信息格式。
2. 点击 复制所选的样品信息格式。
3. 打开复制的样品信息格式并进行所需的调整。

创建样品列表

1 创建并命名样品列表

- 在 **样品** ▶ **样品列表** 下点击 。
  新选项卡打开。
- 在 **名称** 栏中输入一个适当的名称。

2 增加样品

- 在 + 图标左侧的选项列表内选择创建的样品信息格式。

  后续添加的样品将根据所选样品信息格式的规格创建。
- 点击 + 将新样品增加至样品列表。根据需要的数量增加样品。

  样品列表的每一行都包含标有 图标的样品。右侧为样品数据。之后是标有 的子样品和子样品数据。
  样品根据所选样品信息格式中的规格创建：
  - 量化：使用参考参数及其单位（如果已定义一个单位）的定义输入栏。
    身份验证和验证：使用产品参数的定义输入栏。
  - 每件样品包含 1 个采用规定操作过程段的子样品。

样品名称	参考参数名称		编号	子样品名称	操作过程
样品 1		%	1	子样品 1	
样品 2		%	2	子样品 2	
样品 3		%	3	子样品 3	

图 5　样品列表（量化示例）

- 根据需要编辑样品名称和子样品名称。
- 如果参考值（量化）或产品名称（身份验证、验证）明确，将其输入在相应的栏中。

3 保存样品列表

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果需要更多的样品列表（例如用于不同产品）：

1. 在**样品** ▶ **样品列表**下选择已创建的样品列表。
2. 通过点击 复制所选的样品列表。
3. 打开复制的样品列表并进行所需的调整。

参考值或产品名称也可以以其他方式录入样品列表（参阅 *Metrohm Knowledge Base*）。

- 测定期间手动录入，例如在一个查询窗口内。
- 对于量化也可以从后续或之前的测定中通过参考方法段自动录入。

样品列表和进程对于光谱记录已准备就绪 *（参见"记录光谱"，第 51 页）*。

4.2 记录光谱

警告

高温表面上的易燃物质

易燃物质洒出可能导致火灾和灼伤危险。样品、样品瓶、样品支架和样品展示的温度可能高达 85 °C。

- 避免火源。
- 使用接地保护。
- 使用排气装备。
- 立即清除洒落的液体和固体物质。

小心

加热会导致样品体积变大

溢流或样品容器的破碎或塞子的弹出会导致受伤或健康损伤。

- 仅将样品容器充满至 2 cm 的最低高度。液体可能在残留的空气中扩张。
  也可以使用带毛细管开孔的塞子。
- 谨慎地压入塞子，以防损坏样品容器。

小心

高温样品瓶

接触高温表面或高温液体可能会导致皮肤灼伤。样品、样品瓶、样品支架和样品展示的温度可能高达 85 °C。

- 佩戴个人防护装备并戴上耐高温防护手套。
- 立即清除洒落的液体和固体材料。

记录用于开发模型的光谱

前提:

- 光谱记录已准备就绪 *（参见"准备光谱记录"，第 42 页）*。
- 光谱仪已预留 *（参见"预留与共享仪器"，第 23 页）*。

- 已装入正确的样品支架。样品支架必须与所使用的样品容器匹配。

1 打开样品列表

- 打开 **样品** 工作区。
- 如果样品列表已关闭，在 **样品** ▶ **样品列表** 下双击打开样品列表。

量化：这时参考参数的输入栏可能仍为空。参考值可以在光谱记录之后确定并输入。
身份验证和校验：在光谱记录之前和之后，可以输入产品名称。

2 增加更多样品（可选）

如果需要更多样品：

- 在 + 图标左侧的选项列表内选择创建的样品信息格式。

然后，增加的样品将根据规格在选择的样品信息格式中创建。

- 点击 + 为样品列表增加新的样品。
- 根据需要编辑样品名称和子样品名称。
- 通过点击 保存样品列表。

3 执行测定

注意

温度传感器在温度调节样品容器时受损

如果传感器与样品容器直接接触时取下样品容器，则可能导致传感器受损。

- **在测量完成并且温度传感器已移离样品容器时再取下样品容器。**

- 按照以下方式选择需分析的子样品：
  - 点击 图标选择子样品。
  - 对于分析目的而言，选择子样品的一个池即可。
- 准备相应的物理样品。
  将样品容器放置在样品支架中。
- 点击 开始测定。按键上的数字代表需要执行多少个子样品分析。

- 开始分配给子样品的操作过程段。遵循 **曲线和数据** ▶ **实时数据** 区域中可能存在的指示。如果在样品容器上调节温度，则在要求之后再取下样品容器。

  成功完成分析之后子样品状态将显示为 ✓。
- 以相同的方式执行其它所有样品的测定。

目标温度最高允许低于环境温度 5.0 K。

如果过程适于进行序列测定，则可以一次性选择多个子样品。也可以选择由 开始分析样品列表中所有可执行的子样品。

- **液体样品：VESSEL REMOVAL 命令可实现序列测定。**
- **固体物质样品：在执行序列测定时，必须规定用户操作行为（例如使用 WAIT 命令）。**

光谱的目检

光谱的目检能够实现对被干扰波长范围和可能错误测量的身份验证。

前提：

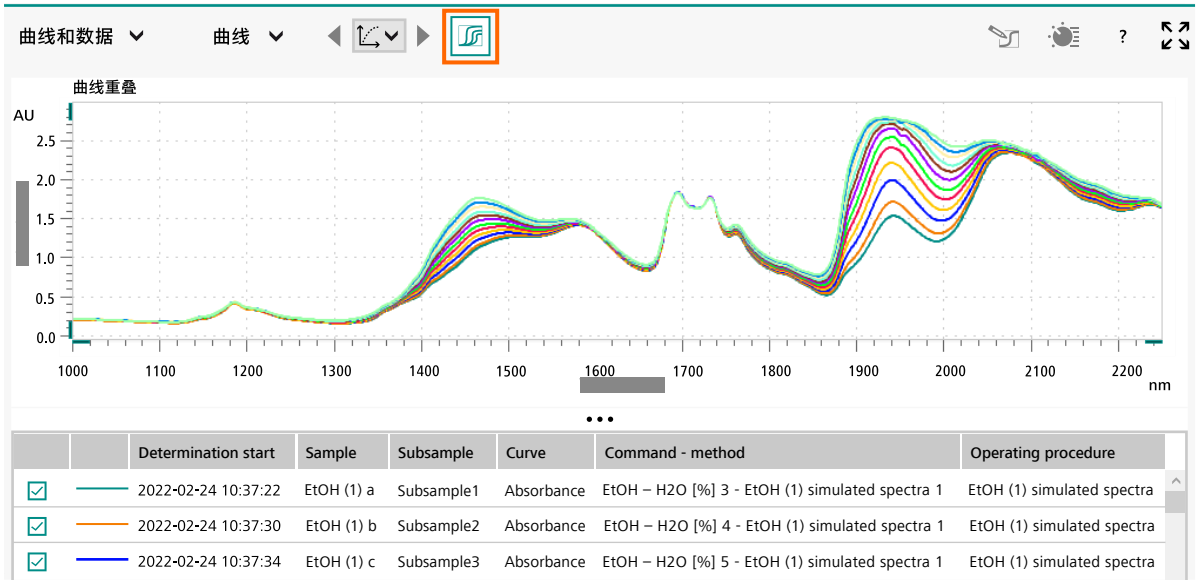
该子样品的分析已成功完成。

1 打开 '曲线' 子区域

- 在样品列表的选项卡中打开 **曲线和数据** ▶ **曲线**。

2 显示和检查光谱

- 显示单个光谱：
  - 从样品列表中选择相应子样品（标有图标 ）。
- 显示多个光谱：
  - 点击 以激活曲线重叠。
  - 借助 **[CTRL]** 或 **[SHIFT]** 按键从样品列表中选择多个子样品。
- 检查光谱 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。



参考值（量化）和产品名称（身份验证、校验）

1 参照方法（量化）

- 使用合适的参考方法段测量样品的参考值，例如通过滴定。

2 输入参考值或产品名称

- 在样品列表相应的栏内输入参考值和产品名称。

将样品数据增加到样品列表中

如果在测量开始时尚不存在用于参考参数或产品参数的样品数据，可以按照如下方式增加一个输入栏：

- **点击 选择应增加输入栏的样品。点击 选择所有样品。**
- **通过右键点击所选择的样品打开上下文菜单，选择添加样品数据。**
- **增加用于参考参数或产品参数的样品数据** *（参见"准备光谱记录"，第 42 页）*。

3 保存样品列表

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果已准备多个样品列表，则按上述说明处理每个样品列表。

量化：若要开发量化模型，按 *量化模型 继续，第 5 章，第 56 页。*。

身份验证、校验：若要开发识别模型，按 *识别模型 继续，第 6 章，第 86 页。*。

定性：为了开发定性模型，按 *定性模型 继续，第 7 章，第 101.* 页。

5 量化模型

5.1 创建量化模型

过程在 OMNIS Software 中的图表说明请参见附录 （参见"开发模型"，第 156 页）。

多个分析参数
如需预测的每件样品的分析参数超过一个，则须为每一个参数创建一个单独的模型 （参见"多个感兴趣的参数（量化）"，第 131 页）。

创建量化模型

前提:

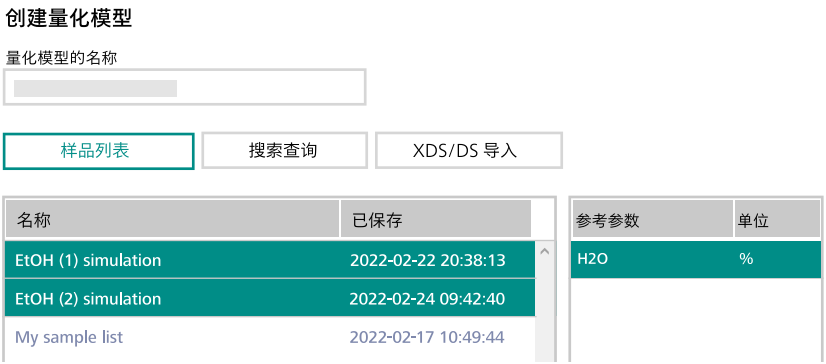
- 已记录用于模型开发用的光谱 （参见"记录光谱"，第 51 页）。

1 创建并命名量化模型

- 在 **校正和评估** ▶ **量化模型** 下点击 。
  一个新的量化模型出现在新的选项卡中。
- 在 **量化模型的名称** 输入栏中输入一个适当的名称。

2 选择样品和参考参数

- 点击 **样品列表** 显示样品列表。
- 选择所有准备用于开发模型的样品列表。



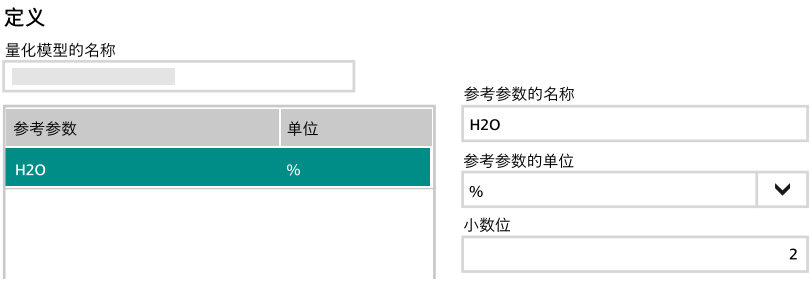
样品也可以通过搜索查询选择。
必要时也可以导入 XDS 仪器和 DS 仪器 （参见"更换 XDS/DS Analyzer（量化）"，第 150 页）。

之后可以调整样品选项。

- 列表 **参考参数** 显示了适于作为参考参数的所有样品数据。选择用于开发模型的参考参数。如果参考参数有不同名称，则可以在列表中选择所有名称。
- 点击 **[下一步]**。

3 定义参考参数

- **参考参数** 列表显示是所有用于在上一步骤中已选择的参考参数的名称。
  在该列表中选择所有所需的名称。



- 在 **参考参数名称** 栏内输入想要使用的模型的名称。
- 选择想要使用模型的 **参考参数单位**。
- 输入用于显示结果的 **小数位** 的数量。

具有所选参考参数名称的所有光谱都被添加至模型中。

4 自动或手动模型开发

如果想要自动开发模型，但之前必须调整样品选项，则使用手动模型开发继续。

- **自动模型开发**
  使用 **OMD (OMNIS Model Developer)** 和所选的样品自动开发模型。自动开发模型后可以发布、校验或继续开发模型。
  - 点击 **[开始 OMD]**。
    OMD 执行的时长取决于光谱的数量。
  - 参阅 *第 5.2 章，自动模型开发 – OMD，第 58 页*。
- **手动开发模型**
  - 点击 **[创建]**。
    在选项卡中打开一个新模型。
  - 保存模型：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。
  - 参阅 *第 5.3 章，手动开发模型，第 60 页*。

5.2 自动模型开发 – OMD

OMD (OMNIS Model Developer) 用于量化模型的自动开发，提供了一系列最适合的模型供选择，并评估了其预测力。

前提:

OMD 已通过 **[开始 OMD]** 启动。

1 检查计算的量化模型

一旦计算结束，OMD 会提供 5 个模型供选择。

计算的量化模型

量化模型的名称 | 小数位: 4

模型#	SEC	SECV	SEP	R²P
1	0.0019	0.0020	0.0030	0.990
2	0.0017	0.0018	0.0030	0.990
3	0.0019	0.0020	0.0031	0.990
4	0.0012	0.0014	0.0023	0.994
5	0.0012	0.0015	0.0023	0.994

这些模型根据预测力分类。每个模型都列出了模型品质指标。

模型在表格左边缘表标有以下颜色:

- **绿色**标记的模型具有出色的预测力。如果样品数量足够多，则模型对于所有相同类型的未知样品而言效果都不错。模型品质指标能够提供对今后错误的可靠预测。
- **黄色**标记的模型具有一般的预测力。如果样品数量足够多，则模型的性能会比较理想。模型品质指标对于今后的样品而言可能是最佳的。推荐进行单独的校验。
- **红色**标记的模型不具有足够的预测力。模型具有严重的缺陷。不应使用。

如果一个量化模型还能够改善，则在模型的工具提示中还将显示改进建议。

2 检查模型品质指标

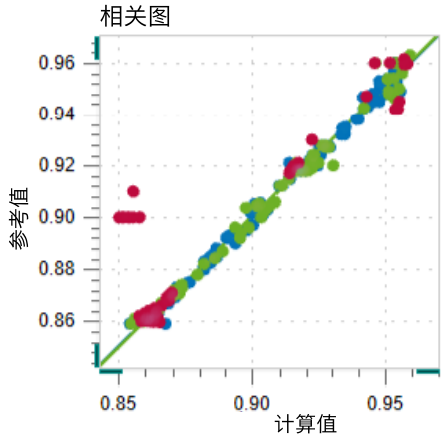
对于每个模型将显示以下标准误差:

- **SEC** 校正的标准误差。
- **SECV** 交叉验证标准误差。
- **SEP** 预测标准误差。该数字在分析未知样品时对于预测误差而言是最佳的预测值。SEP 仅在校验数据集可用时才会显示。**注意**: 如果在识别离群值后还有至少 100 个光谱，OMD 会创建一个校验数据集。

模型 1 具有最佳的预测力，但不一定是最小的标准误差。

3 检查相关图

点击一个单一的模型显示相关的 相关图。



相关图 能够实现对模型性能一目了然的预测。图表表示的是使用模型计算的数值（x 轴）和参考值（y 轴）之间的相关性。

每个点位都代表一个样品：

- 蓝色点位单表校准数据集中的样品。
- 绿色点位代表校验数据集中的样品（如果存在）。
- 红色点位代表离群数据集中的样品（如果存在）。

一条回归直线包含蓝色和绿色点位，以便以尽可能最佳的方式说明参考值和计算值之间的关联性。

评估相关图

- 蓝色和绿色回归线的斜率应尽可能接近 1，y-轴截距应尽可能接近 0。
- 蓝色和绿色点位应尽可能贴近相应的回归线。

回归线和点位可能会重叠。

4 校验、再开发或发布模型

为了能使用模型进行测定和再评估，必须发布模型。

直接发布 5 个模型中的一个

- 如果 OMD 已在创建模型时启动：
  - 选择一个模型并点击 **[保存并发布]**。其余的 4 个模型将被丢弃。
  - 在 **校正和评估** ▶ **量化模型** 下显示最近发布的版本。**PREDICT** 命令这时可以访问发布的模型版本。

- 如果 OMD 已在一个打开的模型中启动：
  - 选择一个模型并点击 **[编辑]**。
  - 保存模型：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。
  - 参阅 *第 5.4 章，发布量化模型，第 78 页*。

校验或再开发一个或多个模型

- 选择一个或多个模型。多项选择请使用 **[SHIFT]** 键或 **[CTRL]** 键。
- 点击 **[编辑]**。
  每个选择的模型将在一个新的选项卡中打开。
- 保存新的模型：在相应的选项卡中点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。
- 参阅 *第 5.3 章，手动开发模型，第 60 页*。

5.3 手动开发模型

5.3.1 选择样品并划分数据组

量化模型的选项卡在最上方显示 1 个水平的导航栏，**导航器**。导航器会引导完成开发模型的后续步骤。

光谱的显示

在 3 个工艺步骤中，以曲线、点或表格行的形式显示各个光谱。所选的光谱将同时突出显示在所有图示和工艺步骤中。

表格和图表

附录描述了表格和图表的处理：

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*
- 处理图表 *（参见章节 11.3，第 141 页）*

选择样品 工艺步骤

光谱表 区域显示所选的样品：

一个输入栏分别显示相关的参考值（图中标记为橙色）。

选择样品 工艺步骤能够实现以下功能：

- **调整样品选择**
  增加更多光谱或删除光谱。
- **划分数据组**
  自动或手动数据组的划分：
  - **校准数据集**：通过校准数据集的光谱和参考值将计算模型。
  - **校验数据集**：校验数据集的光谱和参考值完全用于校验模型。
  - **离群数据集**：离群数据集不会对模型及其校验产生影响。离群值仅显示在一些图表中。

模型可以在无需校验数据集的情况下研发例如在第一阶段仅有限数量的样品可用。

调整样品选择（可选）

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型 *（参见"创建量化模型"，第 56 页）*。
- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

1 增加或删除光谱

样品选择和参考参数可以随时在 **光谱表** 区域中调整：

- 如需选择其光谱须添加至光谱表的样品，请点击 **+**。
- 为了从光谱表中移除光谱，选择光谱并点击 **–**。
  注意：相关样品包括光谱保留在数据库中。
- 点击 选择下列项目：
  - 参考参数的名称或单位
  - 参考参数名称的选择
  - 参考参数和所有结果的小数位数

如果必须要编辑一个光谱的参考值，请打开相关的样品列表或搜索查询并双击参考值。

2 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

切换至自动开发模型

该选项卡中其它设置不会对 **OMD (OMNIS Model Developer)** 产生影响。因此可以从此处切换至自动开发模型：

- 必要时在直方图中检查参考值的均匀分布 *（参见"直方图"，第 64 页）*。
- OMD 自行查找离群值并将其排除出模型开发。
  如果依然要手动排除离群值，则必须将其从样品列表中清除。
  离群数据集的分配对 OMD 没有影响。
- 点击 **[开始 OMD]**。
  OMD 执行的时长取决于光谱的数量。

离群值检测的显著性水平

前提

- 在 **校正和评估** 工作区内已打开量化模型并位于前台。

1 编辑模型的属性

- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **参数** ▶ **离群限制** 下确定离群值识别所用的 **显著性水平**。显著性水平越高，就能识别出越多的光谱离群值。典型数值为 5 % 或 1 %。
  显著性水平按如下方式使用：
  - 在开发模型期间可选的自动离群值识别考虑了离群值识别时刻的显著性水平（见下）。
  - 预测样品属性时的离群值识别考虑了发布模型时的显著性水平。

2 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

确定离群数据集和校验数据集

离群值识别能够实现自动创建离群数据集。剩余的光谱可以自动划分为校准数据集和校验数据集。

如果校正和校验已分别采集了样品，则可以手动分配样品。

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

1 调用数据组分划

- 在 **光谱表** 区域点击 ⇹。

将打开对话框 **数据划分**。

2 确定离群数据集

- 如需自动将光谱分配给离群数据集，请激活 **查明异常数值** 软件拨动开关。自动离群值识别功能会识别以下形式的离群值：
  - 因光谱中的偏差产生的光谱离群值
  - 因参考值中的异常产生的离群值参考值

  必要时调整 **显著性水平**。显著性水平越高，就能识别出越多的光谱离群值。典型数值为 5 % 或 1 %。

3 确定校验数据集

自动划分时将确保校准数据集和校验数据集对于总体而言具有代表性并且相互不关联。

- 如需自动将光谱分配给校验数据集，请激活 **确定校验数据集** 软件拨动开关。
  - 在 **百分率** 栏中定义用于校验数据集的光谱百分比，例如在 20 % 和 30 %.之间。

4 设定选项

设定用于数据组分配的选项：

- **应用参数化设置**：将数据预处理和波长选择应用于光谱 *（参见"参数设置量化模型"，第 71 页）*。
  注意：之后更改参数化或显著性水平对数据组分配无影响。除非重新划分数据组。
- **保留离群值**：已有的离群值在划分时将被保留并且不予考虑。该选项可能会导致离群数据集的扩展，即便是在 **显著性水平** 不变的情况下。
- **保留校验数据集**：已有的校验数据集在划分时将被保留并且不予考虑。该选项会导致离群数据集的扩展，即便是在 **百分率** 不变的情况下。

5 启动自动划分

- 点击 **[划分]**。

数据组将根据进行过的设置划分。

6 检查划分

一旦在光谱表中选定了至少一个光谱，所选的光谱会在 **频谱重叠** 区域突出显示。

在 **直方图** 和 **频谱重叠** 区域将校准数据集中的光谱显示为**蓝色**，将校验数据集中的光谱显示为**绿色**，并离群数据集中的光谱显示为**红色**。

在 **光谱表** 区域中通过下列图标表示分配关系：

	此光谱已分配给校准数据集。
	此光谱已分配给校验数据集。
	此光谱已分配给离群数据集。
!	显示错误或无效的数据。参考工具提示。

7 手动划分（可选）

手动划分可以通在启用或不启用自动划分的情况下进行。

- 右键点击其中一个光谱打开上下文菜单。为光谱分配相应的数据组：
  - **校准数据集**
  - **验证数据集**
  - **离群数据集**

一次性分配多个光谱：

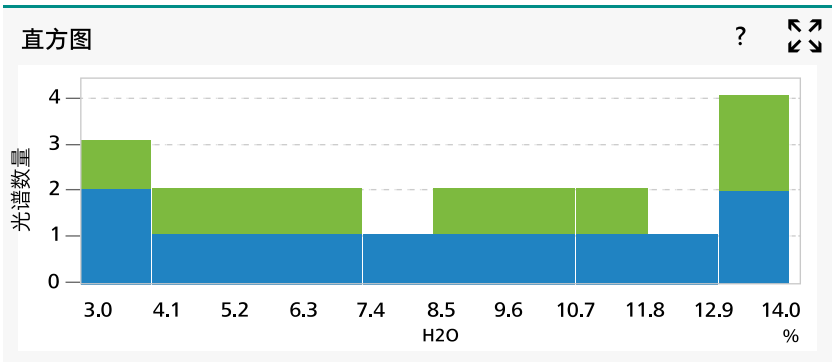
- **可选择将光谱排列为合适的顺序。通过点击列标题分类概览列表。**
- **通过 [CTRL] 或 [SHIFT] 键选择多个光谱。**
- **通过右键点击选择选项打开上下文菜单。分配将所选的光谱。**

8 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

直方图

直方图直观显示参考值的均匀分布程度。为此，直方图将参考值范围分为 10 个相同大小的产品组。



图例中 12 个 3 % 至 14 % 的整数参考值被划分为 10 个产品组。第一个产品组包含 3 % 和 4 % 的参考值，最后一个产品组则包含 13 % 和 14 % 的参考值。其它 8 个产品组仅各自包含 1 个参考值。

示例证实了校准数据集（蓝色）和校验数据集（绿色）中的光谱在参考值范围内均匀分布。

离群值

分配给离群数据集的光谱以红色显示。其中可能涉及光谱离群值或离群值参考值。

应检查离群值。如果一个离群值证实为包含有效参考值的有效光谱，则可以将其分配给校准数据集或校验数据集。

5.3.2 计算量化模型

第一个模型可以在无参数化设置的情况下计算。由此可以得到一个用于模型品质指标的比较标准。之后参数化设置的影响可以更好地评估。

如果干扰或其它伪迹让某些波长无法使用，则这些波长可以直接被排除 *（参见"参数设置量化模型"，第 71 页）*。

计算模型

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区内已打开量化模型并位于前台。

1 开始计算

- 通过点击 **[计算]** 来计算模型。

如果 [计算] 按键处于非活动状态，则可能有以下原因:
- **已计算完模型，自此以后未进行更改。**
- **一个工艺步骤中包含了错误的输入。在导航器中以红色显示相关区域的工艺步骤。有错误输入内容的栏边框为红色。**

5.3.3 校验量化模型

定义交叉验证法

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区内已打开量化模型并位于前台。

1 编辑模型的属性

- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **参数** ▶ **交叉验证** 下定义交叉验证法:
  - 对于有最多 70 个光谱的光谱表，推荐使用 **留一法** 步骤。
  - 对于更大的光谱表，推荐使用 **K-fold** 步骤。**组块数量** 越大，模型的计算时间就越长。k 的典型数值为 5。**划分算法** 决定校准数据集的光谱如何划分为各个区块。**Random** 划分算法随机选择区块。**Fixed Blocks (DUPLEX)** 划分算法以重现性方式选择区块。

2 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

校验量化模型

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区内已打开量化模型并位于前台。
- 已计算量化模型 *（参见"计算量化模型"，第 65 页）*。

1 切换至校验工艺步骤

- 在导航器中点击 **校验量化模型** 切换至校验工艺步骤。

计算出的量化模型数据显示于 **模型品质指标**、**相关图** 和 **影响图** 区域内。

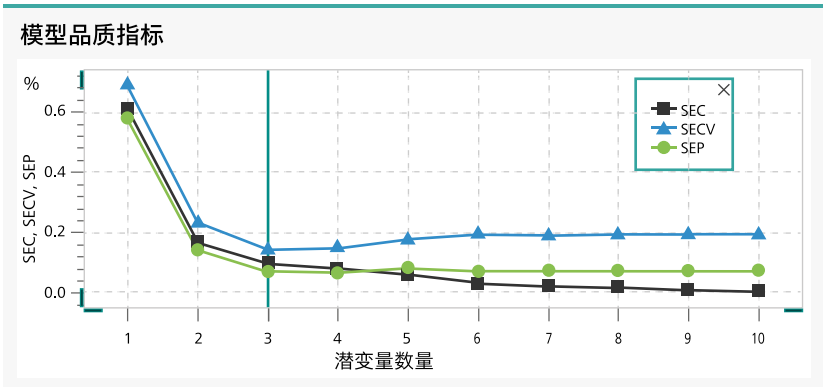
点击 ⌄ 也可显示图表 **载荷图** 和 **得分图**。

2 检查模型品质指标

在 **模型品质指标** 区域内显示一个包含以下模型品质指标的图表:

- **SEC** 校正的标准误差。
- **SECV** 交叉验证标准误差。
- **SEP** 预测标准误差。该数字在分析未知样品时对于预测误差而言是最佳的预测值。SEP 仅在校验数据集可用时才会显示。

模型品质指标（y 轴）显示用于不同数量的模型品质指标（x 轴）。



绿色垂直线显示当前选定的潜变量数量。在上图中已选择 3 个潜变量。在 3 个潜变量中，SECV 的第一个最小值为 0.14%。

表格中的小数位数
要更改统计指标的小数位数，请在工艺步骤 选择样品 的 光谱表 区域点击 。

3 设定潜变量数量

最终量化模型采用固定数量的潜变量。对于量化模型的性能而言，找到最佳潜变量数量是至关重要的。

更多的潜变量能够说明校准数据集中更多的光谱变量。过多的潜变量则说明特定变量或干扰，会导致未知样品的预测精度降低。这种情况被称为**过度调整**。

较少的潜变量则能够获得更可到的量化模型。但如果潜变量数量过低，则无法识别相关光谱变量。预测的准确性将更低。这种情况被称为**调整不足**。

- 临时选择适当的潜变量数量。为此，请双击表格中相应的行。

  在表格中通过 ✓ 标识所选潜变量的数量。
  如有疑虑，请选择 OMNIS Software 推荐的数量。如果选择的潜变量的数量与系统建议的数量存在偏差，则用 → 标识建议的数量。

4 检查相关图

相关图 提供了量化模型的性能评估概览。图表展示了计算值（x 轴）和参考值（y 轴）之间的相关性。每个点位都代表一个样品。

相关图和旁边的表格显示了每件样品的以下数值：

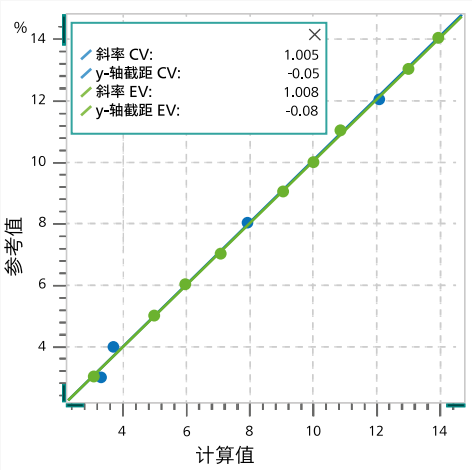
参考值	参考参数数值
计算值	量化模型的结果
残差	计算值和参考值之间的差异

表格中的小数位数
要更改上述数值的小数位数，请在工艺步骤 选择样品 的 光谱表 区域点击 。

蓝色圆点形成一条蓝色回归线。绿色圆点形成一条绿色回归线。

回归线显示了计算值和参考值之间的系统关联性。回归线理想情况下的斜率为 1，轴截距为 0。所有样品均在理想条件下位于直线上。这种情况下，每件样品的计算值都相当于参考值。

相关图



相关图展示了不同形式的错误：

- **系统性错误** 可被视为回归线与理想线（斜率 = 1，y-轴截距 = 0）的偏差。
- **随机错误**：点位在回归线周围越分散，随机错误越高。

图中隐藏了多个点位在其它点位后面。蓝色回归线隐藏在绿色回归线后。

- 在 **模型品质指标** 区域中选择其它潜变量数量。注意观察相关图的变化。

处理图表
可以自定义图表显示，并可选择单个点位或多个点位 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。

5 检查影响图

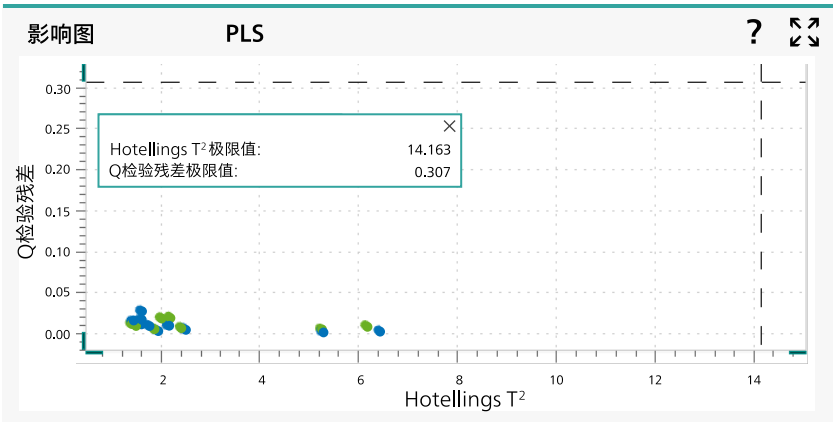
影响图 描述了光谱的特征属性，并有助于确定光谱离群值。

影响图可显示用于 PLS 或 PCA 计算方法段。由列表选择一个计算方法段：

- **PLS**（部分最小平方回归）
  PLS 使用光谱和参考值的相关信息。PLS 是量化模型的基础。
- **PCA**（主要成分分析）
  PCA 由光谱提取相关信息。

两个影响图（即 PLS 和 PCA）考虑定义的数据预处理和波长范围 *（参见"参数设置量化模型"，第 71 页）*。
参考值影响 PLS 影响图，但不会影响 PCA 影响图。唯一的例外就是每个点位因极端参考值可以被标记为可能的离群值。所选的潜变量数量会影响 PLS 影响图，但不会影响 PCA 影像图。对于 PCA 而言，主要成分的数量选择须考虑到所设定的方差至少应为 95 %。

示例：基于 3 个潜变量的 EtOH 光谱的 PLS 影响图



处理图表
可以自定义图表显示，并可选择单个点位或多个点位 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。

每个点位都代表一个光谱。Hotelling T^2 和 Q 检验残差的高数值表示可能存在离群值。

Hotelling T^2 数值较高的光谱表明相关样品的极端成分。这些样品对模型具有重大影响。如果这类样品的参考值不正确，相似样品的预测可能会得出错误的结果。

Q 检验残差较高的光谱表明尚未建模成功的特性。例如，因为相关样品含有异常化学成分。

虚线展示了所设定显著性水平的危险数值（极限值）。

上图显示了无可能的离群值出现。所有点位均在虚线内并且距离较远。

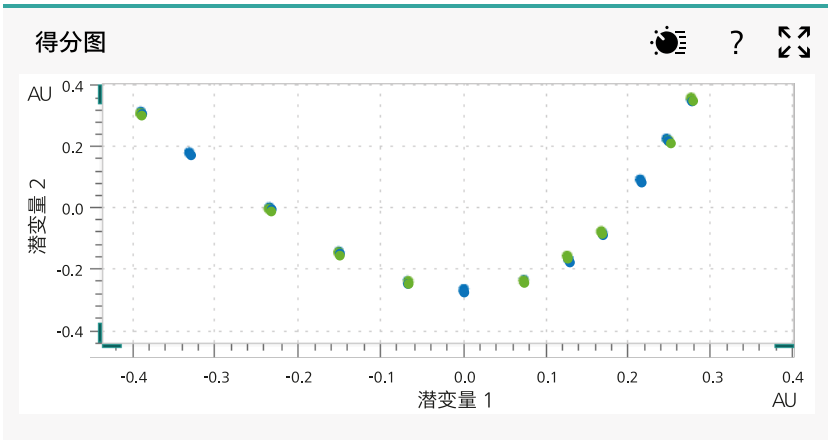
6 检查得分图

如果一个光谱的 Hotelling T² 数值将所有潜变量的得分归纳为一个单一的数值，通过该得分图可以更加详细地分析这些得分。

量化模型的得分图基于计算方法段 **PLS**，并考虑了定义的数据预处理和波长范围 *（参见"参数设置量化模型"，第 71 页）*。

每个点位都代表一个光谱。最前面两个潜变量的得分能够在 x 轴和 y 轴上读取。在 **属性** 下也可以显示其它每一个潜变量对。这些得分已被标准化，每个潜变量均包含相同的重量。

示例：潜变量 1 和 2 情况下的 EtOH 光谱的得分图：



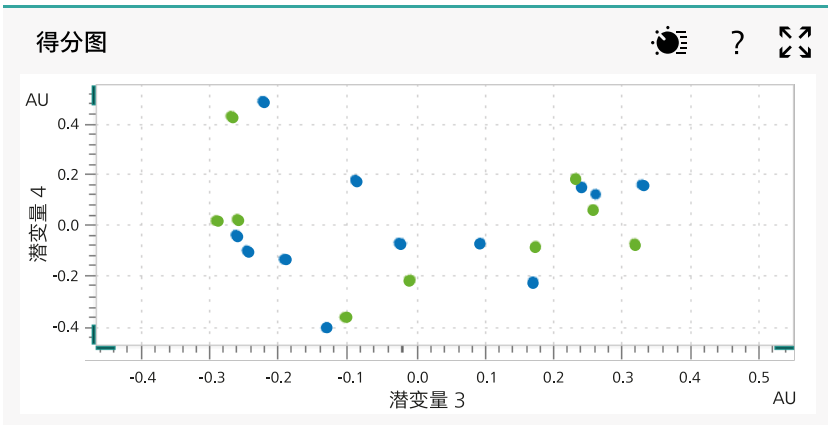
处理图表

可以自定义图表显示，并可选择单个点位或多个点位 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。

点位如同珍珠串一样排列。代表参考值均匀间距以及缺少更多的样品变量。这种情况下须确定是否已考虑所有今后将可能使用的样品变量。

如下图所示，潜变量越高代表方差占比越低，效果将不再可见。

示例：潜变量 3 和 4 情况下的 EtOH 光谱的得分图：



校验数据集（绿色点位）在两个图例中均在所示潜变量内占据大约与校准数据集（蓝色点位）相同的空间。无法识别可能的离群值。

7 纳入或排除离群值

- 谨慎检查可能的离群值。
- 如果样品分配给了另一个数据组，则应在一个步骤内分配所有样品：
  - 在影响图、相关图或得分图中选择所有需要重新分配的点位 *（参见"选择多个点或多个曲线"，第 142 页）*。
  - 通过右键点击一个所选择的点位打开上下文菜单。选择合适的数据组。
  - 通过点击**[计算]**重新计算量化模型。
- 重新分配光谱后重新校验量化模型。

8 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

复制量化模型

量化模型可以复制，以便在必要时可以使用最新版本：

1. 保存量化模型。
2. 在 **校正和评估** ▶ **量化模型** 中选择量化模型。
3. 通过点击复制所选的量化模型。
4. 打开复制的量化模型并继续优化。

5.3.4 参数设置量化模型

参数设置量化模型 工艺步骤能够对光谱进行自动或手动优化。伪迹和非线性将被修正。正确执行将改善模型的参数化设置、精确度和耐用性。

将参数化应用到：

- 校准数据集中的所有光谱
- 校验数据集和离群数据集中的所有光谱

对于 样品 工作区中的预测，记录 1 个样品的光谱并用模型进行评估。也将模型中定义的参数化应用到该光谱上。

提供了两个参数化设置方式：

- 定义须使用的波长范围。
- 应用数据预处理以便将光谱调整为适当的形式。

自动参数化

优化参数化设置

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 '参数设置量化模型'工艺步骤

- 在导航器中点击 **参数设置量化模型** 工艺步骤。

2 自动定义数据预处理和波长范围

- 在 **频谱重叠** 区域点击 **[优化参数化设置]** 按键。
  注意：现有数据预处理和波长范围将被覆盖。

3 手动参数化（可选）

- 如果需要，可以手动进一步处理数据预处理和波长范围。

手动参数化

在 **选择样品** 工艺步骤中通过目检光谱来开始手动参数化。

显示光谱

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 '选择样品'工艺步骤

- 在导航器中点击 **选择样品** 工艺步骤。

在该工艺步骤中可以同时以表格形式和曲线形式检查光谱。

2 检查光谱

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*
- 处理图表 *（参见章节 11.3，第 141 页）*

3 **'参数设置量化模型'工艺步骤**

- 在导航器中点击 **参数设置量化模型** 工艺步骤。
- 在 **数据预处理** 区域中通过点击 ⮟ 展开选项列表并选择 **载荷图** 区域。

在该工艺步骤中可以同时以曲线形式和 **载荷图** 形式检查光谱。载荷图 展示了最初的波长变量是如何帮助建立每个潜变量的。

后续步骤

- 手动选择波长 *（参见"手动选择波长"，第 73 页）*
- 手动定义数据预处理 *（参见"手动定义数据预处理"，第 76 页）*

5.3.4.1 手动选择波长

波长选择可以改善量化模型。示例：如果吸收量数值较高时噪音可见，则可以将相关的波长范围排除。

模型采用定义的波长范围。如果未定义波长范围，则模型使用所有波长。

显示光谱和载荷

前提:

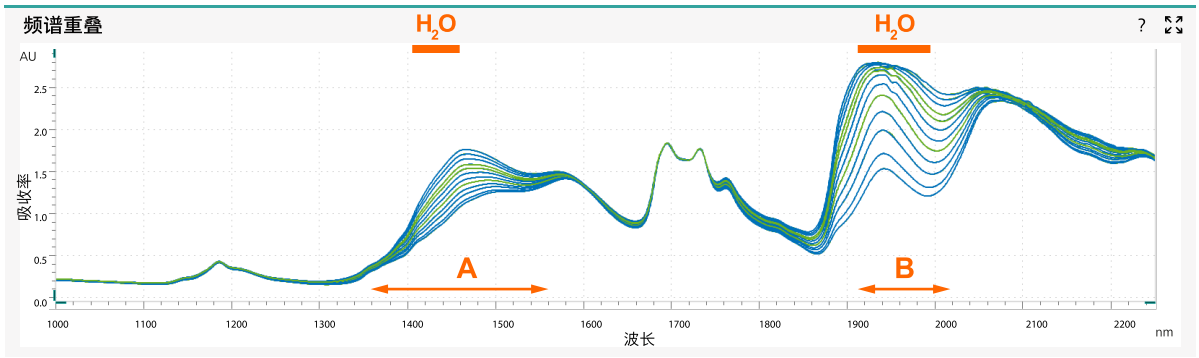
- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 **'参数设置量化模型'工艺步骤**

- 在导航器中点击 **参数设置量化模型** 工艺步骤。
- 同时显示 **频谱重叠**、**载荷图** 和 **波长范围** 区域。

频谱重叠

一般性的 H_2O 吸收量带可以在图表中查阅并用作大致的参考点。H_2O 吸收量带从 1400 至 1450 nm 以及 1900 至 1980 nm。

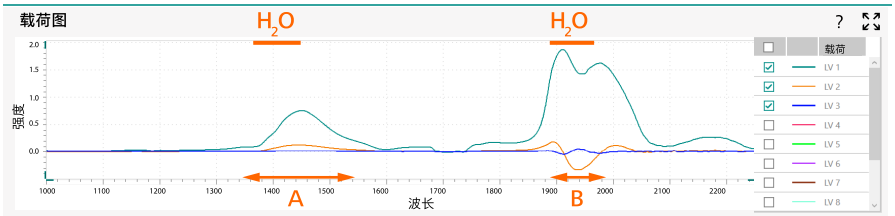


EtOH 光谱根据样品的 H_2O 含量明确展示可见的变量（**A** 和 **B** 区域）。

但 2 个区域有区别。相较于 **B** (1900 - 2000 nm）区域，**A** (1350 - 1550 nm）区域垂直线间距均匀，与参考值的均匀间距相符。

载荷图

载荷显示最初的波长变量是如何帮助架构每个潜变量的。



已识别的 **A**（1350 - 1550 nm）和 **B** (1900 - 2000 nm）区域具有最高的载荷，特别是对于潜变量 1（绿色）。这些区域主要帮助构成潜变量 1。

载荷的正负无关紧要。

因 **B** 区域内存在伪迹，所以尝试基于 **A**（1350 至 1550 nm）区域构建模型可能是有意义的。

定义波长范围

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。
- 导航器在工艺步骤 **参数设置量化模型** 中。

1 增加波长范围

- 在 **波长范围** 区域中通过点击 增加一个波长范围。

波长范围将被增加。该范围首先将覆盖所有波长范围。

2 确定波长范围

按照以下方式之一的方法设定波长范围:

- 如需通过输入数字设定波长范围，请在相应的输入栏内输入 **起始波长** 和 **结束波长**。

- 如需在图表中设定波长范围，请按如下方式操作：
  - 在 **频谱重叠** 区域点击 **[激活移动]**。
  - 将光标移至突出显示区域左缘，直至光标显示为 ↔。
  - 通过按下鼠标左键移动左缘至相应的位置。
  - 在突出显示区域右侧同样这样操作。
  - 为移动波长范围，将光标移到该区域上方，直至光标显示为 ⇔。通过按住鼠标左键从左至右移动区域。
  - 点击 **[取消激活移动]**。

3 增加更多的波长范围

通过点击 可以增加更多波长范围。

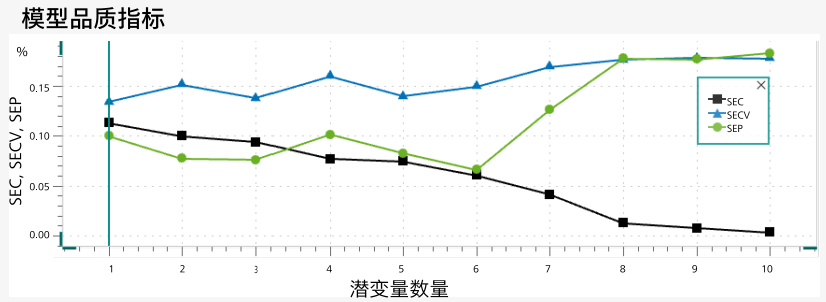
波长范围不得重叠
一个新的波长范围首先与现有的波长范围重叠。调整波长范围使其不再重叠。

4 计算模型

- 通过点击 **[计算]** 来计算模型。

5 验证模型

- 在导航器中点击 **校验量化模型** 切换至校验工艺步骤。
- 验证模型。将模型品质指标与之前创建的模型进行比较。



对于 EtOH 中的水份以及 1350 至 1550 nm 的波长范围，1 个潜变量对使用整个波长范围而言就足够了，而非 3 个潜变量。SECV 在两种情况下类似：0.13 % 和 0.14 %。

一个变量而非 3 个变量对于改善是有意义的。无关方差已被成功排除。更少变量的新模型推测更牢固。

6 保存模型

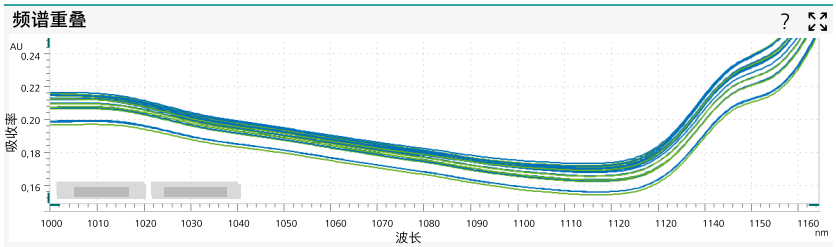
- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果在划分数据组或离群值识别时应考虑新创建的波长选择，则可以重新划分数据组。

5.3.4.2 手动定义数据预处理

适当的数据预处理可以改善量化模型。示例：基线移动对于大部分应用而言不包含相关信息并可以移除。

EtOH 光谱



对于 EtOH 光谱而言，将 1000 扩张至 1200 nm 时，光谱间的小幅基线移动可见。所涉及的是持续（非波长相关）基线移动。

基线移动的原因是在出于演示目的流动池内故意未用尽样品时产生小气泡。
清澈的液体一般不会产生此程度的基线移动。

基线移动可以通过数据预处理修正。

手动定义数据预处理

前提：

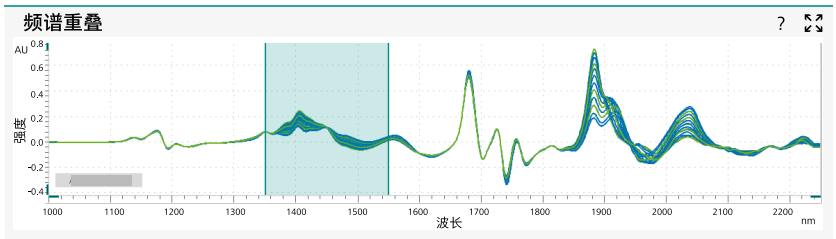
- 模型导航器在工艺步骤 **参数设置量化模型** 中。

1 添加数据预处理步骤

- 通过点击 在 **数据预处理** 区域内添加数据预处理步骤。
- 在 **数据预处理** 栏中选择数据预处理方式，填写相应的栏。一阶导数的 Gap-Segment 示例，能够移除持续（非波长关联）的基线移动：

在 **频谱重叠** 区域中立即显示经过预处理的光谱。

数据预处理后光谱出现变化。



如果是 EtOH 光谱则将移除持续基线移动。

2 添加更多的数据预处理步骤

点击 可添加更多数据预处理步骤。

使用多个数据预处理步骤时，顺序可能是至关重要的。Gap-Segment **或** Savitzky-Golay **在** SNV **之前首选，**SNV **在** detrend **之前首选。**

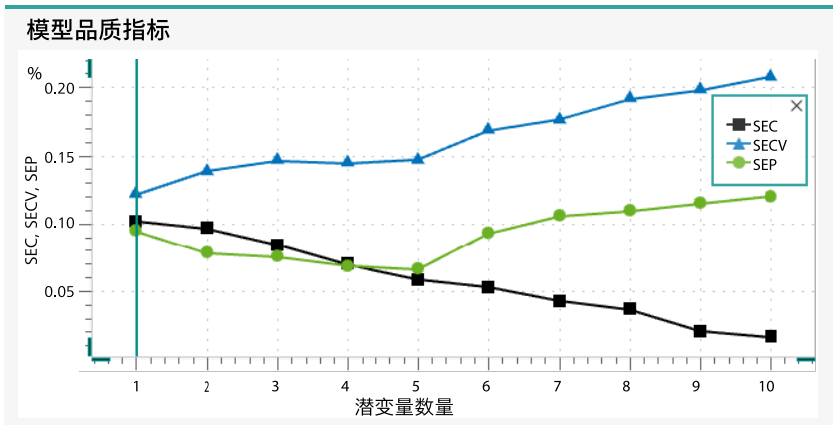
通过点击 和 可向上或向下移动各行，从而规定使用应用顺序。

3 计算模型

- 通过点击 **[计算]** 来计算模型。

4 验证模型

- 在模型导航器中通过点击 **校验量化模型** 切换至校验工艺步骤。
- 验证模型。将模型品质指标与之前创建的模型比较。



对于 EtOH 中的 H_2O（波长范围为 1350 至 1550 nm）并且导数阶次为 1 的 Gap-Segment，一个潜变量便足够。SECV 最小程度改善至 0.12 %。

因为该应用的基线移动不包含相关信息，则数据预处理尽管改善程度极小也可以保留。

5 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

如果在划分数据组或离群值识别中应考虑新创建的数据预处理，则可以重新划分数据组。

5.4 发布量化模型

为了能使用模型进行测定，必须发布模型。如此便可继续开发模型，而不会影响已发布的版本（从而不会影响进行的测定）。

发布量化模型

前提：

- 已计算并保存模型。
- 已打开模型。
- 已选择所需潜变量数量。

1 打开对话框

- 通过点击 打开 **发布量化模型** 对话框。

如果之前已发布模型并在方法段中使用，则可以通过激活 更新方法段 复选框自动更新这些方法段。
注意：非自动更新：
- **打开的方法段**
- **已签名和发布的方法段**
- **如果激活了数据权限过滤：无当前登录用户数据权限的方法段**

2 Nearest Neighbor Distance

如果激活了复选框 **计算 Nearest Neighbor Distance**，则 **Nearest Neighbor Distance**（**NND**）可用。该模型在潜变量空间中计算每个校正样品光谱与最近校正样品光谱之间的距离。所有确定的距离中的最大值将存储在 **PREDICT** 命令变量 **LimitNearestNeighborDistance**（NND 极限值）中 *（参见章节 2.3.2，第 17 页）*。

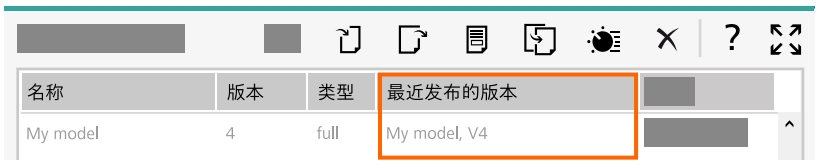
在预测时，量化模型以相同方式计算吸收的光谱与最近校正样品光谱之间的距离。该距离将存储在 **PREDICT** 命令变量 **NearestNeighborDistance**（NND）中 *（参见章节 2.3.2，第 17 页）*。

这两个变量可以相互比较，并可通过结果监视进行监控 （参见“创建操作过程段”，第 127 页）。

3 发布

- 通过点击 **[发布]** 发布模型。

在 **校正和评估** ▶ **量化模型** 下显示最近发布的版本：



PREDICT 命令这时可以访问发布的模型版本。

模型概览
如果选择了一个或多个量化模型，则右侧的模型概览以一览方式显示最终于熬的数据（最多 5 个不同的模型）。
如果之前保存的版本与之前发布的版本不符，则模型概览显示两个版本。

5.5 斜率/y 轴截距纠正

斜率/y 轴截距纠正 能够实现应用量化模型时的系统性错误修正。前提是一个牢固和可靠的量化模型。错误在统计上明显，但不是特别大。

系统性错误在相关图中被视作回归线与理想线（斜率 = 1，y-轴截距 = 0）的偏差。
随机错误同样可以在相关图中看到。点位围绕回归线越分散，随机错误越高。随机错误无法通过斜率/y 轴截距校正纠正。

斜率/y 轴截距校正用于以下情况：

- 如果重新验证量化模型或使用控制样品监控并证实模型品质指标因环境变化不再符合要求。
- 如果通过导入的 XDS-/DS 光谱创建了量化模型 （参见“更换 XDS/DS Analyzer（量化）”，第 150 页）。

有 2 个校正可用：

- **偏差**：校正偏差 — 样品参考值与预测值之间的平均偏差。
  修正后的偏差为 0。
- **斜率/y 轴截距校正**：修正相关图中斜率和 y-轴截距。
  校正后，斜率等于 1（相当于一条 45° 直线），y-轴截距等于 0。
  注意：根据斜率/y 轴截距校正，偏差等于 0。

请审慎应用偏差纠正，尤其是斜率/y 轴截距校正。
如果错误在统计上不明显，则不应用校正。如果错误在统计上明显，则彻底调查错误原因。尽可能排除错误原因。如果错误出于合理原因无法排除，则可以应用偏差纠正和斜率/y 轴截距校正。

注意样品数目：

- 得到可靠的预测值需要至少 20 个样品。
- 得到可靠的斜率预测值需要至少 30 个样品。

准备样品

斜率/y 轴截距校正通常通过用于量化模型再验证的样品进行，或通过用于量化模型性能监控的控制样品进行。

- 组合 **样品列表** 或 **搜索查询** 的样品。
- 确保每件样品包含以下内容：
  - 一个用于须修正参数的参考值。
  - 一个光谱。
  - 一个用于各个光谱的预测值。

创建斜率/y 轴截距校正

多个量化模型（可选）

- **如果要校正不同的量化模型，则须针对每个模型创建独立的斜率/y 轴截距校正。**
- **如果要校正同一量化模型的多个相同版本，则一次斜率/y 轴截距校正即可。**
  相同版本允许在以下方面有区别：
  - **不同的量化模型名称**
  - **不同的参考参数名称**
  - **只要不涉及校准数据集，不同的离群数据集**
  - **只要不涉及校准数据集，不同的校验数据集**
  - **不同的交叉校验参数**

  而相同版本则不得出现影响预测结果的区别：
  - **校准数据集必须相同。**
  - **参数化设置必须相同。**
  - **潜变量数量必须相同。**

1 新建斜率/y 轴截距校正

- 在 **校正和评估** ▶ **斜率/y 轴截距纠正** 下点击 。

2 命名斜率/y 轴截距校正

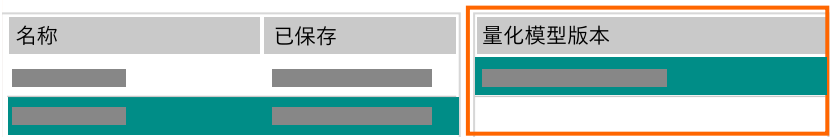
- 在 **名称** 栏中输入一个合适的名称，例如待校正量化模型的名称。

3 选择样品

- 选择从中使用样品创建斜率/y 轴截距校正的一个或多个 **样品列表** 或 **搜索查询**。

4 选择量化模型

量化模型 列表显示所有可以通过所选样品修正的的量化模型。



- 在 **量化模型** 列表中选择须修正的量化模型。
  注意：如果所用样品的预测值来自一个量化模型的多个版本，则必要时可选择所有这些版本。
- 点击 **[下一步]**。

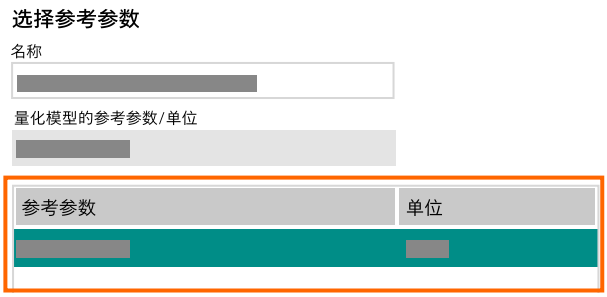
5 量化模型的参考参数

量化模型的参考参数/单位 栏显示所选量化模型参考参数的名称和单位。

- 必要时调整 **小数位** 的数量。

6 所选样品的参考参数

参考参数 列表显示所选样品所有可用的参考参数。



- 在该列表中选择所需的参考参数。

如果参考参数在样品列表或搜索查询中具有多个名称，可以选择所有这些名称。

7 确认输入

- 通过单击**[创建]**新建斜率/y 轴截距校正。

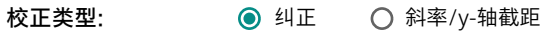
修正根据所选样品的参考值和预测值计算所选的样品。考虑满足以下两个条件的所有样品：

- 样品数据包含所选参考参数的参考值。
- 样品拥有通过所选量化模型计算得出的量化结果。

1 个新的选项卡显示斜率/y 轴截距校正。**样品** 区域列出了考虑到的样品。

8 校正类型

选择校正类型，**偏差** 或 **斜率/y 轴截距**。



9 标记离群值

- 为了将光谱标记为离群值，在 **样品** 区域中用右键点击光谱，并通过点击 **离群数据集** 将该光谱排除在计算之外。

符号标记光谱为离群值。从 **相关图** 区域和所有计算中移除光谱。

- 为了清除离群值标记，再次用右键点击该光谱并点击 **纠正数据集**。

重新用 标记光谱。光谱重新出现在 **相关图** 区域中并重新被引入所有计算。

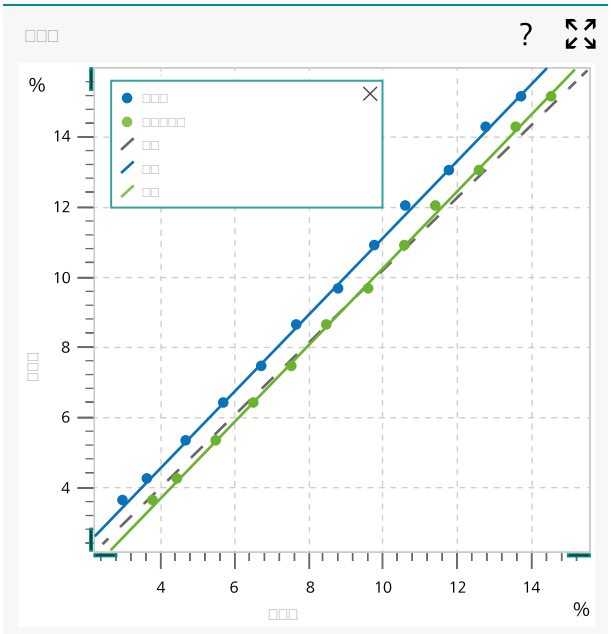
通过 [CTRL] 或 [SHIFT] 键可以同时选择和更改多个光谱
（参见章节 11.2，第 140 页）。

10 相关图

相关图 区域为每个光谱在 y 轴上显示 2 个具有相同参考值的点位，但在 x 轴上则显示不同的数值：

- 蓝色点位在 x 轴上显示由量化模型预测的**计算值**。
  - 将光标移至一个点位，以显示其残差（计算值和参考值之间的差异）。
- 绿色点位在 x 轴上显示**已校正数值**。已校正数值取决于所选的校正类型（偏差或斜率/y-轴截距）。
  - 将光标移至一个点位，以显示其残差（已校正数值和参考值之间的差异）。

偏差纠正的相关图

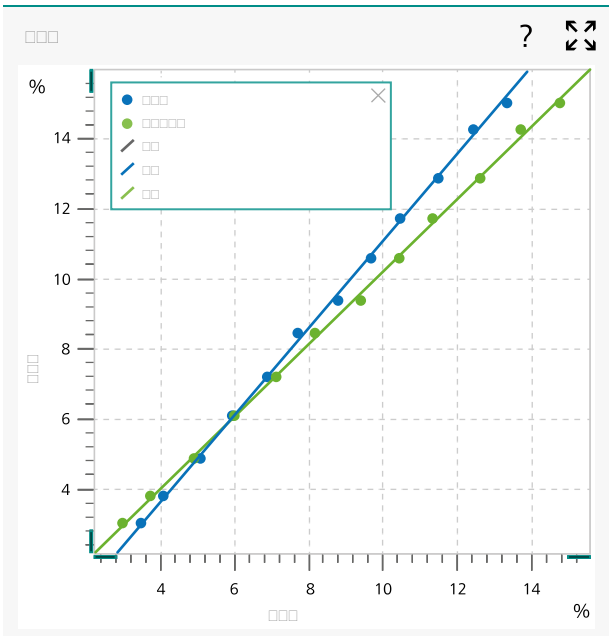


计算值（蓝色点位）将围绕偏差校正。校正的回归线（绿色）与 45° 理想虚线相交使得偏差等于 0。

上面的相关图中的示例显示了 SEP 由 0.82 改进为 0.24。

得到可靠的预测值需要至少 20 个样品。

斜率/y 轴截距校正的相关图



计算值（蓝色点位）将围绕斜率和 y-轴截距校正。已校正数值（绿色点位）具有一条理想的回归线（45°，y-轴截距为 0）。

上面的相关图中的示例显示了 SEP 由 0.86 改进为 0.12。

得到可靠的斜率预测值需要至少 30 个样品。

11 纠正值

在 **纠正值** 区域中根据校正类型显示 SEP 和斜率和 y-轴截距的纠正值：

- **SEP** 基于纠正数据集中的样品说明预测标准误差。
  注意：3 SEP 数值的公式均已考虑相应的自由度。因此，在样品数量少时，进行了校正的值可能大于未进行校正的值。
- 乘性纠正值 **斜率** 与加性纠正值 **y-轴截距** 将计算值（蓝色点位）转换为已校正数值（绿色点位）：
  已校正数值 = 计算值 × 斜率 + y-轴截距

纠正值

	SEP	斜率	y-轴截距
未纠正	0.86	1.000	0.00
偏差纠正	0.71	1.000	0.53
斜率/y轴截距校正	0.12	1.193	-1.11

1 2 3

该表格包含了以下计算值的数据（蓝色点位）：

- 回归直线的斜率**(1)**。
- 回归直线的 y-轴截距**(2)**。
- 回归直线的偏差**(3)**。

12 发布斜率/y 轴截距校正

后续无法再打开和编辑已发布的斜率/y 轴截距校正。

- 检查是否选择了正确的校正类型（偏差或斜率/y-轴截距）。
- 单击 打开 **发布斜率/y 轴截距校正** 对话框。
- 通过单击**[发布并关闭]**发布斜率/y 轴截距校正。

将同时发布并保存该斜率/y 轴截距校正。选项卡关闭，斜率/y 轴截距校正显示在概览列表中。

PREDICT 命令现在可以访问斜率/y 轴截距校正的发布版本。

6 识别模型

程序段执行在 OMNIS Software 中的图表说明请参见附录 *（参见“开发模型”，第 156 页）*。

根据具体使用情况，识别模型提供：

- 未知样品（例如果糖）的**身份验证**。结果为一个产品名称。
- 一个样品产品关联性（例如果糖）的**校验**。结果为是/否 - 校验成功或失败。

6.1 生成识别模型

生成识别模型

前提：

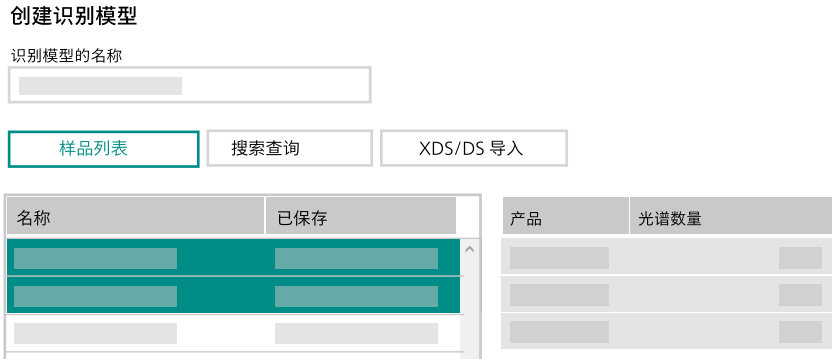
- 已创建包含光谱和产品名称的数据组 *（参见“记录光谱”，第 51 页）*。

1 生成和命名识别模型

- 在 **校正和评估** ▶ **识别模型** 下点击 。
  新的识别模型将显示在新的选项卡中。
- 在 **识别模型的名称** 输入栏中输入一个适当的名称。

2 选择样品

- 点击 **样品列表** 显示样品列表。
- 选择所有准备好的样品列表。



样品也可以通过搜索查询选择。此外，可以导入 XDS 仪器和 DS 仪器的样品 *（参见“更换 XDS/DS Analyzer（量化）”，第 150 页）*。

之后可以调整样品选项。

选择必须包含具有 1 个产品参数的样品。**产品**列列出包含的产品。

3 生成识别模型

- 点击 **[创建]**。
- 保存模型：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

6.2 选择样品并划分数据组

识别模型的选项卡在最上方显示 1 个水平导航栏，**导航器**。导航器会引导完成开发模型的后续步骤。

光谱的显示

在 3 个工艺步骤中，以曲线、点或表格行的形式显示各个光谱。所选的光谱将同时突出显示在所有图示和工艺步骤中。

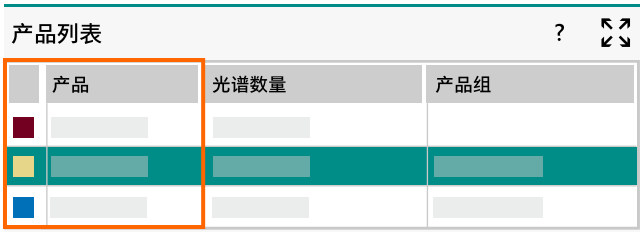
表格和图表

附录描述了表格和图表的处理：

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*
- 处理图表 *（参见章节 11.3，第 141 页）*

'选择样品'工艺步骤

产品列表 区域显示所选样品的产品：



每件产品都标有特定的产品颜色。点击 1 个产品颜色可以选择另一个颜色。

只要在产品列表中至少选择了一个产品，则 **光谱表** 区域显示所选产品的所有光谱：

输入栏分别显示样品的产品关联性（图中标记为橙色）。

以下图标表示已分配给数据组：

	此光谱已分配给校准数据集。
	此光谱已分配给校验数据集。
	此光谱已分配给离群数据集。
!	显示错误或无效的数据。参考工具提示。

光谱表 区域中的光谱也出现在 **频谱重叠** 区域中，并如下显示：

- 校准数据集中的光谱显示为**蓝色**，校验数据集中的光谱显示为**绿色**，离群数据集中的光谱显示为**红色**。
- 如果激活了软件拨动开关 **显示产品颜色**，则光谱将变为相应的产品颜色。

选择样品 工艺步骤能够实现以下功能：

- **调整样品选择**
  增加更多光谱或删除光谱。
- **划分数据组**
  自动或手动数据组的划分：
  - **校准数据集**：通过校准数据集的光谱和产品关联性计算模型。
  - **校验数据集**：校验数据集的光谱和产品关联性仅用于校验模型。
  - **离群数据集**：离群数据集不会对模型及其校验产生影响。离群值仅显示于一些表格中以供参考。

一个模型可以在无校验数据集的情况下开发，例如当第一阶段中仅有限数量的样品可用或当校验仅采用外部数据组时。

调整样品选择

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型 *（参见"生成识别模型"，第 86 页）*。

- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

1 增加或删除光谱

样品选择和样品所属性可随时在 **光谱表** 区域中调整：

- 如需选择其光谱须添加至光谱表的样品，请点击 +。
- 为了从光谱表中移除光谱，选择光谱并点击 –。
  注意：相关样品包括光谱保留在数据库中。

2 更改产品所属性

- 选择所有应为其分配其它产品的所有光谱。
- 右键点击所选光谱并在上下文菜单**分配产品**中进行选择。
  显示输入窗口：
  - 点击 **新产品**。既选择一个现有的产品或输入新的产品名称。
  - 点击 **[分配]** 将产品分配给所选光谱。

3 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

自动划分数据组

离群值识别能够实现自动创建离群数据集。剩余的光谱可以自动划分为校准数据集和校验数据集。

如果校正和校验已分别采集了样品，则可以手动分配样品。

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。
- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

1 调用数据组分划

- 在 **光谱表** 区域点击 。

将打开对话框 **数据划分**。

2 确定离群数据集

- 如需自动将光谱分配给离群数据集，请激活 **查明异常数值** 软件拨动开关。自动离群值识别能够基于光谱中的偏差识别光谱离群值。
  - 必要时调整 **显著性水平**。显著性水平越高，就能识别出越多的光谱离群值。典型数值为 5 % 或 1 %。

3 确定校验数据集

自动划分时将确保校准数据集和校验数据集对于总体而言具有代表性并且相互不关联。

- 如需自动将光谱分配给校验数据集，请激活 **确定校验数据集** 软件拨动开关。
  - 在 **百分率** 栏中定义用于校验数据集的光谱百分比，例如在 20 % 和 30 % 之间。

4 设定选项

确定数据组分划的选项：

- **应用参数化设置**：将数据预处理和波长选择应用于光谱 *（参见“设置识别模型的参数”，第 95 页）*。
  注意：稍后更改参数化对数据组归类没有影响。除非重新划分数据组。
- **保留离群值**：已有的离群值在划分时将被保留并且不予考虑。该选项可能会导致离群数据集的扩展，即便是在 **显著性水平** 不变的情况下。
- **保留校验数据集**：保留校验数据集中现有的光谱并在划分时不予考虑。该选项会导致离群数据集的扩展，即便是在 **百分率** 不变的情况下。

5 启动自动划分

- 点击 **[划分]**。

数据组将根据进行过的设置划分。

6 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

影响图和得分图

自动数据组分划后，可以提供“影响图”和“得分图”图表：

- 在 **选择样品** 工艺步骤中，在其中一个区域点击 并选择图表 **影响图** 或 **得分图**。

影响图和得分图基于计算方法 **PCA** （主要成分分析）。主要成分的数量选择须考虑到所设定的方差至少应为 95 %。

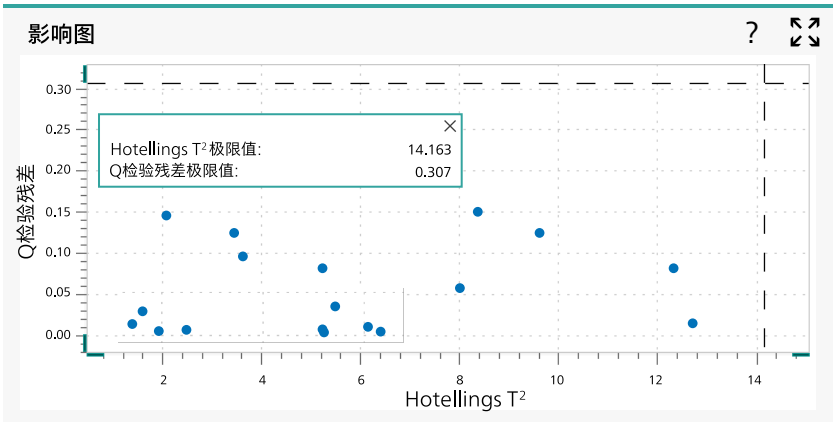
PCA 的起点是下列形式的光谱：

- 在自动数据组分划时，如果禁用了选项 **应用参数化设置**，不进行数据预处理和波长选择的光谱。

- 在自动数据组分划时，如果启用了选项 **应用参数化设置**，进行数据预处理和波长选择的光谱。
  在选项启用时注意：如果更改参数化，仅在自动重新数据组分划后影响图和得分图才可用。

影响图

影响图 描述了光谱的特征属性，并有助于确定离群值。



处理图表
可以自定义图表显示，并可选择单个点位或多个点位 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。

每个点位都代表一个光谱。Hotelling T^2 和 Q 检验残差的高数值表示可能存在离群值。

Hotelling T^2 数值较高的光谱表明相关样品的极端成分。

Q 检验残差较大的光谱表明相关样品含有异常化学成分。

虚线展示了所设定显著性水平的危险数值（极限值）。在自动数据组分划时，如果未确定离群值，则显著性水平为 5 %。

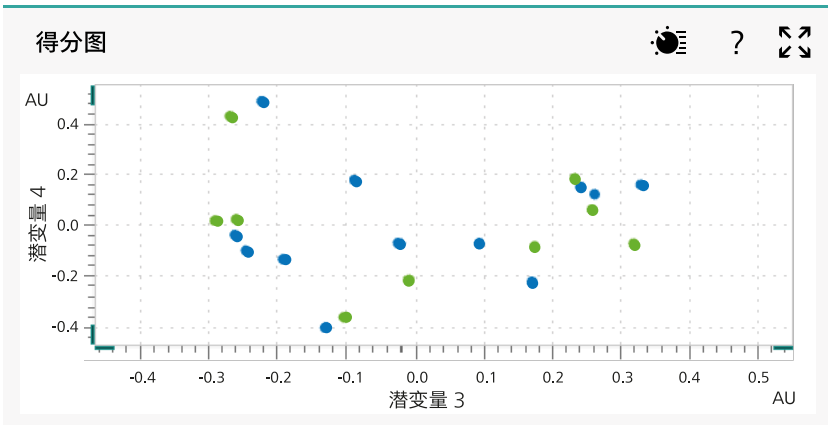
上图显示了无可能的离群值出现。所有点位均在虚线内。

得分图

如果一个光谱的 Hotelling T^2 数值将所有主要成分的得分归纳为一个单一的数值，通过该得分图可以更加详细地分析这些得分。

得分图中的每个点位都代表一个光谱。最前面两个主要成分的得分可以在 x 轴和 y 轴上读取。这些得分已被标准化，每个主要成分的重量都相同。

在 **属性** 下也可显示其他每对主要成分。



手动分划数据组（可选）

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。
- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

在手动分划前，如果自动进行数据组分划，则提供 影响图 和 得分图。

1 重新分配光谱

- 在其中 1 个区域中选择光谱。
  在影响图中的选择示例:
  - 打开 **影响图** 区域。
  - 在影响图中选择一个点位或多个点位 *（参见"选择多个点或多个曲线"，第 142 页）*。
  - 通过右键点击其中一个所选的点位打开上下文菜单。将光谱分配给数据组:

    校准数据集

    验证数据集

    离群数据集

2 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

6.3 计算识别模型

第一个模型可以在无参数化设置的情况下计算。由此得到了一个用于校验结果的比较标准。之后参数化设置的影响可以更好地评估。

如果干扰或其它伪迹让某些波长无法使用，则这些波长可以直接被排除 *（参见"设置识别模型的参数"，第 95 页）*。

计算模型

前提:

- **校正和评估** 工作区中识别模型已打开并位于前台。

1 开始计算

- 通过点击 **[计算]** 来计算模型。

如果 [计算] 按键处于非活动状态，则可能有以下原因:
- **已计算完模型，自此以后未进行更改。**
- **一个工艺步骤中包含了错误的输入。在导航器中以红色显示相关区域的工艺步骤。有错误输入内容的栏边框为红色。**

6.4 校验识别模型

校验识别模型 工艺步骤能够实现通过以下样品校验:

- **校准数据集中的样品**
  这些样品已用于创建模型。因此，通过模型正确分类比其它样品更简单。
- **校验数据集中的样品（如果可用）**
  这些样品与模型不相关。您的校验结果是未知样品身份验证的更佳标准。

以下称为产品，即便产品组同样效果不错。产品组包含多个产品并用于模型层级 *（参见章节 8，第 114 页）*。

身份验证样品

模型会给每个产品的样品分配 1 个概率。

这些概率相互不相关。这些数值的总和不为 100%。
这些数值需相互关联进行观察，从而可对不同产品进行比较。

评估通过可设置的**概率阈值**和各个产品的定性进行:

1. 对于概率高于概率阈值的每个产品，要用相应的定性模型对样品进行定性。如果定性失败，则将相应产品的概率置零。
2. 用步骤 1 中修正的概率进行评估：
   a. 如果没有概率高于概率阈值，则身份验证失败（身份验证状态 **未校验**）。
   b. 如果只有唯一一个概率高于概率阈值，则样品识别成功并将其分配给相应产品（身份验证状态 **被识别**）。
   c. 如果有多个概率高于概率阈值，则预测含糊不清且身份验证失败（身份验证状态 **含糊不清**）。

样品的校验结果

OMNIS Software 比较由模型确定的产品与预期产品。由此得到校验结果：

- **成功**：身份验证成功并与预期产品一致。
- **失败**：不一致，未进行身份验证或身份验证含糊不清。

校验一览 区域

校验一览 区域包含校准数据集和校验数据集的样品结果（如果可用）。

左侧是所有校准样品和验证样品的概览：

总体	
成功 %	正确分类样品的 %
成功	正确分类样品的数量
失败	错误分类样品的数量
光谱数量	校准数据集和校验数据集中的光谱数

右侧是各个产品和产品组的概览：

产品/产品组	失败	成功	成功 %
产品 A	未分类为产品 A 的产品 A 样品数量	正确分类的产品 A 样品的数量	正确分类的产品 A 样品的 %
产品 B	未分类为产品 B 的产品 B 样品数量	正确分类的产品 B 样品的数量	正确分类的产品 B 样品的 %
产品组 C	未分类为产品组 C 的产品组 C 样品数量	正确分类的产品组 C 样品的数量	正确分类的产品组 C 样品的 %

校验结果 区域

校验结果 区域显示了各样品的具体结果。显示在 **校验一览** 区域中选择的所有产品的样品。

对于每个样品，将显示其原始概率超过概率阈值的产品。如果显示 0.0 % 的概率，则相应产品的定性失败。

处理和复制数据

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*

优化识别模型

以下措施能够帮助改善识别模型。

1 调整概率阈值

- 如果许多预测都含糊不清，或者出现许多 0.0 % 概率，则可以提高概率阈值。
- 如果有许多样品因未达到概率阈值而无法识别，则可降低概率阈值。
- 如需调整 概率阈值，执行以下步骤：
  - 通过点击 打开识别模型的属性。
  - 在选项列表中选择 **参数**。
  - 调整 **概率阈值**。标准值为 80 %。
  - 重新计算和校验识别模型。

2 调整参数化设置

- 调整数据预处理 *（参见"数据预处理"，第 98 页）*。
- 调整波长范围 *（参见"波长选择"，第 96 页）*。

3 开发 模型层级

模型层级 能够实现识别模型的层级构建和已验证样品的量化分析 *（参见章节 8，第 114 页）*。

6.5 设置识别模型的参数

设置识别模型的参数 工艺步骤能够对光谱进行优化。伪迹和非线性将被修正。正确执行将改善模型的参数化设置、精确度和耐用性。

将参数化应用到：

- 校准数据集中的所有光谱
- 校验数据集和离群数据集中的所有光谱

对于 样品 工作区中的预测，记录 1 个样品的光谱并用模型进行评估。也将模型中定义的参数化应用到该光谱上。

提供了两个参数化设置方式：

- 定义须使用的波长范围。
- 应用数据预处理以便将光谱调整为适当的形式。

光谱目检在 **选择样品** 工艺步骤中开始。

显示光谱

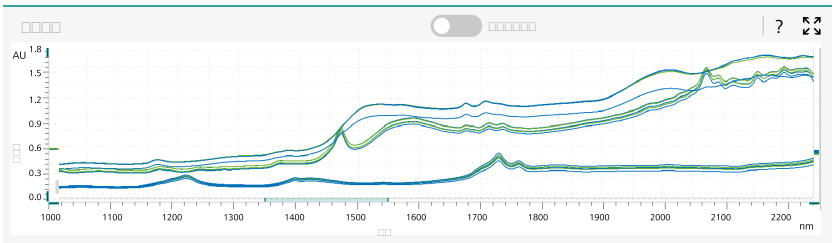
前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 需检查光谱的选择

- 在 **选择样品** 工艺步骤（**产品列表** 区域中）选择所有应显示其光谱的产品。

频谱重叠 区域显示所选产品的光谱。



图中显示的是 3 个不同产品的光谱。不同产品的光谱可以通过目检明确或不明确的区分。

光谱按照如下方式显示:

- 校准数据集中的光谱显示为**蓝色**，校验数据集中的光谱显示为**绿色**，离群数据集中的光谱显示为**红色**。
- 如果激活了软件拨动开关 显示产品颜色，则光谱将变为相应的产品颜色。

2 检查光谱

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*
- 处理图表 *（参见章节 11.3，第 141 页）*

后续步骤

- 波长选择 *（参见"波长选择"，第 96 页）*
- 定义数据预处理 *（参见"数据预处理"，第 98 页）*

6.5.1 波长选择

波长选择可以改进识别模型。示例：如果吸收量数值较高时噪音可见，则可以将相关的波长范围排除。

模型采用定义的波长范围。如果未定义波长范围，则模型使用所有波长。

定义波长范围

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 选择须展示的光谱

选择要显示其光谱的产品：

- 在工艺步骤 **选择样品** 的 **产品列表** 区域中选择产品。
  或者
- 在工艺步骤 **设置识别模型的参数** 的产品列表中选择产品。

2 增加波长范围

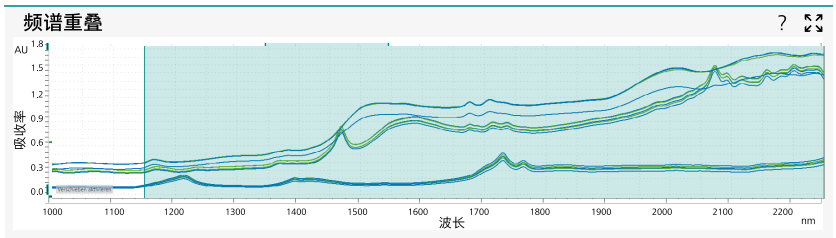
- 在导航器中切换至工艺步骤 **设置识别模型的参数**。
- 在 **波长范围** 区域中通过点击 增加一个波长范围。

波长范围将被增加。该范围首先将覆盖所有波长范围。

3 确定波长范围

按照以下方式之一的方法设定波长范围：

- 如需通过输入数字设定波长范围，请在相应的输入栏内输入 **起始波长** 和 **结束波长**。
- 如需在图表中设定波长范围，请按如下方式操作：
  - 在 **频谱重叠** 区域点击 **[激活移动]**。
  - 将光标移至突出显示区域左缘，直至光标显示为 。
  - 通过按下鼠标左键移动左缘至相应的位置。
  - 在突出显示区域右侧同样这样操作。
  - 为移动波长范围，将光标移到该区域上方，直至光标显示为 ⇔。通过按住鼠标左键从左至右移动区域。
  - 点击 **[取消激活移动]**。



图中定义了一个 1150 至 2250 nm 的波长范围。该区域被模型使用。

4 增加更多的波长范围

通过点击 可以增加更多波长范围。

波长范围不得重叠
一个新的波长范围首先与现有的波长范围重叠。调整波长范围使其不再重叠。

5 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果在划分数据组或离群值识别时应考虑新创建的波长选择，则可以重新划分数据组。

6.5.2 数据预处理

适当的数据预处理可以改善识别模型。示例：基线移动对于大部分应用而言不包含相关信息并可以移除。

定义数据预处理

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 选择须展示的光谱

选择要显示其光谱的产品:

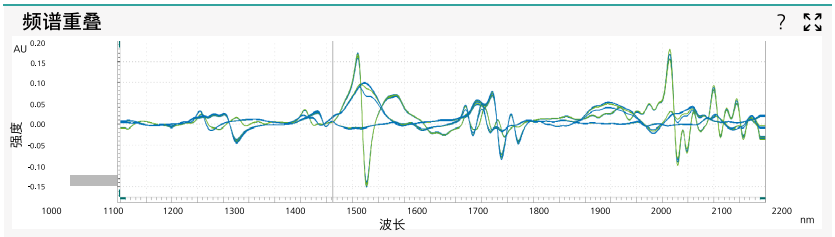
- 在工艺步骤 **选择样品** 的 **产品列表** 区域中选择产品。
  或者
- 在工艺步骤 **设置识别模型的参数** 的产品列表中选择产品。

2 增加数据预处理步骤

- 在导航器中切换至工艺步骤 **设置识别模型的参数**。
- 通过点击 在 **数据预处理** 区域内增加数据预处理步骤。
- 在 **数据预处理** 栏中选择数据预处理方式，填写相应的栏。
  持续（与波长不相关）移除基线移动的一阶导数 Gap-Segment 的示例:

在 **频谱重叠** 区域中立即显示步骤 1 中所选产品的经过预处理的光谱。

数据预处理后，光谱会有所变化，例如：



3 增加更多的数据预处理步骤

点击 可增加更多数据预处理步骤。

使用多个数据预处理步骤时，顺序可能是至关重要的。Gap-Segment **或** Savitzky-Golay **在** SNV **之前首选，**SNV **在** detrend **之前首选。**

通过点击 和 可向上或向下移动各行，从而规定使用应用顺序。

4 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果在划分数据组或离群值识别中应考虑新创建的数据预处理，则可以重新划分数据组。

6.6 发布识别模型

为了能使用模型进行测定，必须发布模型。如此便可继续开发模型，而不会影响已发布的版本（从而不会影响进行的测定）。

发布识别模型

前提:

- 已计算并保存模型。
- 已打开模型。

1 打开对话框

- 通过点击 打开 **发布识别模型** 对话框。

如果之前已发布模型并在方法段中使用，则可以通过激活 **更新方法段** 复选框自动更新这些方法段。

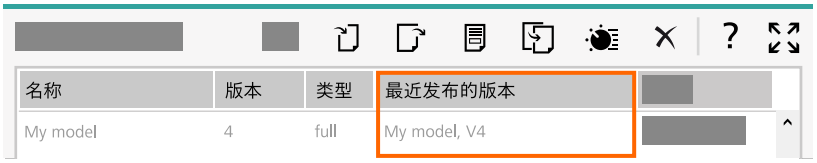
注意：非自动更新：

- 打开的方法段
- 已签名和发布的方法段
- 如果激活了数据权限过滤：无当前登录用户数据权限的方法段

2 发布

- 通过点击 **[发布]** 发布模型。

在 **校正和评估** ▶ **识别模型** 下显示最近发布的版本：



PREDICT 命令这时可以访问发布的模型版本。

7 定性模型

过程在 OMNIS Software 中的图表说明请参见附录 *（参见"开发模型"，第 156 页）*。

定性模型能够将一组样品与其他样品区分开来。定性模型适用于例如将可用样品（有效样品）与不可用样品（无效样品）区分开来。

7.1 创建定性模型

创建定性模型

前提:

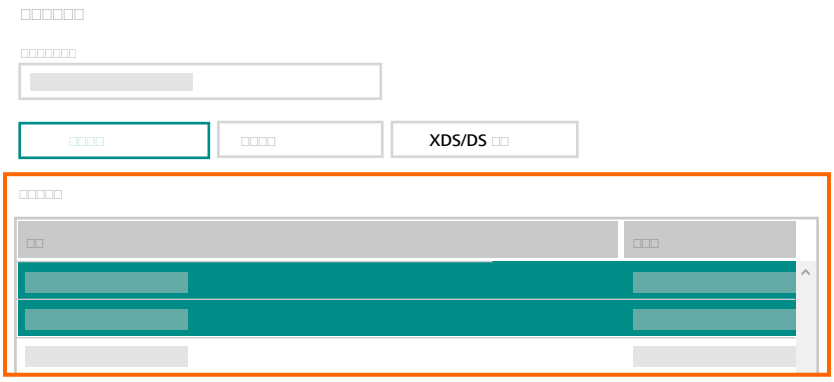
- 已创建包含光谱的数据组 *（参见"记录光谱"，第 51 页）*。

1 生成定性模型并给其命名

- 在 **校正和评估** ▶ **定性模型** 下点击 。
  新的定性模型将显示在新的选项卡中。
- 在 **定性模型的名称** 输入栏中输入 1 个适当的名称。

2 选择校准样品

- 点击 **样品列表** 显示样品列表。
- 选择准备好的校准数据集样品列表。

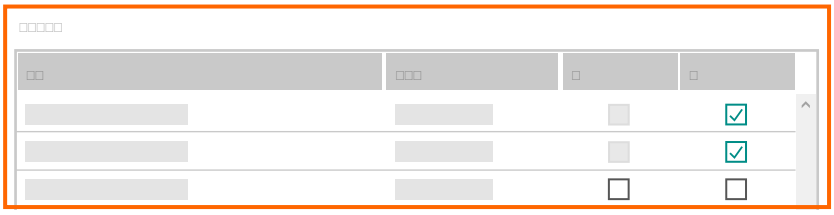


样品也可以通过搜索查询选择。此外，可以导入 XDS 仪器和 DS 仪器的样品 *（参见"更换 XDS/DS Analyzer（量化）"，第 150 页）*。

之后可以调整样品选项。

3 选择校验样品（可选）

- 点击 **添加校验数据集**。
- 通过相应的复选框将准备好的校验数据集样品列表分配给正或负校验数据集。



4 创建定性模型

- 点击 **[创建]**。
- 保存模型：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

7.2 选择样品并划分数据组

定性模型的选项卡在最上方显示 1 个水平导航栏，**导航器**。导航器会引导完成开发模型的后续步骤。

光谱的显示

在 3 个工艺步骤中，以曲线、点或表格行的形式显示各个光谱。所选的光谱将同时突出显示在所有图示和工艺步骤中。

表格和图表

附录描述了表格和图表的处理：

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*
- 处理图表 *（参见章节 11.3，第 141 页）*

'选择样品'工艺步骤

校准数据集 区域列出了校准数据集中的光谱：

如果选择了校验数据集的样品，则在 **验证数据集** 区域中显示其光谱。

以下图标标示了与数据组的对应关系：

	此光谱已分配给校准数据集。
	此光谱已分配给正校验数据集。
	此光谱已分配给负校验数据集。
	手动给数据组分配光谱。
	自动给数据组分配光谱。
	已在 OMNIS Software 中记录了该光谱。
	从外部文件中导入了光谱。

在 **频谱重叠** 区域中，校准数据集中的光谱以**蓝色**显示，正校验数据集中的光谱以**绿色**显示，负校验数据集中的光谱以**红色**显示。

选择样品 工艺步骤能够实现以下功能：

- **调整样品选择**
  增加更多光谱或删除光谱。
- **划分数据组**
  自动或手动数据组的划分：
  - **校准数据集**：通过校准数据集的光谱计算模型。
  - **校验数据集**：校验数据集的光谱仅用于校验模型。

1 个模型可以在无校验数据集的情况下开发，例如当第一阶段中仅有限数量的样品可用或当使用外部数据组进行校验时。

调整样品选择

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型 *（参见“创建定性模型”，第 101 页）*。
- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

1 增加或删除光谱

- 增加光谱：在 **校准数据集** 或 **验证数据集** 区域中点击 +。
- 移除光谱：选择光谱并点击 –。
  注意：相关样品包括光谱保留在数据库中。

2 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

自动划分数据组

该划分涵盖了校准数据集和两个校验数据集的所有光谱。该划分提供了以下选项：

- 自动创建负校验数据集（可选）
  负校验数据集的光谱通过离群值识别进行确定（光谱离群值）。
- 自动创建正校验数据集（可选）
  剩余的光谱可以自动划分为校准数据集和正校验数据集。

样品也可随时手动分配。

前提：

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。
- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

1 调用数据组分划

- 在 **校准数据集** 区域点击 。

将打开对话框 **数据划分**。

2 确定负校验数据集（可选）

- 为了自动将光谱离群值分配给负校验数据集，请激活 **确定负光谱** 软件拨动开关。
  - 必要时调整 **显著性水平**。显著性水平越高，就能识别出越多的光谱离群值。典型数值为 5 % 或 1 %。

负光谱的确定要谨慎使用。高显著性水平可提高正结果的可靠性。但是，这也可能导致更多的正样品被漏检，并被错误地分类为负。
随后必须对所确定负校验数据集中的光谱进行检查，以确定其是否确实为离群值。影响图和得分图对此可以提供帮助。

3 确定正校验数据集（可选）

自动划分时将确保校准数据集和正校验数据集对总体而言具有代表性并且互不相关。

- 如需自动将光谱分配给正校验数据集，请激活 **确定正光谱** 软件拨动开关。
  - 在 **百分率** 栏中定义用于正校验数据集的光谱百分比，例如在 20 % 和 30 % 之间。

4 设定选项

确定数据组分划的选项：

- **应用参数化设置**：将数据预处理和波长选择应用于光谱 *（参见"定性模型参数设置"，第 109 页）*。
  注意：稍后更改参数化对数据组归类没有影响。除非重新划分数据组。
- **保留负光谱**：保留负校验数据集中现有的光谱并在划分时不予考虑。该选项可能会导致负校验数据集的扩展，即便是在 **显著性水平** 不变的情况下。
- **保留正光谱**：保留正校验数据集中现有的光谱并在划分时不予考虑。该选项会导致正校验数据集的扩展，即便是在 **百分率** 不变的情况下。

如果为校验数据集增加了独立的光谱，则要激活 保留负光谱 和 保留正光谱 选项。否则，所有光谱将被合并和重新划分，这可能导致不理想的结果。

5 启动自动划分

- 点击 **[划分]**。

数据组将根据进行过的设置划分。

6 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

影响图和得分图

自动数据组分划后，可以提供"影响图"和"得分图"图表：

- 在 **选择样品** 工艺步骤中，在其中一个区域点击 并选择图表 **影响图** 或 **得分图**。

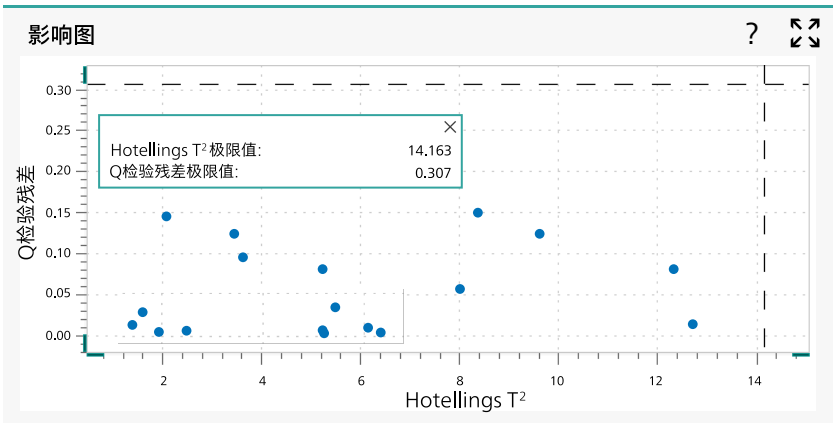
影响图和得分图基于计算方法 **PCA** （主要成分分析）。主要成分的数量选择须考虑到所设定的方差至少应为 95 %。

PCA 的起点是下列形式的光谱：

- 在自动数据组分划时，如果禁用了选项 **应用参数化设置**，不进行数据预处理和波长选择的光谱。
- 在自动数据组分划时，如果启用了选项 **应用参数化设置**，进行数据预处理和波长选择的光谱。
  在选项启用时注意：如果更改参数化，仅在自动重新数据组分划后影响图和得分图才可用。

影响图

影响图 描述了光谱的特征属性，并有助于确定负校验数据集的光谱离群值。



处理图表

可以自定义图表显示，并可选择单个点位或多个点位 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。

每个点位都代表一个光谱。Hotelling T^2 和 Q 检验残差的高数值表示可能存在离群值。

Hotelling T^2 数值较高的光谱表明相关样品的极端成分。

Q 检验残差较大的光谱表明相关样品含有异常化学成分。

虚线展示了所设定显著性水平的危险数值（极限值）。如果在自动数据组分划时未确定负光谱，则显著性水平为 5 %。

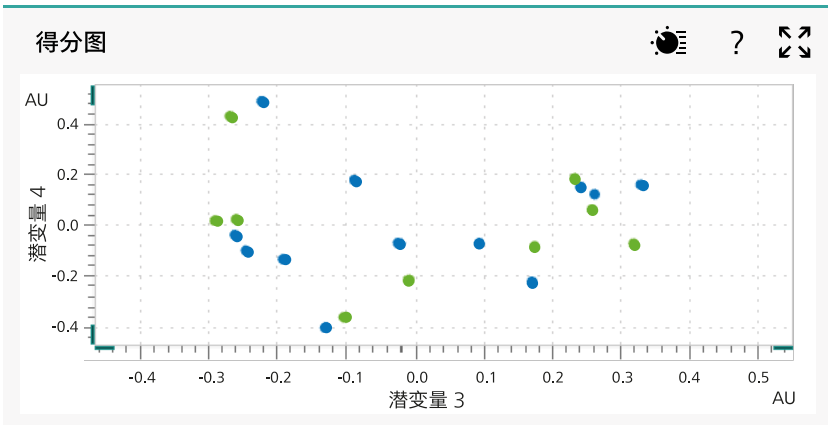
上图未展示可能的负光谱。所有点位均在虚线内。

得分图

如果一个光谱的 Hotelling T^2 数值将所有主要成分的得分归纳为一个单一的数值，通过该得分图可以更加详细地分析这些得分。

得分图中的每个点位都代表一个光谱。最前面两个主要成分的得分可以在 x 轴和 y 轴上读取。这些得分已被标准化，每个主要成分的重量都相同。

在 **属性** 下也可显示其他每对主要成分。



手动分划数据组（可选）

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。
- 导航器在工艺步骤 **选择样品** 中。

在手动分划前，如果自动进行数据组分划，则提供 影响图 和 得分图。

1 重新分配光谱

- 在其中 1 个区域中选择光谱。
  在影响图中的选择示例:
  - 打开 **影响图** 区域。
  - 在影响图中选择一个点位或多个点位 *（参见"选择多个点或多个曲线"，第 142 页）*。
  - 通过右键点击其中一个所选的点位打开上下文菜单。将光谱分配给数据组:
    正校验数据集
    负校验数据集
    校准数据集

2 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

7.3 计算定性模型

第一个模型可以在无参数化设置的情况下计算。由此得到了一个用于校验结果的比较标准。之后参数化设置的影响可以更好地评估。

如果噪音或其它伪迹让某些波长无法使用，则这些波长可以直接被排除 *（参见"定性模型参数设置"，第 109 页）*。

计算模型

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开定性模型。

1 开始计算

- 通过点击 **[计算]** 来计算模型。

如果 [计算] 按键处于非活动状态，则可能有以下原因:
- **已计算完模型，自此以后未进行更改。**
- **一个工艺步骤中包含了错误的输入。在导航器中以红色显示相关区域的工艺步骤。有错误输入内容的栏边框为红色。**

7.4 校验定性模型

验证定性模型 工艺步骤能够实现通过以下样品校验:

- **校准数据集中的样品**
  这些样品已用于创建模型。因此，通过模型正确分类比其它样品更简单。
- **正和负校验数据集中的样品（如有）**
  这些样品与模型不相关。您的校验结果是定性未知样品的更佳标准。

样品的校验结果

定性模型为每个样品确定 1 个结果（有效或无效）。对于校准数据集和正校验数据集中的样品，预期会得到正结果。对于负校验数据集中的样品，预期会得到负结果。OMNIS Software 比较由模型确定的结果与预期结果。由此得到校验结果:

- **成功**: 由模型确定的结果与预期结果一致。
- **失败**: 由模型确定的结果与预期结果不一致。

校验一览 区域

校验一览 区域包含校准数据集和校验数据集的样品结果（如有）。

左侧是所有校准样品和验证样品的概览：

总体	
成功 %	正确预测样品的 %
成功	正确预测样品的数量
失败	错误预测样品的数量
光谱数量	校准数据集和两个校验数据集中的光谱数量

右侧是各个数据组的概览。

校验结果 区域

校验结果 区域显示了各样品的具体结果。显示在 **校验一览** 区域中选择的所有数据组的样品。

优化定性模型

以下措施可以帮助优化定性模型：

- 调整数据预处理 *（参见"数据预处理"，第 112 页）*。
- 调整波长范围 *（参见"波长选择"，第 110 页）*。

在重新进行数据组的划分时，可通过确定无效光谱按要求调整定性模型：

- 较高的显著性水平可提高有效结果的可靠性。这意味着：假的正结果更少，但是更多的正结果会被漏检。
- 更低的显著性水平（或放弃确定负光谱）可能导致更少的正样品被漏检。这意味着：假的负结果减少，但是更多的负结果会被错误地分类为正。

7.5 定性模型参数设置

参数设置定性模型 工艺步骤能够对光谱进行优化。伪迹和非线性将被修正。正确执行将改善模型的参数化设置、精确度和耐用性。

将参数化应用到：

- 校准数据集中的所有光谱
- 两个校验数据集中的所有光谱

对于 样品 工作区中的预测，记录 1 个样品的光谱并用模型进行评估。也将模型中定义的参数化应用到该光谱上。

两个参数化设置方式可用：

- 定义须使用的波长范围。
- 应用数据预处理以便将光谱调整为适当的形式。

光谱目检在 **选择样品** 工艺步骤中开始。

显示光谱

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 '选择样品'工艺步骤

- 在导航器中点击 **选择样品** 工艺步骤。

在该工艺步骤中可以同时以表格形式和曲线形式检查光谱。如果已进行了自动数据组分划，影响图和得分图也可用。

2 检查光谱

- 处理表格 *（参见章节 11.2，第 140 页）*
- 处理图表 *（参见章节 11.3，第 141 页）*

后续步骤

- 波长选择 *（参见"波长选择"，第 110 页）*
- 定义数据预处理 *（参见"数据预处理"，第 112 页）*

7.5.1 波长选择

波长选择可改进定性模型。示例：如果吸收量数值较高时噪音可见，则可以将相关的波长范围排除。

模型采用定义的波长范围。如果未定义波长范围，则模型使用所有波长。

定义波长范围

前提:

- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。

1 '参数设置定性模型'工艺步骤

- 在导航器中点击 **参数设置定性模型**。

2 增加波长范围

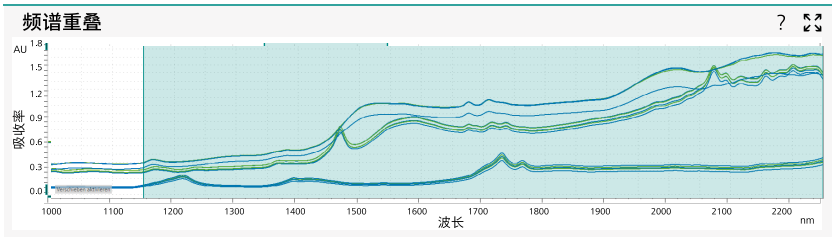
- 在 **波长范围** 区域中通过点击 增加一个波长范围。

波长范围将被增加。该范围首先将覆盖所有波长范围。

3 确定波长范围

按照以下方式之一的方法设定波长范围：

- 如需通过输入数字设定波长范围，请在相应的输入栏内输入 **起始波长** 和 **结束波长**。
- 如需在图表中设定波长范围，请按如下方式操作：
  - 在 **频谱重叠** 区域点击 **[激活移动]**。
  - 将光标移至突出显示区域左缘，直至光标显示为 ↔。
  - 通过按下鼠标左键移动左缘至相应的位置。
  - 在突出显示区域右侧同样这样操作。
  - 为移动波长范围，将光标移到该区域上方，直至光标显示为 ⇔。通过按住鼠标左键从左至右移动区域。
  - 点击 **[取消激活移动]**。



图中定义了一个 1150 至 2250 nm 的波长范围。该区域被模型使用。

4 增加更多的波长范围

通过点击 ⊞ 可以增加更多波长范围。

波长范围不得重叠

一个新的波长范围首先与现有的波长范围重叠。调整波长范围使其不再重叠。

5 保存模型

- 点击 💾 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果在数据组的划分中应考虑新创建的波长选择，则可以重新进行数据组的划分。

7.5.2 数据预处理

适当的数据预处理可以改善定性模型。示例：基线移动对于大部分应用而言不包含相关信息并可以移除。

定义数据预处理

前提:

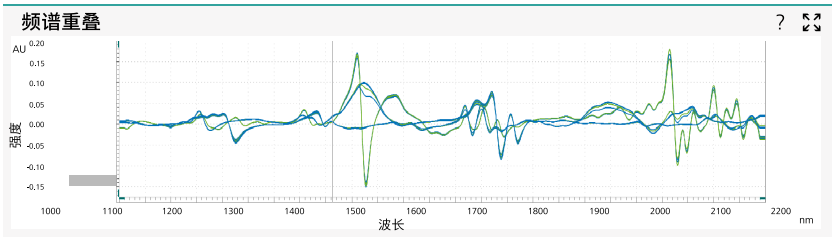
- 在 **校正和评估** 工作区中已在前台打开模型。
- 导航器在工艺步骤 **参数设置定性模型** 中。

1 增加数据预处理步骤

- 通过点击 在 **数据预处理** 区域内增加数据预处理步骤。
- 在 **数据预处理** 栏中选择数据预处理方式，填写相应的栏。持续（与波长不相关）移除基线移动的一阶导数 Gap-Segment 的示例：

在 **频谱重叠** 区域中立即显示步骤 1 中所选产品的经过预处理的光谱。

数据预处理后，光谱会有所变化，例如：



2 增加更多的数据预处理步骤

点击 可增加更多数据预处理步骤。

使用多个数据预处理步骤时，顺序可能是至关重要的。Gap-Segment **或** Savitzky-Golay **在** SNV **之前首选，**SNV **在** detrend **之前首选。**

通过点击 和 可向上或向下移动各行，从而规定使用应用顺序。

3 保存模型

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

如果在数据组的划分时应考虑新创建的数据预处理，则可以重新划分数据组。

7.6 发布定性模型

为了能使用模型进行测定，必须发布模型。如此便可继续开发模型，而不会影响已发布的版本（从而不会影响进行的测定）。

发布定性模型

前提：

- 已计算并保存模型。
- 已打开模型。

1 打开对话框

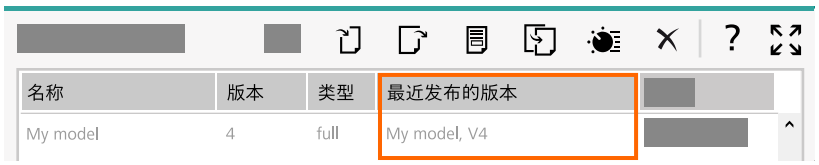
- 通过点击 打开 **发布定性模型** 对话框。

如果之前已发布模型并在方法段中使用，则可以通过激活 更新方法段 复选框自动更新这些方法段。
注意：非自动更新：
- **打开的方法段**
- **已签名和发布的方法段**
- **如果激活了数据权限过滤：无当前登录用户数据权限的方法段**

2 发布

- 通过点击 **[发布]** 发布模型。

在 **校正和评估** ▶ **定性模型** 下显示最近发布的版本：



PREDICT 命令这时可以访问发布的模型版本。

8 模型层级

一个模型层级可以实现以下项目：

- **构建识别模型的层级**
  如果某个识别模型难以区分相似产品，可将该区分任务交由为此经过优化的子模型处理。
  示例：具有 4 件产品的识别模型区分诸如果糖和葡萄糖等类似产品的效果不佳。如果将果糖和葡萄糖归纳在"糖"的产品组中，则主模型可以在糖与其它两种产品之间很好地区分。如果样品被识别为糖，则子模型负责果糖和葡萄糖之间的分类。
  必要时可以增加其他层级分级。
- **将量化模型与产品相关联**
  已识别的样品可进行量化分析。对于每个感兴趣的参数，要将量化模型与相应的产品相关联。可以选择应用斜率/y 轴截距校正。
- **分层构建量化模型**
  在某些情况下，量化模型的分层结构可能比单一的量化模型具有更强的预测力。在此结构中，分别针对其上级模型的部分参考值范围优化每个下级量化模型。
  示例：如果上级量化模型输出的结果 < 5，则使用用于数值 < 5 的下级量化模型，并确定最终结果。结果 ≥ 5 类似。
- **量化模型组成的模型层级**
  在一个模型层级中，可以列出一个或多个量化模型，带或不带下级量化模型。在方法段中，仅需一个 **PREDICT** 命令即可预测所有感兴趣的参数。

根据具体使用情况，模型层级用于完成以下项目：

- 未知样品（例如果糖）的**身份验证**。结果为一个产品名称。
  - 根据确定的产品，可选择一次或多次**量化**。
- 一个样品产品关联性（例如果糖）的**校验**。结果为是或否 - 校验成功或失败。
  - 根据确定的产品以及无论校验结果如何，可选择一次或多次**量化**。
- 一次或多次**量化**。

8.1 开发模型层级

8.1.1 开发模型

首先必须开发应在模型层级中使用的识别模型和/或量化模型。

开发识别模型

如果模型层级应包含识别模型，则如下进行开发。

1 主模型

- 对所有现有的产品开发识别模型 （参见章节6，第86 页）。
- 如果各个产品难以区分，可以将这些产品合并为一个产品组：
  - 在 **选择样品** 工艺步骤的 **产品列表** 区域，为 **产品组** 列中要合并的产品定义一个通用名称。下例中，产品 **C1** 和 **C2** 构成了产品组 **C**：

产品列表 ?

产品	光谱数量	产品组
A		
B		
C1		C
C2		C

模型由此处理单一产品的产品组 **C**。模型无法在 A/B/C1/C2 之间分类，而只能在 A/B/C 之间分类。

必要时可以构建更多产品组。

2 子模型

对主模型的每个产品组开发一个识别模型 （参见章节6，第86 页）。

在上例中使用属于产品 **C1** 和 **C2** 的所有产品开发子模型。为此应如同产品组 **C** 的主模型中采用相同的样品。

右键点击 产品列表 可以创建用于定义产品组的子模型。

3 更多层级分级

如果一个子模型包含多于 2 个产品，则可以在必要时将多个产品归为一个产品组。对该产品组重新开发一个单独的识别模型。通过该方式生成更多的层级分级。

开发量化模型

如果模型层级应包含量化模型，则按照如下方式开发。

1 每个感兴趣的参数的量化模型

为所有量化感兴趣的参数开发相应的量化模型 *（参见章节 5，第 56 页）*。

2 下级量化模型

如果一个量化模型需要下级量化模型，则开发下级量化模型。

8.1.2 将模型插入模型层级

前提：要在模型层级中使用的所有模型已创建 *（参见"开发模型"，第 115 页）* 并且已发布。

接下来的步骤是创建模型层级和将模型插入模型层级：

- 插入已发布的主模型或已发布的量化模型。
- 关联已发布的子模型与产品组。
- 关联已发布的量化模型与产品。
- 关联已发布的下级量化模型与上级量化模型。

创建模型层级

1 生成模型层级

- 在 **校正和评估** ▶ **模型层级** 下点击 +。
  新的模型层级显示在新的选项卡中。

2 给模型层级命令

- 在上方工具栏中点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下的 **名称** 一栏输入所需名称。

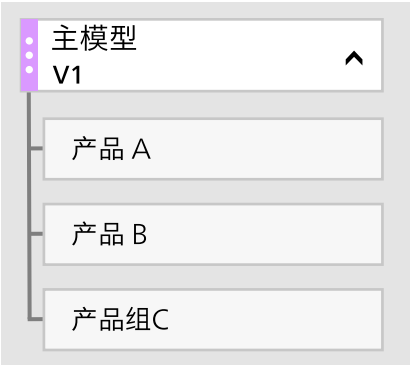
将识别模型插入模型层级

如果模型层级应包含识别模型，则如下将其插入。

1 增加主模型

- 工艺步骤 **编辑模型层级** 包含模型层级编辑器。模型层级编辑器最初为空。
- 通过点击 打开窗口 **功能库**。

- 在 **功能库** ▶ **识别模型** 下通过拖放功能将主模型向右拉动并插入模型层级编辑器。



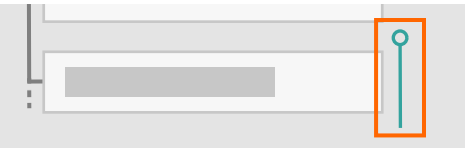
垂直箭头用于折叠和展开产品。

如果在功能库中找不到模型：
- **确保模型已发布。**
- **点击 更新功能库中的视图。**

2 将子模型与产品组关联

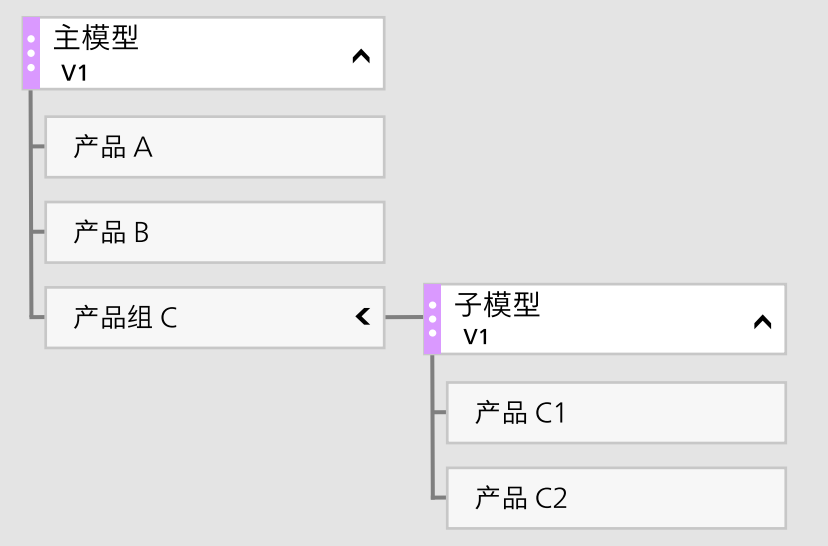
如果在主模型中定义了产品组：

- 在 **功能库** ▶ **识别模型** 下使用拖放功能将子模型插入至相关产品组旁。绿色垂直线显示插入位置：



- **更多子模型和层级分级**
  将更多子模型以相同方式与相关产品组关联。

示例：子模型与产品组关联。



水平箭头用于折叠和展开子模型。

可以将子模型与产品组或产品相关联。

3 确定模型的版本

即使为模型发布了新版本，模型层级中包含的模型也保持不变。如果需要，从模型层级中删除相应的模型并插入更新的版本。

4 保存模型层级

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

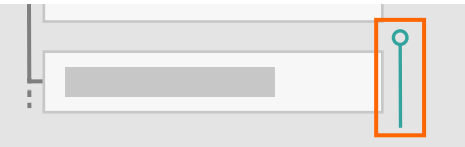
将量化模型插入模型层级

如果模型层级应包含量化模型，则如下将其插入。

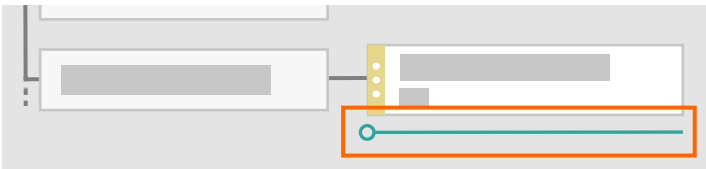
1 带识别模型的模型层级

如果模型层级还包含识别模型，则必须将量化模型与产品相关联：

- 在 **功能库** ▶ **量化模型** 下使用拖放功能将量化模型插入至相关产品组旁。绿色垂直线显示插入位置：

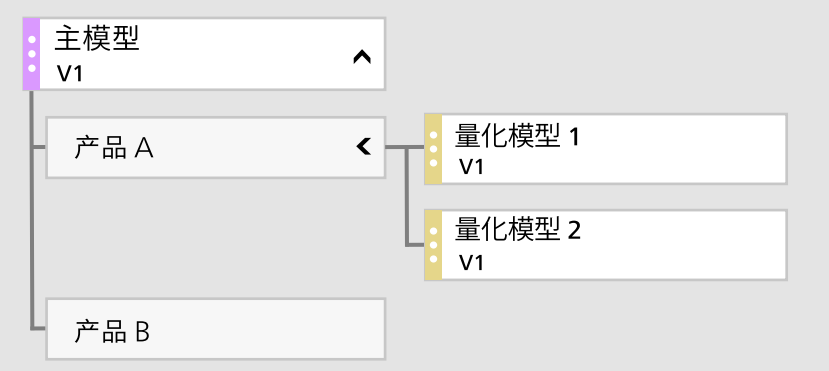


- 如果要预测相同产品的多个量化感兴趣的参数：
  - 使用拖放功能分别将其他量化模型插入彼此下方。绿色水平线显示插入位置：



- 如果计划对其他产品进行量化分析，则以相同的方式关联相应的量化模型。

示例：2 个量化模型与一个产品相关联。



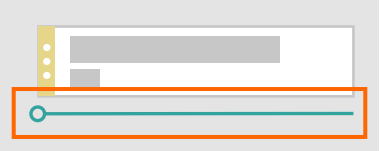
可以将量化模型与产品或产品组相关联。

2 不带识别模型的模型层级

如果模型层级仅应包含量化模型：

- 工艺步骤 **编辑模型层级** 包含模型层级编辑器。模型层级编辑器最初为空。
- 通过点击 打开窗口 **功能库**。
- 在 **功能库** ▶ **量化模型** 下通过拖放功能将第一个量化模型向右拖并将其插入模型层级编辑器中。

- 如果模型层级应预测多个感兴趣的参数，则相应地通过拖放功能将其他量化模型依次插入。绿色水平线显示插入位置：



如果在功能库中找不到模型：

- 确保模型已发布。
- 点击 ↻ 更新功能库中的视图。

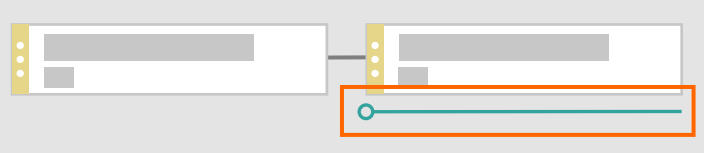
3 下级量化模型

为了将下级量化模型插入模型层级，请按如下方式进行操作：

- 在 **功能库** ▶ **量化模型** 下通过拖放功能将下级量化模型插入到上级量化模型的旁边。绿色垂直线显示插入位置：

- 在 **增加条件** 对话框中设置要应用下级量化模型的条件。条件必须包含一部分上级量化模型的预测值，例如 < 5。
  只要添加条件，则下级量化模型就与上级量化模型完成了关联。

- 使用拖放功能分别将其他下级量化模型插入彼此下方。绿色水平线显示插入位置：



注意：如果一个数字范围不需要下级量化模型，则可将上级模型作为替代，并与自身进行关联。
前提：下级量化模型的条件必须满足以下前提：
  - 条件必须覆盖整个有理数范围。
  - 条件不得重叠。

条件正确的示例：
  - 模型 A1 的条件（单一值）：< 5
  - 模型 A2 的条件（周期）：≥ 5 和 < 10
  - 模型 A3 的条件（单一值）：≥ 10

如果不满足前提，尽管可保存模型层级，但是无法发布。
检查条件：
  - 点击 **内部验证**。
  - 如果不出现错误信息，则表示前提已满足。
  - 否则，错误信息将提供在何处以及为何超出前提的信息。

查看或编辑条件：
  - 选择一个下级量化模型。
  - 点击 打开 **属性** 窗口。
  - 打开 条件 子区域。
  - 依次选择相关的下级量化模型，以显示其各自的条件。必要时调整条件。
- 如果为其他量化模型设置了下级量化模型，则以相同的方式对其进行关联。

4 斜率/y 轴截距校正

请按以下方式修改所有需要斜率/y 轴截距校正的量化模型：

- 选择量化模型。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **参数** 下定义斜率/y 轴截距校正。

符号表示量化模型已经与斜率/y 轴截距校正相关联。在检查可能存在的下级量化模型的条件时使用已校正的结果。

5 确定模型及斜率/y 轴截距校正的版本

即使为模型或斜率/y 轴截距校正发布了新版本，已包含在模型层级中的模型及斜率/y 轴截距校正也将保持不变。如果需要，从模型层级中删除相应的模型或斜率/y 轴截距校正并插入更新的版本。

6 保存模型层级

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

8.2 验证模型层级

带量化模型的模型层级

在校验模型层级时不对量化模型进行评估。但是，要为带下级量化模型的量化模型检查是否满足前提：

- **条件必须覆盖整个有理数范围。**
- **条件不得重叠。**

检查条件

- **点击 内部验证。**
- **如果不出现错误信息，则表示前提已满足。**
- **否则，错误信息将提供在何处以及为何不满足前提的信息。**

内部和外部验证

对于带识别模型的模型层级，工艺步骤 **验证模型层级** 2 可提供不同的校验：

- **内部校验**
  内部校验采用校准数据集并在可用的情况下采用主模型的校验数据集。
- **外部验证**
  外部验证采用 1 个单独的外部数据组。对于外部数据组，在另一天采集样品，并在必要时由另一个人用另一台仪器进行测量。

验证模型层级

前提：

- **校正和评估** 工作区内创建、打开模型层级，并位于前台 *（参见章节8.1，第115 页）*。
- 如果外部校验，则存在包含光谱和产品组的相应数据组 *（参见"记录光谱"，第51 页）*。

1 切换至'校验'工艺步骤

- 在导航器中点击 **验证模型层级** 切换至校验工艺步骤。

2 执行内部或外部验证

内部校验

- 点击**内部验证**。

内部校验仅使用主模型的光谱（校准数据集和校验数据集（如果可用））。子模型中的离群值和更多光谱未纳入。

外部验证

- 点击**外部验证**。
- 由 样品列表 或 搜索查询 选择样品。
  选择必须包含具有 1 个产品参数的样品。**产品**列列出包含的产品。
- 点击 **[验证]**。

3 检查校验结果

- 在 **验证模型层级** 工艺步骤中检查 **校验一览** 区域。校验一览以对于单一模型相同的方式归纳结果 *（参见"校验一览 区域"，第 94 页）*。
  其中，会考虑如唯一大模型的模型层级。一个光谱的校验结果是成功或失败。
- 检查各个光谱的结果：
  - 在 **校验一览** 区域中选择应显示其单一光谱的所有产品。
  - **校验结果** 区域列出了所选产品的光谱。
    模型分层结果 分别显示模型层级的最终结果。
    然后展示每个层级分级的逐步评估。**层级 1 的结果**显示主模型的结果。之后是相关子模型的结果，用于其它所有层级分级。

8.3 发布模型层级

为了能在测定中使用模型层级，必须发布该模型层级。

发布模型层级结构

前提：

- 模型层级已保存。
- 校验可选用。Metrohm 推荐执行校验。
- 模型层级已打开。

1 打开对话框

- 通过点击 打开 **发布模型层级结构** 对话框。

如果模型层级之前已发布并已用于方法段，则通过激活 **更新方法段** 复选框自动更新在这些方法段。

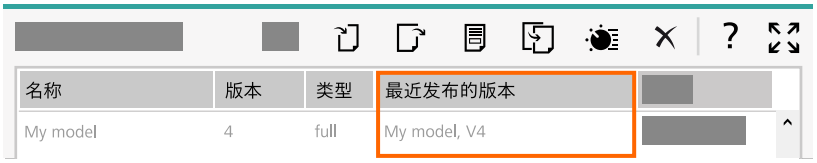
注意：非自动更新：

- 打开的方法段
- 已签名和发布的方法段
- 如果激活了数据权限过滤：无当前登录用户数据权限的方法段

2 发布

- 点击 **[发布]** 发布模型层级。

在 **校正和评估** ▶ **模型层级** 下显示最近发布的版本：



PREDICT 命令现在可以访问发布的模型层级版本。

9 预测

预测时将 1 个模型应用到未知样品的光谱上。根据模型可预测以下内容：

- 感兴趣的参数（量化）
- 产品关联性或校验结果（身份验证）
- 定性结果（定性）

用于预测的样品必须与已创建模型的样品相同的方式处理和测量。

过程在 OMNIS Software 中的图表说明请参见附录 *（参见"预测"，第 157 页）*。

9.1 准备预测

在准备预测时，请按如下方式创建 1 个方法段、1 个操作过程段、1 个样品信息格式和 1 个样品列表。方法段包含 1 个创建与模型连接的 **PREDICT** 命令。

创建方法段

1 接受和命名方法段

光谱必须采用与用于开发模型光谱相同的设置记录。最简便的方式是接受用于开发模型的方法段 *（参见"准备光谱记录"，第 42 页）*。

- 在 **过程** ▶ **方法** 下选择已用于开发模型的方法段。
- 通过点击 复制所选的方法段。
- 双击方法段名称打开复制的方法段。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入一个合适的名称。

2 插入 PREDICT 命令

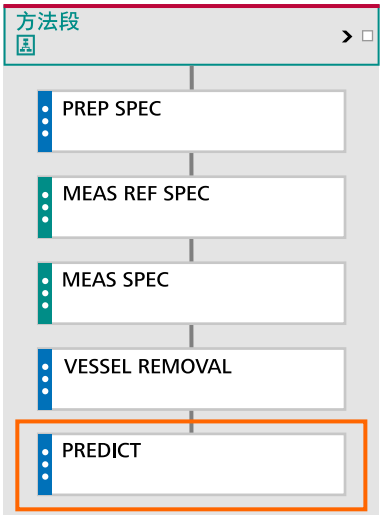
PREDICT 创建一个用于被记录光谱的预测。

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 在 **功能库** ▶ **命令** 下搜索 **PREDICT** 命令并通过拖放功能将其插入方法段中。

注意命令的正确顺序：

液态样品

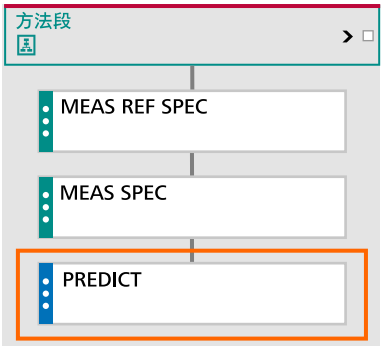
基础结构



PREDICT 命令也可位于 **VESSEL REMOVAL** 命令之前或旁边。

固体物质样品

基础结构



3 配置 PREDICT 命令参数

- 选择 PREDICT 命令。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **参数** 中定义命令参数：
  - **引用光谱**
    展开 **测量命令的名称** 列表。选择记录须评估光谱的 **MEAS SPEC** 命令的名称。
  - **引用模型**
    选择模型的 **结构**：**单模型** 或 **模型层级**。
  - 如果选择了 **单模型** 结构，请选择 **模型类型**：量化模型、识别模型或定性模型。
  - 选择发布的模型或发布的模型层级。
    量化：如有必要，选择一个斜率/y 轴截距校正。
    校验：如果使用识别模型或模型层级进行校验，接通 **用于校验** 选项。

4 多个感兴趣的参数（量化）

对于每件样品，如果必须预测一个以上感兴趣的参数 *（参见"多个感兴趣的参数（量化）"，第 131 页）*，请按照如下操作流程操作：

- 为每个感兴趣的参数插入一个 **PREDICT** 命令。
  注意：一个模型层级只需要一个 **PREDICT** 命令，无论其中包含的量化模型数量为多少。
- 为每个 **PREDICT** 命令按上述方法定义命令参数。所有 **PREDICT** 命令引用相同的光谱，但对于每个感兴趣的参数均引用一个不同的量化模型。

5 保存方法段

- 通过点击 校验方法段。
- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键保存方法段。

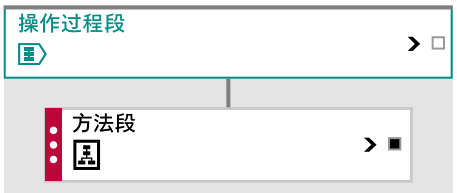
创建操作过程段

1 创建和命名操作过程段

- 在 **过程** ▶ **操作过程** 下点击 。
  新的操作过程段和出现在新的选项卡中。
- 点击 打开 **属性** 窗口。
- 在 **属性** ▶ **常规** 下在 **名称** 栏中输入一个合适的名称。

2 插入方法

- 点击 打开 **功能库** 窗口。
- 通过拖放功能 **功能库** ▶ **方法** 将创建的方法段插入操作过程段。



3 定义结果监视（可选）

对于量化可采用结果监视。示例：监控分析结果是否在特定的限值内，例如在校正样品的参考值范围内。
对于身份验证通常不采用结果监视。但必要时可以以相同方式监控命令变量 'IdentificationProbability.Final.*命令名称*。

- 点击

。
- 通过点击 打开窗口 **属性**。

- 选择 **属性** ▶ **结果监视** 子区域。
- 点击 **[监视结果]**。
- 点击 增加新的结果监视：
  - 通过点击 (x) 打开用于变量的对话框。
  - 选择用于预测数值的 **PREDICT** 命令的变量。例如，对于量化：'**Predicted.Quantification.Result.***命令名称*
  - 如果选择了一个含有索引的模型层级变量，根据需要在顶部输入栏中调整索引，例如：
    '**Predicted.Quantification{2}.Result.***命令名称*
    （参见章节 11.4.1，第 148 页）
  - 点击**[确认]**，应用所选变量。
  - 在 **报警下限**、**报警上限**、**干预下限** 和 **干预上限** 栏中，确定量化模型的限值。限值不应超过校正样品的参考值范围。
    注意：对于警告界限选择一个干预界限内较小的范围。身份验证：监控 '**IdentificationProbability.Final.***命令名称*' 命令变量时对两个上限选择数值 100。
  - 可以选择定义违反限值时触发的操作。为能选择操作，必须在操作过程段中至少定义一个**可选程序段执行 Execute on limit**。
  - 点击 → 关闭区域。

4 直接在样品列表中显示结果（可选）

如果要在样品列表中直接显示预测结果，可以定义一个用于子样品数据的栏 *（参见"PREDICT 命令变量"，第 144 页）*。

5 保存操作过程段

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

创建样品信息格式

样品信息格式用于方便创建多个同类样品。

1 接受并命名样品信息格式

接受用于开发模型的样品信息格式 *（参见"准备光谱记录"，第 42 页）*。

- 在 **样品** ▶ **样品信息格式** 下选择已用于开发模型的样品信息格式。
- 点击 复制所选的样品信息格式。
- 双击样品信息格式名称打开样品信息格式。
- 在 **样品信息格式的名称** 栏中输入一个适当的名称。

2 样品名称的输入栏

必要时调整样品名称的标准值。

3 参考参数/产品参数

样品信息格式包含用于参考参数（量化）或产品参数（身份验证、校验）的样品数据。

- **量化和身份验证**：样品数据对于预测而言并非是必需的。可以删除输入栏或将其用于控制样品。控制样品用于监控模型和仪器并用于确认系统适于进一步的分析。
- **校验**：样品数据用于定义校验样品的产品：
  - **输入栏类型**: **选项列表**
  - 必须创建产品输入栏以用作产品：**应用为**： **产品**
  - 含有产品名称的列表项应该已经存在。
  - **标准值**: **空**
  - 激活 **允许有空字段** 和 **强制输入** 复选框。
- **定性**：预测不需要特定的样品数据。

4 增加更多样品数据（可选）

- 需要时，点击 将输入栏增加至 **样品数据** 区域。

5 定义操作过程段和子样品数量

- 在 **操作过程 / 子样品** 区域中选择创建的操作过程段。
- 定义子样品数量：**1**

6 保存样品信息格式

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

创建样品列表

1 创建并命名样品列表

- 在 **样品** ▶ **样品列表** 下点击 。
  新选项卡打开。
- 在 **名称** 栏中输入一个适当的名称。

2 增加样品

- 在 + 图标左侧的选项列表内选择创建的样品信息格式。

  然后，增加的样品将根据规格在选择的样品信息格式中创建。
- 点击 + 将新样品增加至样品列表。根据需要的数量增加样品。

  样品列表的每一行都包含标有 图标的样品。右侧为样品数据。之后是标有 的子样品和子样品数据。
  样品根据所选样品信息格式中的规格创建。每件样品包含 1 个采用规定操作过程段的子样品。

样品名称	参考参数名称		编号	子样品名称	操作过程
样品 1		%	1	子样品 1	
样品 2		%	2	子样品 2	
样品 3		%	3	子样品 3	

图 6　样品列表（量化示例）

- 根据需要编辑样品名称和子样品名称。
- 校验：如果已知要校验样品的产品：
  – 在产品输入栏中选择产品。

3 保存样品列表

- 点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 按键。

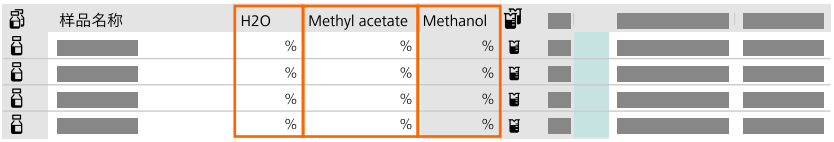
9.1.1 多个感兴趣的参数（量化）

如需对每件样品预测多个量化分析参数，则在模型开发和准备预测时使用以下更改。

用于开发量化模型的样品

- **准备光谱记录**
  在样品信息格式中为每个参考参数增加一个单独的输入栏。

样品列表包含用于各个参考参数的输入栏。



- **记录光谱**
  按照常规方式记录光谱。

开发量化模型

- 为每个感兴趣的参数创建一个独立的量化模型。

准备预测

类型 1：带模型层级

该类型要求创建一个包含所有量化模型的模型层级。在需要时，模型层级还可借助下级量化模型实现更强的预测力。

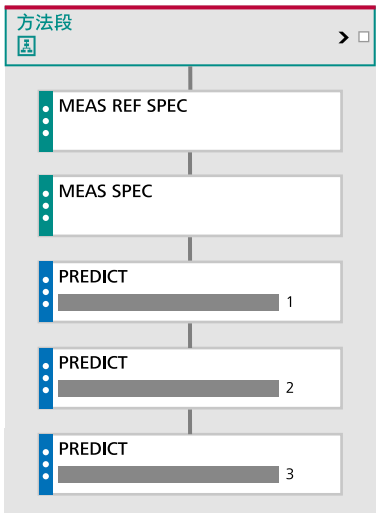
在方法段中只需要一个 **PREDICT** 命令：

- 创建模型层级 *（参见"将模型插入模型层级"，第 116 页）*。
- 将量化模型插入模型层级 *（参见"将模型插入模型层级"，第 116 页）*。
- 在方法段的 PREDICT 命令中引用模型层级。

类型 2：多个 PREDICT 命令

该类型要求方法段中有多个 **PREDICT** 命令。每个命令都引用一个量化模型：

- 为每个感兴趣的参数将一个 **PREDICT** 命令插入方法段：



- 根据感兴趣的参数中的一个为每个 **PREDICT** 命令命名。
- 在每个 **PREDICT** 命令中引用合适的量化模型。
- 在每个 **PREDICT** 命令中引用相同的光谱，即相同的 **MEAS SPEC** 命令。

9.2 开始预测

警告

高温表面上的易燃物质

易燃物质洒出可能导致火灾和灼伤危险。样品、样品瓶、样品支架和样品展示的温度可能高达 85 °C。

- 避免火源。
- 使用接地保护。
- 使用排气装备。
- 立即清除洒落的液体和固体物质。

小心

加热会导致样品体积变大

溢流或样品容器的破碎或塞子的弹出会导致受伤或健康损伤。

- 仅将样品容器充满至 2 cm 的最低高度。液体可能在残留的空气中扩张。
  也可以使用带毛细管开孔的塞子。
- 谨慎地压入塞子，以防损坏样品容器。

小心

高温样品瓶

接触高温表面或高温液体可能会导致皮肤灼伤。样品、样品瓶、样品支架和样品展示的温度可能高达 85 °C。

- 佩戴个人防护装备并戴上耐高温防护手套。
- 立即清除洒落的液体和固体材料。

开始预测

前提:

- 已准备好预测 *（参见"准备预测"，第 125 页）*。
- 光谱仪已预留 *（参见"预留与共享仪器"，第 23 页）*。
- 已装入正确的样品支架。样品支架必须与所使用的样品容器匹配。

1 打开样品列表

- 如果样品列表已关闭，在 **样品** ▶ **样品列表** 下双击打开样品列表。

校验

校验时必须在样品数据中定义校验样品的产品。必须创建产品输入栏以用作产品。不区分大小写。
如果在产品输入栏中输入了与另一识别模型关联的产品组名称，则校验始终失败。这同样适用于与其他识别模型关联的产品。

2 增加更多样品（可选）

如果需要更多样品:

- 在 图标左侧的选项列表内选择创建的样品信息格式。

  后续增加的样品将根据所选的样品信息格式的规格创建。
- 点击 为样品列表增加新的样品。

- 根据需要编辑样品名称和子样品名称。
- 校验：在产品输入栏中选择要校验样品的产品。
- 保存样品列表：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

3 执行测定

注意

温度传感器在温度调节样品容器时受损

如果传感器与样品容器直接接触时取下样品容器，则可能导致传感器受损。

- **在测量完成并且温度传感器已移离样品容器时再取下样品容器。**

- 按照以下方式选择需分析的子样品：
  - 点击 图标选择子样品。
  - 对于分析目的而言，选择子样品的一个池即可。
- 准备相应的物理样品。
  将样品容器放置在样品支架中。
- 点击 开始测定。按键上的数字代表需要执行多少个子样品分析。
- 开始分配给子样品的操作过程段。遵循 **曲线和数据** ▶ **实时数据** 区域中可能存在的指示。如果在样品容器上调节温度，则在要求之后再取下样品容器。

  成功完成分析之后子样品状态将显示为 。
- 以相同的方式执行其它所有样品的测定。

目标温度最高允许低于环境温度 5.0 K。

如果过程适于进行序列测定，则可以一次性选择多个子样品。也可以选择由 开始分析样品列表中所有可执行的子样品。

- **液体样品：VESSEL REMOVAL 命令可实现序列测定。**
- **固体物质样品：在执行序列测定时，必须规定用户操作行为（例如使用 WAIT 命令）。**

预测结果

所选样品的预测结果可在 **结果** ▶ **预测** 区域中找到 *（参见章节 9.3，第 135 页）*。

9.3 预测结果

显示预测结果：

- 选择一个或多个子样品。
- 所有所选和已分析子样品的预测结果都可在 **样品** ▶ **样品列表** ▶ **结果** ▶ **预测** 下找到。

量化示例，子区域 **概览**：

结果 预测 概览 ?

样本信息			量化结果
编号	样品名称	子样品名称	H2O / %
1	[redacted]	[redacted]	4.7
2	[redacted]	[redacted]	6.1
3	[redacted]	[redacted]	8.0

有多个子区域可用：

- 子区域 **概览** 为每个子样品显示最终结果。
- 子区域 **详细视图** 为每个子样品显示详细的预测结果。如果使用了不同的模型或模型层级，则在单独的表格中显示其结果。一个子样品可能出现在多个表格中。必要时可以显示相应的模型属性。
- 量化：在子区域 **再处理** 中可以用其他的量化模型评估已评估过的子样品。
- 模型层级：在子区域 **再处理** 中可以用另一个模型层级评估已评估过的子样品。

必要时，也可在子样品数据中显示预测结果 *（参见"PREDICT 命令变量"，第 144 页）*。

根据模型的不同，如下显示结果：

	样品 ▶ **样品列表** ▶ **结果** ▶ **预测** **中的结果**	
	概览 子区域	**详细视图 子区域**
量化	量化结果 （包括 斜率/y 轴截距纠正）	▪ **计算值**：不带 斜率/y 轴截距纠正 的预测结果 ▪ **已校正数值**：带 斜率/y 轴截距纠正 的预测结果 **注意**：如果未应用斜率/y 轴截距校正，则已校正数值与计算值相同。 ▪ 在超出了相应的极限值时，显示 **Hotelling T^2** 和 **Q 检验残差**。

	样品 ▶ 样品列表 ▶ 结果 ▶ 预测 中的结果	
	概览 子区域	**详细视图 子区域**
身份验证	识别结果: ▪ 在身份验证成功时：所确定产品的名称。 ▪ 在身份验证失败时：身份验证的状态（**未校验** 或 **含糊不清**）。	此外： ▪ 所确定产品的概率
校验	▪ 识别结果 ▪ 校验结果：**成功** 或者 **失败**	此外： ▪ 期待的产品 ▪ 所确定产品的概率
定性	定性结果：**成功** 或者 **失败**	此外： ▪ 根据模型分组 ▪ 模型属性
模型层级	并排列出身份验证、量化和校验的最终结果。 注意：如果身份验证失败，则无法进行量化。	并排列出所有所用模型的详细预测结果，分别带有层级说明。 对于下级量化模型，也将说明为执行模型定义的条件。

子样品的状态警告

- 检查样品列表中的子样品。在出现错误或警告时会出现一个状态警告：
- 相关预测结果标有状态图标 ■。
  将光标置于一个图标上，以显示原因。原因可能是：
  - 在测定子样品之前在程序段执行测试中出现错误。
  - 身份验证：样品的身份验证失败（未校验 或 含糊不清）。
  - 校验：样品校验失败。
  - 定性：样品的定性失败。
  - 量化：记录的光谱是 1 个光谱离群值（Hotelling T^2 离群值或 Q 检验残差离群值）。
  - 量化：超过在结果监视中定义的限值（参阅以下点位）。

量化：警告界限和干预界限

如果在操作过程段中定义了一个结果监视 *（参见"创建操作过程段"，第 127 页）*，则可以按照如下方式检查监控状态：

- 打开 **结果** ▶ **预测** ▶ **监控** 区域。
- 选择应当检查监控状态的子样品。
  注意：如果选择多个样品，则显示最近点击样品的状态。

根据结果数值的不同，显示以下状态图标中的一个：

●	数值处于定义的**警告界限**内。
▲	数值处于定义的**警告界限**外，但处于定义的**干预界限**内。
■	数值处于定义的**干预界限**外。

光谱的目检（可选）

- 打开 **曲线和数据** ▶ **曲线** 区域。
- 显示单个光谱：
  - 从样品列表中选择相应子样品（标有图标 ）。
- 显示多个光谱：
  - 点击 以激活曲线重叠。
  - 借助 **[CTRL]** 或 **[SHIFT]** 按键从样品列表中选择多个子样品。
- 检查光谱 *（参见章节 11.3，第 141 页）*。

10 测试和保养间隔时间

10.1 仪器性能测试

必须定期进行仪器性能测试。

任务	OMNIS 命令	建议的执行间隔	结果
波长测试	**TEST WL**	非管制行业：每 1 至 2 周一次（内部测量模式） 管制行业： ▪ 每天：内部测量模式 ▪ 每周：外部测量模式	波长准确度和精度在规定的允差范围内。
干扰测试	**TEST NOISE**	非管制行业：每 1 至 2 周一次（内部测量模式） 管制行业： ▪ 每天：内部测量模式 ▪ 每周：低通量测试和高通量测试	干扰在规定的允差范围内。
光度线性	**TEST PHOTOMETRIC LINEARITY**	管制行业：每周	光度线性在规定的允差之内。

如果测试失败：

- 液体样品展示：检查测量窗是否脏污并在必要时清洗。
- 检查灯模块的工作小时数。必要时更新灯具。
- 重复仪器性能测试。
  - 如果波长测试失败，重复波长校正。如果波长测试之后再次失败，请联系区域 Metrohm 技术服务代表。
  - 如果干扰测试失败，请联系区域 Metrohm 技术服务代表。
  - 如果光度线性测试失败，请联系区域 Metrohm 技术服务代表。

10.2 波长校正

在特定的操作行为后必须在 OMNIS Software 中对仪器执行波长校正。 *（参见“启动波长校正”，第 31 页）*

任务	OMNIS 命令	建议的执行间隔	结果
波长校正	**CAL WL** 和 **VAL WL**	更换硬件组件后。 较长时间运输仪器后。	光谱的 x 轴已校正。

10.3 仪器保养

必须定期保养仪器。

任务	执行间隔	结果
由区域 Metrohm 技术服务代表保养	每年。 需要时缩短保养间隔。	仪器依然符合技术规格说明书。 过滤垫已检查并在必要时已更换。 内部波长标准版已重新认证。

重新认证外部参考标准样品

如果在外部仪器性能测试中使用参考标准样品，必须周定期重新认证这些标准样品。

- **注意证书上推荐的下一个校正日期。**

11 附录

11.1 报告

在 OMNIS Software 中有多个用于自动或手动报告生成的选项可用（参阅 *Metrohm Knowledge Base*）。

在报告中通常注明了 Windows 用户，与 OMNIS 用户名不同。

11.2 处理表格

可以按照下列方式处理表格中的模型和模型层级。所述技术也可部分用于其他表格。

最大化和最小化区域

- 点击 ⤢，包含表格的子区域就会最大化。
- 点击 ⤡ 最小化子区域。

更改列宽

1. 将光标置于标题栏的第一列和第二列之间。
   光标将变为 ⇔。
2. 按住鼠标左键，将光标移到右侧或左侧。
3. 达到第一列的所需的宽度后，松开鼠标按钮。
4. 以相同的方式按顺序调整其他列。

对表格行进行排序

1. 点击列标题可按该列对行进行排序。
2. 如有必要，再次点击列标题以将排序顺序倒转。

选择一个或多个表格行

新选择：

- 点击一行。
  或者
- 在模型概览列表中，还可按住鼠标左键在多行上移动。

更改选择：

- 按住 **[CTRL]** 键点击一行。
  反向选择行。其余行的选择保持不变。
  或者

- 按住 **[SHIFT]** 键点击一行。
  选择从最后一行（未点击 **[SHIFT]** 键）到当前行的所有行。取消选择其余行。
  或者
- 按住 **[CTRL]**+**[SHIFT]** 组合键点击一行。
  选择从上次点击的行到当前行的所有行。其余行的选择保持不变。
  或者
- 按 **[CTRL]**+**[A]** 选择所有行。

将表格复制到 Windows 剪贴板

复制整个表格：

1. 右键点击表格。
2. 在上下文菜单中选择 **[复制表格]**。

要复制一个或多个表格行：

1. 选择所需行。
2. 按 **[CTRL]**+**[C]** 组合键复制所选的行。

现在可以将表格或表格行插入到任意文件中。

11.3 处理图表

可以按照下列方式处理模型和模型层级中的图表。所述技术也可部分用于其他图表，例如用于样品列表中的光谱。

最大化和最小化区域

- 点击 ⤢，包含图表的子区域就会最大化。
- 点击 ⤡ 最小化子区域。

显示和隐藏详情窗口

某些图表包含详情窗口或图例。可以显示和隐藏窗口：

1. 在图表中点击右键。
2. 在上下文菜单中选择 **[显示/隐藏详情窗口]**。

缩放

使用鼠标滚轮缩放：

1. 将光标移动到图表中。
2. 如需放大须向前转动鼠标滚轮，如需缩小则须向后转动鼠标滚轮。
   a. 仅垂直缩放：同时按下 **[CTRL]** 键。
   b. 仅水平缩放：同时按下 **[SHIFT]** 键。

使用鼠标键缩放：

- 按住鼠标左键，从左下角或左上角开始展开一个区域。
  或者
- 按住 **[CTRL]+[SHIFT]** 键，然后按鼠标左键可放大，按鼠标右键可缩小。
  - 仅垂直缩放：按住 **[CTRL]** 键，然后按鼠标左键可放大，按住鼠标右键可缩小。
  - 仅水平缩放：按住 **[SHIFT]** 键，然后按鼠标左键可放大，按住鼠标右键可缩小。

使用缩放元素缩放：

1. 将光标放在 x 轴或 y 轴开头或结尾的其中一个绿色缩放元件上。
   光标将变为 ⇔ 或 ⇕。
2. 按住鼠标左键沿轴移动或移到轴外。
3. 到达所需视图后，松开鼠标键。

移动显示区域

移到任意方向：

1. 将光标移动到图表中。
2. 按住鼠标右键，将显示区域移至任意方向。
3. 到达所需视图后，松开鼠标键。

- 触摸屏：触摸并长时间按住。然后移动显示区域。

垂直或水平移动：

1. 将光标放到 x 轴或 y 轴的数字区域。
2. 使用下列其中一种方法移动显示区域：
   a. 转动鼠标滚轮。

   a. 按住鼠标左键沿轴移动。

将图表重新设置为标准视图

- 在图表中点击右键。在上下文菜单中选择 **重置视图**。
  或者
- 通过按住鼠标左键从右至左展开一个区域。

选择多个点或多个曲线

- 按住 **[CTRL]** 键，依次点击这些点位或曲线。
  总是反向选择点位或曲线。其余点位或曲线的选择保持不变。

对于图表 **影响图**、 **得分图** 和 **相关图**，还有一种多项选择模式可用：

- **激活多项选择**
  点击 **激活多项选择**。
  上述的一些图表自定义功能将替换为以下功能。
  - **新选择**
    按住鼠标左键展开一个区域。
    选择该区域内的所有点位。取消选择该区域外的点位。
  - **扩展选择**
    按住 **[SHIFT]** 键点击各个点或展开一个区域。
    选择相应点位。其余点位的选择保持不变。
  - **减少选择**
    按住 **[ALT]** 键点击各个点位或展开一个区域。
    选择相应点位。其余点位的选择保持不变。
  - **转换选择**
    按住 **[CTRL]** 键点击各个点位或展开一个区域。
    反向选择相应点位。其余点位的选择保持不变。
  - **取消选择**
    点击图表的空白区域。
- **取消激活多项选择**
  点击 **取消激活多项选择** 可以重新使用图表自定义标准功能。

将图表复制到 Windows 剪贴板

1. 在图表中点击右键。
2. 在上下文菜单中选择 **[复制图表]**。

现在可以将图表插入到任意文件中。

样品列表中的图表

曲线重叠

在一个样品列表中一起显示多个光谱：

- 从样品列表中打开 **曲线和数据** ▶ **曲线**。
- 点击 以激活曲线重叠。如果图标不可见，通过拖动分隔栏来放大该区域。
- 借助 **[CTRL]** 或 **[SHIFT]** 键从样品列表中选择多个子样品。

  点击 或 在样品列表显示所有光谱。

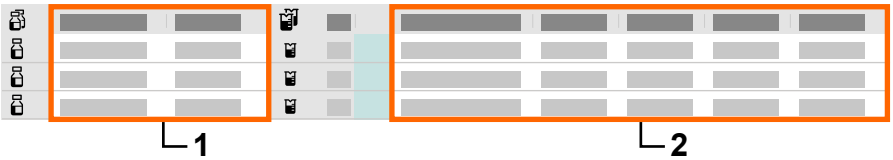
11.4 PREDICT 命令变量

OMNIS Software 提供不同的变量类别，例如样品数据、子样品数据、方法段变量、命令变量或系统变量。

软件自动创建一些变量。必要时可以创建更多变量。使用变量时务必注意其数据类型（**数字**、**文本**或**日期/时间**）。

变量可用于进一步的计算，作为结果输出到报告中或作为条件输入至比如 **IF** 命令中。

在 **样品** 工作区中显示样品列表中的样品数据（**1**）和子样品数据（**2**）：



创建**样品数据**须编辑样品信息格式。
创建**子样品数据**须编辑操作过程段。

将预测结果显示为子样品数据

作为示例，子样品数据中应显示下列 **PREDICT** 命令变量 *（参见章节 2.3.1，第 16 页）*：

- 量化：**Predicted.Quantification.Result.***命令名称*
  用于感兴趣的参数的预测值。
- 身份验证：**Product.Identification.Result**.*命令名称*
  所确定的产品或确定的被识别样品的产品组。如果身份验证失败，变量依然为空。

前提：

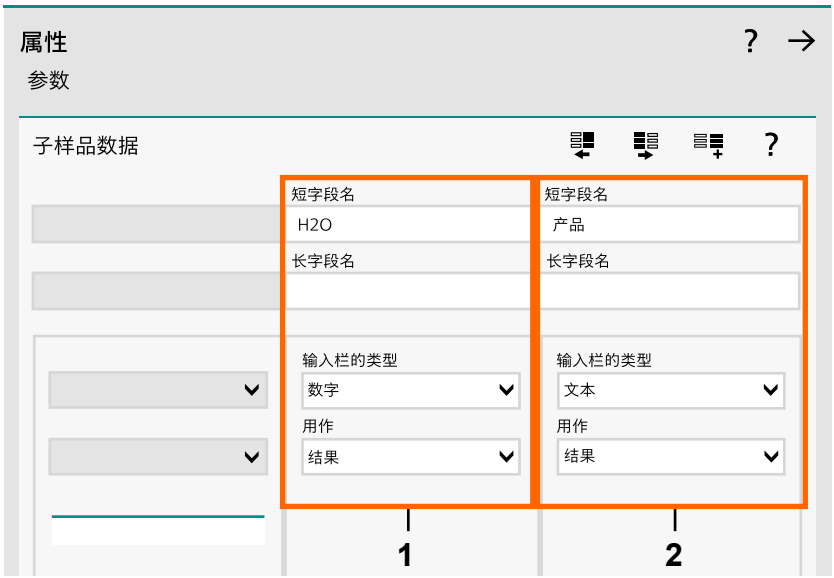
对于准备预测已创建了一个方法段和一个操作过程段 *（参见"准备预测"，第 125 页）*.

1 创建子样品数据

- 打开相应的操作过程段。
- 点击 操作过程段 。
- **属性** ▶ **参数** 打开。

- 点击 输入一个子样品数据栏。
  - 作为 **短字段名** 输入一个合适的名称用于预测的结果和确定的产品。
  - **量化**：如需创建一个数字数据栏作为 **输入栏类型**，选择 **数字** 选项。
    身份验证：如需创建一个字母数字数据栏作为 **输入栏类型**，选择 **文本** 选项。
  - 数据栏应填入 **CALC** 命令的结果。在 **应用为** 下选择 **结果** 选项。
    注意：**结果** 的输入栏无法手动编辑。

量化（**1**）和身份验证（**2**）的示例：



- 保存操作过程段：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

创建子样品数据的变量名称取决于所选的 短字段名：
'*短字段名*.CurrentSubsampleData'

量化：如果要为每件样品预测多个感兴趣的参数，应为预测结果创建多个子样品数据。

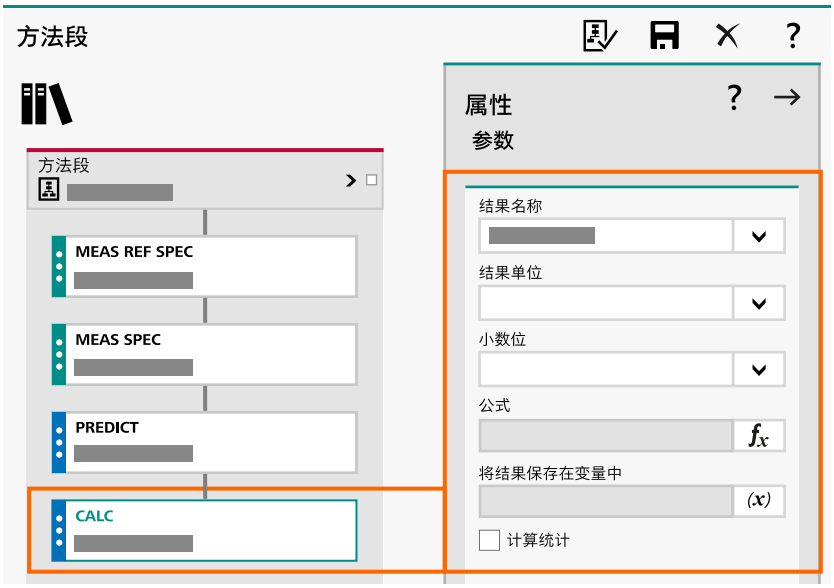
2 为预测的结果插入一个 CALC 命令

填入包含 **CALC** 命令结果的创建的子样品数据：

- 打开相应的方法段。
- 插入 **CALC** 命令。
  将 **CALC** 命令排序为 **PREDICT** 命令下。

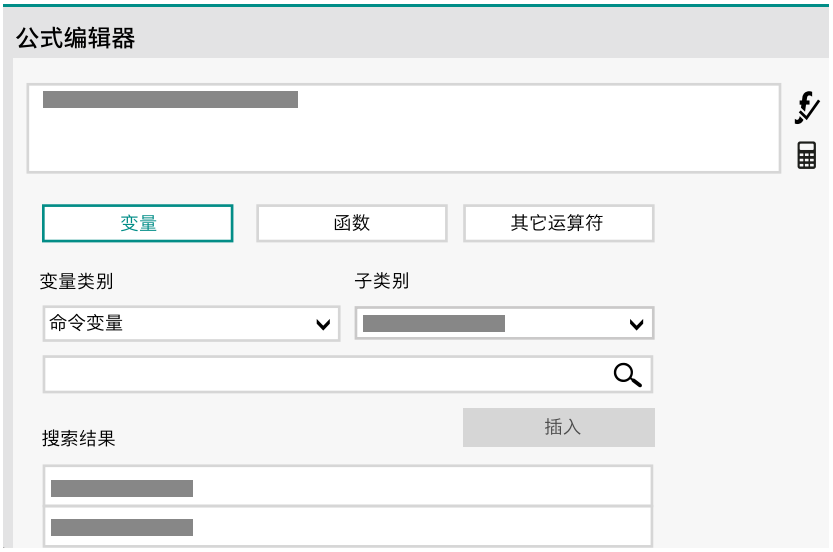
计算须显示的数值

- 选择 **CALC** 命令并打开 **属性** ▶ **参数**。
  - 作为 **结果名称** 输入一个合适的名称用于预测的结果和确定的产品。
  - 量化：输入 **结果单位** 以及所需 **小数位** 的数量。



计算统计值 应用于样品中的多个子样品。取消激活 **计算统计值**。

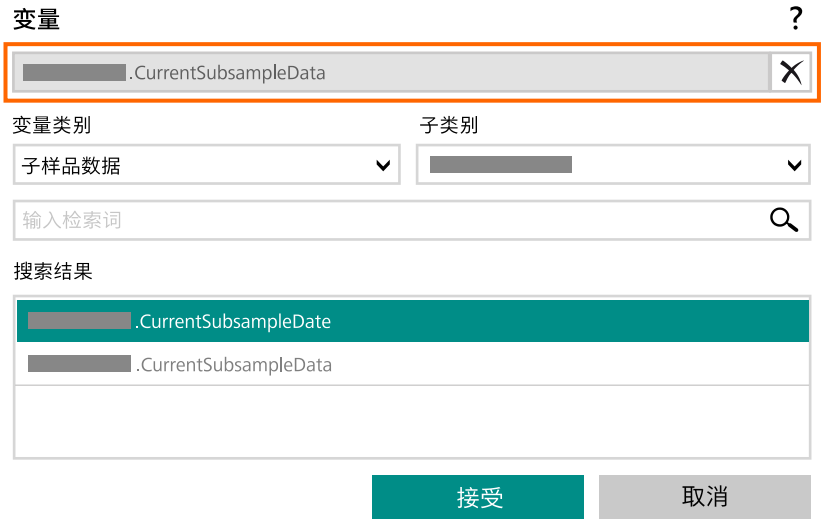
- 在 **公式** 栏内点击 f_x 打开公式编辑器。



- 使用 **命令变量** 变量类别创建公式。对于结果显示而言，公式仅由一个单一的 **PREDICT** 命令变量构成：
  - 身份验证：
    Product.Identification.Result.*命令名称*
  - 量化：
    Predicted.Quantification.Result.*命令名称*
    如果选择了一个含有索引的模型层级变量，根据需要在顶部输入栏中调整索引，
    例如：'**Predicted.Quantification{2}.Result.***命令名称* （*参见章节 11.4.1，第 148 页*）
- 点击 检查所输入公式的有效性。
- **注意**：预测结果在测定时才会生成。通过点击 执行公式计算显示 **无效** 结果。
- 点击 → 关闭公式编辑器。

保存子样品数据内的计算值

- 在 **将结果保存在变量中** 内点击 (x)。
- 选择 **子样品数据** 变量类别。
- 选择相应的操作过程段作为子类别。
  搜索结果 显示了所选操作过程段中定义的子样品数据。
- 选择新创建的变量。
  所选变量将被插入 **变量** 栏中。



- 点击 **应用**。
- 保存方法段：点击 或按下 **[CTRL]+[S]** 键。

量化：如果对每件样品预测了多个感兴趣的参数，则对每个预测结果插入一个 **CALC** 命令。

分析样品

1 打开样品列表

- 如果样品列表已关闭，在 **样品** ▶ **样品列表** 下双击打开样品列表。

2 样品列表中对所有尚未分析的样品显示一个用于所创建子样品数据的样品：

预测后显示结果栏。

身份验证失败：未身份验证。

更多变量
以如上相同方式可以显示子样品数据中的更多变量 *（参见章节 2.3.2，第 17 页）*。

11.4.1 模型层级 - 量化模型的索引

一个模型层级可能包含多个量化模型。为了使 **PREDICT** 命令变量能够区分量化模型，使用了索引号。

与特定产品或产品组相关联的第一个量化模型的索引为 1。如果其他量化模型与同一产品或产品组相关联，则索引会递增。递增基于模型层级中量化模型的顺序。

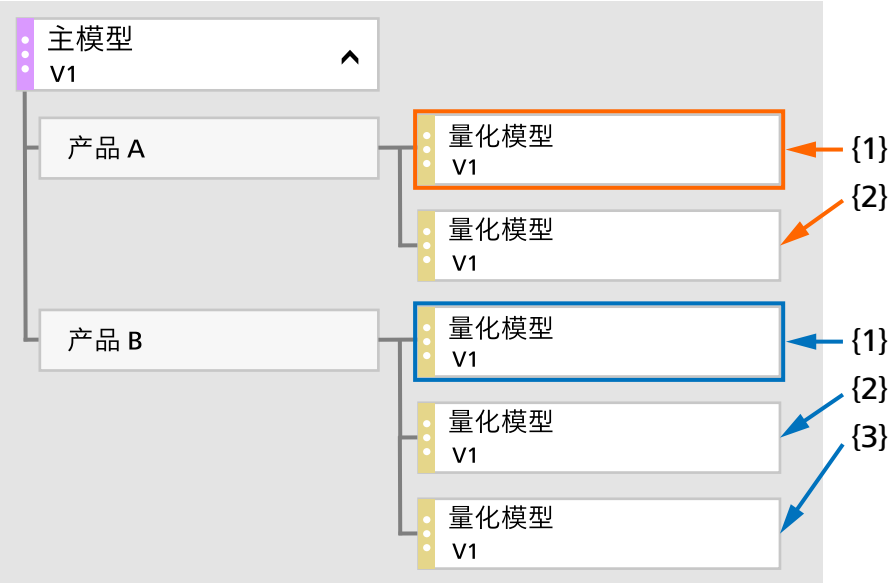


图 7　模型层级中用于量化模型的索引号

PREDICT 命令变量通过索引号引用量化模型。

示例：'**Predicted.Quantification{1}.Result**.*命令名称*

如果在预测时将样品识别为产品 A，则使用与产品 A 相关联的所有量化模型。在这种情况下，上述命令变量引用与索引为 1 的产品 A 相关联的量化模型（在图中以橙色框标出）。

如果将样品识别为产品 B，上述命令变量引用与索引为 1 的产品 B 相关联的量化模型（在图中以蓝色框标出）。

如果以蓝色框表示的量化模型的命令变量的使用方式与以橙色框表示的量化模型不同，**IF** 命令可将处理限定为特定的产品关联性。

对于不带识别模型的模型层级，最上面的量化模型具有索引 1。其余量化模型的索引按顺序递增。

下级量化模型

不给下级量化模型分配索引编号。**PREDICT** 命令变量必须引用上级量化模型。而该变量则为每个子样品提供所用下级模型的数值。

11.5 导出和导入模型

为了在另一个 OMNIS 安装中使用，可将模型导出和导入。

导出模型

1 打开导出对话框

- 在 **校正和评估** 工作区中打开一个以下子区域：
  - **量化模型**
  - **斜率/y 轴截距纠正**
  - **识别模型**
  - **定性模型**
  - **模型层级**
- 点击 。

一个导出对话框将打开。

2 生成导出文件

- 选择所有待导出的模型。
- 如果仅选择了已发布的 **full 类型**模型，则可定义 **导出类型**：
  - 一个功能完全的 **full 类型**的模型可使用。导入之后，可以编辑和保存模型。
  - 如果已发布一个模型，则可以将最近发布的版本导出为 **light 类型**。该模型只能用于预测。
- 根据需要调整目标文件夹。

不得使用下列特殊字符或字符串： > < : " / \ | * ? **以及** CON, PRN, AUX, NUL, COM1–COM9, LPT1–LPT9。

- 通过点击 **[导出]** 生成导出文件。

将模型导出到指定的文件夹中。

导入模型

1 打开导入对话框

- 在 **校正和评估** 工作区中打开一个以下子区域：
  - **量化模型**
  - **斜率/y 轴截距纠正**
  - **识别模型**
  - **定性模型**
  - **模型层级**
- 点击 。

2 打开文件

- 选择文件夹和所有待导入的 *.opmo 文件或 *.osic 文件。
- 点击**[打开]**。

将这些模型导入到 OMNIS Software 中。

11.6 更换 XDS/DS Analyzer（量化）

更换 DS2500 或 XDS Analyzer 时可以将用于为 XDS/DS Analyzer 创建量化模型的光谱和参考参数导入 OMNIS Software。通过这些数据可以开发量化模型。

在第二步骤中创建斜率/y 轴截距校正。为此将使用已通过 OMNIS Software 记录的光谱。这些光谱的参考值必须明确。

斜率/y 轴截距校正的样品数量少于用于量化模型开发的样品数量：

- 得到可靠的预测值需要至少 20 个样品。
- 得到可靠的斜率预测值需要至少 30 个样品。

开发量化模型

前提：

- 光谱文件 (.da) 可用，其中包含 XDS/DS 光谱。

- 在相同的文件夹内有参考参数文件 (.cn) 可用，其中包含了参考参数。

1 创建并命名量化模型

- 在 **校正和评估** ▶ **量化模型** 下点击 。
- 在 **量化模型的名称** 输入栏中输入一个适当的名称。

2 导入光谱

- 点击 **XDS/DS 导入**。

- 点击 。
- 选择应导入的光谱文件 (.da)。
- 点击**[打开]**确认选择。
- 点击 **[下一步]**。

3 选择参考参数

- 从列表 **参考参数 / 单位** 中选择参考参数。
- 在 **参考参数单位** 输入栏内选择参考参数的单位。

具有所选参考参数名称的所有光谱都被添加至量化模型中。

4 自动或手动模型开发

对于模型开发存在多种可能性：

- 使用 **OMNIS Model Developer (OMD)** 自动开发模型：点击 **[开始 OMD]**。
  参阅 *第 5.2 章，自动模型开发 – OMD，第 58 页*。
- 手动开发模型：点击 **[创建]**。
  参阅 *第 5.3 章，手动开发模型，第 60 页*。

5 自动或手动模型开发

如果首先手动调整样品选项并在之后自动开发模型，则由手动开发模型继续下一步。

- **自动开发模型**：点击 **[开始 OMD]**。
  参阅 *第 5.2 章，自动模型开发 – OMD，第 58 页*。
- **手动开发模型**：点击 **[创建]**。
  参阅 *第 5.3 章，手动开发模型，第 60 页*。

6 发布模型

- 发布量化模型 （参见"发布量化模型"，第 78 页）。

用于斜率/y 轴截距校正 d 额样品

斜率/y 轴截距校正所需的每件样品：

- 一个用于须修正参数的参考值。
- 一个光谱。
- 一个用于各个光谱的预测值。

1 收集样品

- 搜集用于斜率/y 轴截距校正的物理样品，如同用于开发量化模型的样品 （参见章节 4，第 41 页）。但是，少量的样品数目即可。

2 准备光谱记录和预测

- 创建一个方法段、一个操作过程段、一个样品信息格式和一个样品列表，如同用于开发量化模型的样品 （参见"准备光谱记录"，第 42 页）。但是：
- **方法段**
  在方法段中在 **MEAS SPEC** 命令（如果可用）后、在 **VESSEL REMOVAL** 命令后插入 **PREDICT** 命令。
  注明以下内容作为 **PREDICT** 的命令参数：
  - **测量命令的名称**
  - 使用导入光谱开发的 **量化模型**。

3 记录光谱并预测分析参数

- 记录光谱并预测分析参数，如同用于开发量化模型的样品 （参见"记录光谱"，第 51 页）。

然后，每件样品均具有一个光谱、一个参考值和一个预测值。

如果是多个分析参数，每件样品均拥有一个光谱、一个用于每个分析参数的参考值和一个预测值。

创建斜率/y 轴截距校正

- 创建斜率/y 轴截距校正。为此将使用已通过 OMNIS Software 记录的光谱。这些光谱的参考值必须明确。
  （参见"斜率/y 轴截距纠正"，第 79 页）

预测

1 准备预测

- 准备预测所需的进程 （参见"准备预测"，第 125 页）。
  在 **PREDICT** 命令中注明量化模型和相应的斜率/y 轴截距校正。

2 进行预测

- 进行预测 （参见"开始预测"，第 132 页）。

分析的执行应通过控制样品监控。控制样品既通过光谱方法段也通过参考方法段分析。两个方法段的结果可以进行比较。

11.7 OMNIS NIR Analyzer 工作流程

使用 OMNIS NIR Analyzer 分析样品时，OMNIS Software 将执行以下任务：

1. 准备仪器：
   a. 仪器配置
   b. 波长校正和校验
   c. 仪器性能测试
2. 记录校正样品的光谱
3. 记录校正样品的参考值
4. 开发模型
5. 预测感兴趣的参数
6. 仪器性能测试：根据需要重复。

在以下章节中将对 OMNIS Software 中的相应工作流程进行说明。

准备仪器

在能够记录光谱之前必须准备仪器。其中必须执行波长校正。

下*图 8* 展示了波长校正的示例。方法段根据单一命令说明。

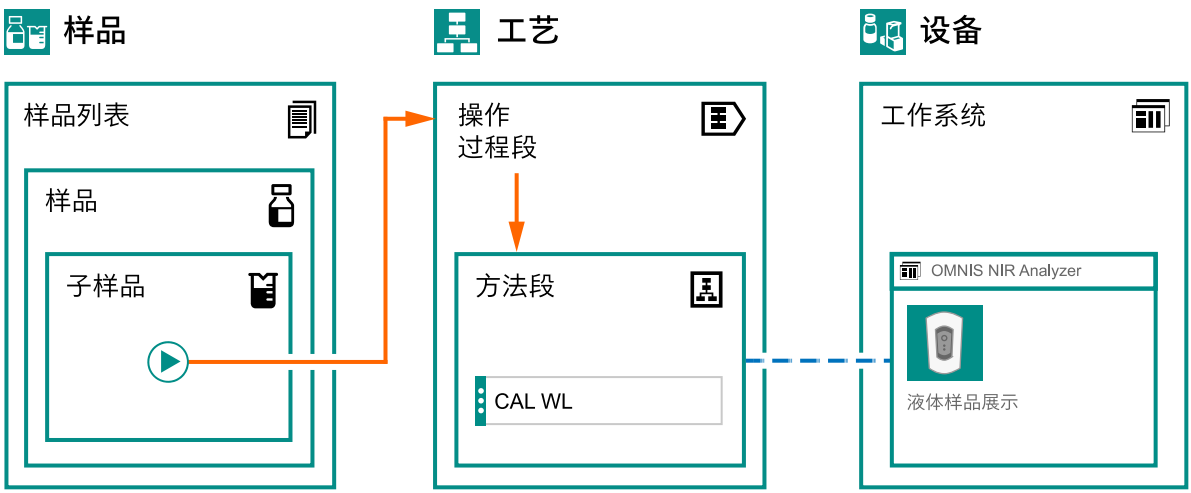


图 8　仪器设置

→	OMNIS Software 中的链接。
- - - -	该方法段分配有一个工作系统。

样品 工作区包含一个包含样品的样品列表。样品包含一个子样品。每件子样品均分配有一个操作过程段。

一般而言，样品用于分析真实的样品。但在这种情况下，样品用于执行波长校正。一旦开始相应子样品的分析，将执行以下步骤：

1. 子样品开始所分配的操作过程段。
2. 操作过程段将执行其中包含的方法段。
3. 方法段执行 **CAL WL** 命令。命令通过分配给方法段的工作系统执行。
   工作系统包含一个 OMNIS NIR Analyzer 仪器的功能单元。该仪器执行波长校正。校正数据保存在仪器上。

获取参考值或产品名称

如需创建模型，则必须为每件校正样品和验证样品记录 1 个参考值（量化）或 1 个产品名称（身份验证）。为了进行定性，必须已知各样品被分类为正还是负。

量化示例

下*图 9* 显示了用于感兴趣的参数的参考值记录，例如样品的水份含量。

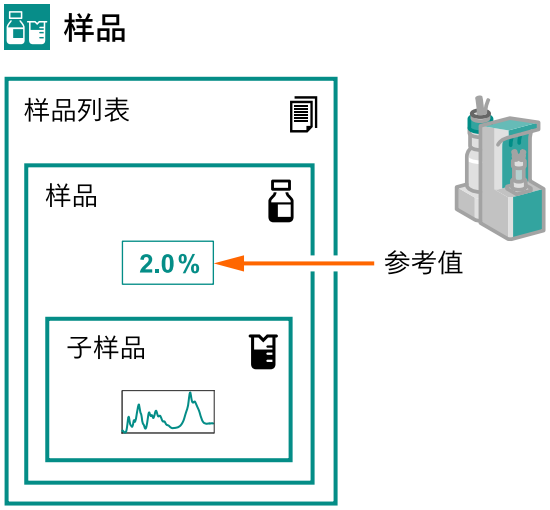


图 9　记录参考值

感兴趣的参数通过一个参照方法测量，例如通过滴定。测量值用作参考值。

将样品列表中每件样品的参考值输入到相应的输入栏中。

记录校正样品的光谱

如需创建一个模型，必须针对每件校正样品和验证样品记录光谱。

下*图 10* 显示了一个记录光谱的示意图。

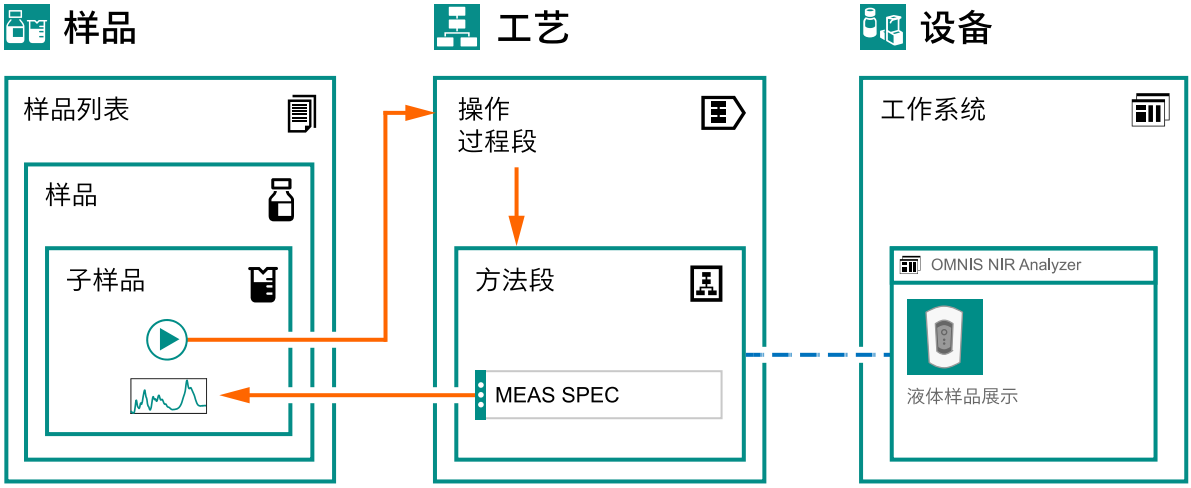


图 10　记录校正样品的光谱

→	OMNIS Software 中的链接。
- - - -	该方法段分配有一个工作系统。

样品 工作区包含一个包含校正样品的样品列表。每件样品均包含一个子样品。子样品分配了一个操作过程段。

一旦开始一个子样品的分析，则将执行以下步骤：

1. 子样品开始所分配的操作过程段。
2. 操作过程段将执行其中包含的方法段。
   方法段执行 **MEAS SPEC** 命令。命令通过分配给方法段的工作系统执行。
   工作系统包含功能单元（例如 **Liquid Sample Presentation**）。功能单元记录光谱并传送至 OMNIS Software。OMNIS Software 在子样品数据中保存光谱。

开发模型

量化：由校正样品的光谱和参考值创建一个量化模型，采用 **OMD**（**OMNIS Model Developer**） 自动或手动方式。

身份验证：由校正样品的光谱和产品名称创建 1 个识别模型。

定性：根据校准样品的光谱创建定性模型。

量化示例

下*图 11* 显示了量化模型的手动开发步骤。

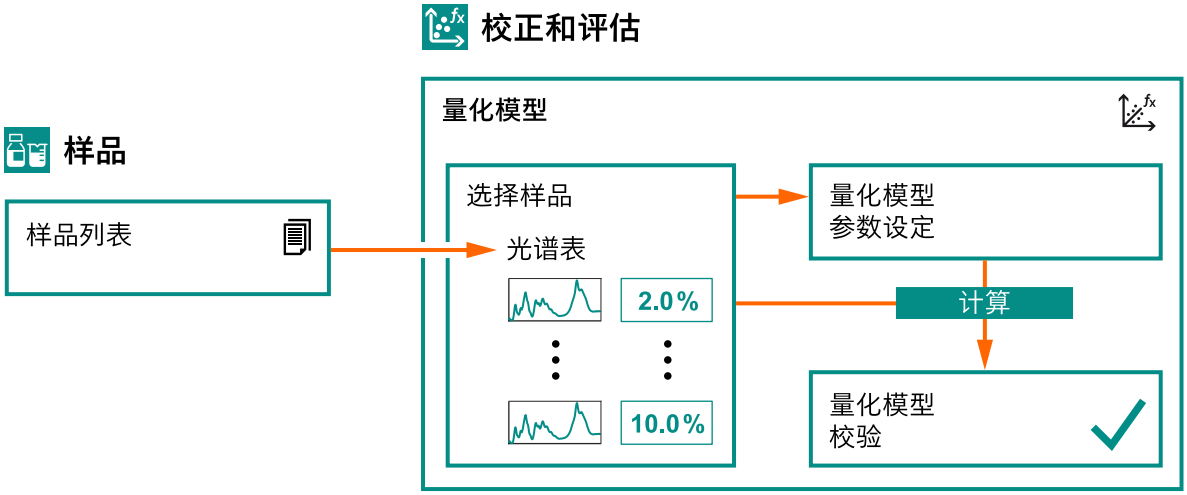


图 11　开发模型（量化示例）

样品连同参考值将首先被传送至光谱表。然后分 3 个工艺步骤开发模型：

1. **选择样品**工艺步骤能够识别离群值、确定校验光谱并注明交叉验证法。
2. 在**参数化设置量化模型**工艺步骤中可以应用对光谱进行数据预处理并定义波长范围。
3. 计算模型后将在**校验量化模型**工艺步骤中评估是否模型符合要求。
   之前的步骤可以调整用于优化模型。如果已确定了一个合适的模型，则可以将其**发布**。之后，发布的模型可以用于未知样品的预测。

预测

预测时将 1 个模型应用到未知样品的光谱上。根据模型可预测以下内容：

- 感兴趣的参数（量化）
- 产品关联性或校验结果（身份验证）
- 定性结果（定性）

量化示例：下*图 12* 展示了感兴趣的参数的预测。

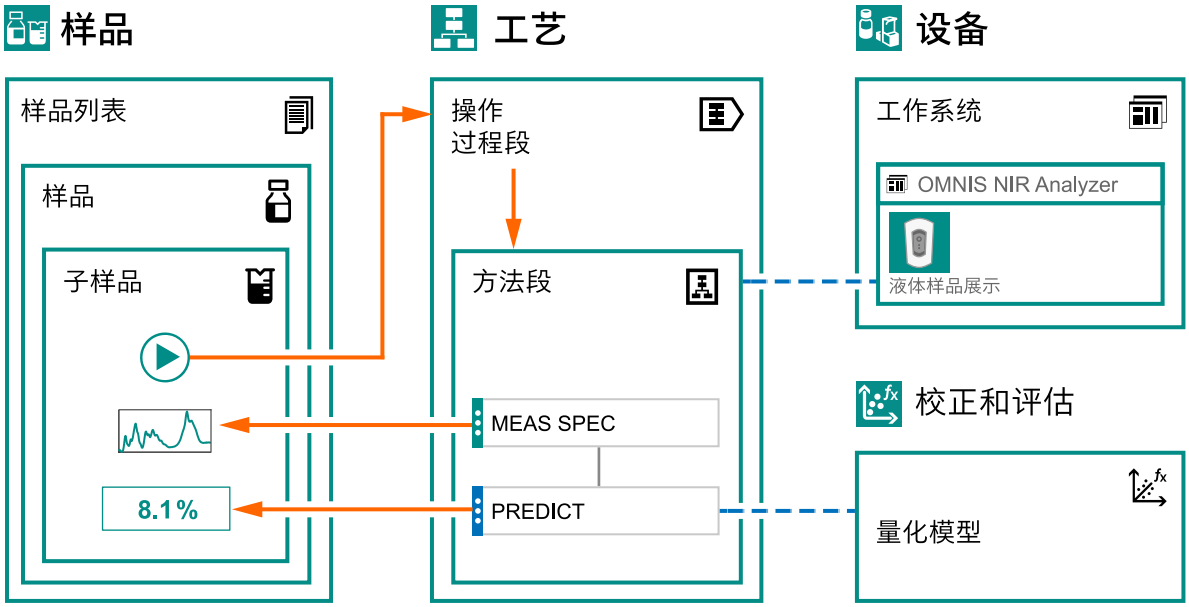


图 12　预测感兴趣的参数（量化示例）

→	OMNIS Software 中的链接。
- - - -	该方法段分配有一个工作系统。 **PREDICT** 命令确立了模型规格。

样品 工作区包含用于带已分析准备就绪样品的样品列表。每件样品均包含一个子样品。子样品分配了一个操作过程段。

一旦开始一个子样品的分析，则将执行以下步骤：

1. 子样品开始所分配的操作过程段。

2. 操作过程段将执行其中包含的方法段。方法段中包含至少 2 个命令：
   a. **测量命令**
      MEAS SPEC 命令记录样品的光谱。命令通过分配给方法段的工作系统执行。
      工作系统包含功能单元（例如 **Liquid Sample Presentation**）。仪器记录一个光谱并将其传递至 OMNIS Software。
   b. **预测**
      在 **PREDICT** 命令中选择一个测量命令和一个模型。用模型评估以记录测量命令的光谱。由此将得到一个预测结果，例如 8.1 % 的水份含量。