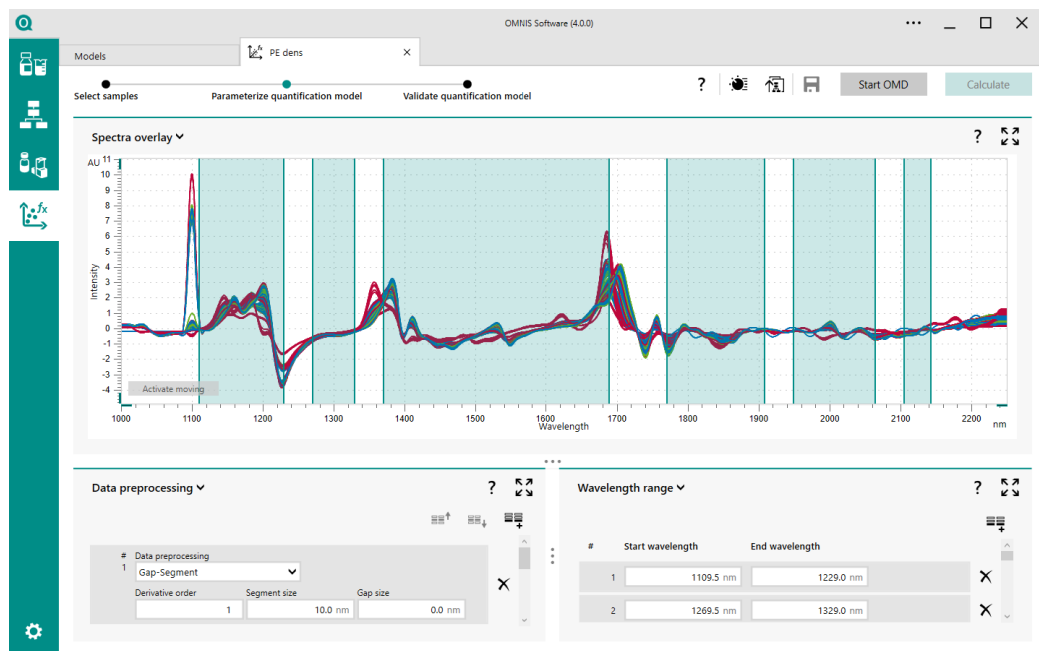


OMNIS NIR (Lab)



Espectroscopía OMNIS paso a paso

Tutorial

8.0600.8202ES / v7 / 2026-02-17



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

OMNIS NIR (Lab)

Versión de OMNIS Software 4.7

Tutorial

8.0600.8202ES / v7 /
2026-02-17

Esta documentación está protegida con derechos de autor. Todos los derechos reservados.

Esta documentación constituye un documento original.

Esta documentación se ha elaborado con la mayor precisión. No obstante puede que haya algún error. Le rogamos nos informe de eventuales errores a la dirección arriba indicada.

Exención de responsabilidad

La garantía no incluye deficiencias que surjan por circunstancias que no sean responsabilidad de Metrohm, tales como un almacenamiento inadecuado, uso inapropiado, etc. Las modificaciones no autorizadas en el producto (por ejemplo, conversiones o accesorios) excluyen cualquier responsabilidad del fabricante por los daños resultantes y sus consecuencias. Deben seguirse estrictamente las instrucciones y notas de la documentación del producto de Metrohm. En caso contrario, queda excluida la responsabilidad de Metrohm.

Índice

1	Información general	1
1.1	Introducción	1
1.2	Acerca de la documentación	1
1.3	Licencias OMNIS	1
1.4	Derechos de usuario	2
1.5	Información adicional	2
2	Breve resumen de OMNIS Software	4
2.1	Estructura y funciones	4
2.1.1	Áreas de trabajo	4
2.1.2	Pestañas y subsecciones	4
2.1.3	Área de trabajo Muestras	6
2.1.4	Área de trabajo Procesos	7
2.1.5	Área de trabajo Equipamiento	8
2.1.6	Área de trabajo Calibración y evaluación	9
2.2	Introducción práctica	11
2.3	Instrucciones OMNIS	18
2.3.1	Adquisición de espectro	19
2.3.2	Predicción	21
2.3.3	Cálculos y estadística	26
2.3.4	Calibración de las longitudes de onda	27
2.3.5	Pruebas de rendimiento del aparato	27
2.4	Reservar y liberar aparatos	28
2.5	Regulación de temperatura (Liquid Sample Presentation)	30
3	Preparación del aparato	32
3.1	Creación de un sistema de trabajo	32
3.2	Calibración de las longitudes de onda	34
3.2.1	Preparar calibración de las longitudes de onda	34
3.2.2	Iniciar calibración de las longitudes de onda	38
3.3	Pruebas de rendimiento del aparato	40
3.3.1	Preparar las pruebas de rendimiento internas	41
3.3.2	Ejecutar pruebas de rendimiento internas	45
3.3.3	Pruebas de rendimiento externas (opcionales)	47
4	Preparar el desarrollo del modelo	50
4.1	Preparación de la adquisición de espectro	51
4.2	Adquirir espectros	63

5	Modelo de cuantificación	68
5.1	Crear modelo de cuantificación	68
5.2	Desarrollo automático del modelo – OMD	70
5.3	Desarrollo manual del modelo	73
5.3.1	Seleccionar muestras y dividir conjunto de datos	73
5.3.2	Calcular el modelo de cuantificación	80
5.3.3	Validar modelo de cuantificación	8
5.3.4	Parametrizar modelo de cuantificación	88
5.4	Publicar modelo de cuantificación	96
5.5	Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y	98
6	Modelo de identificación	107
6.1	Crear modelo de identificación	107
6.2	Seleccionar muestras y dividir conjunto de datos	108
6.3	Calcular modelo de identificación	115
6.4	Validar modelo de identificación	116
6.5	Parametrizar modelo de identificación	119
6.5.1	Selección de longitud de onda	121
6.5.2	Pretratamiento de datos	123
6.6	Publicar modelo de identificación	125
7	Modelo de cualificación	126
7.1	Crear modelo de cualificación	126
7.2	Seleccionar muestras y dividir conjunto de datos	128
7.3	Calcular modelo de cualificación	135
7.4	Validar modelo de cualificación	135
7.5	Parametrizar modelo de cualificación	137
7.5.1	Selección de longitud de onda	138
7.5.2	Pretratamiento de datos	140
7.6	Publicar modelo de cualificación	142
8	Jerarquía de modelos	143
8.1	Desarrollar una jerarquía de modelos	144
8.1.1	Desarrollar modelos	144
8.1.2	Insertar modelos en la jerarquía de modelos	145
8.2	Validar la jerarquía de modelos	153
8.3	Publicar jerarquía de modelos	155

9	Predicción	157
9.1	Preparar la predicción	157
9.1.1	Varios parámetros de interés (cuantificación)	165
9.2	Iniciar predicción	167
9.3	Resultados de la predicción	170
10	Intervalos de prueba y de mantenimiento	174
10.1	Pruebas de rendimiento del aparato	174
10.2	Calibración de las longitudes de onda	175
10.3	Mantenimiento del aparato	175
11	Apéndice	176
11.1	Informes	176
11.2	Manejo de tablas	176
11.3	Manejo de diagramas	178
11.4	PREDICT -Variables de instrucción	181
11.4.1	Jerarquía de modelos – Índice para los modelos de cuantificación	187
11.5	Exportar e importar modelos	188
11.6	Cambio de un analizador XDS/DS (cuantificación)	189
11.7	Flujos de trabajo para OMNIS NIR Analyzer	193

1 Información general

1.1 Introducción

En este tutorial se describe el manejo de aparatos de la familia de productos **OMNIS NIR Analyzer**, con base en Versión de OMNIS Software 4.7.

El tutorial presenta brevemente información general acerca de OMNIS Software y describe la configuración del aparato, el desarrollo del modelo y la predicción.

1.2 Acerca de la documentación

Posibles representaciones en la documentación:

(1)	Referencia al número de posición en la figura
1	Paso de instrucción
Método	Parámetros, elementos de menú, pestañas y diálogos
Proce- sos ► Proce- dimientos operativos	Ruta del menú
[Siguiente]	Botón o tecla
	Información complementaria al texto descriptivo

1.3 Licencias OMNIS

OMNIS es una plataforma modular. Las funciones del aparato y el módulo de software pueden combinarse libremente:

- Las funciones del aparato están disponibles como paquetes de licencias (ver [Metrohm Knowledge Base](#)).
Para este tutorial se requiere la siguiente licencia funcional:
 - Licencia funcional Lab NIR Spectroscopy

- Acceder al sitio web <https://guide.metrohm.com/>.
- Hacer clic en **OMNIS Software**.
- En el filtro **Versión**, seleccione la versión deseada de OMNIS Software.
- Para la versión más actualizada de OMNIS Software y para las versiones del soporte a largo plazo, la ayuda también está disponible en forma de documento PDF: utilice el filtro **Información ► Publicación ► Manual**.

Subsecciones relevantes

El diagrama ilustra el flujo de trabajo de laboratorio, dividido en tres secciones principales: Muestras, Procesos y Equipamiento.

- Muestras:** Contiene un "Listado de muestras" que se expande para mostrar una "Muestra" y una "Submuestra". Un icono de reproducción (play) indica la transición al siguiente paso.
- Procesos:** Muestra el "Procedimiento operativo" que se expande para revelar el "Método" y la "Instrucción".
- Equipamiento:** Incluye el "Sistema de trabajo" y el "Aparato".

Las flechas azules indican el flujo de trabajo: una flecha sólida conecta la "Submuestra" con el "Procedimiento operativo", y una flecha punteada conecta el "Método" con el "Aparato".

	Una submuestra activa un procedimiento operativo.
	Al método se le asigna un sistema de trabajo.

5

Al método se le asigna un sistema de trabajo. Esto permite a las instrucciones acceder al sistema de trabajo y a las unidades funcionales que contiene ese sistema.

2.1.3 Área de trabajo Muestras

Una **muestra** es la sustancia que debe analizarse. Una muestra se divide en una o varias submuestras.

A una **submuestra** se le asigna un procedimiento operativo. Al analizar la submuestra, se ejecuta el procedimiento operativo asignado.

Un **listado de muestras** organiza las muestras y submuestras. Una muestra o submuestra puede estar incluida en un listado de muestras o en varios.

Un **perfil de muestra** es una plantilla para crear muestras.

Muestras – Información general



En el área de trabajo **Muestras** se pueden organizar y analizar muestras y submuestras.

La siguiente *figura 2* muestra un ejemplo simplificado de un listado de muestras con una muestra que, a su vez, contiene una submuestra.

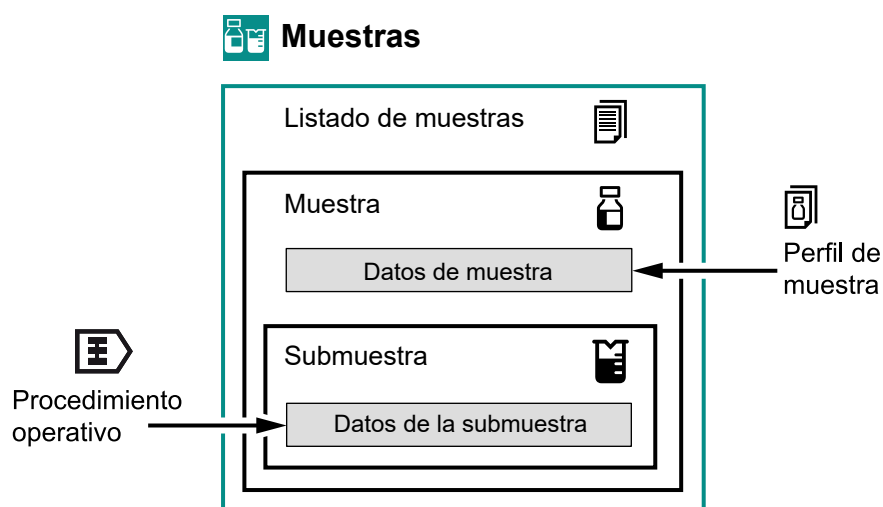


Figura 2 Área de trabajo Muestras

→ Especificación de campos de datos.

Se pueden crear campos de datos para muestras y submuestras. Por ejemplo, los datos de muestra para valores de referencia o datos de submuestra para resultados de análisis.

La *figura 2* también muestra cómo se crean campos de datos:

- Con un perfil de muestra se pueden especificar campos para los datos de muestra.
- Con un procedimiento operativo se pueden especificar campos para datos de submuestra.

Los campos de datos pueden llenarse con datos de forma manual o automática (por ejemplo, mediante una instrucción).

Muestras – Subsecciones



La subsección **Listados de muestras** ofrece las siguientes funciones:

- Crear y gestionar listados de muestras.
- En un listado de muestras:
 - Agregar nuevas muestras o submuestras.
 - Procesar submuestras, por lo cual se ejecuta el procedimiento operativo asignado a cada submuestra. El procedimiento operativo puede incluir, por ejemplo, un análisis de muestras o una calibración de las longitudes de onda.



En la subsección **Consultas de búsqueda**, se pueden filtrar todas las muestras y submuestras en la base de datos según diferentes criterios mediante consultas de búsqueda.

Los criterios de filtrado se pueden guardar como consulta de búsqueda.

Las muestras encontradas se pueden guardar como listado de muestras.



En la subsección **Perfiles de muestra** un perfil de muestra establece lo siguiente para una serie de muestras similares:

- Estructura de los datos de muestra, es decir, número y tipo de campos para datos de muestra.
- Valores por defecto para campos de datos de muestra.
- Uno o varios procedimientos operativos estándar, cada uno aplicable a un número estándar de submuestras.

2.1.4 Área de trabajo Procesos

Procesos – Información general



En el área de trabajo **Procesos** se pueden establecer los procedimientos operativos y métodos para el análisis de muestras.

La siguiente *figura 3* ilustra los componentes de los procesos:

- **Procedimientos operativos**
- **Métodos**

- **Instrucciones** (por ejemplo **MEAS SPEC**)



Procesos

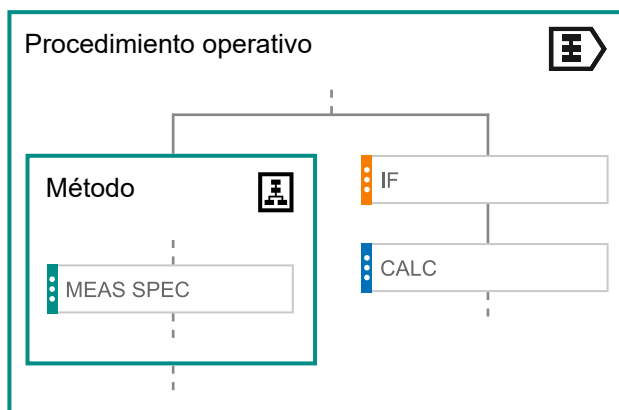


Figura 3 Área de trabajo Procesos

Procesos – Subsecciones

- En la subsección **Procedimientos operativos**, se pueden agrupar procedimientos operativos a partir de métodos e instrucciones. Los métodos y las instrucciones se pueden organizar para ejecutarse de forma secuencial o simultánea.
 - En la subsección **Métodos**, se pueden agrupar los métodos a partir de instrucciones. Las instrucciones se pueden organizar para ejecutarse de forma secuencial o simultánea.

Un método puede contener instrucciones para controlar las acciones de un sistema de trabajo. Estas instrucciones se ejecutan en el sistema de trabajo asignado al método.

2.1.5 Área de trabajo Equipamiento

Equipamiento – Información general

- En el área de trabajo **Equipamiento** se pueden administrar los aparatos y los accesorios.

La siguiente *figura 4* muestra cómo se accede a un aparato:

1. En la subsección **Aparatos** se enumeran todos los aparatos de red y aparatos USB disponibles en un inventario.
2. A través del **Inventario**, se puede reservar un aparato. De este modo, se logra que las unidades funcionales del aparato estén disponibles para el usuario.
3. En la subsección **Sistemas de trabajo**, se puede compilar un sistema de trabajo con todas las unidades funcionales necesarias para la determinación.

Equipamiento



Figura 4 Área de trabajo Equipos

Equipamiento – Subsecciones



En la subsección **Aparatos**, se pueden reservar y liberar aparatos. Cuando un aparato está reservado, sus unidades funcionales están disponibles para el usuario.

Después del análisis, el aparato se puede liberar para que otros usuarios puedan acceder a él.



En la subsección **Sistemas de trabajo**, se pueden crear sistemas de trabajo a partir de una o de varias unidades funcionales. La misma unidad funcional puede estar en varios sistemas de trabajo.

Para analizar muestras, un método accede a un sistema de trabajo y usa las unidades funcionales contenidas en ese sistema. Un sistema de trabajo puede estar asignado a varios métodos.

Nota: Las unidades funcionales en el sistema de trabajo se pueden intercambiar fácilmente según sea necesario. De esta manera, se pueden ejecutar análisis en diferentes aparatos sin necesidad de cambiar los métodos.

2.1.6 Área de trabajo Calibración y evaluación

En el área de trabajo **Calibración y evaluación** se pueden desarrollar modelos espectroscópicos. Un modelo permite efectuar el análisis de una muestra basándose en el espectro registrado:

- **Modelo de cuantificación:** predicción de un parámetro de análisis cuantitativo (p. ej., contenido de agua 5,1%)
- **Modelo de identificación:** identificación o verificación de una muestra (p. ej., fructosa)
- **Modelo de cualificación:** cualificación de una muestra (p. ej., la muestra corresponde a las especificaciones)

Calibración y evaluación – Información general



En la subsección **Jerarquías de modelos** se pueden desarrollar jerarquías de modelos:

- Si las muestras no se pueden distinguir mediante un único modelo de identificación, una jerarquía de modelos puede vincular varios modelos de identificación de manera jerárquica.
- Si se deben realizar análisis cuantitativos de muestras identificadas, una jerarquía de modelos puede vincular los modelos de cuantificación a los productos.
- Si se requieren resultados más precisos para un modelo de cuantificación, se pueden crear y vincular modelos de cuantificación subordinados. Cada uno de estos modelos subordinados se optimiza para una parte del rango de valores de referencia del respectivo modelo superior.

2.2 Introducción práctica

La siguiente introducción ofrece una primera visión general de OMNIS Software.

Áreas de trabajo

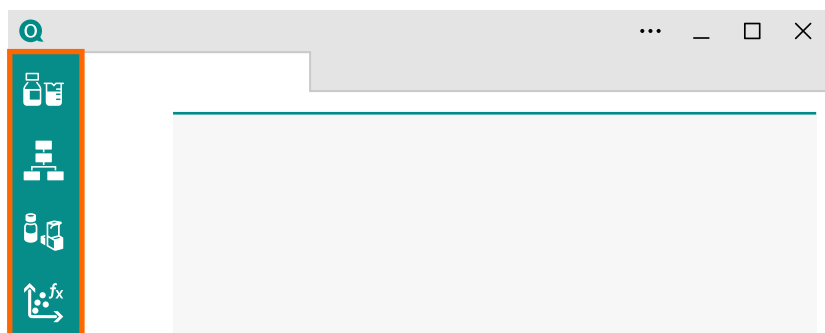
OMNIS Software divide la interfaz de usuario en varias áreas de trabajo. Las áreas de trabajo pueden tener varias subsecciones.

En este tutorial, las subsecciones se indican mediante una ruta del menú. Ejemplo: La subsección **Métodos** en el área de trabajo **Procesos** se indica con **Procesos ► Métodos**.

A continuación, se muestra cómo abrir una subsección de este tipo de un área de trabajo.

1 Abrir un área de trabajo

Haga clic en los iconos en el lado izquierdo de la pantalla para cambiar entre diferentes áreas de trabajo.

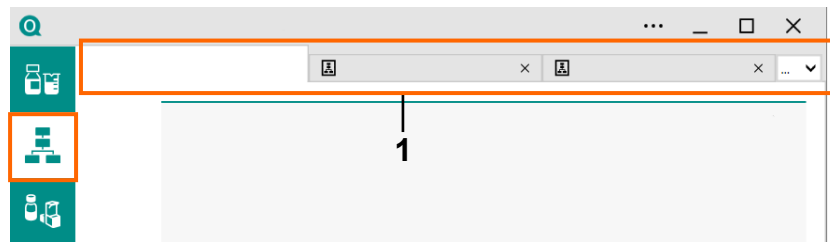


Para el ejemplo anterior, abrir el área de trabajo **Procesos** haciendo clic en el icono  correspondiente.

Textos alternativos

Si el cursor se ubica sobre un icono, aparece un texto alternativo con el nombre del área de trabajo, una breve explicación y un link a más información. Del mismo modo se puede mostrar el texto alternativo de otros elementos de la interfaz de usuario.

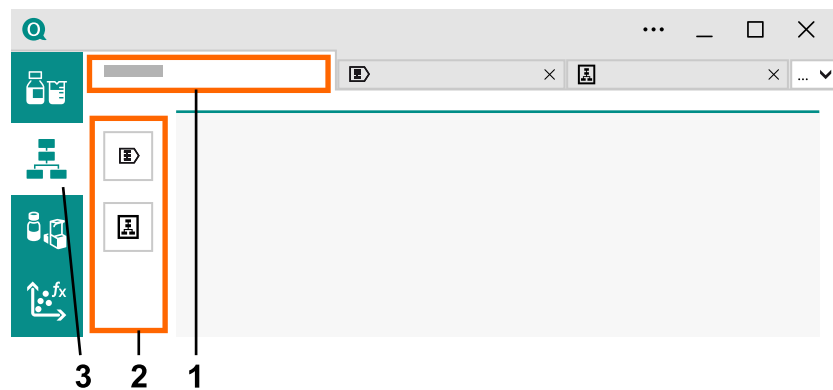
En una pantalla táctil, para mostrar los textos alternativos, toque el elemento durante más tiempo.



El área de trabajo puede contener una o varias pestañas (1).

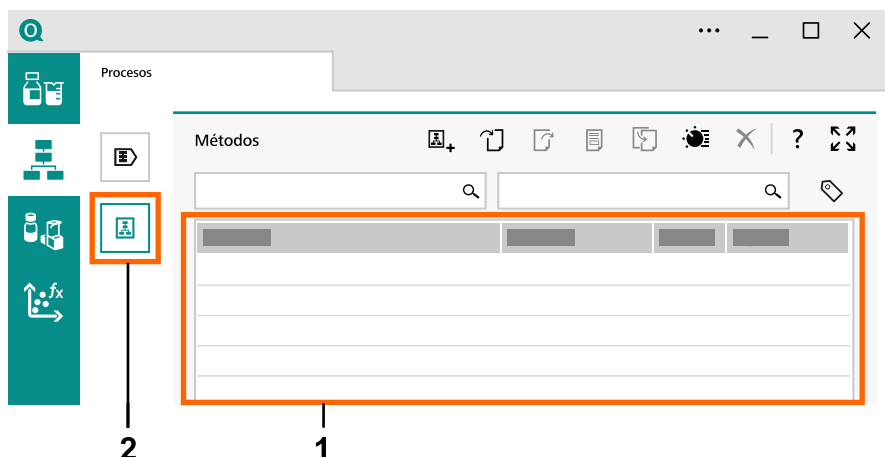
2 Abrir la pestaña de subsección

Haga clic en la pestaña ubicada más a la izquierda **(1)** para que se muestren las subsecciones **(2)** del área de trabajo seleccionada **(3)**.



3 Abrir una subsección

Abra la subsección **Métodos** haciendo clic en  (2).



La subsección **Métodos** contiene una lista resumen con todos los métodos disponibles en la base de datos (1).

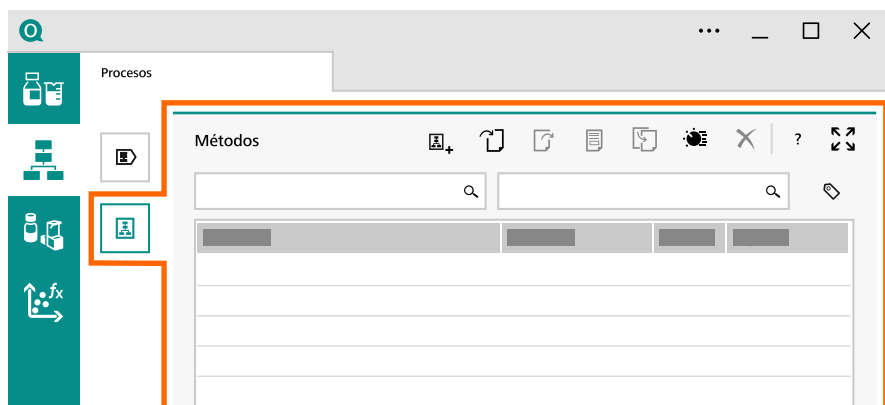
Pestañas

Como se indicó anteriormente en el paso 3, la subsección de un área de trabajo puede contener una lista resumen. Cuando se abre una entrada de la lista o se crea una entrada, esta se muestra en una pestaña propia.

A continuación, se describe un ejemplo de cómo crear un método.

1 Abrir la subsección Métodos

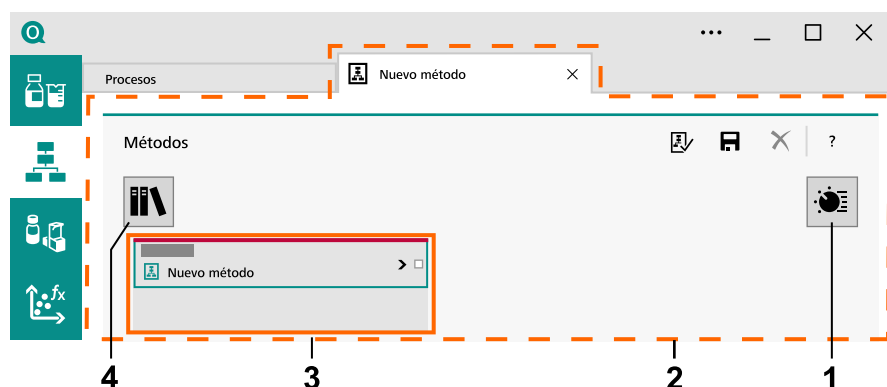
Procesos ► **Métodos** como se indicó anteriormente.



2 Crear un método

- Haga clic en .

Aparece una nueva pestaña con el nombre *Nuevo método* (2), en la que se puede crear el método (3).



Los iconos (1) y (4) proporcionan acceso a otras ventanas actualmente ocultas, como se explica a continuación.

Ventana

Las ventanas son parte de una pestaña o de una sección dentro de la pestaña. Algunas ventanas son visibles, mientras que otras están ocultas y deben abrirse mediante un icono.

1 Ventana de librería

Una librería contiene elementos que se pueden insertar en un proceso.

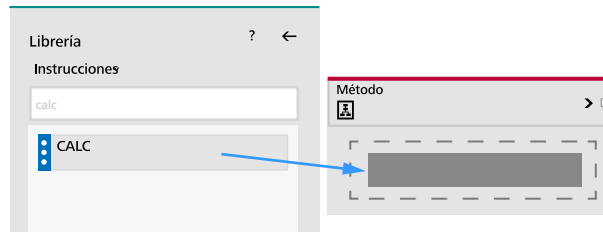
- Abra la ventana de **Librería** haciendo clic en .
- La ventana de librería se abre:



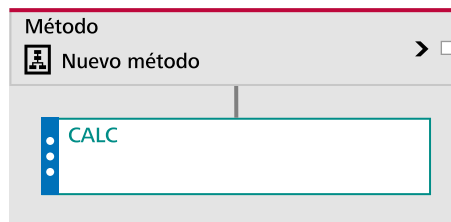
La ventana de librería tiene varias **subsecciones**, que se pueden seleccionar del listado de selección (1), por ejemplo **Librería ► Instrucciones**.

El campo de búsqueda (2) permite buscar elementos dentro de una subsección como, por ejemplo, instrucciones (3).

- Como ejemplo, inserte la instrucción **CALC** en el método:
 - Buscar en **Librería ► Instrucciones** la instrucción **CALC**.
 - Inserte la instrucción **CALC** en el método empleando la técnica de arrastrar y soltar.



Ahora el método contiene una instrucción:



Si es necesario, se pueden añadir más instrucciones. Las instrucciones que están dispuestas unas debajo de las otras se ejecutan secuencialmente. Las instrucciones que están dispuestas unas al lado de las otras se ejecutan en paralelo.

- Para cerrar la ventana de librería, haga clic en **←**.

- Introduzca un nombre para el método:

Propiedades ? →

General ▾

Método

Nombre

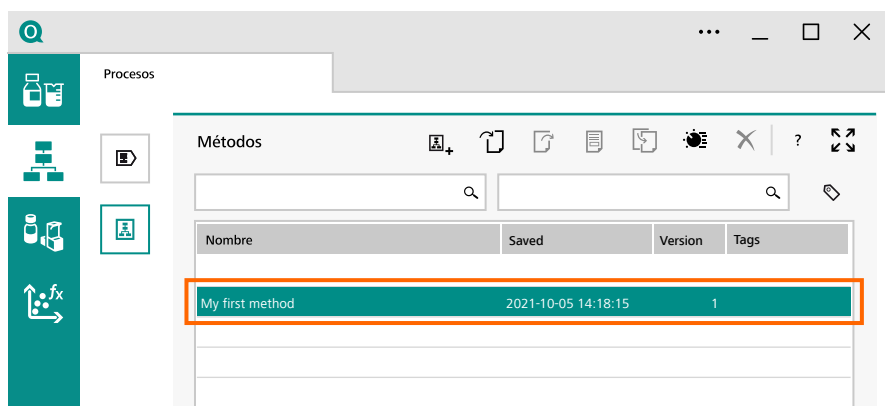
2 Guardar método

- Guarde el método haciendo clic en o pulsando las teclas [CTRL]+[S].

3 Abrir la lista resumen

- Cierre la pestaña y vuelva a la pestaña de la subsección (la pestaña más a la izquierda) **Procesos** ► **Métodos**.

El método creado se mostrará ahora en la lista resumen:



4 Borrado de método

- Seleccione el método creado.
- Borre el método seleccionado haciendo clic en .

Nota: Mientras un método esté abierto en una pestaña, no se puede borrar.
- Aparece un mensaje de confirmación.

Verifique el nombre del método que desea borrar.
- Confirme con **Borrar**.

El método se borra de la base de datos y de la lista resumen.

'Finished.Nombre de la instrucción'

Estado de la instrucción.

- **Inválido:** la instrucción (todavía) no se ha iniciado.
 - **0:** la instrucción todavía está en curso.
 - **1:** la instrucción ha finalizado correctamente.
 - **2:** la instrucción no ha finalizado correctamente. Se ha producido un error o una advertencia.
 - **3:** la instrucción se omitió por una instrucción **SKIP** o manualmente en los **Datos en directo**.
 - **4:** la instrucción se ha detenido por una intervención manual del usuario (parada o parada de emergencia), mediante una instrucción **STOP** o debido a un error en una instrucción en marcha en paralelo.
-

2.3.1 Adquisición de espectro

Nombre de la instrucción	Descripción	Variables de instrucción creadas (seguidas de .nombre de la instrucción)
PREP SPEC Para unidades funcionales del tipo Liquid Sample Presentation	Prepara el análisis de muestras líquidas: ▪ Asegura que el soporte de muestras usado coincida con el recipiente de muestras especificado. En caso contrario, se cancela la determinación. ▪ Asegura que se inserte un recipiente de muestras. En caso contrario, aparece un aviso para insertar la muestra. ▪ Activa la regulación de temperatura en el recipiente de muestras o en el soporte de muestras (véase "<i>Regulación de temperatura (Liquid Sample Presentation)</i>", capítulo 2.5, página 30).	

Nombre de la instrucción	Descripción	Variables de instrucción creadas (seguidas de <i>.nombre de la instrucción</i>)
VESSEL REMOVAL Para unidades funcionales del tipo Liquid Sample Presentation	- Puede asegurar la extracción del recipiente de muestras. La secuencia del proceso se interrumpe hasta que se retire el recipiente de muestras. Esto permite una secuencia controlada para las determinaciones en serie. - Si la temperatura se controla en el recipiente de muestras, el sensor de temperatura se aleja del recipiente de muestras. Tan pronto como aparece la indicación de retirar el recipiente de muestras, este se puede retirar sin dañar el sensor de temperatura. - La regulación de temperatura se puede desactivar o puede continuar en el soporte de muestras.	

2.3.2 Predicción

PREDICT – Cuantificación

La instrucción **PREDICT** aplica un modelo a un espectro de absorción que se haya registrado con la instrucción **MEAS SPEC**.

Un modelo de cuantificación proporciona una predicción de un parámetro de interés cuantitativo. Opcionalmente, se puede aplicar una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.

Variables de instrucción creadas (seguidas de *.nombre de la instrucción*)

- **Predicted.Quantification.Result**
Resultado predicho para el parámetro de interés.
- **Uncorrected.Quantification.Result**
Valor predicho para el parámetro de interés sin aplicar la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.
- **Unit.Quantification.Result**
Unidad del parámetro de interés.

- **IsOutlier.OutlierDetection.Result**
Calificación que indica si el espectro es un valor discrepante.
0: el espectro **no** se considera valor discrepante.
1: el espectro se considera valor discrepante (Hotellings T^2 o residuos Q).
- **HotellingsT2.OutlierDetection.Result**
 T^2 de Hotelling del espectro.
- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection.Result**
Valor límite de T^2 Hotelling para la identificación como valor discrepante. El valor límite depende del nivel de significancia que se haya determinado en el modelo.
- **QResiduals.OutlierDetection.Result**
Residuos Q del espectro.
- **LimitQResiduals.OutlierDetection.Result**
Valor límite de residuos Q para la identificación como valor discrepante. El valor límite depende del nivel de significancia que se haya determinado en el modelo.
- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
Nearest Neighbor Distance (NND) del espectro (*véase "Publicar modelo de cuantificación", página 96*).
Si el modelo se ha publicado sin NND: **no válido**
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
Valor límite de NND.
Si el modelo se ha publicado sin NND: **no válido**

PREDICT – Identificación y verificación

La instrucción **PREDICT** aplica un modelo a un espectro de absorción que se haya registrado con la instrucción **MEAS SPEC**.

Según su uso, un modelo de identificación proporciona una identificación de una muestra desconocida (por ejemplo, fructosa) o una verificación de la clase de producto de una muestra.

Variables de instrucción creadas (seguidas de *.nombre de la instrucción*)

- **Product.Identification.Result**
Producto determinado o grupo de productos determinado de la muestra identificada.
Si la identificación ha fallado, no se muestra ningún resultado.
- **Status.Identification.Result**
 - **Identified:** Identificación realizada correctamente. Se pudo determinar un producto o un grupo de productos.
 - **Ambiguous:** La identificación ha fallado. Los valores de probabilidad de varios productos superan el umbral de probabilidad.
 - **Unidentified:** La identificación ha fallado. Ningún valor de probabilidad de un producto supera el umbral de probabilidad.

- **Probability.Identification.Result**

- **0,01...100**: La probabilidad en porcentaje expresa la posibilidad de que la muestra pertenezca al producto o grupo de productos.
- **No válido**: La identificación ha fallado.

Si el modelo se usó para la verificación:

- **Status.Verification.Result**

- **1**: Verificación correcta.
- **0**: Verificación fallida.

PREDICT – Cualificación

La instrucción **PREDICT** aplica un modelo a un espectro de absorción que se haya registrado con la instrucción **MEAS SPEC**.

Un modelo de cualificación cualifica una muestra como muestra positiva (utilizable).

Variables de instrucción creadas (seguidas de *.nombre de la instrucción*)

- **Status.Qualification.Result**

- **1**: cualificación correcta.
- **0**: cualificación fallida.

PREDICT – Jerarquía de modelos

La instrucción **PREDICT** aplica una jerarquía de modelos a un espectro de absorción que se haya registrado con la instrucción **MEAS SPEC**.

Según su uso, la jerarquía de modelos proporciona una identificación de una muestra desconocida (por ejemplo, fructosa) o una verificación de la clase de producto de una muestra o una cuantificación de los parámetros de interés de una muestra.

Variables de instrucción creadas (seguidas de *.nombre de la instrucción*)

- Jerarquía de modelos (identificación)

- **Product.Identification.Result**

Producto determinado o grupo de productos determinado de la muestra identificada.

Si la identificación ha fallado, no se muestra ningún resultado.

- **Status.Identification.Result**

Identified: Identificación realizada correctamente. Se pudo identificar un producto o un grupo de productos.

Ambiguous: La identificación ha fallado. Los valores de probabilidad de varios productos superan el umbral de probabilidad.

Unidentified: La identificación ha fallado. Ningún valor de probabilidad de un producto supera el umbral de probabilidad.

- **Probability.Identification.Result**

0,01...100: La probabilidad en porcentaje expresa la posibilidad de que la muestra pertenezca al producto o grupo de productos.

No válido: La identificación ha fallado.

- Jerarquía de modelos (verificación)

- **Status.Verification.Result**

0: Verificación fallida.

1: Verificación correcta.

▪ Jerarquía de modelos (cuantificación)

Nota: **x = Índice del modelo de cuantificación** (véase "*Jerarquía de modelos – Índice para los modelos de cuantificación*", capítulo 11.4.1, página 187)

Si no se puede establecer ninguna referencia a un modelo de cuantificación, las siguientes variables devuelven el valor *Inválido*.

- **Predicted.Quantification{x}.Result**
Valor final predicho para el parámetro de interés.
- **Uncorrected.Quantification{x}.Result**
Valor predicho para el parámetro de interés sin aplicar la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.
- **Unit.Quantification{x}.Result**
Unidad del parámetro de interés.
- **ParameterName.Quantification{x}.Result**
Nombre del parámetro de referencia.
- **IsOutlier.OutlierDetection{x}.Result**
Calificación que indica si el espectro es un valor discrepante.
0: el espectro **no** se considera valor discrepante.
1: el espectro se considera valor discrepante (Hotellings T^2 o residuos Q).
- **AnyOutlier.OutlierDetection.Result**
0: ninguno de los modelos de cuantificación clasifica el espectro como valor discrepante.
1: al menos un modelo de cuantificación clasifica el espectro como valor discrepante (Hotellings T^2 o residuos Q).
- **HotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
 T^2 de Hotelling del espectro.
- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
Valor límite de T^2 Hotelling para la identificación como valor discrepante. El valor límite depende del nivel de significancia que se haya determinado en el modelo.
- **QResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
Residuos Q del espectro.
- **LimitQResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
Valor límite de residuos Q para la identificación como valor discrepante. El valor límite depende del nivel de significancia que se haya determinado en el modelo.
- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
Nearest Neighbor Distance (NND) del espectro (véase "*Publicar modelo de cuantificación*", página 96).
Si el modelo se ha publicado sin NND: **no válido**
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
Valor límite de NND.
Si el modelo se ha publicado sin NND: **no válido**

2.3.4 Calibración de las longitudes de onda

Nombre de la instrucción	Descripción	Variables de instrucción creadas (seguidas de <i>.nombre de la instrucción</i>)
CAL WL	Realiza una calibración de las longitudes de onda del aparato. La calibración de las longitudes de onda estandariza los valores de las longitudes de onda, es decir, el eje 'x' de los espectros.	▪ Date.Result Momento en el que se realizó la calibración de las longitudes de onda.
VAL WL	Valida la calibración de las longitudes de onda.	▪ Date.Result Momento en el que se validó la calibración de las longitudes de onda. ▪ OverallStatus.Result 1: la validación se realizó correctamente. 2: la validación ha fallado. ▪ ExpectedWavelength.Peak{X} Longitud de onda esperada (en nm) del pico X. ▪ MeasuredWavelength.Peak{X} Longitud de onda medida (en nm) del pico X. ▪ ExpectedBandwidth.Peak{X} Ancho de la banda esperado (en nm) del pico X. ▪ MeasuredBandwidth.Peak{X} Ancho de la banda medido (en nm) del pico X. ▪ Index.Peak{X} Número de pico del pico X. Por ejemplo: 'Index.Peak{2}' da el resultado 2. Si no hay ningún pico para X, las variables de instrucción anteriores dan el resultado: <i>No válido</i>

2.3.5 Pruebas de rendimiento del aparato

Nombre de la instrucción	Descripción	Variables de instrucción creadas (seguidas de <i>.nombre de la instrucción</i>)
TEST WL	La prueba de longitud de onda verifica la exactitud y la precisión de longitud de onda. Interna (obligatoria): se utiliza el patrón de longitud de onda interno. Externa (opcional): se utiliza un patrón de longitud de onda externo.	▪ Date.Result Momento en el que se realizó la prueba de longitud de onda. ▪ OverallStatus.Result 1: La prueba se realizó correctamente. 2: la prueba ha fallado.
TEST NOISE	La prueba de ruido verifica el ruido de la señal. Interna (obligatoria): se utiliza el camino de referencia de la presentación de muestras empleada. Test de bajo flujo y test de alto flujo (opcional): se utilizan patrones de referencia externos.	▪ Date.Result Momento en el que se comprobó el ruido de la señal. ▪ OverallStatus.Result 1: La prueba se realizó correctamente. 2: la prueba ha fallado.
TEST PHOTOMETRIC LINEARITY	La prueba externa opcional verifica la linealidad fotométrica mediante patrones de referencia externos.	▪ Date.Result Momento en el que se comprobó la linealidad fotométrica. ▪ OverallStatus.Result 1: La prueba se realizó correctamente. 2: La prueba ha fallado.

2.4 Reservar y liberar aparatos

Un aparato determinado solo puede ser usado por un sistema OMNIS a la vez.

El aparato se debe reservar antes de poder usarlo. Mientras el aparato esté reservado, ningún otro sistema OMNIS podrá acceder a él.

Reservar aparato

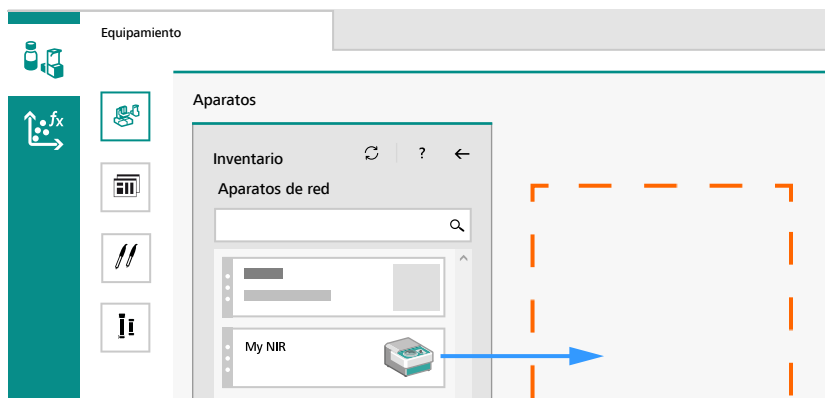
1 Buscar los aparatos disponibles

- Abra la ventana de **Inventario** haciendo clic en 

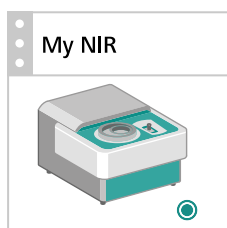
- Buscar el aparato deseado.
Nota: Los aparatos con iconos en gris no están disponibles.

2 Reservar aparato

Empleando la técnica de arrastrar y soltar, colocar el aparato en el área de trabajo contigua.



El aparato está ahora reservado:



Mediante una luz de estado de color verde junto al aparato se indica que este puede usarse.

- i** Si es necesario, se pueden reservar más aparatos.
- i** El aparato sigue estando reservado incluso cuando se cierra OMNIS Software.
El aparato solo se libera al salir de Windows. En cuanto se vuelve a encender el ordenador, el aparato vuelve a estar reservado. Es indiferente que se conecte el mismo usuario u otro.

Liberar aparato

Para liberar definitivamente un aparato reservado, proceda del siguiente modo:

1 Abrir la subsección Aparatos

- Abrir **Equipamiento** ► **Aparatos**.

2 Liberar aparato

- Seleccionar el aparato a liberar.
- Haga clic en  para eliminar el aparato seleccionado.

El aparato se libera y vuelve a estar disponible para otros usuarios.

2.5 Regulación de temperatura (Liquid Sample Presentation)

La regulación de temperatura regula de forma opcional la temperatura en el soporte de muestras o en la muestra.

Regulación de temperatura en el soporte de muestras

- Admite soportes de muestras para viales desechables, cubetas y celdas de flujo continuo.
- Temperatura objetivo en el soporte de muestras: entre 25 °C y 80 °C (no menos de 5,0 K por debajo de la temperatura ambiente).
- Exactitud de los sensores de temperatura < 0,5 K

Regulación de temperatura en la muestra

- Compatible con viales desechables.
- Temperatura objetivo de la muestra: entre 25 °C y 80 °C (no menos de 5,0 K por debajo de la temperatura ambiente).
- Exactitud de los sensores de temperatura < 0,5 K
- Algoritmo de regulación:
 - El algoritmo de regulación tiene en cuenta la temperatura objetivo definida de la muestra y la temperatura medida en los sensores. La medida espectroscópica puede iniciarse en cuanto se alcanza con suficiente estabilidad la temperatura modelada en la muestra y esta temperatura no se desvía más de 0,5 K de la temperatura objetivo. En caso necesario, la medida espectroscópica comienza ya poco después de colocar el vial desechable.
 - Exactitud típica: 1,0 K (comprobada en muestras de agua para temperaturas de muestras desde 25 °C hasta 80 °C con una temperatura ambiente de 23 °C).

Activar la regulación de temperatura

- Mediante una instrucción **PREP SPEC** (parámetro de instrucción **Regulación de temperatura**).

- En el control manual (solo para la regulación de temperatura en el soporte de muestras):
 - En **Equipamiento ► Aparatos** hacer doble clic en el aparato reservado para abrir el **Control manual**.
 - En la sección **Regular la temperatura**, introduzca la temperatura deseada en el campo de entrada **Temperatura objetivo de soporte de muestras** y haga clic en .

Desactivar la regulación de temperatura

- Mediante una instrucción **VESSEL REMOVAL** (opción **Desactivar**).
- En el control manual:
 - En **Equipamiento ► Aparatos** hacer doble clic en el aparato reservado para abrir el **Control manual**.
 - En la sección **Regular la temperatura**, haga clic en . La regulación de temperatura se interrumpe, independientemente de si la temperatura se mide en el soporte de muestras o en la muestra.
- La regulación de temperatura finaliza generalmente tras 2 horas de inactividad o al apagar el aparato.

3 Agregar unidad funcional

- Abra la ventana de **Inventario** haciendo clic en .
- Agregue mediante la técnica de arrastrar y soltar la unidad funcional **Liquid Sample Presentation** o **Solid Sample Presentation** en el sistema de trabajo.

 Los aparatos del tipo **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** ponen a disposición 2 unidades funcionales. Metrohm recomienda crear sistemas de trabajo separados con una de las dos unidades funcionales cada uno.

 Una unidad funcional se puede eliminar del sistema de trabajo:

- Seleccione la unidad funcional que desea borrar.
- Haga clic en  o pulse el botón **[Supr]**.

 Si es necesario, puede modificarse el nombre de la unidad funcional:

- Seleccione la unidad funcional cuyo nombre desea modificar.
- En **Propiedades** ► **General** ► **Nombre** introduzca un nombre adecuado.

4 Guardar un sistema de trabajo

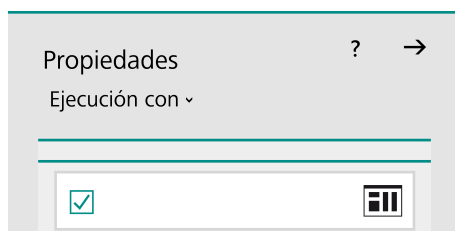
- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

 Una unidad funcional puede asignarse a varios sistemas de trabajo.

 Tan pronto como el sistema de trabajo se haya creado, el aparato puede liberarse y, si es necesario, volver a reservarse.

3 Asignar un sistema de trabajo al método

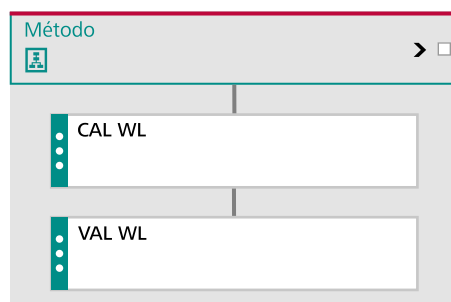
- En **Propiedades** ► **Ejecución con**, seleccione el sistema de trabajo a usar.



- Utilice el mismo sistema de trabajo para todos los métodos de este documento.

4 Insertar instrucciones

- Abra la ventana de **Librería** haciendo clic en .
- Buscar en **Librería** ► **Instrucciones** la instrucción **CAL WL**.
- Inserte la instrucción **CAL WL** en el método empleando la técnica de arrastrar y soltar.
- Buscar la instrucción **VAL WL** y ordenarla debajo de la instrucción **CAL WL**.



- El orden de las instrucciones es importante. Las instrucciones que están ordenadas unas debajo de otras se ejecutan secuencialmente. Primero se ejecuta la instrucción **CAL WL** y luego la instrucción **VAL WL**.

- Las instrucciones adquieren automáticamente un espectro de referencia. Por esta razón, la instrucción **MEAS REF SPEC** no es necesaria.

5 Guardar método

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

3 Campo de entrada para el nombre de muestra

La sección **Datos de muestra** contiene un campo para el nombre de la muestra:

- Introducir **Valor por defecto** para el nombre de muestra.

4 Definir el procedimiento operativo y el número de submuestras

- En la sección **Procedimientos operativos/Submuestras** seleccionar el procedimiento operativo **Wavelength Cal/Val**.
- La **Cantid submuestras** determina cuántas submuestras se agregarán automáticamente para cada muestra. Introduzca **1**.

Procedimientos operativos	Cantid submuestras
1	1

5 Guardar perfil de muestra

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Creación de listado de muestras

1 Crear listado de muestras

- En **Muestras** ► **Listados de muestras**, haga clic en .

2 Asignar nombre al listado de muestras

- Introduzca el siguiente nombre en el campo **Nombre: Wavelength Cal/Val**

Confirmar con **[Intro]**.

Listado de muestras 

3 Guardar listado de muestras

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

 Las muestras se añaden más adelante.

3.2.2 Iniciar calibración de las longitudes de onda

 Tener en cuenta los intervalos de ejecución (*véase "Calibración de las longitudes de onda", capítulo 10.2, página 175*).

 Metrohm recomienda esperar 1 hora después de poner en marcha el aparato antes de iniciar la calibración de las longitudes de onda.

Iniciar calibración de las longitudes de onda

Requisito:

La calibración de las longitudes de onda está preparada (*véase "Preparar calibración de las longitudes de onda", capítulo 3.2.1, página 34*).

1 Reservar aparato

Reservar el espectrómetro (*véase "Reservar y liberar aparatos", capítulo 2.4, página 28*).

2 Abrir listado de muestras 'Wavelength Cal/Val'

- Abrir el área de trabajo **Muestras**.
- Si el listado de muestras **Wavelength Cal/Val** está cerrado, en la pestaña **Muestras** abra la subsección **Listados de muestras** y haga doble clic en el listado de muestras **Wavelength Cal/Val**.

3 Seleccionar perfil de muestra 'Wavelength Cal/Val'

- En el listado de selección a la izquierda del icono  seleccione el perfil de muestra **Wavelength Cal/Val**.

 Las muestras agregadas más adelante se crean según las especificaciones del perfil de muestra seleccionado.

4 Añadir muestra

- Añadir una nueva muestra al listado de muestras haciendo clic en .

En el listado de muestras aparece una nueva entrada. Contiene una muestra marcada con , seguida de su submuestra marcada con .

	Nombre de muestra		N.º	Nombre de submuestra
	Muestra 1		1	Submuestra 1

Según el perfil de muestra, la nueva muestra 1 contiene la submuestra que usa el procedimiento operativo **Wavelength Cal/Val**.

- Los nombres de muestras y de submuestras se editan según sea necesario.
- Guarde el listado de muestras haciendo clic en  o pulsando las teclas **[CTRL]+[S]**.

5 Ejecutar la calibración de las longitudes de onda

- Seleccione la muestra agregada.
- Inicie la calibración de las longitudes de onda haciendo clic en .

Después de completar la calibración, se muestra el estado de la submuestra como .

6 Verificar resultado

- En la sección inferior derecha abra **Resultados ► Datos primarios**.

Se muestran los resultados de la calibración y validación. Verificar el estado general de la validación:

Estado general
Satisfactorio

 **Advertencia de estado:** si falla la validación, el icono de la submuestra aparece marcado en rojo en el listado de muestras:



3.3.1 Preparar las pruebas de rendimiento internas

Siga las indicaciones a continuación para crear un método usando las instrucciones **TEST WL** y **TEST NOISE**. A continuación, cree un procedimiento operativo, un perfil de muestra y un listado de muestras. Esto permite iniciar las pruebas de rendimiento del aparato del mismo modo que una determinación de la muestra.

Creación de método

1 Crear un método

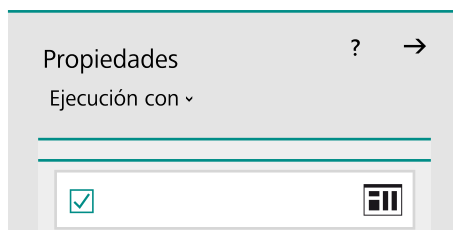
- En **Procesos** ► **Métodos**, haga clic en .

2 Asignar nombre al método

- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
- En **Propiedades** ► **General** introduzca el siguiente nombre en el campo **Nombre**: **Prueba de rendimiento del aparato**.

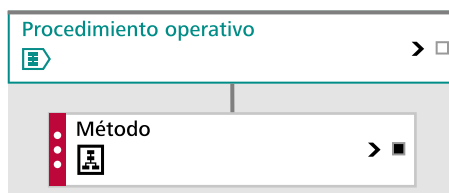
3 Asignar un sistema de trabajo al método

- En **Propiedades** ► **Ejecución con**, seleccione el sistema de trabajo a usar.



4 Insertar instrucciones

- Abra la ventana de **Librería** haciendo clic en .
- Buscar en **Librería** ► **Instrucciones** la instrucción **TEST WL**.
- Inserte la instrucción **TEST WL** en el método empleando la técnica de arrastrar y soltar.
- Buscar la instrucción **TEST NOISE** y ordenarla debajo de la instrucción **TEST WL**.



4 Guardar procedimiento operativo

- Haga clic en  o pulse las teclas [CTRL]+[S].

Creación de perfil de muestra

1 Crear perfil de muestra

- En **Muestras** ► **Perfiles de muestra**, haga clic en .

2 Asignar nombre al perfil de muestra

- Introduzca el siguiente nombre en el campo **Nombre de perfil de muestra**: **Prueba de rendimiento del aparato**.

Perfil de muestra
Nombre de perfil de muestra

3 Campo de entrada para el nombre de muestra

La sección **Datos de muestra** contiene un campo para el nombre de la muestra:

Datos de muestra

Nombre de campo breve
Nombre

Nombre de campo largo
Nombre

Tipo de campo de entrada
Texto ▼

Utilizar como
Campo de entrada ▼

▲ Propiedades campo entrada

Valor por defecto
My Sample name

3.3.2 Ejecutar pruebas de rendimiento internas

 Tener en cuenta los intervalos de ejecución recomendados (véase "Pruebas de rendimiento del aparato", capítulo 10.1, página 174).

Ejecutar prueba de rendimiento del aparato

Requisito:

Las pruebas de rendimiento del aparato están preparadas (véase "Preparar las pruebas de rendimiento internas", capítulo 3.3.1, página 41).

1 Reservar aparato

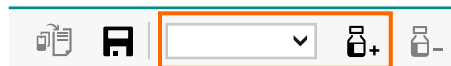
Reservar el espectrómetro (véase "Reservar y liberar aparatos", capítulo 2.4, página 28).

2 Abrir listado de muestras 'Prueba de rendimiento del aparato'

- Abrir el área de trabajo **Muestras**.
- Si el listado de muestras **Prueba de rendimiento del aparato** se ha cerrado, en la pestaña **Muestras** abra la subsección **Listados de muestras** y haga doble clic en el listado de muestras **Prueba de rendimiento del aparato**.

3 Seleccionar perfil de muestra 'Prueba de rendimiento del aparato'

- En el listado de selección a la izquierda del icono + seleccione el perfil de muestra **Prueba de rendimiento del aparato**.



 Las muestras agregadas más adelante se crean según las especificaciones del perfil de muestra seleccionado.

4 Añadir muestra

- Añadir una nueva muestra al listado de muestras haciendo clic en .

En el listado de muestras aparece una nueva entrada. Contiene una muestra marcada con , seguida de su submuestra marcada con .

	Nombre de muestra		N.º	Nombre de submuestra		
	Muestra 1		1	Submuestra 1		

 La variable **OverallStatus.Result** de las instrucciones **TEST WL** y **TEST NOISE** muestra el estado general de la prueba:

- 1: La prueba se realizó correctamente.
- 2: La prueba ha fallado.

 Tener en cuenta los pasos para solucionar problemas para las pruebas fallidas (véase "*Pruebas de rendimiento del aparato*", capítulo 10.1, página 174).

3.3.3 Pruebas de rendimiento externas (opcionales)

Las pruebas de rendimiento externas respaldan la validación según farmacopeas como USP <856>, Ph.Eur 2.2.40 y JP 2.27. Se requieren patrones de referencia externos, con trazabilidad metrológica. Para cada patrón de referencia externo se debe importar el correspondiente archivo del patrón de referencia de OMNIS (*.ostd) a OMNIS Software (ver [Metrohm Knowledge Base](#)).

Para que las pruebas de rendimiento internas y externas puedan ejecutarse separadamente:

- Cree métodos, procedimientos operativos y perfiles de muestra separados.
- Para las pruebas de rendimiento externas se puede proceder de igual modo que con las pruebas de rendimiento internas, pero con las siguientes modificaciones y adiciones.

 Las instrucciones adquieren automáticamente un espectro de referencia. Por esta razón, la instrucción **MEAS REF SPEC** no es necesaria.

TEST WL

- Insertar y seleccionar la instrucción **TEST WL** en el método.
- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
- En **Propiedades** ► **Parámetros** ► **Parámetros de medida**, introduzca el parámetro de medida:
 - Seleccionar el modo de medida **Externo**.
 - **Liquid Sample Presentation**: seleccionar el patrón **WL Standard Transmission OMNIS NIR**.
 - **Solid Sample Presentation**: seleccionar el patrón **WL Standard Reflection OMNIS NIR**.

TEST NOISE – Test de bajo flujo

- Insertar y seleccionar la instrucción **TEST NOISE** en el método.
- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .

Identificación

Las muestras deben cubrir las variaciones esperadas para cada producto. Los productos pueden tener una cantidad diferente de muestras, siendo el mínimo 3.

- Para cada muestra, se adquiere un espectro.
- Se debe conocer la identidad de la muestra.

Cualificación

Las muestras de calibración deben cubrir las variaciones esperadas. El número mínimo de muestras en el conjunto de calibración es 3.

Opcionalmente en cada caso, las muestras de validación pueden asignarse al conjunto de validación positivo o al conjunto de validación negativo.

- Para cada muestra, se adquiere un espectro.

Flujos de trabajo

 Puede encontrar una ilustración de las secuencias en OMNIS Software en el apéndice:

- Adquisición de espectros de muestras de calibración (*véase "Adquisición de espectros de muestras de calibración", página 195*)
- Registrar valores de referencia o nombres de productos (*véase "Registrar valores de referencia o nombres de productos", página 194*)

4.1 Preparación de la adquisición de espectro

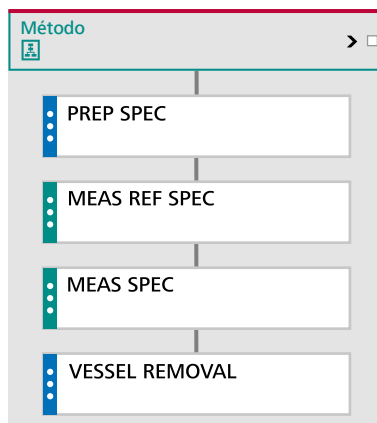
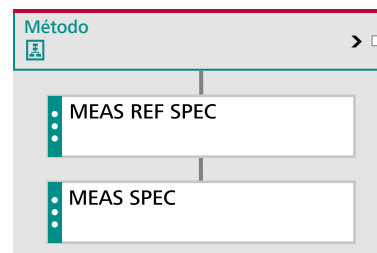
Para cada muestra de calibración y muestra de validación se debe adquirir un espectro.

 Para cada muestra, adquirir solo 1 espectro. Para materias sólidas heterogéneas, usar la opción **Medida multipunto** (ver abajo).

Para preparar la adquisición de espectros, cree un método, un procedimiento operativo, un perfil de muestra y un listado de muestras de la siguiente manera.

Crear método

Requisito:

Muestras líquidas**Estructura base****Muestras de materia sólida****Estructura base**

-  El espectro de absorción de la muestra se calcula usando el espectro de referencia y el espectro registrado de la muestra.
-  Solo hay 1 espectro de referencia por unidad funcional. Cada vez que se ejecuta la instrucción **MEAS REF SPEC**, se sobrescribe el espectro de referencia anterior.
Por esta razón, la instrucción **MEAS SPEC** utiliza siempre el último espectro de referencia adquirido de la unidad funcional correspondiente.
-  Metrohm recomienda asignar a cada instrucción en **Propiedades** ► **General** un nombre descriptivo.

4 **Configurar el parámetro de la instrucción MEAS SPEC (solo en la presentación de muestras de materia sólida)**

- Seleccionar la instrucción **MEAS SPEC**.
- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .

- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
Abrir la subsección **Parámetros**.
 - En **Recipiente de muestras**, seleccione el tipo utilizado y la designación precisa del recipiente de muestras.
 - En **Regulación de temperatura** active o desactive la regulación de temperatura. Si es necesario, especifique el lugar de la regulación de temperatura y la temperatura objetivo. Para la regulación de temperatura de la muestra, seleccione la opción **Recipiente de muestras**.

Nota: La temperatura objetivo no debe estar más de 5,0 K por debajo de la temperatura ambiente.

- Si es necesario, seleccione la instrucción **VESSEL REMOVAL** correspondiente.



AVISO

Daños en el sensor de temperatura

Mientras se regula la temperatura en el recipiente de muestras, un sensor de temperatura permanece en contacto directo con el recipiente de muestras. Para evitar daños en el sensor de temperatura, antes de extraer el recipiente de muestras, el sensor de temperatura debe alejarse del recipiente de muestras. Para ello sirve la instrucción **VESSEL REMOVAL**.

6 Configurar el parámetro de la instrucción VESSEL REMOVAL (solo en la presentación de muestras líquidas)

La instrucción **VESSEL REMOVAL** puede asegurar la extracción del recipiente de muestras. La secuencia del proceso se interrumpe hasta que se retire el recipiente de muestras. Esto permite una secuencia controlada para las determinaciones en serie.

Si la temperatura se controla en el recipiente de muestras, el sensor de temperatura se aleja del recipiente de muestras. Tan pronto como aparece la indicación de retirar el recipiente de muestras, este se puede retirar sin dañar el sensor de temperatura.

La regulación de temperatura se puede desactivar o puede continuar en el soporte de muestras.

- Seleccionar la instrucción **VESSEL REMOVAL**.

4 Guardar procedimiento operativo

- Haga clic en  o pulse las teclas [CTRL]+[S].

Crear perfil de muestra

1 Crear perfil de muestra y asignarle un nombre

- En **Muestras** ► **Perfiles de muestra**, haga clic en .
- Introduzca un nombre adecuado en el campo **Nombre del perfil de muestra**.

2 Campo de entrada para el nombre de muestra

La sección **Datos de muestra** contiene un campo para el nombre de la muestra:

Datos de muestra

Nombre de campo breve

Nombre

Nombre de campo largo

Nombre

Tipo de campo de entrada

Texto

Utilizar como

Campo de entrada

Propiedades campo entrada

Valor por defecto

My Sample name

- Introducir **Valor por defecto** para el nombre de muestra.

3 Para cuantificación: Agregue un campo de entrada para el parámetro de referencia

 Solo los datos de muestra se pueden usar como parámetros de referencia, no los datos de submuestra.

- En la sección **Datos de muestra**, añada un campo de entrada haciendo clic en . Se añade un nuevo campo de entrada a la derecha.

Varios parámetros de referencia

Si se debe predecir más de un parámetro de interés, añada un campo de entrada separado para cada parámetro de referencia (*véase "Varios parámetros de interés (cuantificación)", capítulo 9.1.1, página 165*).

 Para borrar un campo de entrada **Nombre de campo breve**, haga clic con el botón derecho del ratón sobre él y seleccione **[Borrar el campo de entrada]** en el menú contextual.

4 Para identificación y verificación: añadir campo de entrada para el parámetro del producto

 Solo los datos de muestra se pueden usar como parámetro del producto, no los datos de submuestra.

- En la sección **Datos de muestra**, añada un campo de entrada haciendo clic en .

Se añade un nuevo campo de entrada a la derecha.

- **Nombre de campo breve**: Introduzca el nombre que se debe usar como cabecera de columna en el listado de muestras.
- **Nombre de campo largo**: Opcionalmente, introduzca el nombre que se debe usar como designación en los informes.

Nota: Si el campo **Nombre de campo largo** está vacío, en los informes se usará el nombre que se encuentre en el campo **Nombre de campo breve**.

Los nombres de productos se pueden introducir en el listado de muestras ya sea como texto o como selección del listado. Si posteriormente se realizan verificaciones, utilice la selección del listado.

Escribir los nombres de productos en el cuadro de texto:

- **Tipo de campo de entrada**: **Texto**.
- **Utilizar como**: **Producto**
- Completar la sección **Propiedades campo entrada** según sea necesario.

Seleccionar los nombres de productos del listado:

- **Tipo de campo de entrada**: **Listado de selección**.
- **Utilizar como**: **Producto**

5 Definir el procedimiento operativo y el número de submuestras

- Seleccionar el procedimiento operativo creado en la sección **Procedimientos operativos/Submuestras**.
- La Cantid submuestras determina cuántas submuestras se agregarán automáticamente para cada muestra. Introduzca **1**.

Procedimientos operativos	Cantid submuestras
1	1

6 Guardar perfil de muestra

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

En caso de necesitar varios perfiles de muestra (por ejemplo, para diferentes productos):

1. Seleccione el perfil de muestra creado en **Muestras ► Perfiles de muestra**.
2. Duplique el perfil de muestra seleccionado haciendo clic en .
3. Abra el perfil de muestra duplicado y realice los ajustes necesarios.

Crear listado de muestras

1 Crear listado de muestras y asignarle un nombre

- En **Muestras ► Listados de muestras**, haga clic en .
- Se abre una nueva pestaña.
- Introduzca un nombre adecuado en el campo **Nombre**.

2 Añadir muestras

- En el listado de selección a la izquierda del icono , seleccione el perfil de muestra creado.

Las muestras que se agreguen más adelante se crean según las especificaciones del perfil de muestra seleccionado.

Los listados de muestras y procesos están listos para la adquisición de espectros (véase "Adquirir espectros", capítulo 4.2, página 63).

4.2 Adquirir espectros



ADVERTENCIA

Sustancias inflamables en superficie caliente

Peligro de incendio y quemaduras en caso de derrames de sustancias inflamables. Las muestras, los viales de muestras, los soportes de muestras y la presentación de muestras pueden alcanzar temperaturas de hasta 85 °C.

- Evite las fuentes de ignición.
- Utilice una protección de tierra.
- Utilice un extractor.
- Eliminar inmediatamente las materias sólidas y los líquidos derramados.



ATENCIÓN

Expansión del volumen de la muestra por calentamiento

Lesiones y daños para la salud debido al rebose o a la rotura del recipiente de muestras o por la expulsión del tapón.

- Llene el recipiente de muestras solamente hasta la altura mínima de 2 cm. El líquido se puede expandir en el volumen de aire restante.
Como alternativa, use un tapón con orificio capilar.
- Presione suavemente el tapón al insertarlo para no dañar el recipiente de muestras.



ATENCIÓN

Viales de muestra calientes

Quemaduras de la piel por contacto con superficies o líquidos calientes. Las muestras, los viales de muestras, los soportes de muestras y la presentación de muestras pueden alcanzar temperaturas de hasta 85 °C.

- Use equipo de protección personal y guantes resistentes al calor.
- Eliminar inmediatamente los líquidos y materias sólidas derramados.

Adquirir espectros para el desarrollo del modelo

Requisitos:

3 Ejecutar determinaciones

AVISO

Daño en el sensor de temperatura durante la regulación de temperatura en el recipiente de muestras

El sensor se puede dañar, si se retira el recipiente de muestras mientras el sensor está en contacto directo con él.

- No retire el recipiente de muestras hasta que la medida haya finalizado y el sensor de temperatura se haya alejado del recipiente de muestras.
 - Seleccionar la submuestra a analizar de alguna de las siguientes maneras:
 - Seleccione la submuestra haciendo clic en el icono .
 - Para fines de análisis, es suficiente seleccionar una única celda de la submuestra.
 - Preparar la muestra física correspondiente.
Colocar el recipiente de muestras en el soporte de muestras.
 - Iniciar la determinación haciendo clic en el . El número en el botón indica cuántas submuestras se ejecutarán.
 - Se inicia el procedimiento operativo asignado a la submuestra. Seguir cualquier indicación que figure en la sección **Curvas y datos ► Datos en directo**. Si se regula la temperatura del recipiente de muestras, retire el recipiente de muestras solo después de recibir esa indicación.
Después de completar correctamente el análisis, se muestra el estado de submuestra como .
 - Realice las determinaciones para todas las demás muestras de la misma manera.
-  La temperatura objetivo no debe estar más de 5,0 K por debajo de la temperatura ambiente.
-  Si los procesos son adecuados para determinaciones en serie, se pueden seleccionar varias submuestras de una vez. De forma alternativa,  inicia todas las submuestras ejecutables incluidas en el listado de muestras.
- Para muestras líquidas: la instrucción **VESSEL REMOVAL** permite efectuar determinaciones en serie.
 - Para muestras de materia sólida: se deberán prever acciones por parte del usuario para llevar a cabo determinaciones en serie (p. ej., mediante la instrucción **WAIT**).

Valores de referencia (para cuantificación) y nombres de productos (para identificación, verificación)

1 Método de referencia (para cuantificación)

- Mida los valores de referencia de las muestras con un método de referencia adecuado, p. ej., mediante titulación.

2 Ingresar valores de referencia o nombres de productos

- Ingresar los valores de referencia o los nombres de productos en los campos correspondientes del listado de muestras.



Añadir datos de muestra en el listado de muestras

Si al comienzo de la medida aún no hay datos de muestra para el parámetro de referencia o para el parámetro del producto, se puede añadir un campo de entrada de la siguiente manera:

- Seleccionar las muestras para las cuales se desea añadir un campo de entrada haciendo clic en . Para seleccionar todas las muestras, haga clic en .
- Hacer clic con el botón derecho del ratón en las muestras seleccionadas y seleccionar **Añadir datos de muestra** en el menú contextual.
- Agregue datos de muestra para el parámetro de referencia o el parámetro del producto (*véase "Preparación de la adquisición de espectro", capítulo 4.1, página 51*).

3 Guardar listado de muestras

- Haga clic en o pulse las teclas [CTRL]+[S].

Si se han preparado varios listados de muestras, procese cada listado de muestras como se describió anteriormente.

Cuantificación: Para desarrollar un modelo de cuantificación, continúe con *Modelo de cuantificación, capítulo 5, página 68*.

Identificación, verificación: para desarrollar un modelo de identificación, continúe con *Modelo de identificación, capítulo 6, página 107*.

Cualificación: para desarrollar un modelo de cualificación, continúe con *Modelo de cualificación, capítulo 7, página 126*.

Crear modelo de cuantificación

Nombre del modelo de cuantificación

Listados de muestras

Consultas de búsqueda

Importación XDS/DS

Nombre	Guardado	Parámetro de referencia	Unidad
EtOH (1) simulation	2022-02-22 20:38:13	H2O	%
EtOH (2) simulation	2022-02-24 09:42:40		
My sample list	2022-02-17 10:49:44		



Las muestras también pueden seleccionarse mediante una consulta de búsqueda.

En caso necesario, las muestras de aparatos XDS y DS también se pueden importar (*véase "Cambio de un analizador XDS/DS (cuantificación)", capítulo 11.6, página 189*).



La selección de muestras se puede ajustar más adelante.

- El listado **Parámetro de referencia** muestra todos los datos de muestra que son adecuados como parámetros de referencia. Seleccione el parámetro de referencia para el cual se desarrollará el modelo. Si el parámetro de referencia tiene nombres diferentes, seleccione todos los nombres.
- Haga clic en **[Continuar]**.

3 Definir parámetros de referencia

- El listado **Parámetro de referencia** muestra todos los nombres para el parámetro de referencia seleccionado en el paso anterior. Seleccione todos los nombres necesarios en esta lista.

Definir parámetro de referencia

Nombre del modelo de cuantificación

Parámetro de referencia	Unidad
H2O	%

Nombre del parámetro de referencia

Unidad del parámetro de referencia

Número de decimales

- En el campo **Nombre del parámetro de referencia**, ingrese el nombre que usará el modelo.
- Seleccione la **Unidad del parámetro de referencia** que usará el modelo.
- Ingrese la cantidad de **Número de decimales** para mostrar los resultados.

Todos los espectros que tienen las designaciones seleccionadas del parámetro de referencia se añaden al modelo.

4 Desarrollo automático o manual del modelo

 Si se desea un desarrollo automático del modelo, pero se necesita ajustar la selección de muestras primero, continuar con el desarrollo manual del modelo.

- **Desarrollo automático del modelo**

Desarrollo automático del modelo con **OMD (OMNIS Model Developer)** y las muestras seleccionadas. Después del desarrollo automático del modelo, este se puede publicar, validar o seguir desarrollando.

- Haga clic en **[Iniciar OMD]**.
La duración de la ejecución de OMD depende del número de espectros.
- Continuar con *capítulo 5.2, Desarrollo automático del modelo – OMD, página 70*.

- **Desarrollo manual del modelo**

- Haga clic en **[Crear]**.
Abra el nuevo modelo en una pestaña.
- Guardar el modelo: Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.
- Continuar con *capítulo 5.3, Desarrollo manual del modelo, página 73*.

5.2 Desarrollo automático del modelo – OMD

El **OMD (OMNIS Model Developer)** automatiza el desarrollo de modelos de cuantificación, presenta una selección de los modelos más apropiados y evalúa su capacidad predictiva.

Requisito:

El OMD se ha iniciado con **[Iniciar OMD]**.

1 Revisión de los modelos de cuantificación calculados

Una vez finalizados los cálculos, el OMD ofrece 5 modelos para elegir.

Modelo de cuantificación calculado

Nombre del modelo de cuantificación

Número de decimales

4

Número de modelo ▲	SEC	SECV	SEP	IR ² P
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

Los modelos están ordenados según su capacidad predictiva. Para cada modelo se proporcionan figuras de mérito.

En el borde izquierdo de la tabla, los modelos están marcados con los siguientes colores:

- Los modelos marcados en **verde** poseen una buena capacidad predictiva. Si el número de muestras es suficientemente grande, el modelo funcionará bien con todas las muestras desconocidas del mismo tipo. Las figuras de mérito proporcionan una estimación fiable de los errores futuros.
- Los modelos marcados en **amarillo** poseen una capacidad predictiva media. Si el número de muestras es suficientemente grande, se espera un buen rendimiento del modelo. Sin embargo, las figuras de mérito pueden arrojar datos demasiado optimistas para futuras muestras. Se recomienda realizar una validación por separado.
- Los modelos marcados en **rojo** no poseen suficiente capacidad predictiva. El modelo tiene deficiencias importantes. No debería utilizarse.



Si un modelo de cuantificación todavía puede mejorarse, las sugerencias de mejora se muestran en el texto alternativo del modelo.

2 Revisión de figuras de mérito

Para cada modelo, se muestran los siguientes errores estándar:

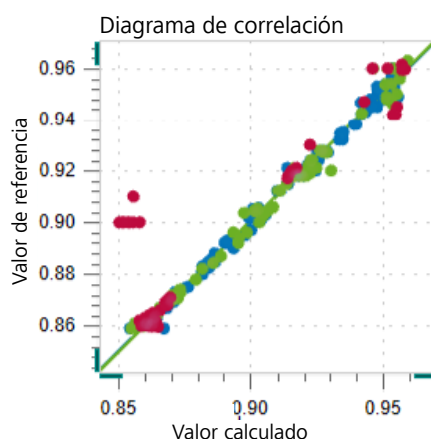
- SEC**: Error estándar de la calibración.
- SECV**: Error estándar de la validación cruzada.
- SEP**: Error estándar de la predicción. Al analizar muestras desconocidas, este número es el mejor valor estimado para el error de predicción. El SEP solo se muestra si hay un conjunto de validación disponible.

Nota: El OMD solo crea un conjunto de validación, cuando quedan al menos 100 espectros después de detectar valores discrepantes.

El Modelo 1 tiene la mejor capacidad predictiva, aunque no necesariamente los menores errores estándar.

3 Verificar el diagrama de correlación

Haciendo clic en un modelo individual se muestra el correspondiente Diagrama de correlación.



El **Diagrama de correlación** permite evaluar el rendimiento del modelo de un vistazo. El diagrama representa la correlación entre los valores calculados con el modelo (eje 'x') y los valores de referencia (eje 'y').

Cada punto representa una muestra:

- Los puntos azules representan las muestras en el conjunto de calibración.
- Los puntos verdes representan las muestras en el conjunto de validación (si están disponibles).
- Los puntos rojos representan las muestras en el conjunto de valores discrepantes (si están disponibles).

Una recta de regresión se ajusta a los puntos azules o verdes, de manera que describa la relación entre los valores de referencia y los valores calculados de la mejor manera posible.

Evaluar el diagrama de correlación

- La pendiente de las rectas de regresión azules y verdes debería ser lo más cercana posible a 1, y el sector de eje de coordenadas 'y' debería ser lo más cercano posible a 0.
- Los puntos azules y verdes deberían estar lo más cerca posible de la recta de regresión correspondiente.

 La recta de regresión y los puntos pueden superponerse.

4 Validar, desarrollar o publicar modelos



Para poder utilizar el modelo en determinaciones y reevaluaciones, ese modelo debe publicarse.

Publicar directamente uno de los 5 modelos

- Si el OMD se inició al crear el modelo:
 - Seleccione un modelo y haga clic en **[Guardar y publicar]**. Los otros 4 modelos se descartan.
 - La última versión publicada se mostrará en **Calibración y evaluación ► Modelos de cuantificación**. Ahora la instrucción **PREDICT** puede acceder a la versión publicada del modelo.
- Si el OMD se inició en un modelo abierto:
 - Seleccione un modelo y haga clic en **[Editar]**.
 - Guardar el modelo: Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.
 - Continuar con [capítulo 5.4, Publicar modelo de cuantificación, página 96](#).

Validar o desarrollar uno o varios modelos

- Seleccione uno o varios modelos. Para una selección múltiple, use la tecla **[SHIFT]** o **[CTRL]**.
- Haga clic en **[Editar]**. Cada modelo seleccionado se abre en una nueva pestaña.
- Guardar nuevos modelos: En las pestañas correspondientes, haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.
- Continuar con [capítulo 5.3, Desarrollo manual del modelo, página 73](#).

5.3 Desarrollo manual del modelo

5.3.1 Seleccionar muestras y dividir conjunto de datos

La pestaña del modelo de cuantificación muestra una barra de navegación horizontal en la parte superior, el **navegador**. El navegador guía al usuario a través de los siguientes pasos del desarrollo del modelo.



-  Un modelo puede desarrollarse sin un conjunto de validación, por ejemplo, si solo hay un número limitado de muestras disponibles en una fase inicial.

Ajustar la selección de muestras (opcional)

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación** está el modelo abierto y en primer plano (véase "Crear modelo de cuantificación", capítulo 5.1, página 68).
- El navegador está en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

1 Agregar o borrar espectros

La selección de muestras y los parámetros de referencia se pueden ajustar en la sección **Listado de espectros**:

- Para seleccionar las muestras cuyos espectros deben añadirse al listado de espectros, haga clic en .
- Para eliminar espectros del listado de espectros, seleccione espectros y haga clic en .

Nota: Las muestras asociadas, incluidos los espectros, permanecen en la base de datos.

- Haga clic en  para cambiar lo siguiente:
 - el nombre o la unidad del parámetro de referencia
 - la selección de denominaciones para el parámetro de referencia
 - el número de decimales para el parámetro de referencia y para todos los resultados

-  Si es necesario editar el valor de referencia de un espectro, abra el respectivo listado de muestras o la consulta de búsqueda y haga doble clic en el valor de referencia.

2 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.



 Para cambiar al desarrollo automático del modelo

Los ajustes adicionales en esta pestaña no afectan al **OMD (OMNIS Model Developer)**. Por lo tanto, aquí se puede cambiar al desarrollo automático del modelo.

- Si es necesario, verifique la distribución uniforme de los valores de referencia en el histograma (*véase "Histograma", página 79*).
- El OMD busca de forma independiente los valores discrepantes y los excluye del desarrollo del modelo.

Si aún así deben excluirse los valores discrepantes de forma manual, deberán eliminarse del listado de muestras. La asignación al conjunto de valores discrepantes no afecta al OMD.

- Haga clic en **[Iniciar OMD]**.

La duración de la ejecución de OMD depende del número de espectros.

Nivel de significancia para la detección de valores discrepantes

Requisito

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está abierto y en primer plano el modelo de cuantificación.

1 Editar las propiedades del modelo

- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
- En **Propiedades ► Parámetros ► Límites atípicos**, establecer el **Nivel de significancia** para la detección de valores discrepantes. Cuanto mayor es el nivel de significancia, se reconocerán más valores discrepantes espectrales. Los valores típicos son 5% o 1%. El nivel de significancia se usa de la siguiente manera.
 - La detección automática opcional de valores discrepantes durante el desarrollo del modelo tiene en cuenta el nivel de significancia en el momento de la detección de valores discrepantes (ver más abajo).
 - La detección de valores discrepantes al predecir propiedades de muestras tiene en cuenta el nivel de significancia en el momento de la publicación del modelo.

2 Guardar modelo

- Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

La detección de valores discrepantes permite la creación automática de un conjunto de valores discrepantes. Los espectros restantes pueden dividirse automáticamente en un conjunto de calibración y un conjunto de validación.

Si se recopilaban muestras separadas para calibración y validación, las muestras pueden asignarse manualmente.

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.
- El navegador está en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

- En la sección **Listado de espectros**, haga clic en .

Se abre el diálogo **División de conjunto de datos**.

- Para asignar automáticamente espectros al conjunto de valores discrepantes, active el interruptor **Calcular valor discrepante**. La detección automática de valores discrepantes reconoce los siguientes tipos de valores discrepantes.
 - Valores discrepantes espectrales debido a desviaciones en los espectros
 - Valores de referencia discrepante debido a anomalías en los valores de referencia

Si es necesario, ajuste el **Nivel de significancia**. Cuanto mayor es el nivel de significancia, más valores discrepantes espectrales se reconocerán. Los valores típicos son 5% o 1%.

La división automática garantiza que el conjunto de calibración y el conjunto de validación sean representativos de la población estadística e independientes entre sí.

- Para asignar automáticamente espectros al conjunto de validación, active el interruptor **Calcular registro de validación**.
 - En el campo **Porcentaje**, defina el porcentaje de los espectros que se deben usar para el conjunto de validación, por ejemplo entre 20% y 30%.



Muestra datos faltantes o no válidos. Consultar el texto alternativo.

7 División manual (opcional)

La división manual se puede realizar con o sin previa división automática.

- Haga clic con el botón derecho en un espectro para abrir el menú contextual. Asigne el espectro al conjunto de datos correspondiente:
 - **Registro de calibración**
 - **Registro de validación**
 - **Conjunto de valores discrepantes**



Asignar varios espectros a la vez:

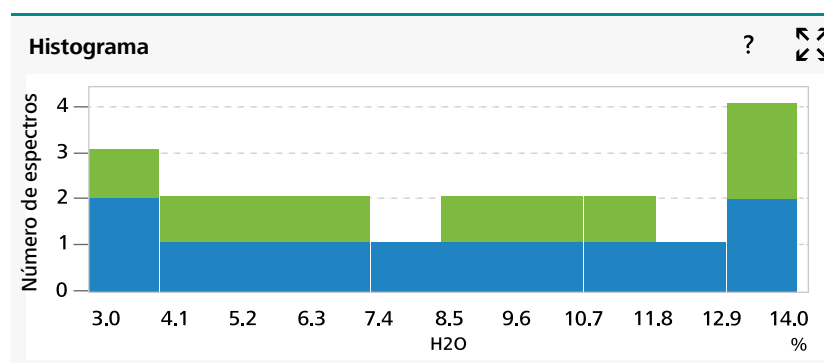
- De forma opcional, coloque los espectros en un orden adecuado. Ordene la lista resumen haciendo clic en una cabecera de columna.
- Seleccione varios espectros mediante las teclas **[CTRL]** o **[SHIFT]**.
- Haga clic con el botón derecho en la selección para abrir el menú contextual. Asignar los espectros seleccionados.

8 Guardar modelo

- Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Histograma

El histograma ilustra hasta qué punto se distribuyen uniformemente los valores de referencia. Para ello, el histograma divide el rango de valores de referencia en 10 clases del mismo tamaño.



En el ejemplo mostrado, se dividen 12 valores de referencia enteros del 3% al 14% en las 10 clases. La primera clase incluye los valores de

referencia del 3% y 4%, y la última clase incluye los valores de referencia del 13% y 14%. Las otras 8 clases solo contienen 1 valor de referencia cada una.

Este ejemplo confirma que los espectros en el conjunto de calibración (azul) y el conjunto de validación (verde) están distribuidos de forma uniforme a lo largo de la gama de valores de referencia.

Valor discrepante

Los espectros asignados al conjunto de valores discrepantes se muestran en rojo. Estos pueden ser valores discrepantes espectrales o valores de referencia discrepante.

Los valores discrepantes deberían examinarse. Si un valor discrepante resulta ser un espectro válido con un valor de referencia válido, se puede asignar al conjunto de calibración o al conjunto de validación.

5.3.2 Calcular el modelo de cuantificación

Se puede calcular un primer modelo sin parametrización. Esto proporciona un punto de comparación para las figuras de mérito. Se puede evaluar mejor la influencia de una parametrización posterior.

 Si el ruido u otros artefactos hacen que algunas longitudes de onda no se puedan usar, estas longitudes de onda se pueden excluir directamente (*véase "Parametrizar modelo de cuantificación", capítulo 5.3.4, página 88*).

Calcular modelo

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está abierto y en primer plano el modelo de cuantificación.

1 Iniciar cálculo

- Haciendo clic en **[Calcular]**, calcule el modelo.

 Si el botón **[Calcular]** está inactivo, esto puede deberse a las siguientes causas:

- El modelo ya se ha calculado y no se han hecho cambios desde entonces.
- Uno de los pasos del proceso contiene una entrada incorrecta. En el navegador se muestra el paso del proceso de la sección correspondiente en **rojo**. El campo con la entrada incorrecta está marcado en rojo.

5.3.3 Validar modelo de cuantificación

Definir método de validación cruzada

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está abierto y en primer plano el modelo de cuantificación.

1 Editar las propiedades del modelo

- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
- En **Propiedades** ► **Parámetros** ► **Validación cruzada**, definir el método de validación cruzada:
 - Para listados de espectros con más de 70 espectros, se recomienda el proceso **Leave-One-Out (dejando una afuera)**.
 - En el caso de listados de espectros con un mayor número de espectros, se recomienda el proceso **K-fold**. Cuanto mayor sea **Cantidad de bloques**, más tiempo llevará el cálculo del modelo. Un valor típico para k es 5. El **Algoritmo de distribución** determina cómo se dividen los espectros del registro de calibración en bloques individuales. El algoritmo de distribución **Random** elige bloques al azar. El algoritmo de distribución **Fixed Blocks (DUPLEX)** elige los bloques de forma reproducible.

2 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas [CTRL]+[S].

Validar modelo de cuantificación

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está abierto y en primer plano el modelo de cuantificación.
- El modelo de cuantificación está calculado (véase "Calcular el modelo de cuantificación", capítulo 5.3.2, página 80).

1 Cambiar al paso del proceso Validación

- En el navegador, haga clic en **Validar modelo de cuantificación** para cambiar al paso del proceso Validación.

Los datos del modelo de cuantificación calculado se muestran en las secciones **Valores estadísticos**, **Diagrama de correlación** y **Gráfico de influencia**.

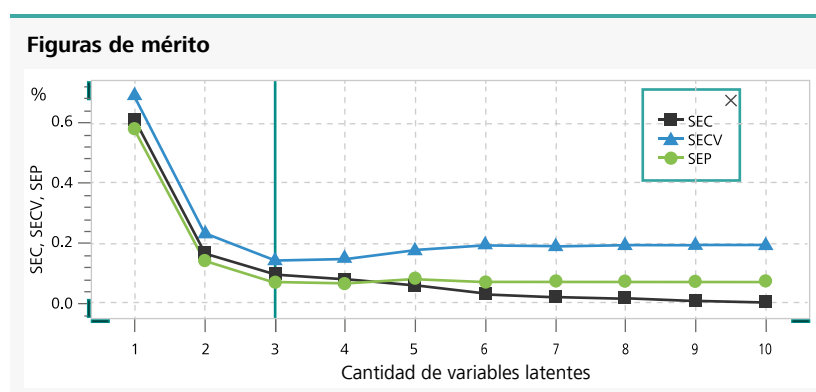
Al hacer clic en , también se pueden mostrar los diagramas **Gráfico de contribución** y **Gráfico de distribución**.

2 Revisión de figuras de mérito

En la sección **Valores estadísticos** se muestra un diagrama con las siguientes figuras de mérito:

- **SEC:** Error estándar de la calibración.
- **SECV:** Error estándar de la validación cruzada.
- **SEP** Error estándar de la predicción. Al analizar muestras desconocidas, este número es el mejor valor estimado para el error de predicción. El SEP solo se muestra si hay un conjunto de validación disponible.

Las figuras de mérito (eje 'y') se muestran para diferentes números de variables latentes (eje 'x').



La línea vertical verde muestra el número de variables latentes actualmente seleccionadas. En la figura de arriba, se seleccionaron 3 variables latentes. Con 3 variables latentes, el SECV tiene un primer valor mínimo de 0,14%.

 Cantidad de números de decimales en la tabla

Para modificar el número de decimales de las figuras de mérito, haga clic en el paso del proceso **Seleccionar muestras** en la

sección **Listado de espectros** en 

3 Establecer la cantidad de variables latentes

El modelo de cuantificación definitivo utiliza un número fijo de variables latentes. Para el rendimiento del modelo de cuantificación es fundamental encontrar el número óptimo de variables latentes.

Más variables latentes explican más variaciones espectrales en el conjunto de calibración. En cambio, demasiadas variables latentes pueden explicar variaciones demasiado específicas o ruido, lo que da lugar a predicciones menos precisas para muestras desconocidas. Esto se denomina **sobreajuste**.

Un menor número de variables latentes puede dar como resultado un modelo de cuantificación más fiable. Sin embargo, si el número de variables latentes es demasiado bajo, no se registran las variaciones espectrales relevantes. Las predicciones son entonces menos precisas. Esto se denomina **subajuste**.

- Seleccione provisionalmente un número adecuado de variables latentes. Para ello, haga doble clic en la fila correspondiente en la tabla.

La cantidad seleccionada de variables latentes se indica en la tabla con ✓.

En caso de duda, elija la cantidad sugerida por OMNIS Software. Si el número de variables latentes seleccionado difiere del número sugerido por el sistema, el número sugerido se indica con →.

4 Verificar el diagrama de correlación

El **Diagrama de correlación** proporciona de un vistazo una evaluación del rendimiento del modelo de cuantificación. El diagrama representa la correlación entre los valores calculados (eje 'x') y los valores de referencia (eje 'y'). Cada punto representa una muestra.

El diagrama de correlación y la tabla que lo acompaña muestran los siguientes valores para cada muestra:

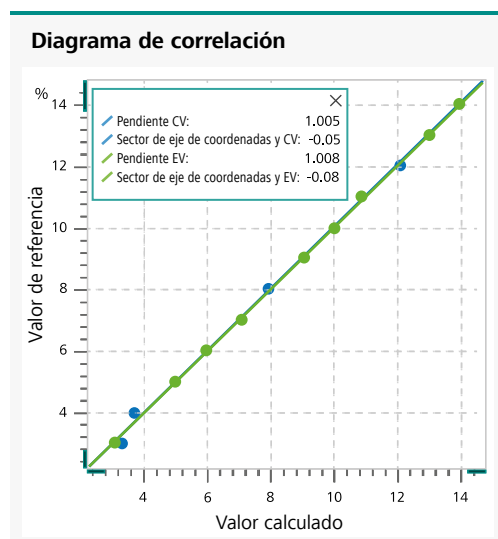
Valor de referencia	Valor para el parámetro de referencia
Valor calculado	Resultado del modelo de cuantificación
Residuos	Diferencia entre el valor calculado y el valor de referencia

Cantidad de números de decimales en la tabla

Para modificar el número de decimales de los valores anteriores, haga clic en el paso del proceso **Seleccionar muestras** en la sección **Listado de espectros** en .

Los puntos azules dan lugar a una recta de regresión azul. Los puntos verdes dan lugar a una recta de regresión verde.

La recta de regresión muestra la relación sistemática entre los valores calculados y los valores de referencia. Lo ideal sería una recta de regresión con una pendiente de 1 y un sector de ejes de coordenadas de 0. En el caso óptimo, todas las muestras se sitúan directamente sobre la línea. En este caso, el valor calculado corresponde al valor de referencia de cada muestra.



El diagrama de correlación muestra diferentes tipos de errores:

- **Los errores sistemáticos** pueden considerarse desviaciones de las líneas de regresión de la línea ideal (pendiente = 1, sector de eje de coordenadas 'y' = 0).
- **Errores aleatorios:** Cuanto más dispersos estén los puntos alrededor de la recta de regresión, mayores serán los errores aleatorios.

En la figura, varios puntos están ocultos detrás de otros puntos. La recta de regresión azul está oculta detrás de la recta de regresión verde.

- En la sección **Valores estadísticos** seleccione otro número de variables latentes. Observe los cambios que se producen en el diagrama de correlación.

Manejo de diagrama

La visualización del diagrama se puede personalizar y se pueden seleccionar puntos individuales o múltiples (*véase "Manejo de diagramas", capítulo 11.3, página 178*).

5 Revisar el gráfico de influencia

El **Gráfico de influencia** describe las propiedades distintivas de los espectros y ayuda a identificar valores discrepantes espectrales.

Un gráfico de influencia puede mostrarse para el método de cálculo PLS o PCA. Seleccionar un método de cálculo del listado:

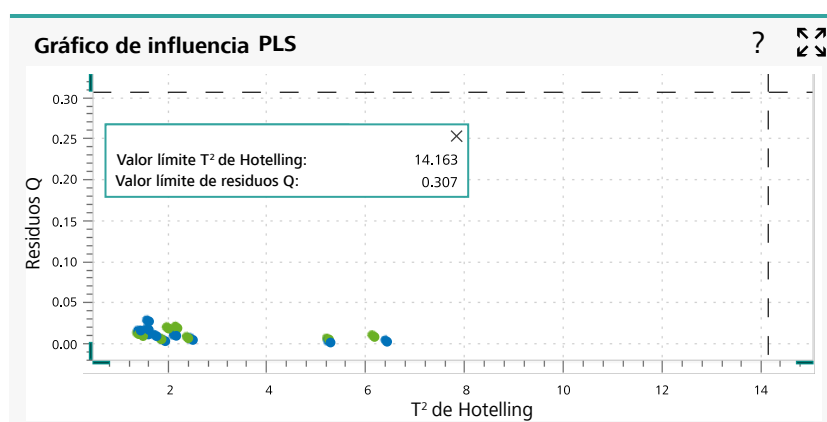
- **PLS** (Regresión de mínimos cuadrados parciales)
PLS usa la información relevante de los espectros y los valores de referencia. PLS es la base del modelo de cuantificación.
- **PCA** (Análisis de componentes principales)
PCA extrae la información relevante de los espectros.

i Ambos gráficos de influencia, PLS y PCA, tienen en cuenta los pretratamientos de datos definidos y las gamas de longitudes de onda (véase "*Parametrizar modelo de cuantificación*", capítulo 5.3.4, página 88).

Los valores de referencia influyen en el gráfico de influencia de PLS, pero no en el gráfico de influencia de PCA. La única excepción es que cada punto puede ser marcado como un posible valor discrepante debido a un valor de referencia extremo.

El número de variables latentes seleccionadas afecta al gráfico de influencia de PLS, pero no al gráfico de influencia de PCA. Para PCA, se selecciona la cantidad de componentes principales, de modo que la varianza explicada sea al menos del 95%.

Ejemplo: Gráfico de influencia de PLS de los espectros de EtOH basado en 3 variables latentes



i Manejo de diagrama

La visualización del diagrama se puede personalizar y se pueden seleccionar puntos individuales o múltiples (véase "*Manejo de diagramas*", capítulo 11.3, página 178).

Cada punto representa un espectro. Los valores de T^2 de Hotelling altos y de residuos Q bajos indican posibles valores discrepantes.

Los espectros con valores altos para el T^2 de Hotelling indican una composición extrema de las muestras en cuestión. Estas muestras

tienen una gran influencia en el modelo. Si el valor de referencia de dicha muestra es incorrecto, la predicción de muestras similares puede provocar resultados incorrectos.

Los espectros con residuos Q altos tienen características que no se han modelado correctamente. Por ejemplo, porque en las muestras en cuestión hay componentes químicos inusuales.

 Las líneas discontinuas muestran los valores críticos (valores límite) para el nivel de significancia establecido.

La figura anterior no muestra posibles valores discrepantes. Todos los puntos están dentro de las líneas punteadas.

6 Revisar el gráfico de distribución

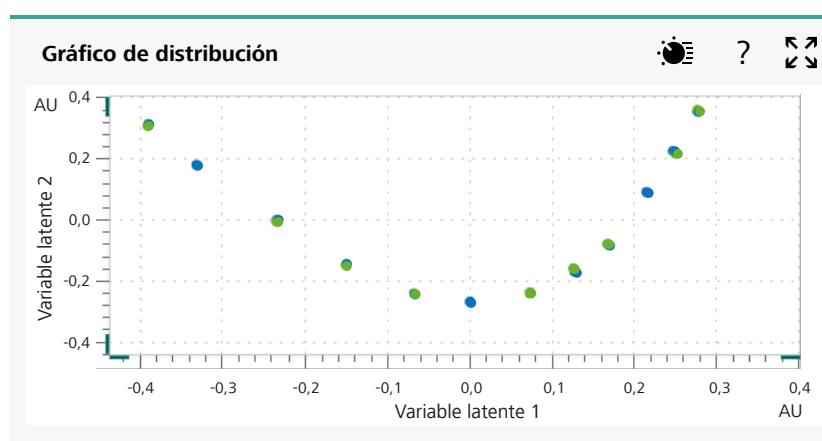
 Mientras que el valor T^2 de Hotelling de un espectro resume las distribuciones de todas las variables latentes en un solo valor, el gráfico de distribución permite un análisis más detallado de las distribuciones.

El gráfico de distribución para los modelos de cuantificación se basa en el método de cálculo **PLS** y tiene en cuenta los pretratamientos de datos definidos y las gamas de longitudes de onda (*véase "Parametrizar modelo de cuantificación", capítulo 5.3.4, página 88*).

Cada punto representa un espectro. Las distribuciones para las 2 primeras variables latentes se pueden leer en el eje x y el eje y.

En  **Propiedades** se puede mostrar también cualquier otro par de variables latentes. Las distribuciones se normalizan; cada variable latente recibe el mismo peso.

Ejemplo: Gráfico de distribución de los espectros de EtOH para las variables latentes 1 y 2:



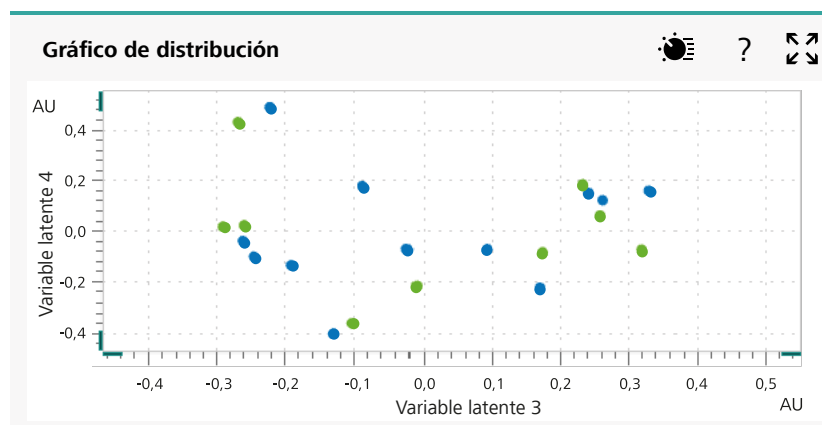
Manejo de diagrama

La visualización del diagrama se puede personalizar y se pueden seleccionar puntos individuales o múltiples (*véase "Manejo de diagramas", capítulo 11.3, página 178*).

Los puntos están alineados como en un collar de perlas. Esto se debe a los espacios regulares entre los valores de referencia y a la ausencia de variaciones adicionales en las muestras. En este caso, cabe plantearse la pregunta de si se han tenido en cuenta todas las variaciones en las muestras que pueden esperarse en el futuro.

El efecto ya no es visible para las variables latentes superiores, que explican una proporción cada vez menor de la varianza, como muestra la siguiente figura.

Ejemplo: Gráfico de distribución de los espectros de EtOH para las variables latentes 3 y 4:



El conjunto de validación (puntos verdes) ocupa aproximadamente el mismo espacio que el conjunto de calibración (puntos azules) dentro de las variables latentes mostradas en ambas figuras. No se observan valores discrepantes potenciales.

7 Incluir o excluir valores discrepantes

- Examine cuidadosamente los posibles valores discrepantes.

- Si se van a asignar muestras a otro conjunto de datos, asigne todas en un solo paso:
 - Seleccione todos los puntos que se van a asignar de nuevo en el gráfico de influencia, en el diagrama de correlación o en el gráfico de distribución (*véase "Seleccionar varios puntos o curvas", página 179*).
 - Abra el menú contextual haciendo clic con el botón derecho en uno de los puntos seleccionados. Seleccione el conjunto de datos apropiado.
 - Calcule de nuevo el modelo de cuantificación haciendo clic en **[Calcular]**.
- Después de volver a asignar los espectros, valide nuevamente el modelo de cuantificación.

8 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Duplicar modelo de cuantificación

El modelo de cuantificación se puede duplicar para volver al estado actual, si fuese necesario:

1. Guardar el modelo de cuantificación.
2. Seleccione el modelo de cuantificación en **Calibración y evaluación ► Modelos de cuantificación**.
3. Duplique el modelo de cuantificación seleccionado haciendo clic en .
4. Abra el modelo de cuantificación duplicado y continúe con la optimización.

5.3.4 Parametrizar modelo de cuantificación

El paso del proceso **Parametrizar modelo de cuantificación** permite optimizar los espectros de forma automática o manual. Se corrigen los artefactos y las faltas de linealidad. Si se realiza correctamente, la parametrización mejorará la exactitud y robustez del modelo.

La parametrización se emplea en:

- todos los espectros en el conjunto de calibración
- todos los espectros en el conjunto de validación y en el conjunto de valores discrepantes

 En la predicción en el área de trabajo **Muestras**, el espectro de una muestra se registra y se evalúa con un modelo. También en este espectro se aplica la parametrización que está definida en el modelo.

Hay dos opciones de parametrización disponibles:

- ## Parametrización automática

Optimizar la parametrización

Requisitos:

- ## 1 Paso del proceso 'Parametrizar modelo de cuantificación'

- ## 2 Definir automáticamente el pretratamiento de datos y la gama de longitudes de onda

- ### 3 Parametrización manual (opcional)

- ## Parametrización manual

Representar los espectros

Requisito:

- ## 1 Paso del proceso 'Seleccionar muestras'

- 89

2 Examinar espectros

- Manejo de tablas (véase "Manejo de tablas", capítulo 11.2, página 176)
- Manejo de diagramas (véase "Manejo de diagramas", capítulo 11.3, página 178)

3 Paso del proceso 'Parametrizar modelo de cuantificación'

- Haga clic en el paso del proceso **Parametrizar modelo de cuantificación** en el navegador.
- En la sección **Pretratamiento de datos** con ▼ desplegar el listado de selección y seleccionar la sección **Gráfico de contribución**.

En este paso del proceso, se pueden analizar los espectros simultáneamente en forma de curva y en **Gráfico de contribución**. El Gráfico de contribución muestra cómo las variables de longitud de onda originales contribuyen a la construcción de cada variable latente.

Otros pasos

- Selección de longitud de onda manual (*véase "Selección de longitud de onda manual", capítulo 5.3.4.1, página 90*)
- Definir manualmente el pretratamiento de datos (*véase "Definir manualmente el pretratamiento de datos", capítulo 5.3.4.2, página 94*)

5.3.4.1 Selección de longitud de onda manual

Una selección de longitud de onda puede mejorar el modelo de cuantificación. Ejemplo: Si hay ruido visible en valores de absorbancia altos, pueden excluirse esas gamas de longitudes de onda.

El modelo usa las gamas de longitudes de onda definidas. Si no se definen gamas de longitudes de onda, el modelo usa todas las longitudes de onda.

Mostrar espectros y contribuciones

Requisitos:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.

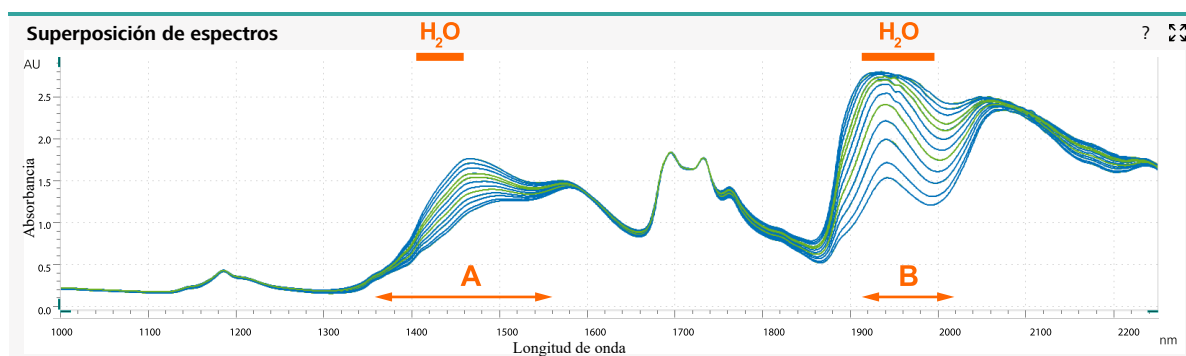
1 Paso del proceso 'Parametrizar modelo de cuantificación'

- Haga clic en el paso del proceso **Parametrizar modelo de cuantificación** en el navegador.

- Mostrar simultáneamente las secciones **Superposición de espectros**, **Gráfico de contribución** y **Gama de longitudes de onda**.

Superposición de espectros

Las bandas de absorción genéricas de H_2O pueden consultarse en un diagrama y usarse como orientación aproximada. Las bandas de absorción de H_2O se extienden desde 1400 hasta 1450 nm y desde 1900 hasta 1980 nm.

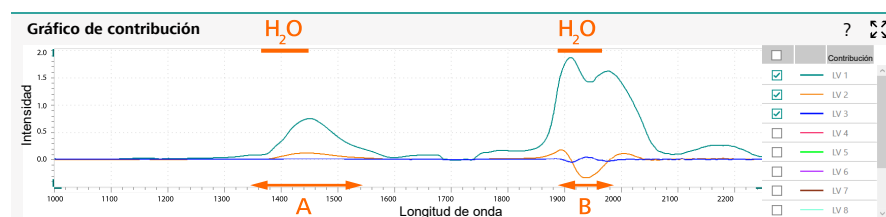


Los espectros de EtOH muestran variaciones claramente visibles correspondientes al diferente contenido de H_2O de las muestras (áreas **A** y **B**).

Sin embargo, hay una diferencia entre las 2 áreas. A diferencia del área **B** (1900...2000nm), el área **A** (1350...1550 nm) muestra un espaciado vertical uniforme entre las líneas, que corresponde al espaciado uniforme de los valores de referencia.

Gráfico de contribución

Las contribuciones muestran cómo las variables de longitudes de onda originales contribuyen a la construcción de cada variable latente.



Las áreas previamente identificadas **A** (1350...1550 nm) y **B** (1900...2000 nm) muestran las contribuciones más altas, especialmente para la variable latente 1 (verde). Por lo tanto, estas áreas contribuyen más a la formación de la variable latente 1.

i Es irrelevante si las contribuciones son positivas o negativas.

Debido a los artefactos en el área **B**, parece sensato probar un modelo basado en el área **A** (1350 a 1550 nm).

3 Agregar más gamas de longitudes de onda

Se pueden agregar más gamas de longitudes de onda haciendo clic en .

Los valores de las gamas de longitudes de onda no deben solaparse

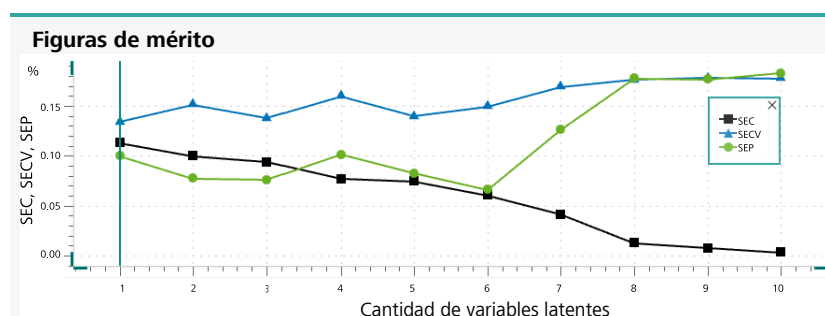
Una nueva gama de longitudes de onda se superpone inicialmente con las gamas de longitudes de onda existentes. Ajuste la gama de longitudes de onda para eliminar las superposiciones.

4 Calcular modelo

- Haciendo clic en **[Calcular]**, calcule el modelo.

5 Validar modelo

- En el navegador, haga clic en **Validar modelo de cuantificación** para cambiar al paso del proceso Validación.
- Valide el modelo. Compare las figuras de mérito con el modelo previamente creado.



Para agua en EtOH y una gama de longitudes de onda de 1350 a 1550 nm, parece ser suficiente una sola variable latente en lugar de 3 variables latentes al usar la gama completa de longitudes de onda. El SECV es similar en ambos casos: 0,13% y 0,14%.

Tener una variable en lugar de 3 variables es una mejora significativa. Se ha eliminado con éxito la varianza irrelevante. El nuevo modelo con menos variables es probablemente más robusto.

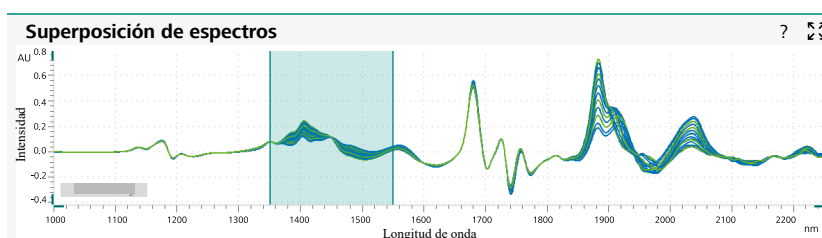
6 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

- Seleccione el tipo de pretratamiento de datos en el campo **Pre-tratamiento de datos** y rellene los campos correspondientes. Ejemplo de Gap-Segment con una derivada de primer orden que elimina desplazamientos de la línea de base constantes (que no dependen de la longitud de onda).

Los espectros pretratados se muestran inmediatamente en la sección **Superposición de espectros**.

Después del pretratamiento de datos, los espectros se ven de otro modo.



En el caso de los espectros de EtOH, se eliminan los desplazamientos de la línea de base constantes.

2 Agregar más pasos de pretratamiento de datos

Se pueden agregar más pasos de pretratamiento de datos haciendo clic en

Al usar múltiples pasos de pretratamiento de datos, la secuencia puede ser crucial. Gap-Segment o Savitzky-Golay se aplican preferiblemente antes de SNV, y SNV antes de Detrend.

Haciendo clic en y , las líneas pueden moverse hacia arriba o hacia abajo, determinando así el orden.

3 Calcular modelo

- Haciendo clic en **[Calcular]** calcule el modelo.

4 Validar modelo

- En el navegador del modelo, haga clic en **Validar modelo de cuantificación** para cambiar al paso del proceso Validación.

- La cantidad deseada de variables latentes está seleccionada.

1 Abrir diálogo

- Haga clic en  para abrir el diálogo **Publicar modelo de cuantificación**.

 Si el modelo ya ha sido publicado y usado en métodos, estos métodos se pueden actualizar automáticamente activando la casilla de verificación **Actualizar métodos**.

Nota: No se actualizan automáticamente:

- Métodos abiertos
- Métodos firmados y publicados
- Si el filtrado de los permisos de datos está activado, tampoco se actualizan de forma automática los métodos que no tengan los permisos de datos del usuario conectado actualmente

2 Nearest Neighbor Distance

Si se activa la casilla de verificación **Calcular Nearest Neighbor Distance**, el proceso **Nearest Neighbor Distance (NND)** está disponible. La distancia con respecto al espectro de muestras de calibración más cercano es calculada por el modelo, en el espacio de las variables latentes, para cada espectro de muestras de calibración. La mayor de todas las distancias determinadas se almacena en la variable de la instrucción **PREDICT LimitNearestNeighborDistance** (valor límite de NND) (véase "Predicción", capítulo 2.3.2, página 21).

De la misma manera, en la predicción, el modelo de cuantificación calcula la distancia entre el espectro registrado y el espectro de muestras de calibración más cercano. Esta distancia se almacena en la variable de la instrucción **PREDICT NearestNeighborDistance** (NND) (véase "Predicción", capítulo 2.3.2, página 21).

Ambas variables pueden compararse entre sí y supervisarse mediante la monitorización de resultado (véase "Creación de procedimiento operativo", página 160).

3 Publicar

- Hacer clic en **[Publicar]** para publicar el modelo.

La última versión publicada se muestra en **Calibración y evaluación ► Modelos de cuantificación**:

Nombre	Versión	Tipo	Última versión publicada
My model	4	full	My model, V4

Ahora la instrucción **PREDICT** puede acceder a la versión publicada del modelo.

Vista general de modelos

Si se seleccionan uno o varios modelos de cuantificación, la vista general de modelos en el lado derecho muestra los datos más importantes en un solo vistazo (5 modelos diferentes, como máximo).

Si la última versión guardada no coincide con la última versión publicada, la vista general de modelos muestra ambas versiones.

5.5 Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y

La **Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y** permite corregir errores sistemáticos al aplicar un modelo de cuantificación. El requisito es un modelo de cuantificación robusto y fiable. Los errores deberían ser estadísticamente significativos, pero no demasiado grandes.

 Los errores sistemáticos pueden verse en el diagrama de correlación como desviaciones de las líneas de regresión de la línea ideal (pendiente = 1, sector de eje de coordenadas 'y' = 0).

Los errores aleatorios también pueden verse en el diagrama de correlación. Cuanto más dispersos estén los puntos alrededor de la recta de regresión, mayores serán los errores aleatorios. Los errores aleatorios no se pueden corregir con la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.

Una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y' se usa en los siguientes casos:

- Si se revalida un modelo de cuantificación o si se lo supervisa con muestras de control y resulta que las figuras de mérito ya no cumplen los requisitos debido, por ejemplo, a cambios ambientales.
- Si se ha creado un modelo de cuantificación con espectros XDS/DS importados (*véase "Cambio de un analizador XDS/DS (cuantificación)", capítulo 11.6, página 189*).

Hay 2 correcciones disponibles:

- **Desviación:** corrige la desviación – la desviación media entre los valores de referencia y los valores predichos de las muestras. Después de la corrección, la desviación es igual a 0.
- **Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y':** Corrige la pendiente y el sector de eje de coordenadas 'y' de la línea de regresión en el diagrama de correlación. Después de la corrección, la pendiente es igual a 1 (corresponde a una línea recta de 45°) y el sector de eje de coordenadas 'y' es igual a 0. AVISO: Después de una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y', la desviación es igual a 0.

i Se recomienda aplicar con precaución la corrección de desviación y sobre todo la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.

No aplique ninguna corrección, si los errores no son estadísticamente significativos. Si los errores son estadísticamente significativos, se deberán investigar a fondo esos errores. En la medida de lo posible, corrija la causa de los errores. Si los errores no se pueden corregir por una razón válida, puede aplicarse una corrección de desviación o una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.

Aviso sobre el número de muestras:

- Se necesitan al menos 20 muestras para un valor estimado fiable de la desviación.
- Se necesitan al menos 30 muestras para un valor estimado fiable de la pendiente.

Preparar las muestras

La corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y' suele realizarse con muestras que se utilizan para la revalidación del modelo de cuantificación o con muestras de control que sirven para la monitorización del rendimiento del modelo de cuantificación.

- Compile las muestras en **Listados de muestras** o **Consultas de búsqueda**.
- Asegúrese de que cada muestra contiene lo siguiente:
 - Un valor de referencia para el parámetro que debe corregirse.
 - Un espectro.
 - Un valor calculado para cada espectro.

9 Marcar valor discrepante

- Para marcar un espectro como valor discrepante, en la sección **Muestras** haga clic con el botón derecho del ratón en el espectro y excluya ese espectro del cálculo con un clic en **Conjunto de valores discrepantes**.

El símbolo  marca el espectro como valor discrepante. El espectro se elimina de la sección **Diagrama de correlación** y de todos los cálculos.

- Para quitar la marca de valor discrepante, vuelva a hacer clic con el botón derecho del ratón en el espectro y haga clic en **Conjunto de valores de corrección**.

El espectro se vuelve a marcar con . El espectro vuelve a aparecer en la sección **Diagrama de correlación** y se incluye de nuevo en todos los cálculos.

 Con las teclas **[CTRL]** o **[SHIFT]** se pueden seleccionar y modificar varios espectros a la vez (*véase "Manejo de tablas", capítulo 11.2, página 176*).

10 Diagrama de correlación

Para cada espectro, la sección **Diagrama de correlación** presenta 2 puntos con el mismo valor de referencia en el eje 'y', pero con diferentes valores en el eje 'x':

- En el eje 'x', el punto azul muestra el **valor calculado** predicho por el modelo de cuantificación.
 - Sitúe el cursor sobre un punto para visualizar su residuo (esto es, la diferencia entre el valor calculado y el valor de referencia).
- En el eje 'x', el punto verde muestra el **valor corregido**. El valor corregido depende del tipo de corrección seleccionado (desviación o pendiente/sector de eje de coordenadas 'y').
 - Sitúe el cursor sobre un punto para visualizar su residuo (esto es, la diferencia entre el valor corregido y el valor de referencia).

6 Modelo de identificación

i Puede encontrar una ilustración de las secuencias en OMNIS Software en el apéndice (véase "*Desarrollo de un modelo*", página 196).

Según su uso, un modelo de identificación proporciona:

- Una **identificación** de una muestra desconocida (por ejemplo, fructosa). El resultado es un nombre de producto.
- Una **verificación** de la clase de producto de una muestra (por ejemplo, fructosa). El resultado es sí/no - verificación correcta o fallida.

6.1 Crear modelo de identificación

Crear modelo de identificación

Requisito:

- Se crea un conjunto de datos con espectros y nombres de productos (véase "*Adquirir espectros*", capítulo 4.2, página 63).

1 Crear modelo de identificación y asignarle un nombre

- En **Calibración y evaluación** ► **Modelos de identificación**, haga clic en . Aparece un nuevo modelo de identificación en una nueva pestaña.
- Introduzca un nombre adecuado en el campo de entrada **Nombre del modelo de identificación**.

2 Seleccionar muestras

- Mostrar todos los listados de muestras haciendo clic en **Listados de muestras**.
- Seleccione todos los listados de muestras preparados.

Tablas y diagramas

El manejo de tablas y diagramas se describe en el apéndice:

- Manejo de tablas (véase "*Manejo de tablas*", capítulo 11.2, página 176)
- Manejo de diagramas (véase "*Manejo de diagramas*", capítulo 11.3, página 178)

Paso del proceso 'Seleccionar muestras'

La sección **Lista de productos** muestra los productos de las muestras seleccionadas:

	Producto	Número de espectros	Grupo de productos
			
			
			

Cada producto se identifica por un color de producto. Pulsando sobre un color de producto, se puede seleccionar un color diferente.

En cuanto se selecciona al menos un producto en la lista de productos, en la sección **Listado de espectros** se muestran todos los espectros de los productos seleccionados:

		Nombre de muestra	Nombre de submuestra	Fuente	Producto
					
					
					
					

Un campo de entrada indica la clase de producto de la muestra (marcado en naranja en la imagen).

Los siguientes iconos simbolizan la asignación a los conjuntos de datos:



El espectro se asigna al conjunto de calibración.



Asignar el espectro al conjunto de validación.



Asignar el espectro al conjunto de valores discrepantes.



Muestra datos faltantes o no válidos. Consultar el texto alternativo.

Los espectros mostrados en la sección **Listado de espectros** también aparecen en la sección **Superposición de espectros** y se presentan de este modo:

- Los espectros del conjunto de calibración son **azules**, los espectros del conjunto de validación, **verdes**, y los espectros del conjunto de valores discrepantes, **rojos**.
- Si el interruptor **Mostrar colores del producto** está activado, los espectros se colorean según los colores de productos.

El paso del proceso **Seleccionar muestras** permite lo siguiente:

- **Ajustar la selección de muestras**

Agregar espectros adicionales o borrar espectros.

- **Dividir el conjunto de datos**

División automática o manual del conjunto de datos:

- **Conjunto de calibración:** El modelo se calcula usando los espectros y las clases de producto del conjunto de calibración.
- **Conjunto de validación:** Los espectros y las clases de producto del conjunto de validación solo se usan para validar el modelo.
- **Conjunto de valores discrepantes:** El conjunto de valores discrepantes no afecta al modelo ni a su validación. Los valores discrepantes solo se representan en algunas tablas a modo informativo.

 Un modelo se puede desarrollar sin un conjunto de validación, por ejemplo, si solo hay un número limitado de muestras disponibles en una fase inicial o si la validación se realiza exclusivamente con un conjunto de datos externo.

Ajustar la selección de muestras

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación** está el modelo abierto y en primer plano (*véase "Crear modelo de identificación", capítulo 6.1, página 107*).
- El navegador está en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

1 Agregar o borrar espectros

La selección de muestras y la clase de producto se pueden ajustar en cualquier momento en la sección **Listado de espectros**:

- Para seleccionar las muestras cuyos espectros deben añadirse al listado de espectros, haga clic en .

- Para eliminar espectros del listado de espectros, seleccione espectros y haga clic en .

Nota: Las muestras asociadas, incluidos los espectros, permanecen en la base de datos.

2 Modificar clase de producto

- Seleccionar todos los espectros a los cuales se desea asignar otro producto.
- Hacer clic con el botón derecho del ratón en los espectros seleccionados y seleccionar **Asignar producto** en el menú contextual. Aparece una ventana para introducir datos:
 - Haga clic en el campo **Nuevo producto**. Seleccione un producto existente o introduzca un nuevo nombre de producto.
 - Haciendo clic en **[Asignar]**, asigne el nuevo producto a los espectros seleccionados.

3 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Dividir automáticamente el conjunto de datos

La detección de valores discrepantes permite la creación automática de un conjunto de valores discrepantes. Los espectros restantes pueden dividirse automáticamente en un conjunto de calibración y un conjunto de validación.

Si se recopilaron muestras separadas para calibración y validación, las muestras pueden asignarse manualmente.

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.
- El navegador está en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

1 Acceder a la división de conjunto de datos

- En la sección **Listado de espectros**, haga clic en .

Se abre el diálogo **División de conjunto de datos**.



2 Determinar el conjunto de valores discrepantes

- Para asignar automáticamente espectros al conjunto de valores discrepantes, active el interruptor **Calcular valor discrepante**. La detección automática de valores discrepantes reconoce los valores discrepantes espectrales debido a desviaciones en los espectros.
 - Si es necesario, ajuste el **Nivel de significancia**. Cuanto mayor es el nivel de significancia, más valores discrepantes espectrales se reconocerán. Los valores típicos son 5% o 1%.

3 Calcular conjunto de validación

La división automática garantiza que el conjunto de calibración y el conjunto de validación sean representativos de la población estadística e independientes entre sí.

- Para asignar automáticamente espectros al conjunto de validación, active el interruptor **Calcular registro de validación**.
 - En el campo **Porcentaje**, defina el porcentaje de los espectros para el conjunto de validación, p. ej., entre 20% y 30%.

4 Establecer opciones

Establecer las opciones para la división de conjunto de datos:

- **Aplicar parametrización:** aplicar el pretratamiento de datos y la selección de longitud de onda a los espectros (*véase "Parametrizar modelo de identificación", capítulo 6.5, página 119*).
- **Nota:** Los cambios que se realicen posteriormente en la parametrización no afectan a la asignación de conjuntos de datos. A menos que el conjunto de datos se vuelva a dividir.
- **Conservar valores discrepantes:** Se mantienen los valores discrepantes ya existentes y no se tienen en cuenta en la división. Esta opción puede provocar un aumento del tamaño del conjunto de valores discrepantes, aunque no cambie el **Nivel de significancia**.
- **Conservar registro de validación:** mantener los espectros ya existentes en el conjunto de validación y no tenerlos en cuenta en la división. Esta opción provoca un aumento del tamaño del conjunto de validación, aunque no cambie el **Porcentaje**.

5 Inicio de la división automática

- Haga clic en **[Distribuir]**.

El conjunto de datos se divide según los ajustes realizados.

6 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas [CTRL]+[S].

Gráfico de influencia y gráfico de distribución

Después de la división de conjunto de datos automática, estarán disponibles los diagramas del gráfico de influencia y gráfico de distribución:

- En el paso del proceso **Seleccionar muestras**, en una de las secciones, hacer clic en  y seleccionar el diagrama **Gráfico de influencia** o **Gráfico de distribución**.

El gráfico de influencia y el gráfico de distribución se basan en el método de cálculo **PCA** (análisis de componentes principales). Se selecciona la cantidad de componentes principales, de modo que la varianza explicada sea al menos del 95%.

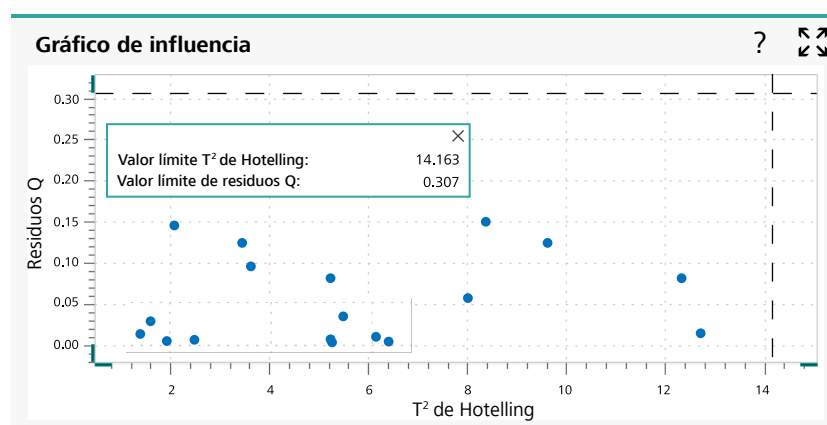
Los espectros se usan como punto de partida para PCA de la siguiente forma:

- Espectros sin pretratamiento de datos y selección de longitud de onda, si la opción **Aplicar parametrización** se desactivó durante la división de conjunto de datos automática.
- Espectros con pretratamiento de datos y selección de longitud de onda, si la opción **Aplicar parametrización** se activó durante la división de conjunto de datos automática.

Nota cuando la opción está activada: Si se cambia la parametrización, el gráfico de influencia y el gráfico de distribución solo están disponibles después de una nueva división de conjunto de datos automática.

Gráfico de influencia

El **Gráfico de influencia** describe las propiedades distintivas de los espectros y ayuda a identificar los valores discrepantes.



División manual del conjunto de datos (opcional)

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.
- El navegador está en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

i Si antes de la división manual se realiza una división de conjunto de datos automática, estarán disponibles el **Gráfico de influencia** y **Gráfico de distribución**.

1 Reasignar espectros

- Seleccionar los espectros en una de las secciones.

Ejemplo de selección en el gráfico de influencia:

- Abrir la sección **Gráfico de influencia**.
- Seleccionar uno o varios puntos en el gráfico de influencia (*véase "Seleccionar varios puntos o curvas", página 179*).
- Haciendo clic con el botón derecho en uno de los puntos seleccionados, abrir el menú contextual. Asignar los espectros a un conjunto de datos:



Registro de calibración



Registro de validación



Conjunto de valores discrepantes

2 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas [CTRL]+[S].

6.3 Calcular modelo de identificación

Se puede calcular un primer modelo sin parametrización. Esto proporciona un punto de comparación para los resultados de la validación. Se puede evaluar mejor la influencia de una parametrización posterior.

i Si el ruido u otros artefactos hacen que algunas longitudes de onda no se puedan usar, estas longitudes de onda se pueden excluir directamente (*véase "Parametrizar modelo de identificación", capítulo 6.5, página 119*).

Calcular modelo

Requisito:

6.5.1 Selección de longitud de onda

Una selección de longitud de onda puede mejorar el modelo de identificación. Ejemplo: Si hay ruido visible en valores de absorbancia altos, pueden excluirse esas gamas de longitudes de onda.

El modelo usa las gamas de longitudes de onda definidas. Si no se definen gamas de longitudes de onda, el modelo usa todas las longitudes de onda.

Definir gamas de longitudes de onda

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.

1 Selección de los espectros a representar

Seleccione los productos cuyos espectros deben mostrarse:

- En el paso del proceso **Seleccionar muestras**, en la sección **Lista de productos**, seleccione los productos.
- o
- En el paso del proceso **Parametrizar modelo de identificación**, seleccione los productos en la lista de productos.

2 Agregar gama de longitudes de onda

- En el navegador, cambie al paso del proceso **Parametrizar modelo de identificación**.
- En la sección **Gama de longitudes de onda** agregue una gama de longitudes de onda haciendo clic en .

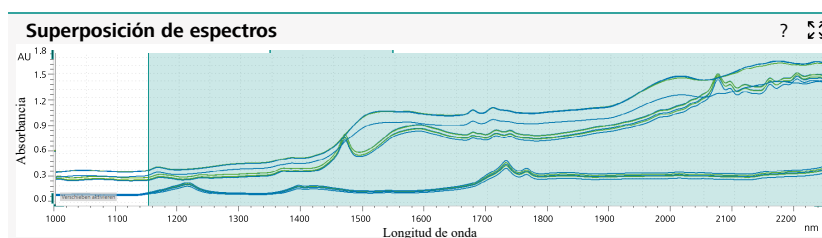
Gama de longitudes de onda			?	
#	Longitud de onda inicial	Longitud de onda final		
1	1000.0 nm	2250.0 nm		

Se agrega una gama de longitudes de onda. La sección cubre inicialmente todas las longitudes de onda.

3 Establecer gama de longitudes de onda

Establecer la gama de longitudes de onda de una de las siguientes maneras:

- Para establecer la gama de longitudes de onda introduciendo números, ingrese **Longitud de onda inicial** y **Longitud de onda final** en los campos de entrada correspondientes.
- Para establecer la gama de longitudes de onda en el diagrama, proceda de la siguiente manera:
 - En la sección **Superposición de espectros**, haga clic en **[Activar el desplazamiento]**.
 - Mueva el cursor hacia el borde izquierdo de la sección resaltada hasta que el cursor se muestre como $\leftrightarrow$.
 - Mantenga pulsado el botón izquierdo del ratón y mueva el borde izquierdo a la posición correspondiente.
 - Haga lo mismo en el lado derecho de la sección resaltada.
 - Para mover una gama de longitudes de onda, mueva el cursor sobre la gama hasta que el cursor se muestre como $\leftrightarrow$. Con el botón izquierdo del ratón pulsado, mueva la sección hacia la izquierda o hacia la derecha.
 - Haga clic en **[Desactivar el desplazamiento]**.



En la imagen se define una gama de longitudes de onda de 1150 a 2250 nm. Esta sección es utilizada por el modelo.

4 Agregar más gamas de longitudes de onda

Se pueden agregar más gamas de longitudes de onda haciendo clic en .

Los valores de las gamas de longitudes de onda no deben solaparse

Una nueva gama de longitudes de onda se superpone inicialmente con las gamas de longitudes de onda existentes. Ajuste la gama de longitudes de onda para eliminar las superposiciones.

5 Guardar modelo

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

- i** Si la recién creada selección de longitud de onda debe considerarse en la división del conjunto de datos o la detección de valores discrepantes, el conjunto de datos puede dividirse nuevamente.

6.5.2 Pretratamiento de datos

Un pretratamiento de datos adecuado puede mejorar el modelo de identificación. Ejemplo: Los desplazamientos de la línea base generalmente no contienen información relevante para la mayoría de las aplicaciones y pueden eliminarse.

Definir pretratamiento de datos

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.

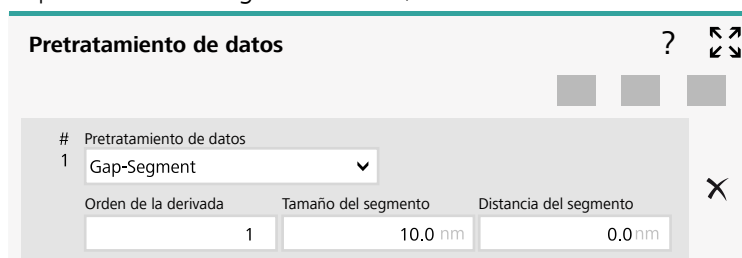
1 Selección de los espectros a representar

Seleccione los productos cuyos espectros deben mostrarse:

- En el paso del proceso **Seleccionar muestras**, en la sección **Lista de productos**, seleccione los productos.
- o
- En el paso del proceso **Parametrizar modelo de identificación**, seleccione los productos en la lista de productos.

2 Agregar un paso de pretratamiento de datos

- En el navegador, cambie al paso del proceso **Parametrizar modelo de identificación**.
- En la sección **Pretratamiento de datos**, agregar un paso de pretratamiento de datos haciendo clic en .
- Seleccione el tipo de pretratamiento de datos en el campo **Pretratamiento de datos** y rellene los campos correspondientes. Ejemplo de Gap-Segment con una derivada de primer orden que elimina desplazamientos de la línea de base constantes (que no dependen de la longitud de onda):



Pretratamiento de datos		
# Pretratamiento de datos		
1	Gap-Segment	
Orden de la derivada	Tamaño del segmento	Distancia del segmento
1	10.0 nm	0.0 nm

6.6 Publicar modelo de identificación

El modelo debe estar publicado para poder utilizarlo para las determinaciones. Esto permite seguir desarrollando el modelo sin afectar a la versión publicada y a las determinaciones realizadas con ella.

Publicar modelo de identificación

Requisito:

- El modelo está calculado y guardado.
- El modelo está abierto.

1 Abrir diálogo

- Haga clic en  para abrir el diálogo **Publicar modelo de identificación**.

 Si el modelo ya ha sido publicado y usado en métodos, estos métodos se pueden actualizar automáticamente activando la casilla de verificación **Actualizar métodos**.

Nota: No se actualizan automáticamente:

- Métodos abiertos
- Métodos firmados y publicados
- Si el filtrado de los permisos de datos está activado, tampoco se actualizan de forma automática los métodos que no tengan los permisos de datos del usuario conectado actualmente

2 Publicar

- Hacer clic en **[Publicar]** para publicar el modelo.

La última versión publicada se muestra en **Calibración y evaluación ► Modelos de identificación**:

Nombre	Versión	Tipo	Última versión publicada
My model	4	full	My model, V4

Ahora la instrucción **PREDICT** puede acceder a la versión publicada del modelo.

Crear modelo de cualificación

Nombre del modelo de cualificación

Listados de muestras

Consultas de búsqueda

Importación de XDS/DS

Conjunto de calibración

Nombre	Guardado

 Las muestras también pueden seleccionarse mediante una consulta de búsqueda. Además, se pueden importar las muestras de aparatos XDS y DS (*véase "Cambio de un analizador XDS/DS (cuantificación)", capítulo 11.6, página 189*).

 La selección de muestras se puede ajustar más adelante.

3 Seleccionar muestras de validación (opcional)

- Haga clic en **Agregar conjuntos de validación**.
- Asignar los listados de muestras preparados para los conjuntos de validación mediante las casillas de verificación correspondientes al conjunto de validación positivo o al conjunto de validación negativo.

Conjunto de validación

Nombre	Guardado	Positivo	Negativo
		☐	☒
		☐	☒
		☐	☐

4 Crear modelo de cualificación

- Haga clic en **[Crear]**.
- Guardar el modelo: Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

	El espectro se ha asignado manualmente al conjunto de datos.
	El espectro se ha asignado automáticamente al conjunto de datos.
	El espectro se ha registrado en OMNIS Software.
	El espectro se importa desde un archivo externo.

En la sección **Superposición de espectros**, los espectros en el conjunto de calibración se representan en **azul**, los espectros en el conjunto de validación positivo, en **verde**, y los espectros en el conjunto de validación negativo, en **rojo**.

El paso del proceso **Seleccionar muestras** permite lo siguiente:

- **Ajustar la selección de muestras**
Agregar espectros adicionales o borrar espectros.
- **Dividir el conjunto de datos**
División automática o manual del conjunto de datos:
 - **Conjunto de calibración:** el modelo se calcula usando los espectros del conjunto de calibración.
 - **Conjunto de validación:** los espectros de los conjuntos de validación sirven únicamente para validar el modelo.

 Un modelo se puede desarrollar sin un conjunto de validación, por ejemplo, si solo hay un número limitado de muestras disponibles en una fase inicial o si la validación se realiza exclusivamente con un conjunto de datos externo.

Ajustar la selección de muestras

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación** está el modelo abierto y en primer plano (*véase "Crear modelo de cualificación", capítulo 7.1, página 126*).
- El navegador está en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

1 Agregar o borrar espectros

- Agregar espectros: en la sección **Registro de calibración** o en la sección **Registro de validación**, hacer clic en .
 - Borrar espectros: seleccionar los espectros y hacer clic en .
- Nota: Las muestras asociadas, incluidos los espectros, permanecen en la base de datos.

i El cálculo de espectros negativos debería emplearse siempre con precaución. Un nivel de significancia elevado puede mejorar la fiabilidad de los resultados positivos. Sin embargo, también pueden pasarse por alto más muestras positivas y clasificarse erróneamente como negativas.

Los espectros en el conjunto de validación negativo determinado deben examinarse para comprobar si realmente se trata de valores discrepantes. Para ello, el gráfico de influencia y el gráfico de distribución resultan útiles.

3 Determinar el conjunto de validación positivo (opcional)

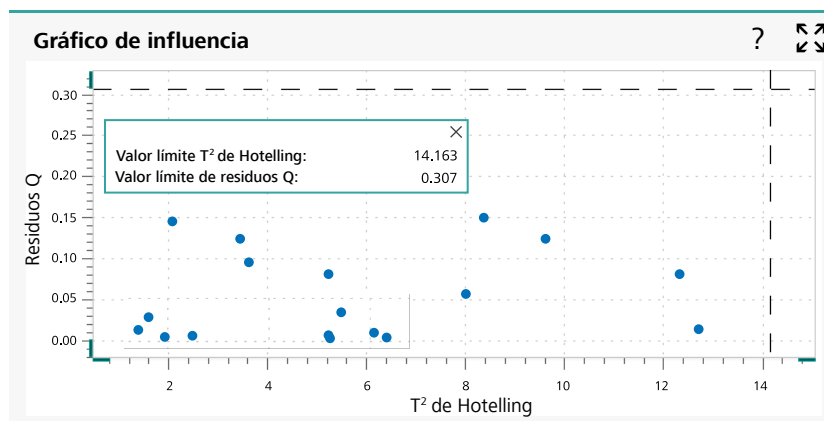
La división automática garantiza que el conjunto de calibración y el conjunto de validación positivo sean representativos de la población estadística e independientes entre sí.

- Para asignar automáticamente espectros al conjunto de validación positivo, active el interruptor **Determinar espectros positivos**.
 - En el campo **Porcentaje**, defina el porcentaje de los espectros para el conjunto de validación positivo p. ej., entre 20% y 30%.

4 Establecer opciones

Establecer las opciones para la división de conjunto de datos:

- **Aplicar parametrización**: aplicar el pretratamiento de datos y la selección de longitud de onda a los espectros (*véase "Parametrizar modelo de cualificación", capítulo 7.5, página 137*).
Nota: Los cambios que se realicen posteriormente en la parametrización no afectan a la asignación de conjuntos de datos. A menos que el conjunto de datos se vuelva a dividir.
- **Conservar espectros negativos**: mantener los espectros ya existentes en el conjunto de validación negativo y no tenerlos en cuenta en la división. Esta opción puede provocar un aumento del tamaño del conjunto de validación negativo, aunque no cambie el **Nivel de significancia**.
- **Conservar espectros positivos**: mantener los espectros ya existentes en el conjunto de validación positivo y no tenerlos en cuenta en la división. Esta opción provoca un aumento del tamaño del conjunto de validación positivo, aunque no cambie el **Porcentaje**.



i Manejo de diagrama

La visualización del diagrama se puede personalizar y se pueden seleccionar puntos individuales o múltiples (*véase "Manejo de diagramas", capítulo 11.3, página 178*).

Cada punto representa un espectro. Los valores de T^2 de Hotelling altos y de residuos Q bajos indican posibles valores discrepantes.

Los espectros con valores altos para el T^2 de Hotelling indican una composición extrema de las muestras en cuestión.

Los espectros con residuos Q altos indican componentes químicos inusuales en las muestras en cuestión.

i Las líneas discontinuas muestran los valores críticos (valores límite) para el nivel de significancia establecido. Si en la división de conjunto de datos automática no se han identificado espectros negativos, el nivel de significancia es de un 5%.

La figura anterior no muestra posibles espectros negativos. Todos los puntos se encuentran dentro de las líneas discontinuas.

Gráfico de distribución

i Mientras que el valor T^2 de Hotelling de un espectro resume las distribuciones de todos los componentes principales en un solo valor, el gráfico de distribución permite un análisis más detallado de las distribuciones.

Cada punto en el gráfico de distribución representa un espectro. Las distribuciones para los dos primeros componentes principales se pueden leer en los ejes 'x' e 'y'. Las distribuciones se normalizan; cada componente principal recibe el mismo peso.

En  **Propiedades** también se puede mostrar cualquier otro par de componentes principales.

7.3 Calcular modelo de cualificación

Se puede calcular un primer modelo sin parametrización. Esto proporciona un punto de comparación para los resultados de la validación. Se puede evaluar mejor la influencia de una parametrización posterior.

i Si el ruido u otros artefactos hacen que algunas longitudes de onda no se puedan usar, estas longitudes de onda se pueden excluir directamente (véase *"Parametrizar modelo de cualificación", capítulo 7.5, página 137*).

Calcular modelo

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, el modelo de cualificación está abierto y en primer plano.

1 Iniciar cálculo

- Haciendo clic en **[Calcular]**, calcule el modelo.

i Si el botón **[Calcular]** está inactivo, esto puede deberse a las siguientes causas:

- El modelo ya se ha calculado y no se han hecho cambios desde entonces.
- Uno de los pasos del proceso contiene una entrada incorrecta. En el navegador se muestra el paso del proceso de la sección correspondiente en **rojo**. El campo con la entrada incorrecta se marca en rojo.

7.4 Validar modelo de cualificación

El paso del proceso **Validar modelo de cualificación** permite una validación con las siguientes muestras:

- **Muestras en el conjunto de calibración**
Estas muestras se usaron para crear el modelo. La clasificación correcta mediante el modelo es, por lo tanto, más fácil que con otras muestras.
- **Muestras en el conjunto de validación positivo y en el negativo (si están disponibles)**
Estas muestras no dependen del modelo. Sus resultados de validación son un mejor punto de referencia para la cualificación de muestras desconocidas.

Si se efectúa una nueva división del conjunto de datos, el modelo de cualificación puede ajustarse a los requisitos mediante la identificación de los espectros negativos:

- Un nivel de significancia más elevado puede aumentar la fiabilidad de los resultados positivos. Es decir: se obtendrán menos resultados erróneamente positivos, pero se pasarán por alto más muestras positivas.
- Un nivel de significancia más bajo (o la omisión de la identificación de espectros negativos) puede permitir que se pasen por alto menos muestras positivas. Es decir: se obtendrán menos resultados erróneamente negativos, pero se clasificarán erróneamente como positivas más muestras negativas.

7.5 Parametrizar modelo de cualificación

El paso del proceso **Parametrizar modelo de cualificación** permite la optimización de los espectros. Se corrigen los artefactos y las faltas de linealidad. Si se realiza correctamente, la parametrización mejorará la exactitud y robustez del modelo.

La parametrización se emplea en:

- todos los espectros en el conjunto de calibración
- todos los espectros en ambos conjuntos de validación

i En la predicción en el área de trabajo **Muestras**, el espectro de una muestra se registra y se evalúa con un modelo. También en este espectro se aplica la parametrización que está definida en el modelo.

Hay dos opciones de parametrización disponibles:

- Defina las gamas de longitudes de onda a usar.
- Aplique pretratamientos de datos para llevar los espectros a una forma más adecuada.

La exploración visual de los espectros comienza en el paso del proceso **Seleccionar muestras**.

Representar los espectros

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, está el modelo abierto y en primer plano.

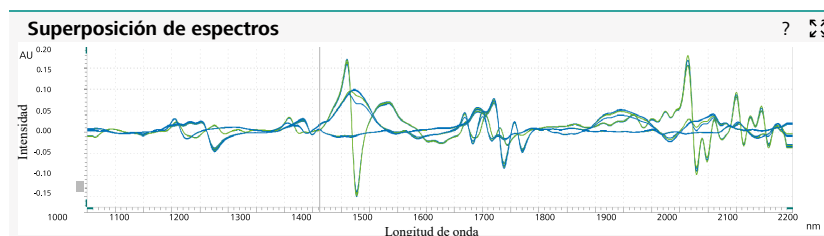
1 Paso del proceso 'Seleccionar muestras'

- Haga clic en el paso del proceso **Seleccionar muestras** en el navegador.

- Selecione el tipo de pretratamiento de datos en el campo **Pre-tratamiento de datos** y rellene los campos correspondientes. Ejemplo de Gap-Segment con una derivada de primer orden que elimina desplazamientos de la línea de base constantes (que no dependen de la longitud de onda):

Los espectros pretratados de los productos seleccionados en el paso 1 se muestran inmediatamente en la sección **Superposición de espectros**.

Después del pretratamiento de datos, los espectros se ven de otro modo, por ejemplo:



2 Agregar más pasos de pretratamiento de datos

Se pueden agregar más pasos de pretratamiento de datos haciendo clic en

Al usar múltiples pasos de pretratamiento de datos, la secuencia puede ser crucial. Gap-Segment o Savitzky-Golay se aplican preferiblemente antes de SNV, y SNV antes de Detrend.

Haciendo clic en y las líneas pueden moverse hacia arriba o hacia abajo, determinando así el orden.

3 Guardar modelo

- Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Si los recién creados pretratamientos de datos deben considerarse en la división del conjunto de datos, el conjunto de datos puede dividirse nuevamente.

8 Jerarquía de modelos

Una jerarquía de modelos permite lo siguiente:

- **Estructurar jerárquicamente los modelos de identificación**
Si a un modelo de identificación le cuesta diferenciar entre productos similares, para esa diferenciación se pueden utilizar submodelos optimizados con ese fin.
Ejemplo: un modelo de identificación con 4 productos puede tener problemas para distinguir entre productos similares como la fructosa y la glucosa. Si la fructosa y la glucosa se reúnen en un grupo de productos llamado "Azúcar", el modelo principal puede diferenciar entre azúcar y los otros 2 productos. Si una muestra se identifica como "azúcar", se puede utilizar un submodelo para distinguir entre fructosa y glucosa.
En caso necesario se pueden añadir otros niveles jerárquicos.
- **Vincular modelos de cuantificación a los productos**
Las muestras identificadas pueden analizarse cuantitativamente. Se vincula un modelo de cuantificación al producto correspondiente para cada parámetro de interés. Opcionalmente, se puede aplicar una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.
- **Estructure los modelos de cuantificación jerárquicamente**
En muchos casos, una estructura jerárquica de modelos de cuantificación puede tener una capacidad predictiva mayor que la capacidad de un modelo de cuantificación individual. En cada caso, los modelos de cuantificación subordinados se optimizan para una parte del rango de valores de referencia del modelo superior.
Ejemplo: si el modelo de cuantificación superior proporciona un resultado < 5 , se utiliza un modelo de cuantificación subordinado para los valores < 5 y se determina el resultado definitivo. Análogo para los resultados ≥ 5 .
- **Jerarquía de modelos a partir de modelos de cuantificación**
En una jerarquía de modelos se pueden incluir uno o varios modelos de cuantificación uno debajo del otro, con o sin modelos de cuantificación subordinados. En ese caso, es suficiente utilizar una sola instrucción **PREDICT** en el método para predecir todos los parámetros de interés.

Según su uso, una jerarquía de modelos proporciona:

- Una **identificación** de una muestra desconocida (por ejemplo, fructosa). El resultado es un nombre de producto.
 - De forma opcional, una o varias **cuantificaciones** en función del producto determinado.

2 Submodelos

Para cada grupo de productos del modelo principal, desarrolle un modelo de identificación (véase "*Modelo de identificación*", capítulo 6, página 107).

En el ejemplo anterior, se desarrolla un submodelo con todas las muestras asociadas a los productos **C1** y **C2**. Para ello, deben usarse las mismas muestras que en el modelo principal para el grupo de productos **C**.

 Haciendo clic con el botón derecho del ratón sobre **Lista de productos**, pueden crearse submodelos para los grupos de productos definidos.

3 Otros niveles jerárquicos

Si un submodelo contiene más de 2 productos, de ser necesario se pueden agrupar varios productos en un solo grupo de productos. Para este grupo de productos se desarrolla un modelo de identificación separado. De este modo, se generan niveles jerárquicos adicionales.

Desarrollar modelos de cuantificación

Si la jerarquía de modelos debe contener modelos de cuantificación, desarróllos de la siguiente manera.

1 Modelos de cuantificación para cada parámetro de interés

Desarrolle los correspondientes modelos de cuantificación para todos los parámetros de interés cuantitativos (véase "*Modelo de cuantificación*", capítulo 5, página 68).

2 Modelos de cuantificación subordinados

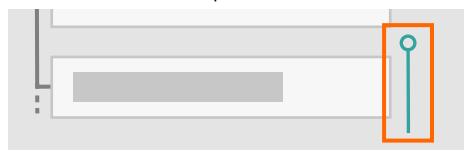
Si se requieren modelos de cuantificación subordinados para un modelo de cuantificación, desarrolle los modelos de cuantificación subordinados.

8.1.2 Insertar modelos en la jerarquía de modelos

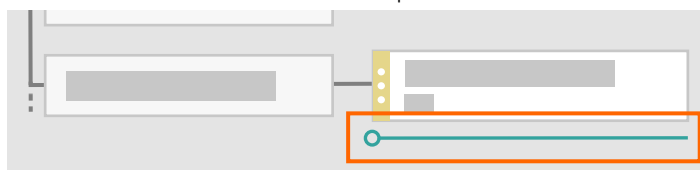
Requisito: se han creado (véase "*Desarrollar modelos*", capítulo 8.1.1, página 144) y publicado todos los modelos que deben utilizarse en la jerarquía de modelos.

Los siguientes pasos consisten en la creación de la jerarquía de modelos y la inserción de los modelos en la jerarquía de modelos:

- En **Librería ► Modelos de cuantificación**, aplique la técnica de arrastrar y soltar para insertar el modelo de cuantificación junto al producto correspondiente. Una línea vertical de color verde muestra la posición de inserción:

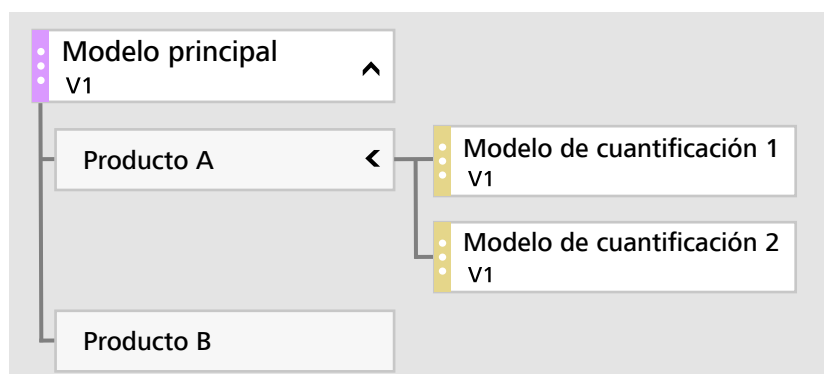


- En caso de que se deban predecir varios parámetros de interés cuantitativos para el mismo producto:
 - Inserte los otros modelos de cuantificación uno debajo del otro usando la técnica de arrastrar y soltar. Una línea horizontal de color verde muestra la posición de inserción:



- Si está previsto efectuar análisis cuantitativos para otros productos, vincule los modelos de cuantificación correspondientes de la misma manera.

Ejemplo: se vinculan 2 modelos de cuantificación a un producto.



i Los modelos de cuantificación pueden vincularse a productos o a grupos de productos.

2 Jerarquía de modelos sin modelos de identificación

Si la jerarquía de modelos debe contener exclusivamente modelos de cuantificación:

- El paso del proceso **Editar jerarquía de modelos** incluye el editor de jerarquías de modelos. Al principio, el editor de jerarquías de modelos está vacío.
- Hacer clic en  para abrir la ventana **Librería**.

8.2 Validar la jerarquía de modelos

Jerarquías de modelos con modelos de cuantificación

Al validar jerarquías de modelos no se evalúan los modelos de cuantificación. Sin embargo, para los modelos de cuantificación que tienen modelos de cuantificación subordinados se comprueba si se han cumplido los requisitos:

- Las condiciones deberán abarcar toda la gama de números racionales.
- Las condiciones no deberán superponerse.

Compruebe las condiciones

- Haga clic en **Validar internamente**.
- Si no aparece ningún mensaje de error, ello indica que se han cumplido los requisitos.
- En caso contrario, el mensaje de error informa dónde y por qué no se han cumplido los requisitos.

Validación externa e interna

Para las jerarquías de modelos que tienen modelos de identificación, el paso del proceso **Validar la jerarquía de modelos** ofrece 2 validaciones diferentes:

▪ Validación interna

La validación interna usa el conjunto de calibración y, si está disponible, el conjunto de validación del modelo principal.

▪ Validación externa

La validación externa usa un conjunto de datos externo independiente. Las muestras para el conjunto de datos externo son recogidas y medidas otro día y, en lo posible, por una persona distinta y con un aparato diferente.

Validar la jerarquía de modelos

Requisito:

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, se crea la jerarquía de modelos, abierta y en primer plano (véase "*Desarrollar una jerarquía de modelos*", capítulo 8.1, página 144).

- Compruebe los resultados de los espectros individuales:
 - En la sección **Vista general de la validación**, seleccione todos los productos cuyos espectros individuales desee visualizar.
 - La sección **Resultados de la validación** enumera los espectros de los productos seleccionados.
- El **Resultado de la jerarquía de modelos** muestra el resultado final de la jerarquía de modelos en cada caso. A continuación, se muestra la evaluación paso a paso para cada nivel jerárquico. El **resultado del nivel 1** muestra el resultado del modelo principal. Después, se presentan los resultados de los correspondientes submodelos para todos los demás niveles jerárquicos.

8.3 Publicar jerarquía de modelos

La jerarquía de modelos debe estar publicada para poder usarla en las determinaciones.

Publicar jerarquía de modelos

Requisito:

- La jerarquía de modelos está guardada.
- La validación es opcional. Metrohm recomienda realizar una validación.
- La jerarquía de modelos está abierta.

1 Abrir diálogo

- Haga clic en  para abrir el diálogo **Publicar jerarquía de modelos**.

 Si la jerarquía de modelos ya ha sido publicada y usada en métodos, estos métodos se pueden actualizar automáticamente activando la casilla de verificación **Actualizar métodos**.

Nota: No se actualizan automáticamente:

- Métodos abiertos
- Métodos firmados y publicados
- Si el filtrado de los permisos de datos está activado, tampoco se actualizan de forma automática los métodos que no tengan los permisos de datos del usuario conectado actualmente

2 Publicar

- Haga clic en **[Publicar]** para publicar la jerarquía de modelos.

9 Predicción

En la predicción se utiliza un modelo en el espectro de una muestra desconocida. Dependiendo del modelo, se puede predecir lo siguiente:

- Parámetros de interés (cuantificación)
- Clase de producto o resultado de la verificación (identificación)
- Resultado de cualificación (cualificación)

 Las muestras para la predicción se deben tratar y medir de la misma forma que las muestras usadas para crear el modelo.

 Puede encontrar una ilustración de las secuencias en OMNIS Software en el apéndice (*véase "Predicción", página 197*).

9.1 Preparar la predicción

Para preparar la predicción, cree un método, un procedimiento operativo, un perfil de muestra y un listado de muestras de la siguiente manera. El método contiene una instrucción **PREDICT** que establece una conexión con el modelo.

Crear método

1 Adoptar método y asignarle un nombre

Los espectros deben adquirirse con los mismos ajustes que los espectros para el desarrollo del modelo. Lo más fácil es adoptar el método utilizado para el desarrollo del modelo (*véase "Preparación de la adquisición de espectro", capítulo 4.1, página 51*).

- En **Procesos** ► **Métodos** seleccione el método usado para el desarrollo del modelo.
- Duplique el método seleccionado haciendo clic en .
- Abra el método duplicado haciendo doble clic en el nombre del método.
- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
- En **Propiedades** ► **General** introduzca un nombre adecuado en el campo **Nombre**.

2 Insertar instrucción PREDICT

PREDICT crea una predicción para el espectro adquirido.

- En **Propiedades ► Parámetros**, definir los parámetros de la instrucción:
 - **Referenciar espectro**
Abrir el listado **Nombre de la instrucción de medida**. Seleccione el nombre de la instrucción **MEAS SPEC** que adquiere el espectro a evaluar.
 - **Referenciar modelo**
Seleccionar la **Estructura** del modelo: **Modelo individual** o **Jerarquía de modelos**.
 - Si se ha seleccionado la estructura **Modelo individual**, seleccionar el **Tipo de modelo**: modelo de cuantificación, modelo de identificación o modelo de cualificación.
 - Seleccione el modelo publicado o la jerarquía de modelos publicada.
Cuantificación: Si es necesario, seleccionar una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'.
Verificación: Si el modelo de identificación o la jerarquía de modelos se debe usar para la verificación, activar la opción **Usar para la verificación**.

4 Varios parámetros de interés (cuantificación)

Si se debe predecir más de un parámetro de interés para cada muestra (véase "*Varios parámetros de interés (cuantificación)*", capítulo 9.1.1, página 165), proceda de la siguiente manera:

- Inserte una instrucción **PREDICT** para cada parámetro de interés.
Nota: Una jerarquía de modelos solo necesita una instrucción **PREDICT**, independientemente de la cantidad de modelos de cuantificación que contenga.
- Para cada instrucción **PREDICT**, defina los parámetros de la instrucción como se indica anteriormente. Todas las instrucciones **PREDICT** hacen referencia al mismo espectro, pero a un modelo de cuantificación diferente para cada parámetro de interés.

5 Guardar método

- Valide el método haciendo clic en .
- Guarde el método haciendo clic en  o pulsando las teclas **[CTRL]+[S]**.

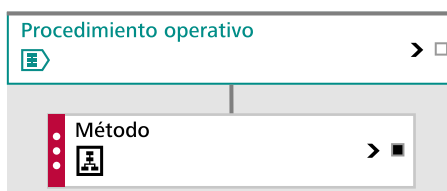
Creación de procedimiento operativo

1 Crear procedimiento operativo y asignarle un nombre

- En **Procesos** ► **Procedimientos operativos**, haga clic en +. En una nueva pestaña aparece un nuevo procedimiento operativo.
- Abra la ventana de **Propiedades** haciendo clic en .
- En **Propiedades** ► **General** introduzca un nombre adecuado en el campo **Nombre**.

2 Insertar método

- Abra la ventana de **Librería** haciendo clic en .
- Utilice la técnica de arrastrar y soltar para insertar el método creado de **Librería** ► **Métodos** en el procedimiento operativo.



3 Definir monitorización del resultado (opcional)

-  Para **cuantificación**, se puede usar la monitorización del resultado. Ejemplo: Monitorizar que el resultado del análisis esté dentro de ciertos límites, por ejemplo, dentro del rango de valores de referencia de las muestras de calibración.
Para **identificación**, por lo general, no se usa la monitorización del resultado. Sin embargo, si es necesario, también se puede monitorizar la variable de instrucción '**Identification-Probability.Final.Nombre de la instrucción**'.

- Hacer clic en .
- Hacer clic en  para abrir la ventana **Propiedades**.
- Seleccionar la subsección **Propiedades** ► **Monitorización del resultado**.
- Haga clic en **[Monitorización de resultados]**.

- Añada una nueva monitorización del resultado haciendo clic en :
 - Haga clic en **(x)** para abrir el diálogo para la variable.
 - Seleccione la variable de la instrucción **PREDICT** para el valor predicho. Para la cuantificación, por ejemplo: '**Predicted.Quantification.Result.Nombre de la instrucción**'
 - Si se ha seleccionado una variable de jerarquía de modelos con índice, ajuste el índice en el campo de entrada superior según sea necesario, por ejemplo: '**Predicted.Quantification{2}.Result.Nombre de la instrucción**'
(véase "Jerarquía de modelos – Índice para los modelos de cuantificación", capítulo 11.4.1, página 187)
 - Haga clic en **[Aplicar]** para aceptar la variable seleccionada.
 - En los campos **Límite de indicación inferior**, **Límite de indicación superior**, **Límite de intervención inferior** y **Límite de intervención superior**, establecer los límites del modelo de cuantificación. Los límites no deberían sobrepasar el rango de valores de referencia de las muestras de calibración.
Nota: Para los límites de indicación, seleccione un rango más pequeño que esté dentro de los límites de intervención.
 Identificación: al monitorizar la variable de la instrucción '**IdentificationProbability.Final.Nombre de la instrucción**', seleccione el valor 100 para ambos límites superiores.
 - De manera opcional, se pueden definir las acciones que se pondrán en marcha cuando se infrinjan esos límites. Para poder seleccionar una acción, se deberá definir al menos una **secuencia opcional Execute on limit** en el procedimiento operativo.
 - Cerrar la sección haciendo clic en →.

4 Mostrar los resultados directamente en el listado de muestras (opcional)

Si los resultados de la predicción se deben mostrar directamente en el listado de muestras, se puede definir un campo para los datos de submuestra (véase "PREDICT -Variables de instrucción", capítulo 11.4, página 181).

5 Guardar procedimiento operativo

- Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Creación de perfil de muestra

Un perfil de muestra simplifica la creación de varias muestras similares.

1 Adoptar perfil de muestra y asignarle un nombre

Adoptar el perfil de muestra utilizado para el desarrollo del modelo (véase "Preparación de la adquisición de espectro", capítulo 4.1, página 51).

- En **Muestras** ► **Perfiles de muestra** seleccione el perfil de muestra usado para el desarrollo del modelo.
- Duplique el perfil de muestra seleccionado haciendo clic en .
- Abra el perfil de muestra duplicado haciendo doble clic en el nombre de perfil de muestra.
- Introduzca un nombre adecuado en el campo **Nombre del perfil de muestra**.

2 Campo de entrada para el nombre de muestra

Si es necesario, ajuste el valor por defecto para el nombre de la muestra.

Datos de muestra

Nombre de campo breve

Nombre

Nombre de campo largo

Nombre

Tipo de campo de entrada

Texto

Utilizar como

Campo de entrada

Propiedades campo entrada

Valor por defecto

My Sample name

3 Parámetro de referencia / Parámetro del producto

El perfil de muestra contiene datos de muestra para el parámetro de referencia (cuantificación) o el parámetro del producto (identificación, verificación).

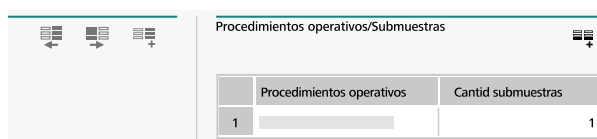
- **Cuantificación e identificación:** los datos de muestra no son absolutamente necesarios para la predicción. El campo de entrada se puede borrar o usar para muestras de control. Las muestras de control sirven para monitorizar el modelo y el aparato, y para confirmar que el sistema es adecuado para otros análisis.
- **Verificación:** En los datos de muestra se define el producto del cual se verifica la muestra:
 - **Tipo de campo de entrada:** **Listado de selección**
 - Para usarlo como producto, se debe crear el campo de entrada del producto: **Utilizar como: Producto**
 - Los elementos del listado con los nombres de productos ya deberían estar disponibles.
 - **Valor por defecto:** **Vacío**
 - Active las casillas de verificación **Permitir campo vacío** y **Forzar la entrada**.
- **Cualificación:** para la predicción no se requieren datos de muestra específicos.

4 Añadir más datos de muestra (opcional)

- Si es necesario, agregue un campo de entrada en la sección **Datos de muestra** haciendo clic en .

5 Definir el procedimiento operativo y el número de submuestras

- Seleccionar el procedimiento operativo creado en la sección **Procedimientos operativos/Submuestras**.
- Defina el número de submuestras: **1**



Procedimientos operativos/Submuestras	
Procedimientos operativos	Cantidad submuestras
1	1

6 Guardar perfil de muestra

- Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Creación de listado de muestras

1 Crear listado de muestras y asignarle un nombre

- En **Muestras ► Listados de muestras**, haga clic en +. Se abre una nueva pestaña.
- Introduzca un nombre adecuado en el campo **Nombre**.

Listado de muestras

2 Añadir muestras

- En el listado de selección a la izquierda del icono , seleccione el perfil de muestra creado.



Las muestras agregadas más adelante se crean según las especificaciones del perfil de muestra seleccionado.

- Añadir una nueva muestra al listado de muestras haciendo clic en +. Añada tantas muestras como sea necesario.

Cada línea del listado de muestras contiene una muestra marcada con el icono . A la derecha se encuentran los datos de muestra.

Después, sigue la submuestra marcada con  y los datos de submuestra.

Las muestras se crean según las especificaciones del perfil de muestra seleccionado. Cada muestra contiene 1 submuestra que usa el procedimiento operativo establecido.

	Nombre de muestra	Nombre del parámetro de referencia		N.º	Nombre de submuestra	Procedimiento operativo
	Muestra 1	%		1	Submuestra 1	
	Muestra 2	%		2	Submuestra 2	
	Muestra 3	%		3	Submuestra 3	

Figura 6 Listado de muestras (ejemplo para la cuantificación)

- Los nombres de muestras y de submuestras se editan según sea necesario.
- Verificación: Si ya se conoce el producto del cual se verifican las muestras:
 - En el campo de entrada del producto, seleccione el producto.

3 Guardar listado de muestras

- Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

9.1.1 Varios parámetros de interés (cuantificación)

Para predecir varios parámetros de interés cuantitativos para cada muestra, use las siguientes modificaciones durante el desarrollo del modelo y la preparación de la predicción.

Muestras para el desarrollo de modelos de cuantificación

- **Preparar adquisición de espectro**

En el perfil de muestra, añada un campo de entrada separado para cada parámetro de referencia.

El listado de muestras contiene un campo de entrada para cada parámetro de referencia.

Nombre de muestra	H2O	Methyl acetate	Methanol
	%	%	%
	%	%	%
	%	%	%
	%	%	%

- **Adquirir espectros**

Adquiera espectros del modo habitual.

Desarrollar modelos de cuantificación

- Cree un modelo de cuantificación separado para cada parámetro de interés.

Preparar la predicción

Versión 1: con jerarquía de modelos

Esta versión requiere la creación de una jerarquía de modelos que contenga todos los modelos de cuantificación. En caso necesario, la jerarquía

de modelos ofrece además la posibilidad de obtener una mayor capacidad predictiva mediante los modelos de cuantificación subordinados.

En el método se requiere únicamente una instrucción **PREDICT**:

- Cree una jerarquía de modelos (*véase "Insertar modelos en la jerarquía de modelos", capítulo 8.1.2, página 145*).
- Inserte modelos de cuantificación en la jerarquía de modelos (*véase "Insertar modelos en la jerarquía de modelos", capítulo 8.1.2, página 145*).
- En la instrucción PREDICT, haga referencia a la jerarquía de modelos en el método.

Versión 2: varias instrucciones PREDICT

Esta versión requiere varias instrucciones **PREDICT** en el método. Cada instrucción hace referencia a un modelo de cuantificación:

- Para cada parámetro de interés, inserte una instrucción **PREDICT** en el método:

Método

MEAS REF SPEC

MEAS SPEC

PREDICT 1

PREDICT 2

PREDICT 3

- Asigne el nombre de uno de los parámetros de interés a cada instrucción **PREDICT**.
- Haga referencia al modelo de cuantificación adecuado en cada instrucción **PREDICT**.
- Haga referencia al mismo espectro en cada instrucción **PREDICT**, es decir, la misma instrucción **MEAS SPEC**.

9.2 Iniciar predicción



ADVERTENCIA

Sustancias inflamables en superficie caliente

Peligro de incendio y quemaduras en caso de derrames de sustancias inflamables. Las muestras, los viales de muestras, los soportes de muestras y la presentación de muestras pueden alcanzar temperaturas de hasta 85 °C.

- Evite las fuentes de ignición.
- Utilice una protección de tierra.
- Utilice un extractor.
- Eliminar inmediatamente las materias sólidas y los líquidos derramados.



ATENCIÓN

Expansión del volumen de la muestra por calentamiento

Lesiones y daños para la salud debido al rebose o a la rotura del recipiente de muestras o por la expulsión del tapón.

- Llene el recipiente de muestras solamente hasta la altura mínima de 2 cm. El líquido se puede expandir en el volumen de aire restante.
Como alternativa, use un tapón con orificio capilar.
- Presione suavemente el tapón al insertarlo para no dañar el recipiente de muestras.



ATENCIÓN

Viales de muestra calientes

Quemaduras de la piel por contacto con superficies o líquidos calientes. Las muestras, los viales de muestras, los soportes de muestras y la presentación de muestras pueden alcanzar temperaturas de hasta 85 °C.

- Use equipo de protección personal y guantes resistentes al calor.
- Eliminar inmediatamente los líquidos y materias sólidas derramados.

Iniciar predicción

Requisitos:

- La predicción está preparada (*véase "Preparar la predicción", capítulo 9.1, página 157*).

- El espectrómetro está reservado (*véase "Reservar y liberar aparatos", capítulo 2.4, página 28*).
- El soporte de muestras correcto está colocado. El soporte de muestras se debe adaptar al recipiente de muestras que se va a utilizar.

1 Abrir listado de muestras

- Si el listado de muestras se ha cerrado, abra el listado de muestras en **Muestras ► Listados de muestras** haciendo doble clic.

Verificación

Para una verificación, en los datos de muestra debe estar definido el producto del cual se verifica la muestra. Para usarlo como producto, se debe crear el campo de entrada del producto. No se distingue entre mayúsculas y minúsculas.

La verificación siempre falla, si en el campo de entrada de producto se introduce el nombre de un grupo de productos que está vinculado a otro modelo de identificación. Lo mismo ocurre con un producto que esté vinculado a otro modelo de identificación.

2 Añadir más muestras (opcional)

Si se necesitan más muestras:

- En el listado de selección a la izquierda del icono , seleccione el perfil de muestra creado.



Las muestras recién añadidas se crean según las especificaciones del perfil de muestra seleccionado.

- Agregue nuevas muestras al listado de muestras haciendo clic en +.
- Los nombres de muestras y de submuestras se editan según sea necesario.
- Verificación: En el campo de entrada del producto, seleccione el producto para el que se va a verificar la muestra.
- Guarde el listado de muestras: Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

3 Ejecutar determinaciones

AVISO

Daño en el sensor de temperatura durante la regulación de temperatura en el recipiente de muestras

El sensor se puede dañar, si se retira el recipiente de muestras mientras el sensor está en contacto directo con él.

- No retire el recipiente de muestras hasta que la medida haya finalizado y el sensor de temperatura se haya alejado del recipiente de muestras.
 - Seleccionar la submuestra a analizar de alguna de las siguientes maneras:
 - Seleccione la submuestra haciendo clic en el icono .
 - Para fines de análisis, es suficiente seleccionar una única celda de la submuestra.
 - Preparar la muestra física correspondiente.
Colocar el recipiente de muestras en el soporte de muestras.
 - Iniciar la determinación haciendo clic en el . El número en el botón indica cuántas submuestras se ejecutarán.
 - Se inicia el procedimiento operativo asignado a la submuestra. Seguir cualquier indicación que figure en la sección **Curvas y datos ► Datos en directo**. Si se regula la temperatura del recipiente de muestras, retire el recipiente de muestras solo después de recibir esa indicación.
Después de completar correctamente el análisis, se muestra el estado de submuestra como .
 - Realice las determinaciones para todas las demás muestras de la misma manera.
-  La temperatura objetivo no debe estar más de 5,0 K por debajo de la temperatura ambiente.
-  Si los procesos son adecuados para determinaciones en serie, se pueden seleccionar varias submuestras de una vez. De forma alternativa,  inicia todas las submuestras ejecutables incluidas en el listado de muestras.
- Para muestras líquidas: la instrucción **VESSEL REMOVAL** permite efectuar determinaciones en serie.
 - Para muestras de materia sólida: se deberán prever acciones por parte del usuario para llevar a cabo determinaciones en serie (p. ej., mediante la instrucción **WAIT**).

Resultados de la predicción

Los resultados de la predicción de las muestras seleccionadas pueden encontrarse en la sección **Resultados ► Predicciones**(véase "*Resultados de la predicción*", capítulo 9.3, página 170).

9.3 Resultados de la predicción

Visualice los resultados de la predicción:

- Seleccione una o varias submuestras.
- Los resultados de la predicción de todas las submuestras seleccionadas y ya analizadas pueden encontrarse en **Muestras ► Listado de muestras ► Resultados ► Predicciones**.

Ejemplo para cuantificación, subsección **Visión conjunta:**

Resultados		Predicciones	Visión conjunta	?	
Información de la muestra			Resultados de la cuantificación		
N.º	Nombre de muestra	Nombre de submuestra	H2O / %		
1			4.7		
2			6.1		
3			8.0		

Están disponibles varias subsecciones:

- En la subsección **Visión conjunta** se muestran los resultados finales para cada submuestra.
- En la subsección **Vista detallada** se muestran los resultados de la predicción detallados para cada submuestra. Si se han utilizado diferentes modelos o jerarquías de modelos, los resultados correspondientes se representan en tablas separadas. Una submuestra puede aparecer en varias tablas. En caso necesario se pueden mostrar las respectivas propiedades del modelo.
- Cuantificación: en la subsección **Reprocesamiento** pueden evaluarse submuestras que ya hayan sido evaluadas con otros modelos de cuantificación.
- Jerarquía de modelos: en la subsección **Reprocesamiento** pueden evaluarse submuestras que ya hayan sido evaluadas con otra jerarquía de modelos.

 En caso necesario, los resultados de la predicción pueden mostrarse también en los datos de submuestra (*véase "PREDICT-Variables de instrucción", capítulo 11.4, página 181*).

Dependiendo del modelo, los resultados se muestran de la siguiente manera:

Resultados en Muestras ► Listado de muestras ► Resultados ► Predicciones		
	Subsección Visión conjunta	Subsección Vista detallada
Cuantificación	Resultado de la cuantificación (incluida la Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y)	▪ Valor calculado: resultado de la predicción sin Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y ▪ Valor corregido: resultado de la predicción con Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y AVISO: Si no se ha aplicado ninguna corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y', el valor corregido es idéntico al valor calculado. ▪ Se muestran T² de Hotelling y Residuos Q, si se supera el valor límite correspondiente.
Identificación	Resultado de la identificación: ▪ En caso de una identificación correcta: el nombre del producto identificado. ▪ En caso de una identificación fallida: el estado de la identificación (No identificado o Ambiguo).	Además: ▪ Probabilidad del producto determinado
Verificación	▪ Resultado de la identificación ▪ Resultado de la verificación: Satisfactorio o Fallo	Además: ▪ Producto esperado ▪ Probabilidad del producto determinado
Cualificación	Resultado de cualificación: Satisfactorio o Fallo	Además: ▪ Agrupación según modelos ▪ Propiedades del modelo
Jerarquía de modelos	Los resultados finales para la identificación, la cuantificación y la verificación aparecen unos al lado de otros. AVISO: Si falla la identificación, no se puede efectuar ninguna cuantificación.	Los resultados de la predicción detallados para todos los modelos utilizados aparecen unos al lado de otros, indicando también el respectivo nivel jerárquico. En el caso de modelos de cuantificación subordinados se indica también la condición definida para la ejecución del modelo.

- Mostrar espectro individual:
 - Seleccione la submuestra correspondiente en el listado de muestras (marcada con el icono ).
- Visualizar varios espectros:
 - Activar la superposición de curvas haciendo clic en .
 - En el listado de muestras, utilice las teclas **[CTRL]** o **[SHIFT]** para seleccionar varias submuestras.
- Revise los espectros (*véase "Manejo de diagramas", capítulo 11.3, página 178*).

- Repita las pruebas de rendimiento del aparato.
 - Si falla la prueba de longitud de onda, repita la calibración de las longitudes de onda. Si la prueba de longitud de onda vuelve a fallar después de repetir la calibración, póngase en contacto con el representante de servicio regional de Metrohm.
 - Si falla la prueba de ruido, póngase en contacto con el representante de servicio regional de Metrohm.
 - Si falla la prueba de linealidad fotométrica, póngase en contacto con el representante de servicio regional de Metrohm.

10.2 Calibración de las longitudes de onda

Después de ciertas acciones, debe ejecutar una calibración de las longitudes de onda para el aparato en OMNIS Software. (véase *"Iniciar calibración de las longitudes de onda"*, capítulo 3.2.2, página 38)

Tarea	Instrucción OMNIS	Intervalo de ejecución recomendado	Resultado
Calibración de las longitudes de onda	CAL WL y VAL WL	Después de sustituir componentes del hardware. Después de un transporte prolongado del aparato.	El eje x del espectro está calibrado.

10.3 Mantenimiento del aparato

Se debe dar mantenimiento periódicamente al aparato.

Tarea	Intervalo de ejecución	Resultado
Mantenimiento por el representante de servicio regional de Metrohm	Una vez al año. Si es necesario, con mayor frecuencia.	El aparato sigue cumpliendo con las especificaciones técnicas. Se han revisado las esteras filtrantes y se han sustituido en caso necesario. Se ha certificado nuevamente el patrón de longitud de onda interno.



Recertificar patrones de referencia externos

Si se utilizan patrones de referencia para las pruebas de rendimiento externas, estos patrones deben volver a certificarse periódicamente.

- Tener en cuenta la siguiente fecha de calibración recomendada que se indica en el certificado.

- En la lista resumen de modelos, también se puede mantener pulsado el botón izquierdo del ratón y arrastrar sobre varias filas.

Modificar la selección:

- Con la tecla **[CTRL]** pulsada, haga clic en una fila.
La selección de la fila se invierte. Las demás filas seleccionadas permanecerán sin cambios.
o
- Con la tecla **[SHIFT]** pulsada, haga clic en una fila.
Se seleccionan todas las filas desde la última fila en la que se hizo clic sin la tecla **[SHIFT]** hasta la fila actual. Se deseleccionan las filas restantes.
o
- Mantenga pulsada la combinación de teclas **[CTRL]+[SHIFT]** y haga clic en una fila.
Se seleccionan todas las filas desde la última fila en la que se hizo clic hasta la fila actual. Las demás filas seleccionadas permanecerán sin cambios.
o
- Con **[CTRL]+[A]** seleccionar todas las filas de la tabla.

Copiar la tabla en el portapapeles de Windows

Copiar toda la tabla:

1. Hacer clic en la tabla con el botón derecho.
2. Seleccionar **[Copiar tabla]** en el menú contextual.

Copiar una o varias filas de la tabla:

1. Seleccionar las filas deseadas.
2. Copiar las filas seleccionadas con la combinación de teclas **[CTRL]+[C]**.

Ahora, la tabla o las filas de la tabla se pueden insertar en cualquier archivo.

1. Coloque el cursor en uno de los elementos de zoom verdes al principio o al final del eje 'x' o del eje 'y'.

El cursor cambia a  o .

2. Mueva el ratón a lo largo del eje o más allá de él mientras mantiene pulsado el botón izquierdo del ratón.
3. En cuanto se alcance la vista deseada, suelte el botón del ratón.

Desplazar la sección mostrada

Desplazar en cualquier dirección:

1. Posicionar el cursor en el diagrama.
 2. Desplace la sección mostrada en cualquier dirección manteniendo pulsado el botón derecho del ratón.
 3. En cuanto se alcance la vista deseada, suelte el botón del ratón.
- En pantallas táctiles: Toque y mantenga pulsado. A continuación, desplace la sección mostrada.

Desplazar vertical u horizontalmente:

1. Posicionar el cursor en la zona de los números del eje 'x' o del eje 'y'.
2. Desplazar la sección mostrada con uno de los siguientes métodos:
 - a. Girar la rueda del ratón.
 - a. Desplazarse a lo largo del eje con el botón izquierdo del ratón pulsado.

Restablecer el diagrama a la vista predeterminada

- Haga clic en el diagrama con el botón derecho del ratón. Seleccionar **Resetear vista** en el menú contextual.
- o
- Con el botón izquierdo del ratón pulsado, extender una sección de derecha a izquierda.

Seleccionar varios puntos o curvas

- Mantenga pulsada la tecla **[CTRL]** y haga clic en los puntos o curvas uno tras otro.
Se invierte la selección de cada punto o curva. La selección de los demás puntos o curvas permanecerá sin cambios.

Para los diagramas **Gráfico de influencia**, **Gráfico de distribución** y **Diagrama de correlación** hay disponible un modo adicional de selección múltiple:

- **Activar selección múltiple**

Haga clic en **Activar selección múltiple**.

Parte de las funciones anteriores para ajustar el diagrama se reemplazarán por las siguientes funciones.

- Nueva selección

Mantener pulsado el botón izquierdo del ratón y seleccionar una sección.

Se seleccionan todos los puntos dentro de la sección. Se deseleccionan los puntos fuera de la sección.

- **Ampliar selección**

Mantener pulsada la tecla **[SHIFT]** y hacer clic en puntos individuales o seleccionar una sección.

Se seleccionan los puntos correspondientes. Los demás puntos seleccionados permanecerán sin cambios.

- Reducir selección

Mantener pulsada la tecla **[ALT]** y hacer clic en puntos individuales o seleccionar una sección.

Se deseleccionan los puntos correspondientes. Los demás puntos seleccionados permanecerán sin cambios.

- Invertir selección

Mantener pulsada la tecla **[CTRL]** y hacer clic en puntos individuales o seleccionar una sección.

La selección de los puntos correspondientes se invierte. Los demás puntos seleccionados permanecerán sin cambios.

- **Cancelar selección**

Hacer clic en un área vacía del diagrama.

- **Desactivar selección múltiple**

Hacer clic en **Desactivar selección múltiple** para volver a usar las funciones estándar de ajuste del diagrama.

Copiar el diagrama al portapapeles de Windows

1. Haga clic en el diagrama con el botón derecho del ratón.
2. Seleccionar **[Copiar diagrama]** en el menú contextual.

Ahora el diagrama se puede insertar en cualquier archivo.

Diagrama en el listado de muestras

Superposición de curvas

Mostrar varios espectros juntos en un listado de muestras:

- En el listado de muestras, abrir **Curvas y datos** ► **Curvas**.
- Activar la superposición de curvas haciendo clic en . En caso de que el icono no sea visible, hay que ampliar la sección arrastrando la barra de separación.
- En el listado de muestras, utilice las teclas **[CTRL]** o **[SHIFT]** para seleccionar varias submuestras.

Para mostrar todos los espectros incluidos en el listado de muestras, haga clic en  o .

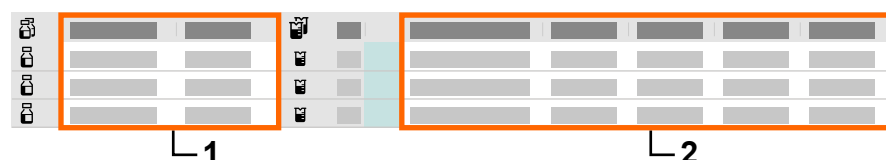
11.4 PREDICT-Variables de instrucción

OMNIS Software ofrece diferentes categorías de variables, por ejemplo, datos de muestra, datos de la submuestra, variables de método, variables de instrucción o variables de sistema.

El software crea algunas variables automáticamente. Se pueden crear variables adicionales según sea necesario. Cuando se utilizan variables, también se debe prestar atención a su tipo de datos (**número**, **texto** o **fecha/hora**).

Las variables se pueden usar para otros cálculos, imprimirse como resultados en informes o p. ej., introducirse como condiciones en la instrucción **IF**.

En el área de trabajo **Muestras**, aparecen los datos de muestra **(1)** y los datos de submuestra **(2)** en el listado de muestras:



- Para crear **datos de muestra**, edite el perfil de muestra.
- Para crear **datos de la submuestra**, edite el procedimiento operativo.

Visualizar los resultados de la predicción como datos de submuestra

A modo de ejemplo, las siguientes variables de instrucción **PREDICT** se mostrarán en los datos de submuestra (véase "Adquisición de espectro", capítulo 2.3.1, página 19):

Datos de la submuestra	
Nombre del campo breve	Nombre del campo breve
H2O	Producto
Nombre del campo largo	Nombre del campo largo
Tipo de campo de entrada	Tipo de campo de entrada
Número	Texto
Usar como	Usar como
Resultado	Resultado
1	2

- Guardar el procedimiento operativo: Haga clic en o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

El nombre de la variable para los datos de la submuestra creados depende del **Nombre de campo breve** seleccionado:
'Nombre del campo breve.CurrentSubsampleData'

Cuantificación: Si se predicen varios parámetros de interés para cada muestra, cree múltiples datos de submuestra para los resultados predichos.

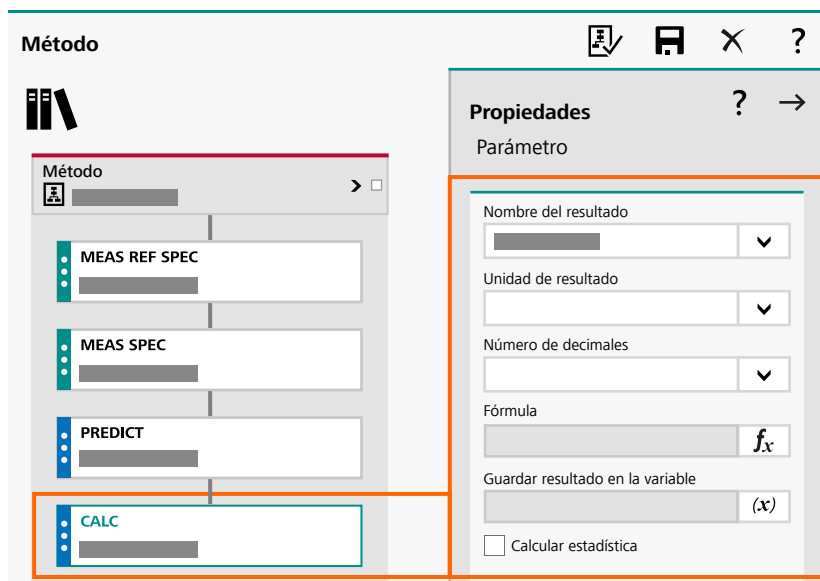
2 Inserte una instrucción CALC para el resultado predicho

Complete los datos de submuestra creados con el resultado de una instrucción **CALC**:

- Abrir el método correspondiente.
- Insertar una instrucción **CALC**.
Ordene la instrucción **CALC** debajo de la instrucción **PREDICT**.

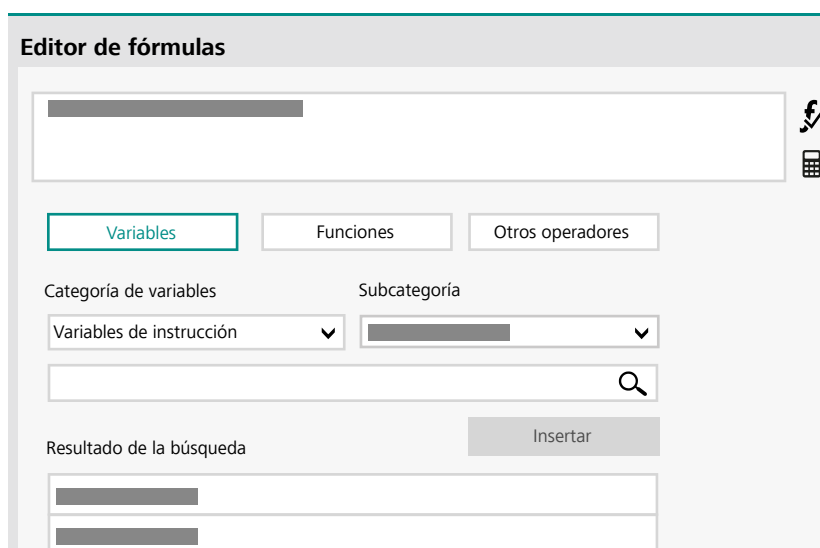
Calcular el valor a mostrar

- Seleccione la instrucción **CALC** y abra **Propiedades ► Parámetros**.
 - Como **Nombre del resultado** ingrese un nombre adecuado para el resultado predicho o el producto identificado.
 - Cuantificación: Introduzca **Unidad de resultado** y especifique la cantidad necesaria de **Número de decimales**.



i **Calcular estadística** se aplica a varias submuestras en una muestra. Desactive **Calcular estadística**.

- En el campo **Fórmula**, haga clic en **fx** para abrir el editor de fórmulas.



- Cree una fórmula utilizando la categoría de variables **Variables de mando**. Para la visualización de resultados, la fórmula consiste en una sola variable de instrucción **PREDICT**:
 - Identificación:
Product.Identification.Result.Nombre de la instrucción
 - Cuantificación:
Predicted.Quantification.Result.Nombre de la instrucción
Si se ha seleccionado una variable de jerarquía de modelos con índice, ajuste el índice en el campo de entrada superior según sea necesario, por ejemplo: '**Predicted.Quantification{2}.Result.Nombre de la instrucción**' (véase "[Jerarquía de modelos – Índice para los modelos de cuantificación](#)", capítulo 11.4.1, página 187)
- Comprobar la validez de la fórmula introducida haciendo clic en .
- **Nota:** El resultado de la predicción solo se genera durante el tiempo de ejecución de una determinación. Por lo tanto, al calcular la fórmula haciendo clic en , se mostrará el resultado **Inválido**.
- Cierre el editor de fórmulas haciendo clic en →.

Guardar el valor calculado en datos de la submuestra

- En el campo **Almacenar el resultado en la variable**, haga clic en **(x)**.
- Seleccione la categoría de variables **Datos de la submuestra**.
- Elija como subcategoría el procedimiento operativo correspondiente.
El Resultado de la búsqueda muestra los datos de la submuestra definidos en el procedimiento operativo seleccionado.
- Seleccione la nueva variable creada.
La variable seleccionada se inserta en el campo **Variables**.

Variables

.CurrentSubsampleData

X

Categoría de variables

Subcategoría

Datos de la submuestra

Introducir término de búsqueda

Q

Resultado de la búsqueda

.CurrentSubsampleDate

.CurrentSubsampleData

Aceptar

Cancelar

- Haga clic en **Aceptar**.
- Guarde el método: Haga clic en  o pulse las teclas **[CTRL]+[S]**.

Cuantificación: Si se predicen varios parámetros de interés para cada muestra, inserte una instrucción **CALC** para cada resultado predicho.

Análisis de muestras

1 Abrir listado de muestras

- Si el listado de muestras se ha cerrado, abra el listado de muestras en **Muestras ► Listados de muestras** haciendo doble clic.

2 En el listado de muestras aparece un campo para todas las muestras que aún no se han analizado para los datos de la submuestra creados:

Nombre de muestra	Nombre de submuestra			

Después de la predicción, el campo muestra el resultado.

Identificación: Si la identificación ha fallado, el campo de resultados permanece vacío.

Otras variables

Se pueden añadir más variables a los datos de submuestra de la misma manera que se describió anteriormente (*véase "Predicción", capítulo 2.3.2, página 21*).

11.4.1 Jerarquía de modelos – Índice para los modelos de cuantificación

Una jerarquía de modelos puede contener varios modelos de cuantificación. Para que las variables de instrucción **PREDICT** puedan diferenciar los modelos de cuantificación se usan los números de índice.

Al primer modelo de cuantificación que se vincula a un producto o grupo de productos determinado se le asigna el índice 1. Si se vinculan más modelos de cuantificación al mismo producto o grupo de productos, el índice se va incrementando. El incremento se basa en el orden de los modelos de cuantificación en la jerarquía de modelos.

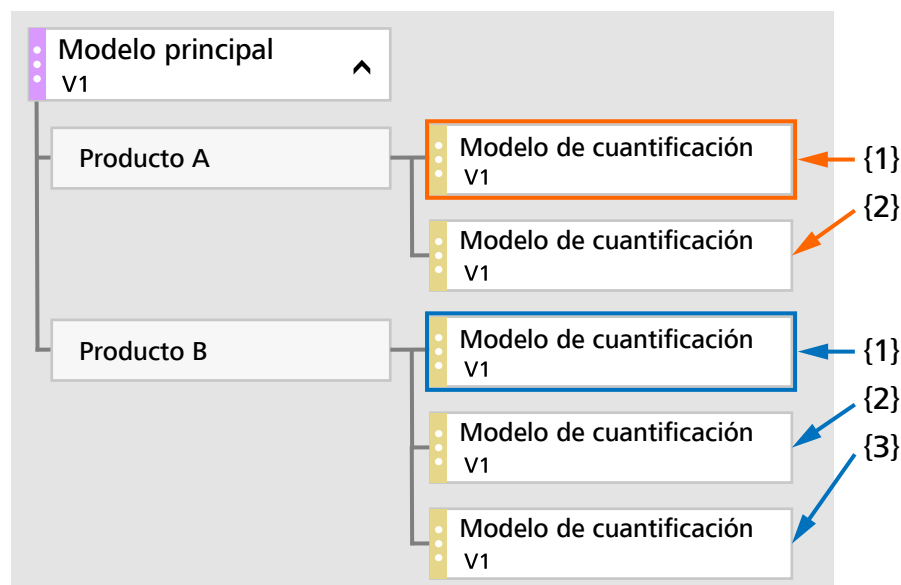


Figura 7 Números de índice para modelos de cuantificación en una jerarquía de modelos

Las variables de instrucción **PREDICT** hacen referencia al modelo de cuantificación a través del número de índice.

Ejemplo: '**Predicted.Quantification{1}.Result.Nombre de la instrucción**'

Si durante la predicción, una muestra se identifica como producto A, se usan todos los modelos de cuantificación vinculados al producto A. En este caso, la variable de instrucción anterior hace referencia al modelo de cuantificación vinculado al producto A con índice 1 (con marco naranja en la imagen).

Si una muestra se identifica como producto B, la variable de instrucción anterior hace referencia al modelo de cuantificación vinculado al producto B con índice 1 (con marco azul en la imagen).

Si la variable de la instrucción para el modelo de cuantificación con marco azul se debe usar de forma diferente a la del modelo de cuantificación con

marco naranja, una instrucción **IF** puede restringir el procesamiento a una clase de producto específica.

 En una jerarquía de modelos sin modelos de identificación, el modelo de cuantificación superior recibe el índice 1. Para los demás modelos de cuantificación, este índice se va incrementando de uno en uno.

Modelos de cuantificación subordinados

A los modelos de cuantificación subordinados no se les asigna ningún número de índice. La variable de la instrucción **PREDICT** deberá hacer referencia al modelo de cuantificación superior. Sin embargo, la variable suministra para cada submuestra los valores del modelo subordinado que se esté utilizando.

11.5 Exportar e importar modelos

Los modelos pueden exportarse e importarse para usarlos en otra instalación OMNIS.

Exportar modelos

1 Abrir diálogo de exportación

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, abra una de las siguientes subsecciones:
 - **Modelos de cuantificación**
 - **Correcciones de pendiente/del sector de eje de coordenadas y**
 - **Modelos de identificación**
 - **Modelos de cualificación**
 - **Jerarquías de modelos**
- Hacer clic en .

Se abre un diálogo de exportación.

2 Generar archivos de exportación

- Seleccione todos los modelos que desee exportar.
- Si se han seleccionado exclusivamente modelos publicados **versión full**, se puede definir el **Tipo de exportación**:
 - Un modelo **versión full** funciona perfectamente. Tras la importación, el modelo puede editarse y guardarse.
 - Si un modelo se ha publicado, se puede exportar la última versión publicada como **versión light**. Este modelo solo puede usarse para predicciones.

- Personalice la carpeta de destino, si es necesario.
-  No se pueden utilizar los siguientes caracteres especiales o cadenas de caracteres: > < : " / \ | * ? y CON, PRN, AUX, NUL, COM1–COM9, LPT1–LPT9.
- Haga clic en **[Exportar]** para generar los archivos de exportación. Los modelos se exportan a la carpeta especificada.

Importar modelos

1 Abrir el diálogo de importación

- En el área de trabajo **Calibración y evaluación**, abra una de las siguientes subsecciones:
 - **Modelos de cuantificación**
 - **Correcciones de pendiente/del sector de eje de coordenadas y**
 - **Modelos de identificación**
 - **Modelos de cualificación**
 - **Jerarquías de modelos**
- Hacer clic en .

2 Abrir archivos

- Seleccione la carpeta y todos los archivos *.opmo o los archivos *.osic que desee importar.
- Haga clic en **[Abrir]**.

Los modelos se importan a OMNIS Software.

11.6 Cambio de un analizador XDS/DS (cuantificación)

Al cambiar desde un analizador DS2500 o XDS, los espectros y parámetros de referencia utilizados para crear un modelo de cuantificación para analizadores XDS/DS se pueden importar a OMNIS Software. Con estos datos se puede desarrollar un modelo de cuantificación.

En un segundo paso, se crea una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'. Para esto, se utilizan espectros adquiridos con OMNIS Software. Es necesario conocer los valores de referencia asociados a estos espectros.

Para la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y' se usan menos muestras que para el desarrollo de un modelo de cuantificación:

- Desarrollo automático del modelo con **OMNIS Model Developer (OMD)**: Haga clic en **[Iniciar OMD]**. Continuar con [capítulo 5.2, Desarrollo automático del modelo – OMD, página 70](#).
- Desarrollo manual del modelo: Haga clic en **[Crear]**. Continuar con [capítulo 5.3, Desarrollo manual del modelo, página 73](#).

5 Desarrollo automático o manual del modelo

 Si primero se necesita ajustar manualmente la selección de muestras y después el desarrollo automático del modelo, continúe con el desarrollo manual del modelo.

- **Desarrollo automático del modelo**: Haga clic en **[Iniciar OMD]**. Continuar con [capítulo 5.2, Desarrollo automático del modelo – OMD, página 70](#).
- **Desarrollo manual del modelo**: Haga clic en **[Crear]**. Continuar con [capítulo 5.3, Desarrollo manual del modelo, página 73](#).

6 Publicar modelo

- Publicar el modelo de cuantificación (*véase "Publicar modelo de cuantificación", capítulo 5.4, página 96*).

Muestras para la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'

Para la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y', cada muestra necesita:

- Un valor de referencia para el parámetro que debe corregirse.
- Un espectro.
- Un valor calculado para cada espectro.

1 Recolección de muestras

- Recolectar muestras físicas para la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y', como si fueran muestras para el desarrollo de un modelo de cuantificación (*véase "Preparar el desarrollo del modelo", capítulo 4, página 50*). Sin embargo, un número menor de muestras es suficiente.

2 Preparar la adquisición de espectro y la predicción

- Cree un método, un procedimiento operativo, un perfil de muestra y un listado de muestras como si se tratase de muestras para desarrollar un modelo de cuantificación (*véase "Preparación de la adquisición de espectro", capítulo 4.1, página 51*). Pero:

- **Método**

En el método, después de la instrucción **MEAS SPEC** y, si está disponible, después de la instrucción **VESSEL REMOVAL** inserte una instrucción **PREDICT**.

Como parámetro de la instrucción **PREDICT**, indique lo siguiente:

- **Nombre de la instrucción de medida**
- El **Modelo de cuantificación** desarrollado con los espectros importados.

3 Adquirir espectros y predecir parámetros de interés

- Adquiera los espectros y prediga los parámetros de interés como si las muestras fueran para desarrollar un modelo de cuantificación (*véase "Adquirir espectros", capítulo 4.2, página 63*).

A continuación, cada muestra tendrá un espectro, un valor de referencia y un valor calculado.

En caso de que haya varios parámetros de interés, cada muestra tiene un espectro y, para cada parámetro de interés habrá un valor de referencia y un valor calculado.

Crear corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'

- Crear una corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y'. Para esto, se utilizan espectros adquiridos con OMNIS Software. Es necesario conocer los valores de referencia asociados a estos espectros. *(véase "Corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas y", capítulo 5.5, página 98)*

Predicción

1 Preparar la predicción

- Prepare los procesos necesarios para la predicción (véase "Preparar la predicción", capítulo 9.1, página 157).

En la instrucción **PREDICT**, especifique el modelo de cuantificación y la corrección de pendiente/del sector de eje de coordenadas 'y' correspondiente.

2 Realizar predicción

- Realice la predicción (*véase "Iniciar predicción", capítulo 9.2, página 167*).

 La realización del análisis debería supervisarse con muestras de control. Las muestras de control se analizan usando tanto el método espectroscópico como el método de referencia. Los resultados de ambos métodos se pueden comparar.

11.7 Flujos de trabajo para OMNIS NIR Analyzer

Para analizar muestras con OMNIS NIR Analyzer, OMNIS Software realiza las siguientes tareas:

- Preparación del aparato:
 - Configuración del aparato
 - Calibración de las longitudes de onda y validación
 - Pruebas de rendimiento del aparato
- Adquisición de espectros de muestras de calibración
- Registro de valores de referencia de muestras de calibración
- Desarrollar modelos
- Predecir parámetros de interés
- Prueba de rendimiento del aparato: Repetición según necesidad.

En las siguientes secciones, se ilustran los flujos de trabajo correspondientes en OMNIS Software.

Preparación del aparato

Antes de que se puedan adquirir los espectros, el aparato debe ser preparado. Entre otras tareas, se debe efectuar la calibración de las longitudes de onda.

La siguiente *figura 8* ilustra un ejemplo de calibración de las longitudes de onda. El método se ilustra mediante una sola instrucción.

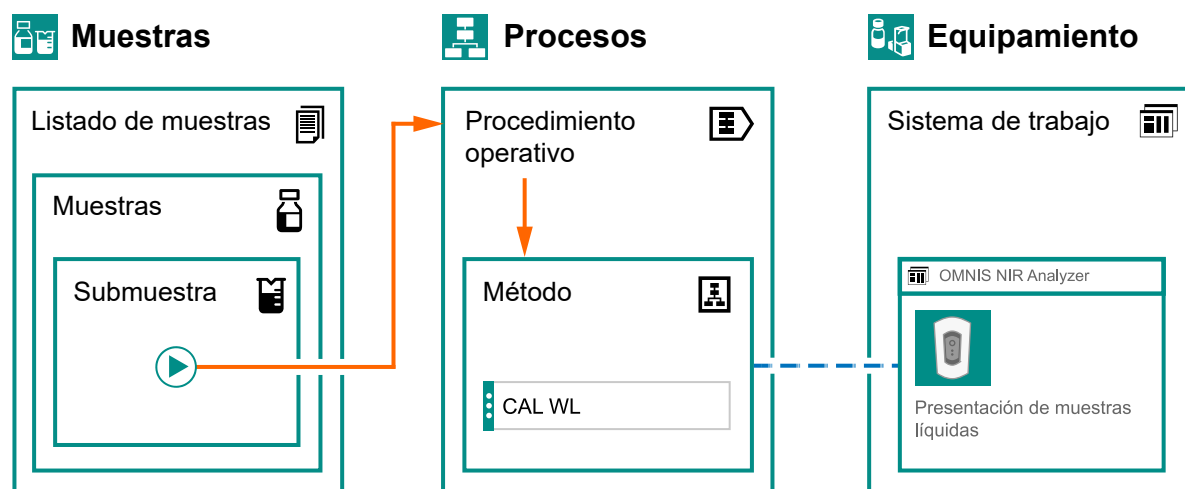
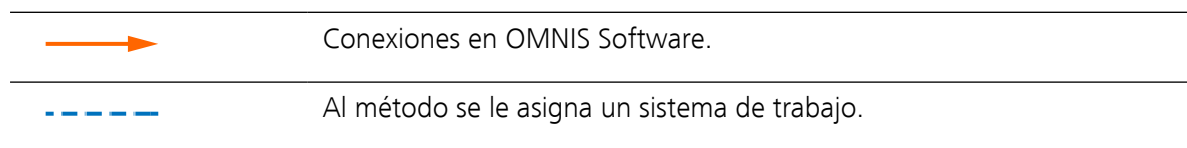


Figura 8 Configuración del aparato



El área de trabajo **Muestras** contiene un listado de muestras con una muestra. La muestra contiene una submuestra. A la submuestra se le asigna un procedimiento operativo.

Normalmente, las muestras se usan para analizar muestras reales. Sin embargo, en este caso, la muestra se utiliza para realizar una calibración de las longitudes de onda. En cuanto se inicia la correspondiente sub-muestra, se realizan los siguientes pasos:

1. La submuestra inicia el procedimiento operativo asignado.
2. El procedimiento operativo ejecuta el método que contiene.
3. El método ejecuta la instrucción **CAL WL**. La instrucción se ejecuta con el sistema de trabajo asignado al método.

El sistema de trabajo contiene una unidad funcional del aparato OMNIS NIR Analyzer. Este aparato realiza una calibración de las longitudes de onda. Los datos de calibración se guardan en el aparato.

Registrar valores de referencia o nombres de productos

Para crear un modelo, se debe registrar un valor de referencia (cuantificación) o un nombre de producto (identificación) para cada muestra de calibración y muestra de validación. Para la cualificación se debe saber si las distintas muestras están clasificadas como positivas o negativas.

Ejemplo para cuantificación

La siguiente *figura 9* muestra el registro de un valor de referencia para el parámetro de interés, como el contenido de agua de una muestra, por ejemplo.

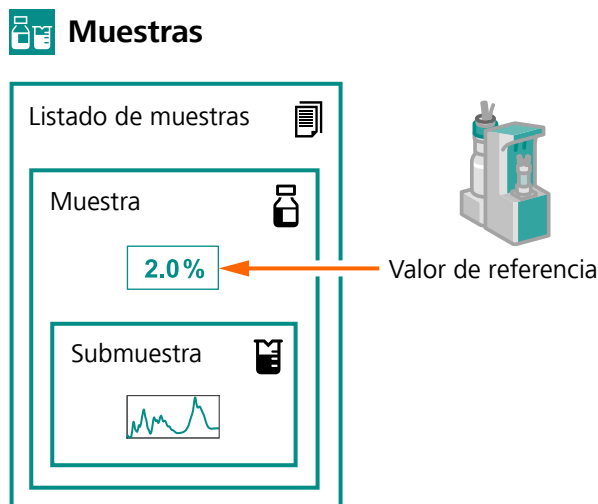


Figura 9 Registrar valor de referencia

El parámetro de interés se mide con un método de referencia, por ejemplo, mediante titulación. El valor medido sirve como valor de referencia.

El valor de referencia para cada muestra incluida en el listado de muestras se introduce en el campo de entrada correspondiente.

Adquisición de espectros de muestras de calibración

Para crear un modelo, se debe adquirir un espectro para cada muestra de calibración y muestra de validación.

La siguiente [figura 10](#) muestra una representación esquemática de la adquisición de un espectro.

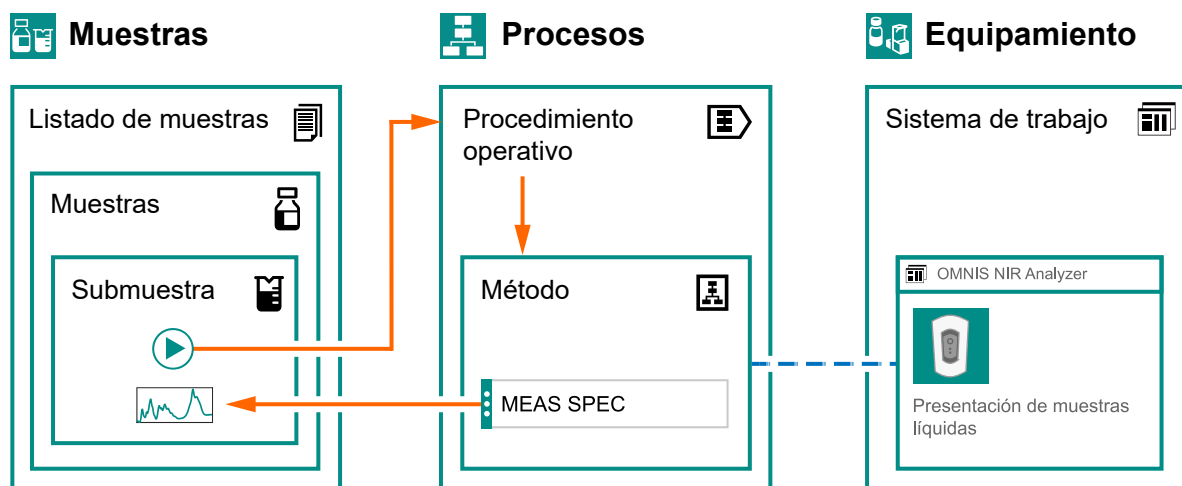


Figura 10 Adquirir espectro de una muestra de calibración



Conexiones en OMNIS Software.



Al método se le asigna un sistema de trabajo.

El área de trabajo **Muestras** contiene un listado de muestras con muestras de calibración. Cada muestra contiene una submuestra. A su vez, a cada submuestra se le asigna un procedimiento operativo.

En cuanto se inicia una submuestra, se realizan los siguientes pasos:

1. La submuestra inicia el procedimiento operativo asignado.
2. El procedimiento operativo ejecuta el método que contiene.
El método ejecuta la instrucción **MEAS SPEC**. La instrucción se ejecuta con el sistema de trabajo asignado al método.
El sistema de trabajo contiene una unidad funcional (por ejemplo, **Liquid Sample Presentation**). La unidad funcional adquiere un espectro y lo transmite a OMNIS Software. OMNIS Software guarda el espectro en los datos de submuestra.

Desarrollo de un modelo

Cuantificación: Se crea un modelo de cuantificación a partir de los espectros y valores de referencia de las muestras de calibración, automáticamente con **OMD** (OMNIS Model Developer) o manualmente.

Identificación: se crea un modelo de identificación a partir de los espectros y nombres de productos de las muestras de calibración.

Cualificación: se crea un modelo de cualificación a partir de los espectros de las muestras de calibración.

Ejemplo para cuantificación

La siguiente *figura 11* muestra los pasos para el desarrollo manual de un modelo de cuantificación.

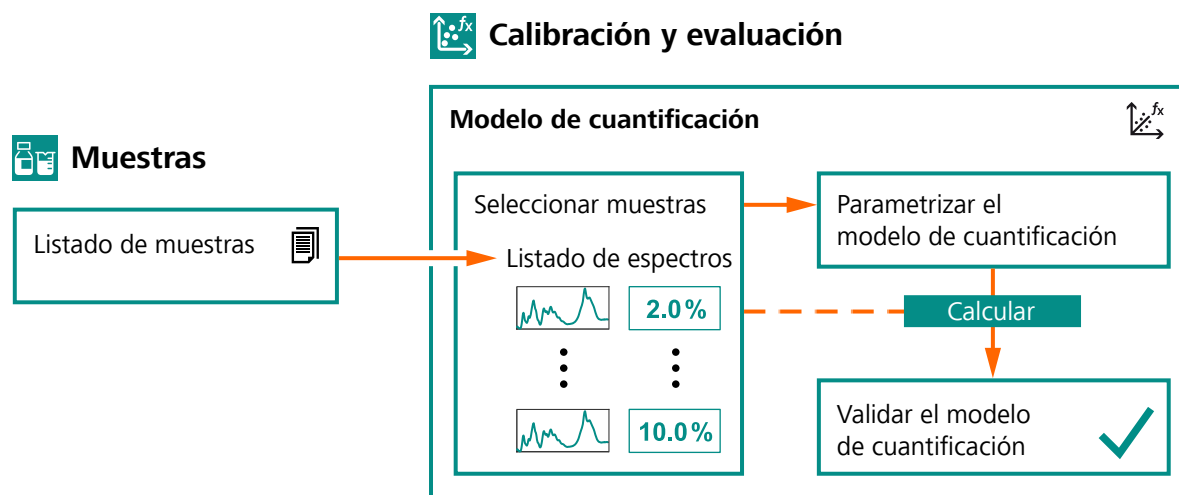


Figura 11 Desarrollar un modelo (ejemplo para cuantificación)

En primer lugar, se transfieren las muestras, incluidos los valores de referencia, a un listado de espectros. Luego, se desarrolla el modelo en 3 pasos del proceso:

1. El paso del proceso **Seleccionar muestras** permite detectar valores discrepantes, establecer espectros de validación y especificar un método de validación cruzada.
2. En el paso del proceso **Parametrizar modelo de cuantificación**, se pueden aplicar pretratamientos de datos a los espectros y definir gamas de longitudes de onda.
3. Después de calcular un modelo, en el paso del proceso **Validar modelo de cuantificación**, se evalúa si el modelo cumple con los requisitos.
Los pasos anteriores se pueden ajustar para optimizar el modelo. Una vez que se haya determinado un modelo adecuado, ese modelo puede **publicarse**. Luego, el modelo publicado se puede usar para predecir muestras desconocidas.

Predicción

En la predicción se utiliza un modelo en el espectro de una muestra desconocida. Dependiendo del modelo, se puede predecir lo siguiente:

- Parámetros de interés (cuantificación)
- Clase de producto o resultado de la verificación (identificación)
- Resultado de cualificación (cualificación)

Ejemplo de cuantificación: la siguiente *figura 12* ilustra la predicción de un parámetro de interés.

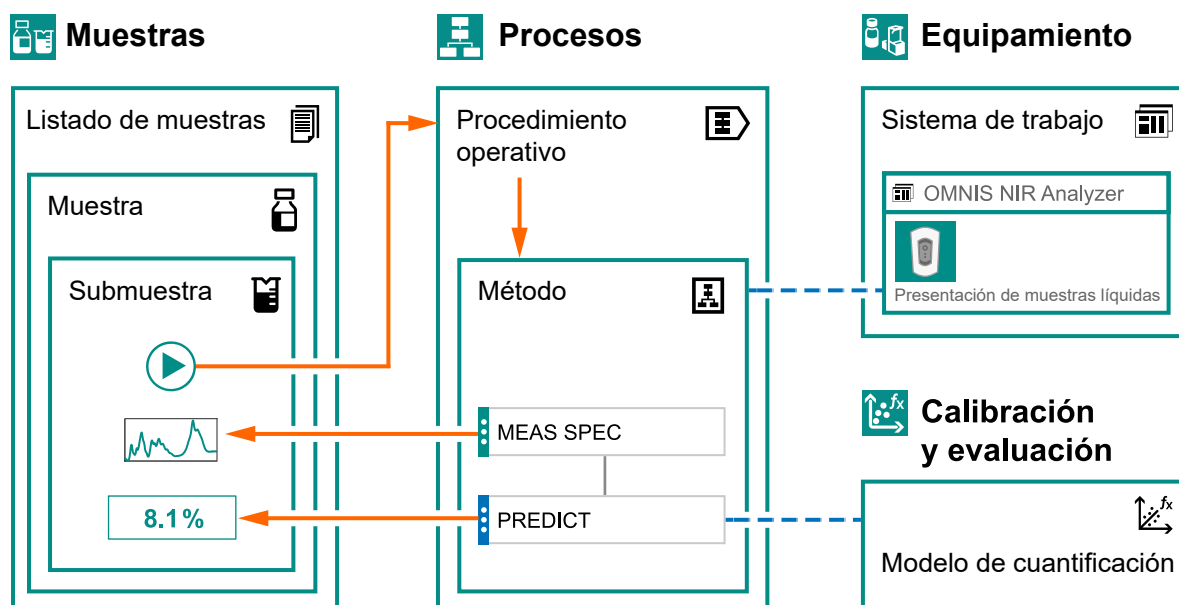


Figura 12 Predecir parámetros de interés (ejemplo para cuantificación)



Conexiones en OMNIS Software.



Al método se le asigna un sistema de trabajo.

La instrucción **PREDICT** especifica un modelo.

El área de trabajo **Muestras** contiene un listado de muestras con muestras listas para analizar. Cada muestra contiene una submuestra. A su vez, a cada submuestra se le asigna un procedimiento operativo.

En cuanto se inicia una submuestra, se realizan los siguientes pasos:

1. La submuestra inicia el procedimiento operativo asignado.
2. El procedimiento operativo ejecuta el método que contiene. El método contiene al menos 2 instrucciones:

a. Instrucción de medida

La instrucción **MEAS SPEC** adquiere un espectro de la muestra. La instrucción se ejecuta con el sistema de trabajo asignado al método.

El sistema de trabajo contiene una unidad funcional (por ejemplo, **Liquid Sample Presentation**). Con ello, el aparato adquiere un espectro y lo transmite a OMNIS Software.

b. Predicción

En la instrucción **PREDICT** se selecciona una instrucción de medida y un modelo. El modelo evalúa el espectro adquirido con la instrucción de medida. Esto da como resultado una predicción, por ejemplo, un contenido de agua del 8,1%.