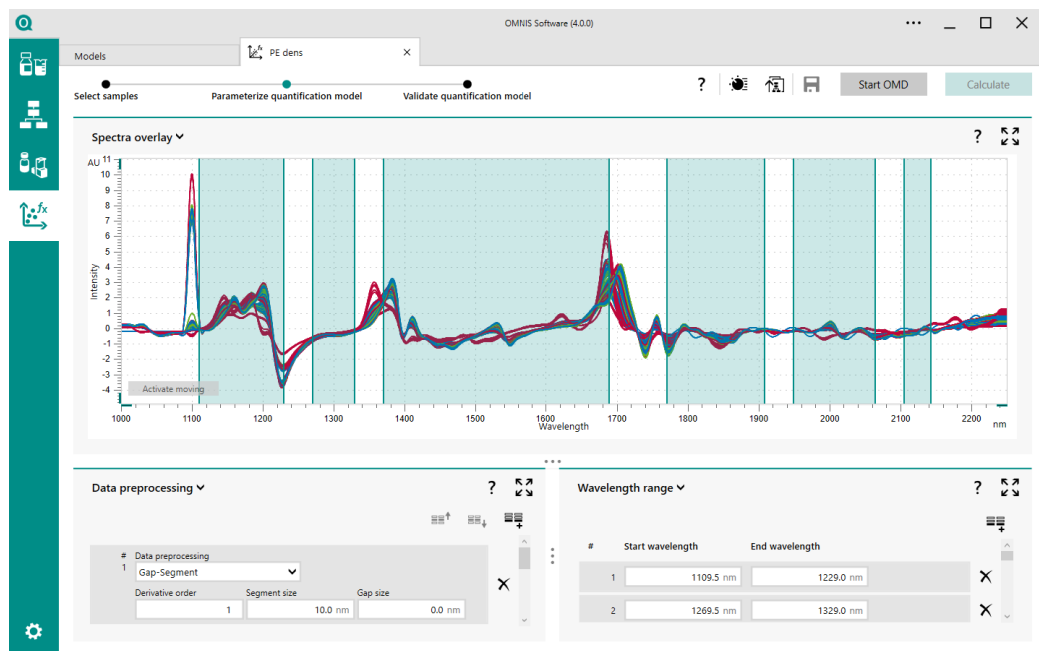


OMNIS NIR (Lab)



Espectroscopia OMNIS passo a passo

Tutorial

8.0600.8202PT / v7 / 2026-02-17



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

OMNIS NIR (Lab)

Versão do OMNIS Software 4.7

Tutorial

Todos os direitos autorais desta documentação são protegidos. Reservados todos os direitos patrimoniais e autorais.

Esta documentação é um documento original.

Esta documentação foi cuidadosamente elaborada. No entanto, ainda pode conter erros. Nesse caso, solicita-se o envio de comunicação sobre eventuais erros ao endereço acima indicado.

Aviso de isenção de responsabilidade

Estão expressamente excluídas da garantia defeitos que não sejam da responsabilidade da Metrohm como armazenamento ou uso irregular, etc. As modificações não autorizadas do produto (por exemplo, conversões ou anexos) excluem qualquer responsabilidade por parte do fabricante pelos danos resultantes e suas consequências. As instruções e notas na documentação do produto da Metrohm devem ser rigorosamente seguidas. Caso contrário, a responsabilidade da Metrohm estará excluída.

Índice

1	Visão geral	1
1.1	Introdução	1
1.2	Informações sobre a documentação	1
1.3	Licenças OMNIS	1
1.4	Direitos de usuário	2
1.5	Informações adicionais	2
2	Breve visão geral do OMNIS Software	4
2.1	Estrutura e funções	4
2.1.1	Barras de funções	4
2.1.2	Guias e subáreas	4
2.1.3	Barra de funções Amostras	6
2.1.4	Barra de funções Processos	7
2.1.5	Barra de funções do Equipamento	8
2.1.6	Área de trabalho Calibração e avaliação	9
2.2	Introdução prática	11
2.3	Comandos OMNIS	18
2.3.1	Registro do espectro	19
2.3.2	Previsão	21
2.3.3	Cálculos e estatísticas	25
2.3.4	Calibração do comprimento de onda	26
2.3.5	Testes de desempenho do equipamento	26
2.4	Reservar e liberar os equipamentos	27
2.5	Controle de temperatura (Liquid Sample Presentation) ..	29
3	Preparar o aparelho	31
3.1	Criar um sistema de trabalho	31
3.2	Calibração do comprimento de onda	32
3.2.1	Preparar a calibração do comprimento de onda	33
3.2.2	Iniciar a calibração do comprimento de onda	37
3.3	Testes de desempenho do equipamento	39
3.3.1	Preparar testes de desempenho do equipamento internos	40
3.3.2	Realizar os testes de desempenho do equipamento internos ..	44
3.3.3	Testes de desempenho do equipamento externos (opcional) ..	46
4	Preparar o desenvolvimento de modelo	49
4.1	Preparar o registro do espectro	50
4.2	Registrar os espectros	62

5	Modelo de quantificação	67
5.1	Criar o modelo de quantificação	67
5.2	Desenvolvimento de modelo automático – OMD	69
5.3	Desenvolvimento de modelo manual	72
5.3.1	Selecionar as amostras e dividir o conjunto de dados	72
5.3.2	Calcular o modelo de quantificação	79
5.3.3	Validar o modelo de quantificação	80
5.3.4	Parametrizar o modelo de quantificação	87
5.4	Publicar o modelo de quantificação	95
5.5	Correção da interceptação do eixo y / slope	97
6	Modelo de identificação	105
6.1	Criar o modelo de identificação	105
6.2	Selecionar as amostras e dividir o conjunto de dados ..	106
6.3	Calcular o modelo de identificação	113
6.4	Validar o modelo de identificação	114
6.5	Parametrizar o modelo de identificação	117
6.5.1	Seleção de comprimento de onda	119
6.5.2	Pré-tratamento de dados	121
6.6	Publicar o modelo de identificação	122
7	Modelo de qualificação	124
7.1	Criar o modelo de qualificação	124
7.2	Selecionar as amostras e dividir o conjunto de dados ..	126
7.3	Calcular o modelo de qualificação	133
7.4	Validar o modelo de qualificação	133
7.5	Parametrizar o modelo de qualificação	135
7.5.1	Seleção de comprimento de onda	136
7.5.2	Pré-tratamento de dados	138
7.6	Publicar o modelo de qualificação	139
8	Hierarquia de modelos	141
8.1	Desenvolver hierarquia de modelos	142
8.1.1	Desenvolver modelos	142
8.1.2	Inserir os modelos na hierarquia de modelos	143
8.2	Validar a hierarquia de modelos	150
8.3	Publicar a hierarquia de modelos	152

9	Previsão	154
9.1	Preparar a previsão	154
9.1.1	Diversos parâmetros de interesse (quantificação)	161
9.2	Iniciar a previsão	163
9.3	Resultados de previsão	166
10	Intervalos de teste e intervalos de manutenção	170
10.1	Testes de desempenho do equipamento	170
10.2	Calibração do comprimento de onda	171
10.3	Manutenção do equipamento	171
11	Anexo	173
11.1	Relatórios	173
11.2	Manuseio de tabelas	173
11.3	Manuseio de diagramas	174
11.4	Variáveis de comando PREDICT	178
11.4.1	Hierarquia de modelos – índice para modelos de quantificação	183
11.5	Exportar e importar modelos	185
11.6	Troca de XDS/DS Analyzer (quantificação)	186
11.7	Fluxo de trabalho para OMNIS NIR Analyzer	190

1 Visão geral

1.1 Introdução

Este tutorial descreve a operação dos dispositivos da família de produtos **OMNIS NIR Analyzer**, com base na Versão do OMNIS Software 4.7.

O tutorial fornece uma breve visão geral do OMNIS Software e descreve as definições do equipamento, o desenvolvimento de modelo e a previsão.

1.2 Informações sobre a documentação

Possíveis apresentações na documentação:

(1)	Referência ao número da posição na figura
1	Etapas de instrução
Método	Parâmetros, pontos do menu, guias e diálogos
Processos ► Procedimentos operacionais	Caminho do menu
[Próximo]	Botão ou tecla
i	Informações complementares sobre o texto de descrição

1.3 Licenças OMNIS

OMNIS é uma plataforma modular. As funções do equipamento e os módulos de software podem ser combinados livremente:

- As funções do equipamento estão disponíveis como pacotes de licença (veja [Metrohm Knowledge Base](#)).
Para este tutorial, é necessário ter a seguinte licença de funcionamento:
 - Licença de funcionamento Lab NIR Spectroscopy

- Os módulos de software podem ser licenciados e ativados individualmente (veja [Metrohm Knowledge Base](#)).
- As seguintes licenças de software são necessárias para este tutorial (exemplo para o OMNIS Stand-Alone):
- Licenças de software OMNIS Stand-Alone
 - Para o desenvolvimento de modelos de quantificação: licença de software Quant Development
 - Para o desenvolvimento de modelos de identificação e modelos de qualificação: licença de software Ident Development
-  Informações adicionais sobre licenças podem ser obtidas na [Metrohm Knowledge Base](#) ou com o representante da Metrohm local.

1.4 Direitos de usuário

Se a administração de usuário estiver ativada, um administrador pode criar outros usuários e atribuir direitos de usuário. As funções de usuário reúnem uma série de direitos individuais, facilitando a administração de direitos (consultar a [Metrohm Knowledge Base](#)).

Se a administração de usuário estiver ativada, será necessária a função de usuário **Desenvolvedor de métodos** ou **Diretores do laboratório** para concluir este tutorial.

Alternativamente, o OMNIS Software pode ser utilizado sem administração de usuário ativada.

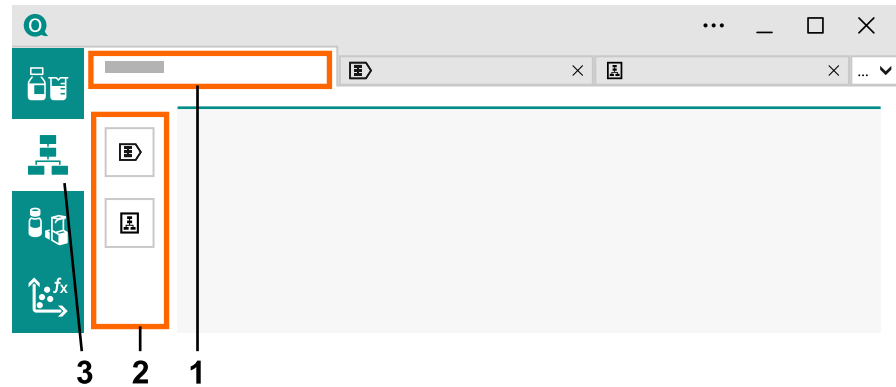
1.5 Informações adicionais

A ajuda OMNIS pode ser acessada pelo OMNIS Software ou por meio de um navegador da web.

Acessar a ajuda do OMNIS Software

- **Definir o acesso on-line ou off-line**
 - Acesso on-line (é necessário acesso à internet): ativar na barra de título sob ... a opção **Metrohm Knowledge Base**.
 - Acesso off-line: desativar na barra de título sob ... a opção **Metrohm Knowledge Base**.
- **Abrir a página inicial da ajuda**
 - Na barra de título, sob ..., clicar no botão **Ajuda**.
 - Ou pressionar a tecla **[F1]**.
- **Abrir a ajuda dependente do contexto**
 - Na área ou janela relevante, clicar em **?**.
Aviso: ao acessar off-line, a página inicial sempre aparece.

- Ir ao website <https://guide.metrohm.com>.
- Clicar no **OMNIS Software**.
- Selecionar a versão desejada do OMNIS Software no filtro **Versão**.
- Para a versão mais recente do OMNIS Software e para versões de suporte de longo prazo, a ajuda também está disponível em PDF: utilizar o filtro **Informações** ► **Publicação** ► **Manual**.



As barras de funções ainda são divididas em **Subáreas**. A guia mais à esquerda (1) exibe a subárea (2) da barra de funções selecionada (3).

Subáreas relevantes

A seguinte [figura 1](#) mostra uma representação esquematizada. A barra de funções Amostras contém uma lista de amostras. A lista de amostras contém amostras e subamostras. A cada subamostra, está atribuído um procedimento operacional.

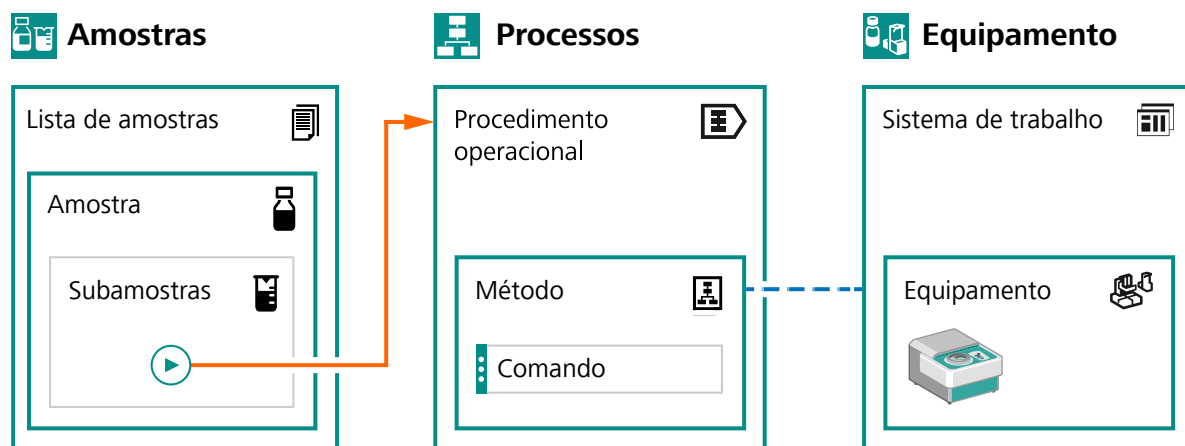


Figura 1 3 barras de funções com subáreas relevantes



Uma subamostra acessa um procedimento operacional.



Um sistema de trabalho está atribuído ao método.

Se uma subamostra for analisada, o OMNIS Software inicia o procedimento operacional atribuído e executa os métodos e comandos contidos nele.

Um sistema de trabalho está atribuído ao método. Assim, os comandos podem acessar o sistema de trabalho e os dispositivos contidos nele.

- Os campos de dados podem ser preenchidos com dados de maneira manual ou automática (p. ex., por meio de um comando).

- A subárea **Listas de amostras** oferece as seguintes funções:
 - Criar e gerenciar listas de amostras.
 - Em uma lista de amostras:
 - Adicionar novas amostras ou subamostras.
 - Processar subamostras de modo que, para cada subamostra, seja executado o procedimento operacional atribuído a ela.O procedimento operacional pode, p. ex., executar uma análise de amostras ou uma calibração do comprimento de onda.

- Na subárea **Resultados de busca**, todas as amostras e subamostras no banco de dados podem ser filtradas em resultados de busca de acordo com diferentes critérios. Os critérios de filtro podem ser salvos como resultado de busca. As amostras encontradas podem ser salvas como lista de amostras.

- Na subárea **Perfis da amostra**, um perfil da amostra determina o seguinte para uma série de amostras semelhantes:
- Estrutura dos dados da amostra, ou seja, quantidade e tipo dos campos para dados da amostra.
- Valores padrão para campos de dados da amostra.
- Um ou mais procedimentos operacionais padrão válidos respectivamente para uma quantidade padrão de subamostras.

2.1.4 Barra de funções Processos

Na barra de funções **Processos**, é possível definir procedimentos operacionais e métodos para a análise de amostras.

A seguinte *figura 3* esclarece os componentes para processos:

- **Procedimentos operacionais**
- **Métodos**
- **Comandos** (p. ex. **MEAS SPEC**)

Processos

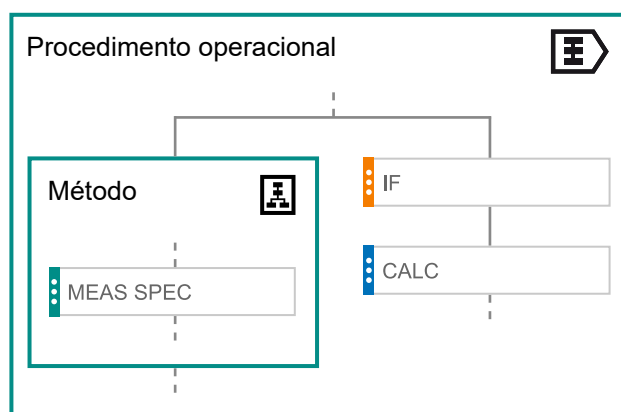


Figura 3 Barra de funções Processos

Processos – subáreas



Na subárea **Procedimentos operacionais**, os procedimentos operacionais podem ser montados a partir de métodos e comandos. Os métodos e comandos podem ser organizados para uma execução sequencial ou simultânea.



Na subárea **Métodos**, os métodos podem ser montados a partir de comandos. Os comandos podem ser organizados para uma execução sequencial ou simultânea.

Um método pode conter comandos para o controle das ações de um sistema de trabalho. Esses comandos serão executados no sistema de trabalho atribuído ao método.

2.1.5 Barra de funções do Equipamento

Equipamento – visão geral



Na barra de funções **Equipamento**, são gerenciados equipamentos e acessórios.

A seguinte *figura 4* mostra como tornar um equipamento acessível:

1. Na subárea **Equipamentos**, todos os equipamentos de rede e dispositivos USB disponíveis são listados em um inventário.
2. Por **Inventário**, um equipamento pode ser reservado. Assim, os dispositivos do equipamento são disponibilizados ao usuário.
3. Na subárea **Sistemas de trabalho**, um sistema de trabalho pode ser montado com todos os dispositivos necessários para a determinação.

Equipamento



Figura 4 Barra de funções do Equipamento

Equipamento – subáreas



Na subárea **Equipamentos**, os equipamentos podem ser reservados e liberados. Se um equipamento estiver reservado, seus dispositivos estarão disponíveis ao usuário.

Após a análise, o equipamento pode ser novamente liberado para que outros usuários possam acessá-lo.



Na subárea **Sistemas de trabalho**, os sistemas de trabalho podem ser montados a partir de um ou mais dispositivos. O mesmo dispositivo pode estar contido em vários sistemas de trabalho.

Para analisar amostras, um método acessa um sistema de trabalho e usa os dispositivos contidos nele. Um sistema de trabalho pode estar atribuído a vários métodos.

Aviso: os dispositivos no sistema de trabalho podem ser trocados de maneira simples, caso necessário. Assim, é possível executar análises em diferentes equipamentos sem ter que alterar os métodos.

2.1.6 Área de trabalho Calibração e avaliação

Na barra de funções **Calibração e avaliação**, podem ser desenvolvidos modelos espectroscópicos. Um modelo possibilita a análise de uma amostra com base no espectro registrado:

- **Modelo de quantificação:** previsão de um parâmetro de interesse quantitativo (p. ex., teor de água 5,1%)
- **Modelo de identificação:** identificação ou verificação de uma amostra (p. ex. frutose)
- **Modelo de qualificação:** qualificação de uma amostra (p. ex.: a amostra atende às especificações)

Calibração e avaliação – Visão geral



Na área de trabalho **Calibração e avaliação**, podem ser desenvolvidos modelos e hierarquias de modelos.

A barra de funções está dividida em subáreas.

Calibração e avaliação – Subáreas



Na subárea **Modelos de quantificação**, podem ser desenvolvidos modelos de quantificação.

Um modelo de quantificação descreve a dependência de um parâmetro de interesse quantitativo dos espectros registrados das amostras.



Na subárea **Correções da interceptação do eixo y / inclinação**, podem ser criadas correções da interceptação do eixo y / slope. Com isso, é possível corrigir erros sistêmicos na aplicação de um determinado modelo de quantificação. Erros sistêmicos podem ocorrer, p. ex., em alterações nas amostras ou no tratamento de amostra.



Na subárea **Modelos de identificação** podem ser desenvolvidos modelos para identificação e verificação de amostras.

Um modelo de identificação subdivide as amostras em diversos produtos (por ex. frutose, glucose e lactose) com base nos espectros registrados.



Na subárea **Modelos de qualificação**, podem ser desenvolvidos modelos para qualificação de amostras.

Um modelo de qualificação classifica amostras em positivas (utilizáveis) e negativas (inutilizáveis) com base nos espectros registrados.



Na subárea **Hierarquias de modelos**, podem ser desenvolvidas hierarquias de modelos:

- Se as amostras não puderem ser distinguidas por um único modelo de identificação, uma hierarquia de modelos pode vincular hierarquicamente vários modelos de identificação.
- Se a análise quantitativa for realizada em amostras identificadas, uma hierarquia de modelos poderá vincular modelos de quantificação a produtos.
- Se forem necessários resultados mais precisos para um modelo de quantificação, modelos de quantificação subordinados podem ser criados e vinculados. Cada um desses modelos subordinados é otimizado para uma parte da faixa de valores de referência do modelo de nível superior.

2.2 Introdução prática

A seguinte introdução oferece uma apresentação geral do OMNIS Software.

Barras de funções

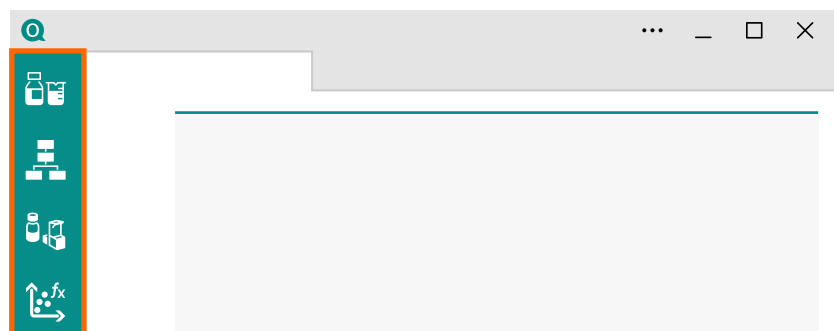
O OMNIS Software divide a interface de usuário em barras de funções. As barras de funções podem ter diferentes subáreas.

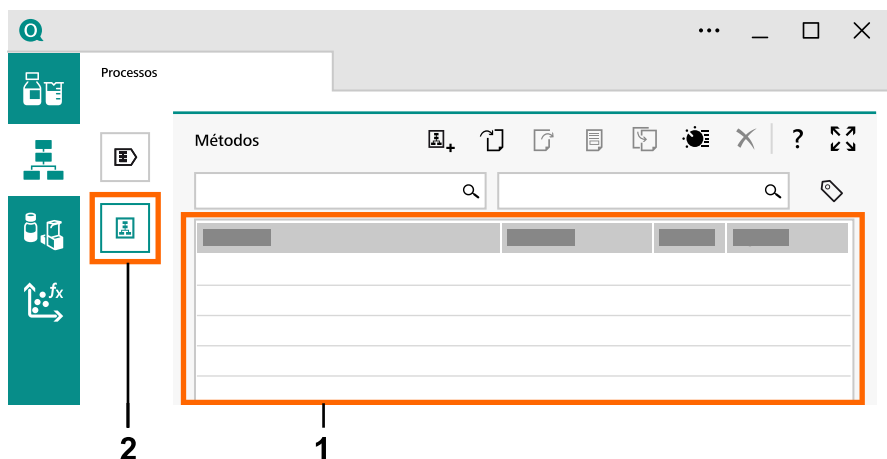
Neste tutorial, as subáreas são informadas por meio de um caminho do menu. Exemplo: a subárea **Métodos**, na barra de funções **Processos**, é informada com **Processos ► Métodos**.

A seguir, será mostrado como é aberta uma subárea de uma barra de funções como essa.

1 Abrir uma barra de funções

Clicar nos ícones no lado esquerdo da tela para alternar entre as diferentes barras de funções.





A subárea **Métodos** contém uma lista de visão geral com todos os métodos no banco de dados (1).

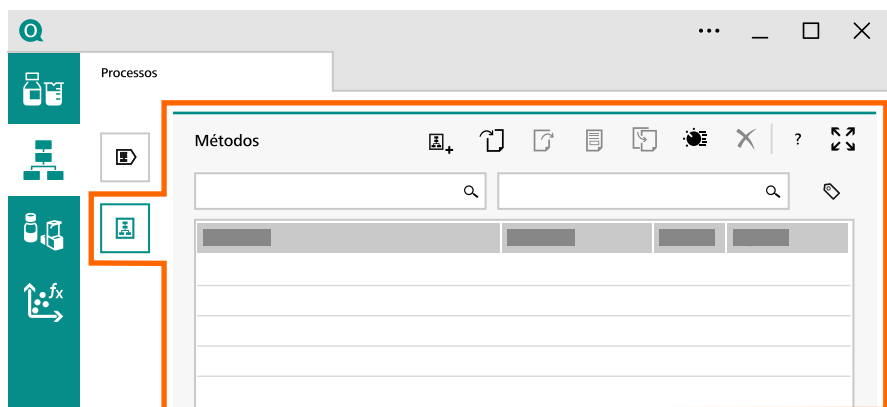
Guias

Como apresentado no passo 3 acima, a subárea de uma barra de funções pode conter uma lista de visão geral. Se uma entrada na lista for aberta ou uma nova entrada for criada, ela será apresentada em uma guia própria.

A seguir há uma descrição de como criar um novo método, por exemplo.

1 Abrir a subárea Métodos

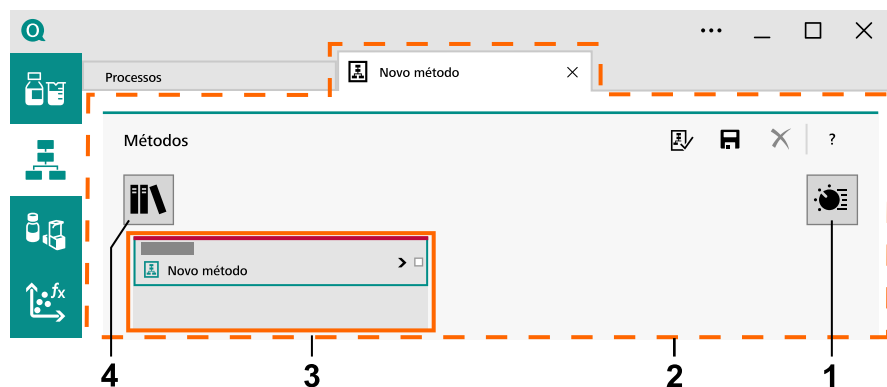
Abrir **Processos** ► **Métodos** como descrito acima.



2 Criar o método

- Clicar em .

É exibida uma nova guia com o nome *Novo método* (2) e o método pode ser criado nela (3).



Os ícones (1) e (4) dão acesso a outras janelas atualmente ocultas, como explicado a seguir.

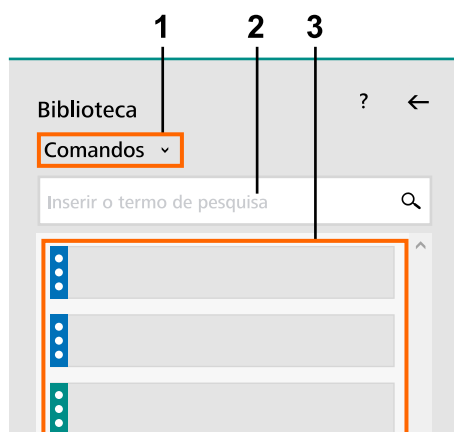
Janela

As janelas fazem parte de uma guia ou de uma área na guia. Algumas janelas são visíveis, outras estão ocultas e devem ser abertas por meio de um ícone.

1 Janela de biblioteca

Uma biblioteca contém elementos que podem ser inseridos em um processo.

- Abrir a janela **Biblioteca** ao clicar em .
- A janela de biblioteca é aberta:



A janela de biblioteca tem diferentes **Subáreas** que podem ser selecionadas a partir da lista de seleção (1), p. ex. **Biblioteca ► Comandos**.

O campo de busca (2) permite procurar elementos de uma subárea, p. ex., comandos (3).

-
- The diagram illustrates the process of adding a new command to the 'Comandos' menu. On the left, the 'Biblioteca' (Library) window shows the 'Comandos' (Commands) list. A blue arrow points from the 'CALC' command in this list to a new command slot in the 'Método' (Method) dialog box on the right. The 'Método' dialog box has a title bar with a red gradient and contains a 'Método' label, a small icon, and a large grey rectangular area for defining the command's behavior.

- Para fechar a janela de biblioteca, clicar em .

- Digitar um nome para o método:

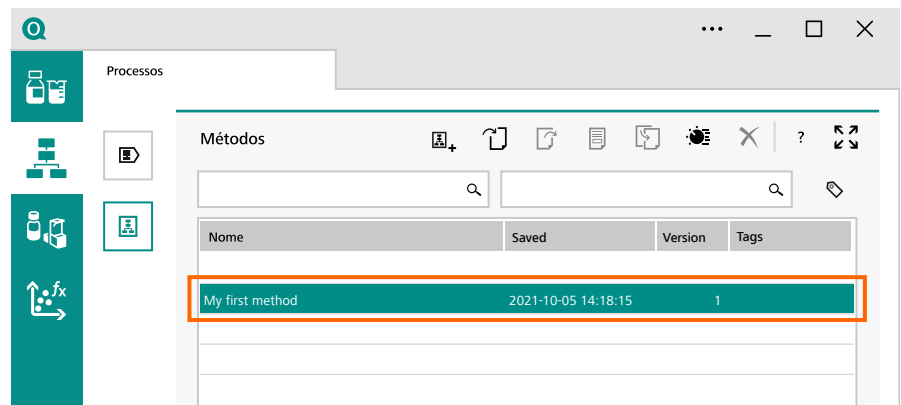
2 Salvar o método

- Salvar o método clicando em  ou pressionando as teclas [CTRL]+[S].

3 Abrir a lista de visão geral

- Fechar a guia e voltar para a guia da subárea (a guia mais à esquerda) **Processos** ► **Métodos**.

O método criado será exibido na lista de visão geral:



4 Excluir o método

- Selecionar o método criado.
- Excluir o método selecionado ao clicar em .
- Aviso: enquanto um método estiver aberto em uma guia, ele não poderá ser excluído.
- Aparece uma mensagem de confirmação.
- Verificar o nome do método a ser excluído.
- Confirmar com **Excluir**.

O método será excluído do banco de dados e da lista de visão geral.

2.3 Comandos OMNIS

Comandos executam uma determinada tarefa. Com o comando **MEAS SPEC**, p. ex., um espectro é registrado. O comando **MEAS SPEC** é utilizado em um método e pode acessar o sistema de trabalho atribuído ao método.

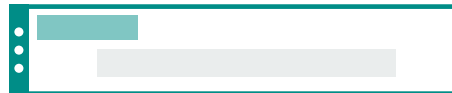
Alguns comandos também podem ser inseridos em procedimentos operacionais, p. ex. do comando **IF**.

Os comandos são exibidos em duas linhas. A primeira linha contém o nome do tipo de comando (p. ex., **MEAS SPEC**), a segunda linha contém um nome do comando específico do usuário.

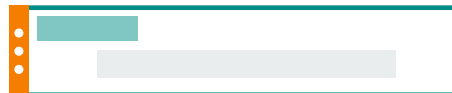
 É possível alterar os nomes do comando padrão (p. ex., Registrar espectro 1) para um nome mais específico. As referências cruzadas ao comando serão automaticamente adaptadas.

A borda esquerda do elemento de comando tem uma cor diferente dependendo do tipo de comando:

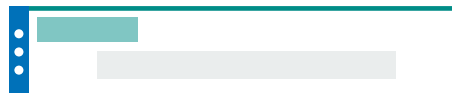
- Comandos de medição, comandos de calibração e comandos de titulação



- Comandos de estrutura que controlam o processo do método (p. ex., ramos e loops)



- Comandos de dosagem, comandos de automação e outros comandos



Variáveis de comando

Cada comando tem pelo menos uma variável de comando, que é criada na sequência do processo e pode ser usada em uma fórmula sob a denominação '**Nome da variável**.*Nome do comando*'.

A seguinte variável está disponível para todos os comandos:

Status do comando.

- **Inválido:** o comando (ainda) não foi iniciado.
- **0:** o comando ainda está em execução.
- **1:** o comando foi concluído corretamente.
- **2:** o comando não foi concluído corretamente. Ocorreu um erro ou um alerta.
- **3:** o comando foi ignorado por um comando **SKIP** ou manualmente nos **Dados online**.
- **4:** o comando foi parado por uma intervenção manual do usuário (parada ou parada de emergência), por um comando **STOP** ou devido a um erro em um comando que está sendo executado em paralelo.

Nome do comando	Descrição	Variável de comando gerada (seguida por <i>.nome do comando</i>)
PREP SPEC Para dispositivos do tipo Liquid Sample Presentation	Prepara a análise de amostras líquidas: ▪ Assegura que o suporte de amostra colocado seja adequado ao recipiente de amostra informado. Caso contrário, a determinação será cancelada. ▪ Assegura que um recipiente de amostra esteja colocado. Caso contrário, é exibida uma solicitação de colocação da amostra. ▪ Possibilita um controle de temperatura no recipiente de amostra ou no suporte de amostra (<i>ver capítulo 2.5, página 29</i>).	

Nome do comando	Descrição	Variável de comando gerada (seguida por <i>.nome do comando</i>)
MEAS REF SPEC	Registra um espectro de referência no dispositivo atribuído. O espectro de referência será salvo no equipamento. Há 1 espectro de referência por dispositivo. A cada execução do comando MEAS REF SPEC o espectro de referência anterior será sobrescrito. O espectro de referência salvo será utilizado por todos os comandos MEAS SPEC que forem executados no respectivo dispositivo.	▪ Date.Result Data na qual o espectro de referência foi registrado. Adicionalmente para dispositivos do tipo Liquid Sample Presentation: ▪ TemperatureControlMode.Result Local do controle de temperatura – Inactive: sem controle de temperatura. – Sample holder: a temperatura foi controlada no suporte de amostra. – Sample vessel: a temperatura foi controlada no recipiente de amostra. ▪ CurrentTemperature.Result Temperatura atual durante a execução do comando. Unidade: °C
MEAS SPEC	Registra um espectro de uma amostra no dispositivo atribuído. Com base no espectro e no espectro de referência salvo no equipamento para o dispositivo correspondente, é calculado o Espectro de absorção da amostra.	Para dispositivos do tipo Liquid Sample Presentation: ▪ TemperatureControlMode.Result Local do controle de temperatura – Inactive: sem controle de temperatura. – Sample holder: a temperatura foi controlada no suporte de amostra. – Sample vessel: a temperatura foi controlada no recipiente de amostra. ▪ CurrentTemperature.Result Temperatura atual durante a execução do comando. Unidade: °C

Nome do comando	Descrição	Variável de comando gerada (seguida por <i>.nome do comando</i>)
VESSEL REMOVAL Para dispositivos do tipo Liquid Sample Presentation	- Pode garantir a remoção do recipiente de amostra. A sequência do processo é interrompida até o recipiente de amostra ser removido. Isso possibilita uma sequência controlada nas determinações em série. - Se a temperatura for controlada no recipiente de amostra, o sensor de temperatura é afastado do recipiente de amostra. Assim que aparecer a solicitação para retirada do recipiente de amostra, o recipiente de amostra poderá ser retirado sem causar danos ao sensor de temperatura. - O controle de temperatura pode ser desativado ou continuado no suporte de amostra.	

2.3.2 Previsão

PREDICT – Quantificação

O comando **PREDICT** aplica um modelo a um espectro de absorção registrado com o comando **MEAS SPEC**.

O modelo de quantificação fornece uma previsão de um parâmetro de interesse quantitativo. Opcionalmente, pode ser utilizada uma correção da interceptação do eixo y / slope.

Variável de comando gerada (seguida por *.nome do comando*)

- **Predicted.Quantification.Result**
Resultado previsto para o parâmetro de interesse.
- **Uncorrected.Quantification.Result**
Valor previsto para o parâmetro de interesse sem aplicação da correção da interceptação do eixo y / slope.
- **Unit.Quantification.Result**
Unidade do parâmetro de interesse.
- **IsOutlier.OutlierDetection.Result**
Avaliação que informa se o espectro é um outlier.
0: o espectro **não** é considerado um outlier.
1: o espectro é considerado um outlier. (Hotellings T^2 ou resíduos Q).
- **HotellingsT2.OutlierDetection.Result**
Hotelling T^2 do espectro.

PREDICT – Qualificação

O comando **PREDICT** aplica um modelo a um espectro de absorção registrado com o comando **MEAS SPEC**.

Um modelo de qualificação qualifica uma amostra como uma amostra positiva (utilizável).

Variável de comando gerada (seguida por *.nome do comando*)

- **Status.Qualification.Result**

- **1**: Qualificação bem-sucedida.
- **0**: Qualificação falhou.

PREDICT – Hierarquia de modelos

O comando **PREDICT** aplica uma hierarquia de modelos a um espectro de absorção registrado com o comando **MEAS SPEC**.

Dependendo do uso, a hierarquia de modelos fornece uma identificação de uma amostra desconhecida (p. ex., frutose), uma verificação do pertencimento de produto de uma amostra ou uma quantificação dos parâmetros de interesse de uma amostra.

Variável de comando gerada (seguida por *.nome do comando*)

- **Hierarquia de modelos (identificação)**

- **Product.Identification.Result**

O produto determinado ou o grupo de produtos determinados da amostra identificada.

Se a identificação falhar, não é exibido um resultado.

- **Status.Identification.Result**

Identified: identificação concluída com sucesso. Um produto ou um grupo de produto pôde ser identificado.

Ambiguous: a identificação falhou. Os valores de probabilidade de vários produtos ultrapassam o limiar de probabilidade.

Unidentified: a identificação falhou. Nenhum valor de probabilidade de um produto ultrapassa o limiar de probabilidade.

- **Probability.Identification.Result**

de 0,01 até 100: a probabilidade em percentual expressa a plausibilidade da amostra corresponder ao produto ou ao grupo de produto.

Inválido: a identificação falhou.

- Hierarquia de modelos (verificação)

- **Status.Verification.Result**

0: a verificação falhou.

1: verificação concluída com sucesso.

2.3.4 Calibração do comprimento de onda

Nome do comando	Descrição	Variável de comando gerada (seguida por <i>.nome do comando</i>)
CAL WL	Executa uma calibração do comprimento de onda do equipamento. A calibração do comprimento de onda normaliza os valores de comprimento de onda, ou seja, o eixo x dos espectros.	▪ Date.Result Data na qual a calibração do comprimento de onda foi realizada.
VAL WL	Valida a calibração do comprimento de onda.	▪ Date.Result Data na qual a calibração do comprimento de onda foi validada. ▪ OverallStatus.Result 1: a validação foi bem-sucedida. 2: a validação falhou. ▪ ExpectedWavelength.Peak{X} Comprimento de onda esperado (em nm) do pico X. ▪ MeasuredWavelength.Peak{X} Comprimento de onda medido (em nm) do pico X. ▪ ExpectedBandwidth.Peak{X} Largura de banda esperada (em nm) do pico X. ▪ MeasuredBandwidth.Peak{X} Largura de banda medida (em nm) do pico X. ▪ Index.Peak{X} Número de pico do pico X. Exemplo: 'Index.Peak{2}' informa o Resultado 2. Se não existir um pico para X, as variáveis de comando acima informam o resultado: <i>Inválido</i>

2.3.5 Testes de desempenho do equipamento

Nome do comando	Descrição	Variável de comando gerada (seguida por <i>.nome do comando</i>)
TEST WL	O teste de comprimento de onda controla a exatidão do comprimento de onda e a precisão do comprimento de onda. Interno (obrigatório): o padrão de comprimento de onda interno será usado. Externo (opcional): um padrão de comprimento de onda externo será usado.	▪ Date.Result Data em que o teste de comprimento de onda foi realizado. ▪ OverallStatus.Result 1: o teste foi bem-sucedido. 2: o teste falhou.
TEST NOISE	O teste de ruído verifica o ruído do sinal. Interno (obrigatório): é usado o caminho de referência da apresentação de amostras utilizada. Teste Low-Flux e teste High-Flux (opcional): são utilizados padrões de referência externos.	▪ Date.Result Data na qual o ruído do sinal foi testado. ▪ OverallStatus.Result 1: o teste foi bem-sucedido. 2: o teste falhou.
TEST PHOTOMETRIC LINEARITY	O teste externo opcional verifica a linearidade fotométrica usando padrões de referência externos.	▪ Date.Result Momento em que a linearidade fotométrica foi testada. ▪ OverallStatus.Result 1: o teste foi bem-sucedido. 2: o teste falhou.

2.4 Reservar e liberar os equipamentos

Cada equipamento específico só pode ser utilizado por um sistema OMNIS.

O equipamento precisa ser reservado antes de poder ser utilizado. Assim que o equipamento estiver reservado, nenhum outro sistema OMNIS poderá acessá-lo.

Reservar o equipamento

1 Procurar equipamentos disponíveis

- Abrir **Equipamento** ► **Equipamentos**.
- Abrir a janela **Inventário** ao clicar em .

3 Preparar o aparelho

Antes do equipamento poder registrar espectros, é necessário fazer as seguintes preparações:

- Um **Sistema de trabalho** deve ser configurado.

A seguir, as seguintes tarefas visam assegurar que os espectros sejam comparáveis:

- A **Calibração do comprimento de onda** calibra o eixo x dos espectros.
- Os **Testes de desempenho do equipamento** asseguram que o desempenho do equipamento corresponda aos requisitos. Os testes de desempenho do equipamento devem ser executados regularmente (*ver capítulo 10.1, página 170*).

 Além disso, os valores de absorbância no eixo y dos espectros devem ser padronizados. Para tal, antes de registrar os espectros é usado um comando **MEAS REF SPEC** para cada.

 Um esclarecimento da sequência no OMNIS Software pode ser encontrado no anexo (*ver "Preparar o aparelho", página 190*).

3.1 Criar um sistema de trabalho

Pré-requisito:

- O espectrômetro está reservado (*ver "Reservar e liberar os equipamentos", página 27*).

1 Criar um sistema de trabalho

- Em **Equipamento** ► **Sistemas de trabalho**, clicar em .

Uma nova guia é aberta.

2 Nomear o sistema de trabalho

- Selecionar a subárea **Novo sistema de trabalho**.
A moldura da subárea é exibida em verde.
- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades** ► **Geral**, inserir um nome adequado no campo **Nome**.

- i** Equipamentos do tipo **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** disponibilizam 2 dispositivos. A calibração do comprimento de onda e a validação devem ser executadas separadamente para ambos os dispositivos.

3.2.1 Preparar a calibração do comprimento de onda

- i** Na primeira utilização do OMNIS Software, ler a introdução ([ver "Introdução prática", página 11](#)) antes de prosseguir.

Seguir as instruções informadas para criar um método com os comandos **CAL WL** e **VAL WL**. A seguir, criar um procedimento operacional, um perfil da amostra e uma lista de amostras. Com isso, a calibração do comprimento de onda pode ser iniciada da mesma forma que uma determinação da amostra.

Criar o método

1 Criar o método

- Em **Processos** ► **Métodos**, clicar em .

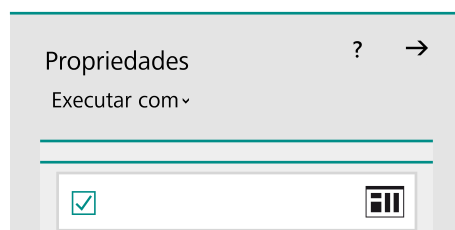
É aberta uma guia com o novo método criado e o título **Novo método**.

2 Nomear o método

- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades** ► **Geral**, inserir no campo **Nome** o seguinte nome: **Wavelength Cal/Val**.

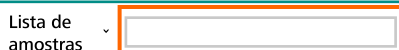
3 Atribuir a sistema de trabalho ao método

- Em **Propriedades** ► **Executar com**, selecionar o sistema de trabalho a ser usado.



- i** Utilizar o mesmo sistema de trabalho para todos os métodos neste documento.

Confirmar com **[Enter]**.



3 Salvar a lista de amostras

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

 As amostras serão adicionadas posteriormente.

3.2.2 Iniciar a calibração do comprimento de onda

 Observar os intervalos de execução ([ver capítulo 10.2, página 171](#)).

 A Metrohm recomenda aguardar 1 hora após ligar o equipamento antes de iniciar uma calibração do comprimento de onda.

Iniciar a calibração do comprimento de onda

Pré-requisito:

A calibração do comprimento de onda está preparada ([ver "Preparar a calibração do comprimento de onda", página 33](#)).

1 Reservar o equipamento

Reservar o espectrômetro ([ver "Reservar e liberar os equipamentos", página 27](#)).

2 Abrir a lista de amostras 'Wavelength Cal/Val'

- Abrir a barra de funções **Amostras**.
- Se a lista de amostras **Wavelength Cal/Val** tiver sido fechada, ir até a guia **Amostras**, abrir a subárea **Listas de amostras** e clicar duas vezes na lista de amostras **Wavelength Cal/Val**.

3 Selecionar o perfil da amostra 'Wavelength Cal/Val'

- Na lista de seleção à esquerda do ícone , selecionar o perfil da amostra **Wavelength Cal/Val**.



 A seguir, as amostras adicionadas serão criadas conforme as especificações no perfil da amostra selecionado.

Nome da amostra	N.º	Nome da subamostra	
Amostra 1	1	Subamostra 1	

Conforme o perfil da amostra, a nova amostra contém 1 subamostra que utiliza o procedimento operacional **Teste de desempenho do equipamento**.

- O nome da amostra e o nome da subamostra podem ser editados, se necessário.
- Salvar a lista de amostras clicando em  ou pressionando as teclas **[CTRL]+[S]**.

5 Executar o teste de desempenho do equipamento

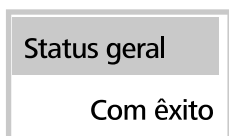
- Selecione a amostra que realizará os testes de desempenho do equipamento.
- Iniciar os testes clicando em .

Após a conclusão do teste de desempenho do equipamento, o status da subamostra é exibido como .

6 Verificar o resultado

- Na área inferior direita, abrir **Resultados ► Dados originais**.

Os resultados do teste de comprimento de onda e do teste de ruído serão exibidos. Em ambos os testes, verificar o status geral:



 **Advertência de status:** se um teste de desempenho do equipamento falhar, o ícone de subamostras na lista de amostras será marcado em vermelho:



-  Informações sobre os testes de desempenho do equipamento podem ser visualizadas nas propriedades do equipamento:
- Sob **Equipamento ► Equipamentos**, selecionar o equipamento reservado.
 - Com um clique em , abrir a janela **Propriedades**.
 - **Dados específicos ► Dados da calibração e dados de teste**

4 Preparar o desenvolvimento de modelo

Com dispositivos do tipo **Liquid Sample Presentation**, podem ser desenvolvidos modelos para amostras de líquidos. Com dispositivos do tipo **Solid Sample Presentation**, podem ser desenvolvidos modelos para amostras de sólidos.

O desenvolvimento de modelos começa com a coleta de amostras de calibração e de amostras de validação.

Coletar as amostras

Coletar cuidadosamente as amostras para o desenvolvimento de um modelo:

- As amostras devem incluir variações de amostras típicas esperadas futuramente e também variações sazonais ou variações em função das condições do ambiente.
- As amostras devem ser distribuídas uniformemente por toda a gama de variações.
- Coletar preferencialmente conjuntos de amostras separados para a calibração e a validação.
- Todas as amostras devem ser manuseadas da mesma forma.

Quantificação

A Metrohm recomenda um mínimo de aproximadamente 50 amostras ou, para um primeiro modelo, aproximadamente 20 amostras. Quanto mais variações nas condições, componentes químicos ou tamanhos das partículas forem incluídos, maior será a quantidade de amostras necessárias.

1. Para cada amostra será registrado um espectro.
2. Para cada amostra, o valor de referência para o parâmetro de interesse será medido pelo método de referência, p. ex., por titulação. Caso existam vários valores de referência por amostra para um determinado parâmetro de interesse, o valor médio aritmético dos valores de referência deverá ser calculado para cada amostra. O valor médio é utilizado como valor de referência para a respectiva amostra. Cada valor médio deve ser formado a partir do mesmo número de valores de referência. Nesses casos, as figuras de mérito são expressas em relação a uma determinada quantidade de valores de referência.

Na medição de referência, se a amostra não se alterar ou for destruída, as medições também podem ser executadas na ordem inversa.

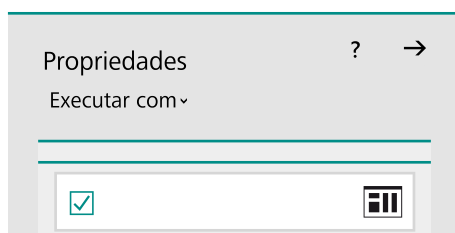
Um sistema de trabalho adequado foi criado (ver "Criar um sistema de trabalho", página 31).

1 Criar e nomear o método

- Em **Processos** ► **Métodos**, clicar em .
- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades** ► **Geral**, inserir um nome adequado no campo **Nome**.

2 Atribuir o sistema de trabalho

- Em **Propriedades** ► **Executar com**, selecionar o sistema de trabalho a ser usado:
 - Para amostras de líquidos, selecionar um sistema de trabalho que contenha um dispositivo do tipo **Liquid Sample Presentation**.
 - Para amostras de sólidos, selecionar um sistema de trabalho que contenha um dispositivo do tipo **Solid Sample Presentation**.



3 Inserir os comandos

- Abrir a janela **Biblioteca** ao clicar em .
- Em **Biblioteca** ► **Comandos**, selecionar os seguintes comandos e inserir no método ao arrastar e soltar:
 - Somente para apresentação de amostras de líquidos: **PREP SPEC** prepara a análise de amostras de líquidos.
 - **MEAS REF SPEC** esboça o espectro de referência.
 - **MEAS SPEC** registra o espectro de uma amostra.
 - Somente para amostras de líquidos: **VESSEL REMOVAL** serve para controlar a retirada do recipiente da amostra do suporte de amostra da apresentação de amostras de líquidos.

Observar a ordem correta dos comandos:

- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
Abrir a subárea **Parâmetros**.
 - Ativar a opção **Garantir a remoção do recipiente de amostra**. Isso interrompe a sequência do processo e solicita que o usuário retire o recipiente de amostra do suporte de amostra. Assim que a amostra for removida, a sequência do processo será continuada.
 - Para o parâmetro **Controle de temperatura Suporte de amostra**, ativar a opção **Continuar**. Isso continua um controle de temperatura em execução no suporte de amostra, independentemente do local onde o controle de temperatura era feito até o momento.

7 Salvar o método

- Validar o método ao clicar em .
- Salvar o método clicando em  ou pressionando as teclas [CTRL]+[S].

Elaborar o procedimento operacional

1 Criar o procedimento operacional

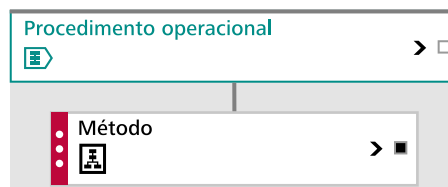
- Em **Processos** ► **Procedimentos operacionais**, clicar em .

2 Nomear o procedimento operacional

- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades** ► **Geral**, inserir um nome adequado no campo **Nome**.

3 Inserir o método

- Abrir a janela **Biblioteca** ao clicar em .
- Inserir o método criado ao arrastar e soltar **Biblioteca** ► **Métodos** no procedimento operacional.



- Aviso:** se o campo **Nome do campo, longo** estiver vazio, será utilizado nos relatórios o nome no campo **Nome do campo, curto**.

Dados da amostra

Nome do campo curto

Nome

Nome do campo longo

Inserir nome

Tipo de campo de introdução

Número

Usar como

Campo de introdução

Propriedades campo de introdução

Valor padrão

Valor mínimo

-10000000000

Valor máximo

10000000000

Unidade

☒ Campo editável
☒ Permitir campo vazio
☐ Entrada obrigatória

- Na seção **Propriedades campo de introdução** selecionar os nomes dos produtos de um modelo ou adicionar manualmente:
 - Selecionar itens:** Clicar em **Selecionar os itens**. Selecionar um modelo de identificação ou hierarquia de modelos. Com um clique em **Selecionar**, assumir o nome do produto do modelo.
 - Adicionar itens manualmente:** Em **Elementos da lista**, inserir os nomes dos produtos e adicionar cada nome de produto inserido clicando em **+**.
- Se for desejada a entrada de texto livre além dos elementos predefinidos da lista, ativar a caixa de controle **Permitir o texto livre**.
- Se necessário, efetuar outras configurações.

Escrever os nomes dos produtos no campo de texto

Dados da amostra

Nome do campo curto

Nome do campo longo

Inserir nome

Tipo de campo de introdução

Texto

Usar como

Produto

Propriedades campo de introdução

Valor padrão

☒ Campo editável

☒ Permitir campo vazio

☐ Entrada obrigatória

Selecionar os nomes de produtos da lista

Dados da amostra

Nome do campo curto

Nome do campo longo

Inserir nome

Tipo de campo de introdução

Lista de seleção

Usar como

Produto

Propriedades campo de introdução

Selecionar os itens

Elementos da lista

Inserir nome

Produto A

Produto B

Produto C

Valor padrão

Vazio

☐ Permitir o texto livre

☒ Permitir campo vazio

☐ Entrada obrigatória

5 Definir o procedimento operacional e o número de subamostras

- Na área **Procedimentos operacionais / Subamostras**, selecionar o procedimento operacional criado.

- Clicar em  para adicionar uma nova amostra à lista de amostras. Adicionar a quantidade necessária de amostras. Cada linha da lista de amostras contém uma amostra identificada com o ícone . À direita delas seguem os dados da amostra. E, depois disso, segue a subamostra identificada com  e os dados da subamostra. As amostras serão criadas conforme as especificações no perfil da amostra selecionado:
 - Quantificação: com o campo de introdução definido para os parâmetros de referência e sua unidade, contanto que tenha sido definida uma unidade.
 - Identificação e verificação: com o campo de introdução definido para o parâmetro de produto.
 - Cada amostra contém 1 subamostra que utiliza o procedimento operacional definido.

	Nome da amostra	Nome dos parâmetros de referência		N.º	Nome da subamostra	Procedimento operacional
	Amostra 1	%		1	Subamostra 1	
	Amostra 2	%		2	Subamostra 2	
	Amostra 3	%		3	Subamostra 3	

Figura 5 Lista de amostras (exemplo para quantificação)

- O nome da amostra e o nome da subamostra podem ser editados, se necessário.
- Se os valores de referência (quantificação) ou os nomes de produto (identificação e verificação) já forem conhecidos, eles devem ser inseridos nos respectivos campos.

3 Salvar a lista de amostras

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Se forem necessárias várias listas de amostras (por exemplo, para diferentes produtos):

- Em **Amostras** ► **Listas de amostras**, selecionar a lista de amostras já criada.
- Duplicar a lista de amostras selecionada ao clicar em .
- Abrir a lista de amostras duplicada e fazer os ajustes necessários.

 Os valores de referência ou nomes de produto também podem ser inseridos de outras formas na lista de amostras (consultar [Metrohm Knowledge Base](#)).

- Manualmente durante a determinação, p. ex., em uma janela de consulta.
- Em uma quantificação, também é possível inserir automaticamente a partir de uma determinação anterior ou seguinte com o método de referência.

As listas de amostras e os processos estão preparados para o registro dos espectros (*ver "Registrar os espectros", página 62*).

4.2 Registrar os espectros



ATENÇÃO

Substâncias inflamáveis sobre superfície quente

Risco de incêndio e queimaduras ao derramar substâncias inflamáveis. Amostras, frascos de amostra, suportes de amostra e apresentações de amostra podem atingir temperaturas de até 85 °C.

- Evitar fontes de ignição.
- Utilizar proteção de aterramento.
- Utilizar um dispositivo de sucção.
- Eliminar imediatamente líquidos e sólidos derramados.



CUIDADO

Aumento do volume da amostra devido ao aquecimento

Ferimentos e riscos à saúde causados por transbordamento, quebra do recipiente da amostra ou pela tampa lançada com violência.

- Encher o recipiente de amostra somente até a altura mínima de 2 cm. O líquido pode aumentar de volume no espaço restante. Alternativamente, usar tampas com perfurações capilares.
- Pressionar suavemente a tampa para que o recipiente de amostra não seja danificado.



CUIDADO

Frasco de amostra quente

Queimaduras na pele ao entrar em contato com superfícies quentes ou líquidos quentes. Amostras, frascos de amostra, suportes de amostra e apresentações de amostra podem atingir temperaturas de até 85 °C.

- Usar equipamentos de proteção pessoal e luvas resistentes a altas temperaturas.
- Eliminar imediatamente líquidos e sólidos derramados.

Registrar os espectros para o desenvolvimento de um modelo

Pré-requisitos:

- O registro do espectro está preparado (*ver "Preparar o registro do espectro", página 50*).
- O espectrômetro está reservado (*ver "Reservar e liberar os equipamentos", página 27*).
- O suporte de amostra correto foi colocado. O suporte de amostra deve ser adequado ao recipiente de amostra utilizado.

1 Abrir a lista de amostras

- Abrir a barra de funções **Amostras**.
- Se a lista de amostras tiver sido fechada, abrir a lista de amostras em **Amostras ► Listas de amostras** ao clicar duas vezes.

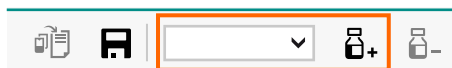
 **Quantificação:** os campos de introdução da amostra para o parâmetro de referência ainda podem estar vazios neste momento. Os valores de referência podem ser determinados e inseridos após o registro do espectro.

Identificação e verificação: os nomes dos produtos podem ser inseridos antes ou depois do registro do espectro.

2 Adicionar outras amostras (opcional)

Se forem necessárias outras amostras:

- Na lista de seleção à esquerda do ícone , selecionar o perfil da amostra criado.



A seguir, as amostras adicionadas serão criadas conforme as especificações no perfil da amostra selecionado.

- Ao clicar em , adicionar novas amostras à lista de amostras.
- O nome da amostra e o nome da subamostra podem ser editados, se necessário.
- Com um clique em , salvar a lista de amostras.

3 Executar as determinações

AVISO

Danos no sensor de temperatura durante o controle de temperatura no recipiente de amostra

Se o recipiente de amostra for retirado enquanto o sensor estiver em contato direto com o recipiente de amostra, o sensor pode ser danificado.

- Só retirar o recipiente de amostra quando a medição estiver terminada e o sensor de temperatura estiver afastado do recipiente de amostra.
 - Selecionar a subamostra a ser analisada de uma das seguintes formas:
 - Selecionar a subamostra ao clicar no ícone .
 - Para fins de análise, basta selecionar uma única célula da subamostra.
 - Preparar a amostra física correspondente.
Colocar o recipiente de amostra no suporte de amostra.
 - Iniciar a determinação ao clicar em . Um número no botão informa quantas subamostras serão executadas.
 - O procedimento operacional atribuído à subamostra será iniciado. Seguir eventuais instruções na área **Curvas e dados ► Dados online**. Se a temperatura no recipiente de amostra for controlada, retirar o recipiente de amostra somente depois da solicitação.
- Após a conclusão bem-sucedida da análise, o status da subamostra é exibido como .
- Executar as determinações para todas as outras amostras da mesma forma.
-  A temperatura alvo pode ser no máx. 5,0 K abaixo da temperatura ambiente.

-  Se os processos forem adequados para determinações em série, podem ser selecionadas ao mesmo tempo várias subamostras. Alternativamente,  inicia todas as subamostras executáveis em uma lista de amostras.
- Amostras de líquidos: o comando **VESSEL REMOVAL** possibilita determinações em série.
 - Amostras de sólidos: para a execução de determinações em série, devem ser previstas ações do usuário (por exemplo, com o comando **WAIT**).

Verificação visual dos espectros

Uma verificação visual dos espectros possibilita a identificação de faixas de comprimento de onda com ruídos e possíveis medições incorretas.

Pré-requisito:

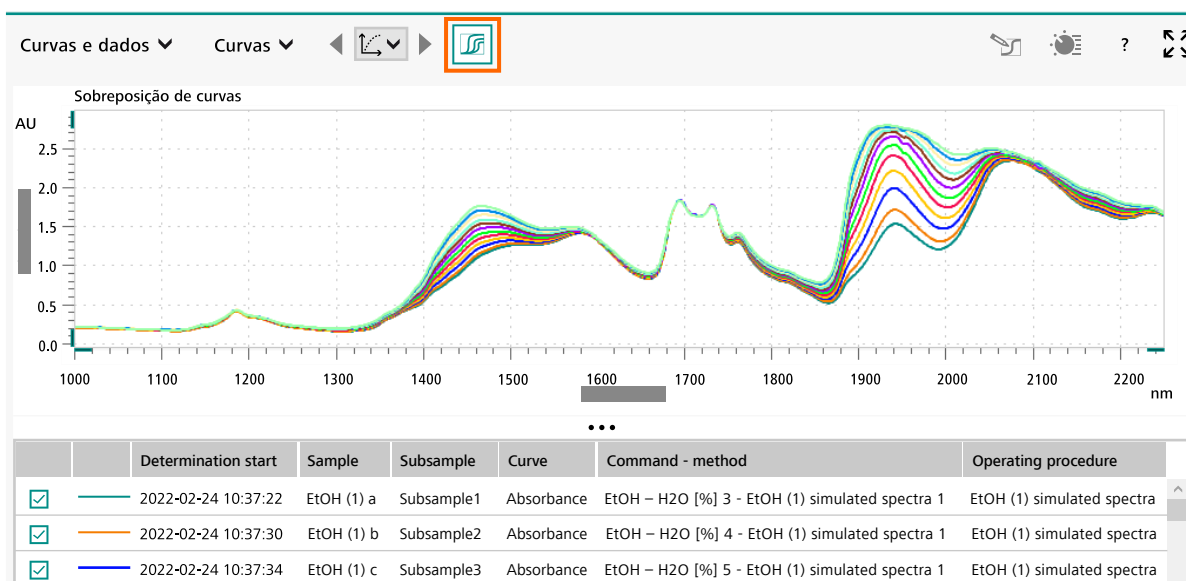
A análise das subamostras foi concluída com sucesso.

1 Abrir a subárea 'Curvas'

- Na guia da lista de amostras, abrir **Curvas e dados** ► **Curvas**.

2 Exibir e verificar os espectros

- Exibir o espectro individual:
 - Na lista de amostras, selecionar a subamostra correspondente (marcada com o ícone .
- Exibir vários espectros:
 - Ativar a sobreposição de curvas clicando em .
 - Selecionar várias subamostras na lista de amostras usando as teclas **[CTRL]** ou **[SHIFT]**.
- Verificar os espectros (*ver capítulo 11.3, página 174*).



Valores de referência (quantificação) e nomes de produto (identificação e verificação)

1 Método de referência (quantificação)

- Medir os valores de referência das amostras com um método de referência adequado, p. ex., com titulação.

2 Inserir os valores de referência ou nomes de produto

- Inserir os valores de referência ou nomes de produto nos campos correspondentes da lista de amostras.

Adicionar os dados da amostra à lista de amostras

Se ainda não houver dados da amostra disponíveis para o parâmetro de referência ou o parâmetro de produto no início da medição, é possível adicionar um campo de introdução da seguinte forma:

- Ao clicar em , selecionar as amostras que devem ser adicionadas para um campo de introdução. Para selecionar todas as amostras, clicar em .
- Clicar duas vezes com o botão direito sobre a amostra selecionada para abrir o menu de contexto e selecionar **Adicionar os dados da amostra**.
- Adicionar dados da amostra para o parâmetro de referência ou o parâmetro de produto (ver "*Preparar o registro do espectro*", página 50).

3 Salvar a lista de amostras

- Clicar em ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Se várias listas de amostras tiverem sido preparadas, editar todas as listas de amostras da maneira descrita anteriormente.

Quantificação: para desenvolver um modelo de quantificação, continuar com *Modelo de quantificação, capítulo 5, página 67..*

Identificação, verificação: para desenvolver um modelo de identificação, continuar com *Modelo de identificação, capítulo 6, página 105.*

Qualificação: para desenvolver um modelo de qualificação, continuar com *Modelo de qualificação, capítulo 7, página 124.*

5 Modelo de quantificação

5.1 Criar o modelo de quantificação

i Um esclarecimento da sequência no OMNIS Software pode ser encontrado no anexo (*ver "Desenvolvimento de um modelo", página 193*).

i **Vários parâmetros de interesse**

Para prever mais de um parâmetro de interesse para cada amostra, criar um modelo separado para cada parâmetro (*ver "Diversos parâmetros de interesse (quantificação)", página 161*).

Criar o modelo de quantificação

Pré-requisito:

- Foram registrados espectros para o desenvolvimento do modelo (*ver "Registrar os espectros", página 62*).

1 Criar e nomear modelo de quantificação

- Em **Calibração e avaliação** ► **Modelos de quantificação**, clicar em . Um novo modelo de quantificação é exibido em uma nova guia.
- Inserir um nome adequado no campo de introdução **Nome do modelo de quantificação**.

2 Selecionar amostras e parâmetros de referência

- Exibir todas as listas de amostras ao clicar em **Listas de amostras**.
- Selecionar todas as listas de amostras que foram preparadas para o desenvolvimento do modelo.

Criar modelo de quantificação

Nome do modelo de quantificação

Nome do aluno de quantificação

Listas de amostras

Resultados de busca

Importação XDS/DS

Nome	Salvo	Parâmetro de referência	Unidade
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		

 As amostras também podem ser selecionadas por um resultado de busca.

Se necessário, também podem ser importadas amostras de equipamentos XDS e DS (*ver "Troca de XDS/DS Analyzer (quantificação)", página 186*).

 A seleção de amostras pode ser adaptada posteriormente.

- A lista **Parâmetros de referência** exibe os dados da amostra adequados como parâmetros de referência. Selecionar o parâmetro de referência desenvolvido para o modelo. Se o parâmetro de referência tiver diferentes denominações, selecionar todas as denominações.
- Clicar em **[Continuar]**.

3 Definir os parâmetros de referência

- A lista **Parâmetros de referência** exibe todas as denominações que foram selecionadas para o parâmetro de referência no passo anterior.
Selecionar todas as denominações necessárias nesta lista.

Definir parâmetro de referência

Nome do modelo de quantificação

Nome do modelo de quantização

Parâmetro de referência	Unidade
H2O	%

Nome do parâmetro de referência

Nome do parâmetro de referência	
H2O	

Unidade do parâmetro de referência

%

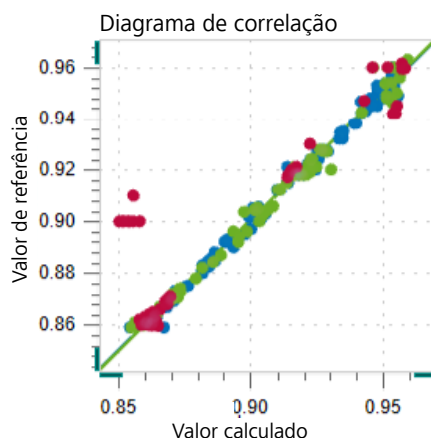
Casas decimais

2

- No campo **Nome dos parâmetros de referência**, inserir o nome que o modelo deve usar.
- Selecionar **Unidade dos parâmetros de referência** que o modelo deve usar.

3 Verificar o diagrama de correlação

Ao clicar em um único modelo, o respectivo Diagrama de correlação é exibido.



O **Diagrama de correlação** possibilita estimar resumidamente o desempenho de um modelo. O diagrama representa a correlação entre os valores calculados com o modelo (eixo x) e os valores de referência (eixo y).

Cada ponto representa uma amostra:

- Os pontos azuis representam as amostras no conjunto de dados de calibração.
- Os pontos verdes representam as amostras no conjunto de dados de validação (se disponível).
- Os pontos vermelhos representam as amostras no conjunto de dados de outliers (se disponível).

Uma reta de regressão é traçada pelos pontos azuis e verdes, de modo que a relação entre os valores de referência e os valores calculados seja descrita da melhor maneira possível.

Avaliar diagrama de correlação

- O slope da reta de regressão azul e verde deve ser o mais próximo possível de 1, a interceptação y deve ser o mais próxima possível de 0.
- Os pontos azuis e verdes devem estar o mais próximos possível da respectiva reta de regressão.



A reta de regressão e os pontos podem se sobrepor.

Apresentação de espectros

Nos 3 passos do processo, os espectros individuais são exibidos na forma de curvas, pontos ou linhas de tabela.

Os espectros selecionados são destacados simultaneamente em todas as apresentações e passos do processo.

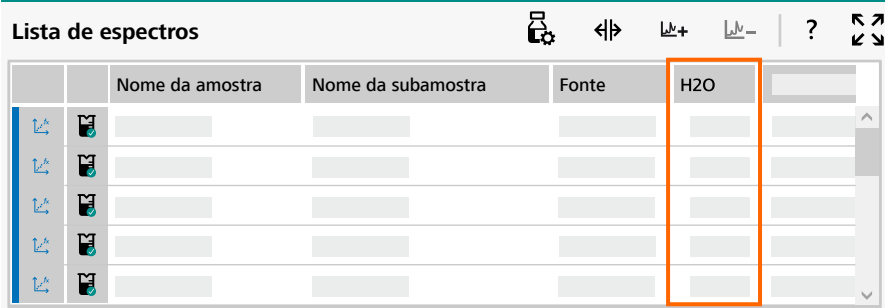
Tabelas e diagramas

O manuseio de tabelas e diagramas é descrito no anexo:

- Manuseio de tabelas (*ver capítulo 11.2, página 173*)
- Manuseio de diagramas (*ver capítulo 11.3, página 174*)

Passo do processo Selecionar amostras

A área **Lista de espectros** exibe os espectros das amostras selecionadas:



	Nome da amostra	Nome da subamostra	Fonte	H2O

Um campo de introdução exibe cada um dos respectivos valores de referência (marcados em laranja na imagem).

O passo do processo **Selecionar amostras** permite fazer o seguinte:

- **Adaptar a seleção de amostras**

Adicionar mais espectros ou excluir espectros.

- **Dividir o conjunto de dados**

Divisão do conjunto de dados automática ou manual:

- **Conjunto de dados de calibração:** o modelo será calculado novamente com os espectros e valores de referência do conjunto de dados de calibração.
- **Conjunto de dados de validação:** os espectros e valores de referência do conjunto de dados de validação servem exclusivamente para a validação do modelo.
- **Conjunto de dados de outliers:** o conjunto de dados de outliers não influencia o modelo ou a validação dele. Os outliers são apresentados somente por motivos informativos em alguns diagramas.



Um modelo pode ser desenvolvido sem conjunto de dados de validação, p. ex., quando estiver disponível apenas uma quantidade limitada de amostras em uma primeira fase.

Alternar para o desenvolvimento de modelo automático

As outras configurações nesta guia não influenciam o **OMD (OMNIS Model Developer)**. Portanto, neste ponto é possível alternar para o desenvolvimento de modelo automático:

- Se necessário, verificar a distribuição homogênea dos valores de referência no histograma (ver "*Histograma*", página 78).
- O OMD procura automaticamente por outliers e os exclui do desenvolvimento de modelos.

Mas, se os outliers deverem ser excluídos manualmente, eles deverão ser removidos da lista de amostras. Uma atribuição ao conjunto de dados de outliers não tem efeito no OMD.

- Clicar em **[Iniciar OMD]**.

A duração da execução do OMD depende da quantidade de espectros.

Definir o nível de significância para a identificação de outliers

Pré-requisito

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo de quantificação está aberto e em primeiro plano.

1 Editar as propriedades do modelo

- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades ► Parâmetros ► Limites de outliers**, determinar o **Nível de significância** para a detecção de outliers. Quanto maior for o nível de significância, mais outliers espectrais serão reconhecidos. Valores típicos são 5% ou 1%.
O nível de significância é utilizado da seguinte forma:
 - A detecção de outliers automática durante o desenvolvimento do modelo considera o nível de significância no momento da detecção de outliers (ver abaixo).
 - A detecção de outliers na previsão de propriedades de amostras considera o nível de significância no momento da publicação do modelo.

2 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

4 Definir as opções

Definir as opções para atribuição de conjunto de dados:

- **Aplicar a parametrização:** aplicar o pré-tratamento de dados e seleção de comprimento de onda aos espectros (*ver "Parametrizar o modelo de quantificação", página 87*).
Aviso: alterações posteriores na parametrização ou no nível de significância não têm qualquer efeito sobre a atribuição de conjuntos de dados. A não ser que o conjunto de dados seja dividido novamente.
- **Manter outliers:** manter outliers existentes e não considerar na divisão. Esta opção pode levar a um aumento do conjunto de dados de outliers, mesmo sem alterar **Nível de significância**.
- **Manter conjunto de dados de validação:** manter o conjunto de dados de validação existente e não considerar na divisão. Esta opção leva a um aumento do conjunto de dados de validação, mesmo sem alterar **Percentual**.

5 Iniciar a divisão automática

- Clicar em **[Dividir]**.

O conjunto de dados será dividido conforme as configurações realizadas.

6 Verificar a divisão

Assim que pelo menos um espectro for selecionado na lista de espectros, os espectros selecionados serão destacados na área **Sobreposição de espectros**.

Nas áreas **Histograma** e **Sobreposição de espectros**, os espectros no conjunto de dados de calibração são mostrados em **azul**, os espectros no conjunto de dados de validação em **verde** e os espectros no conjunto de dados de outliers em **vermelho**.

Na área **Lista de espectros**, as atribuições são representadas pelos seguintes ícones:



O espectro está atribuído ao conjunto de dados de calibração.



O espectro está atribuído ao conjunto de dados de validação.



O espectro está atribuído ao conjunto de dados de outliers.



Exibe dados em falta ou inválidos. Consultar a tooltip.

O exemplo comprova que os espectros no conjunto de dados de calibração (azul) e no conjunto de dados de validação (verde) estão distribuídos uniformemente pela faixa dos valores de referência.

Outliers

Os espectros atribuídos ao conjunto de dados de outliers são exibidos em vermelho. Eles podem ser outliers espectrais ou outliers de valor de referência.

Os outliers devem ser examinados. Se um outlier se revelar como espectro válido com valor de referência válido, ele pode ser atribuído ao conjunto de dados de calibração ou ao conjunto de dados de validação.

5.3.2 Calcular o modelo de quantificação

Um primeiro modelo pode ser calculado sem parametrização. Por meio dele, é possível obter uma escala de comparação para as figuras de mérito. É possível avaliar melhor a influência de uma parametrização posterior.

 Se ruídos ou outros artefatos inutilizarem alguns comprimentos de onda, esses comprimentos de onda podem ser diretamente excluídos (*ver "Parametrizar o modelo de quantificação", página 87*).

Calcular o modelo

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo de quantificação está aberto e em primeiro plano.

1 Iniciar o cálculo

- Calcular o modelo ao clicar em **[Calcular]**.

 Se o botão **[Calcular]** estiver inativo, as seguintes causas podem estar presentes:

- O modelo já foi calculado e não houve alterações desde então.
- Um dos passos do processo contém uma entrada incorreta. No navegador, o passo do processo da área afetada é representado em **vermelho**. O campo com a entrada incorreta está delineado em vermelho.

Os dados do modelo de quantificação calculado serão exibidos nas áreas **Figuras de mérito**, **Diagrama de correlação** e **Gráfico de influência**.

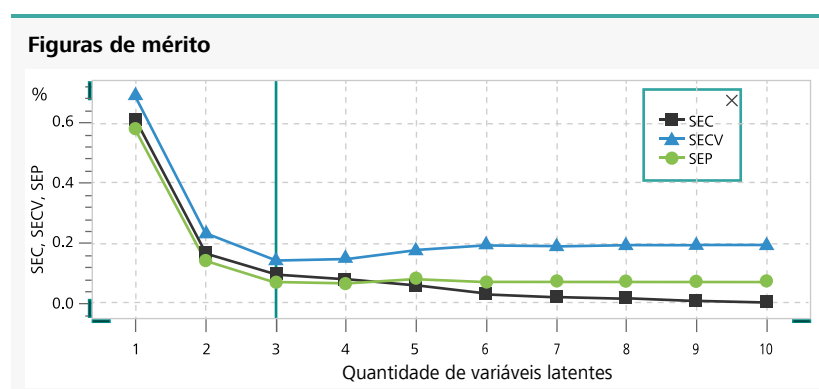
Clicando em  os diagramas **Gráfico de loading** e **Gráfico de scores** também podem ser exibidos.

2 Verificar as figuras de mérito

Na área **Figuras de mérito**, é apresentado um diagrama com as seguintes figuras de mérito:

- **SEC**: erro padrão da calibração.
- **SECV**: erro padrão da validação cruzada.
- **SEP**: erro padrão da predição. Na análise de amostras desconhecidas, esse número é o melhor valor estimado para o erro de previsão. O SEP é exibido somente se um conjunto de dados de validação estiver disponível.

As figuras de mérito (eixo y) são apresentadas para diferentes quantidades de variáveis latentes (eixo x).



A linha vertical verde mostra o número atualmente selecionado de variáveis latentes. Na figura acima, foram selecionadas 3 variáveis latentes. Em 3 variáveis latentes, o SECV com 0,14 % alcançou um primeiro valor mínimo.

Número de casas decimais na tabela

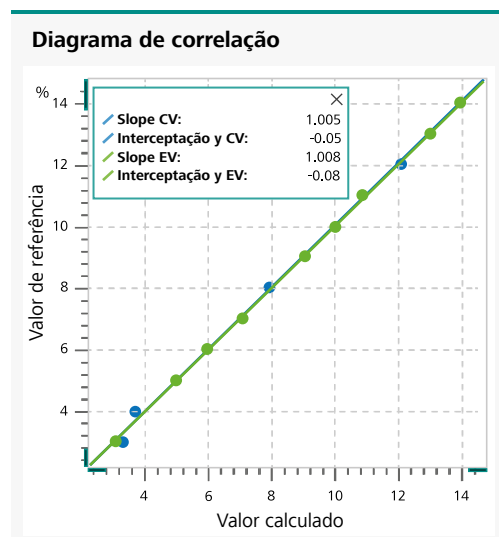
Para alterar o número de casas decimais para as figuras de mérito, no passo do processo **Selecionar amostras** na área

Lista de espectros clicar em .

3 Determinar o número de variáveis latentes

O modelo de quantificação definitivo utiliza uma quantidade fixa de variáveis latentes. Para o bom desempenho do modelo de quantificação, é essencial encontrar a quantidade ideal de variáveis latentes.

A reta de regressão mostra a relação sistêmica entre os valores calculados e os valores de referência. É ideal que a reta de regressão tenha um slope de 1 e uma interceptação de 0. Também é ideal que todas as amostras estejam diretamente nas linhas. Nestes casos, em todas as amostras o valor calculado corresponde ao valor de referência.



O diagrama de correlação mostra diferentes tipos de erros:

- **Erros sistêmicos** podem ser considerados desvios que a reta de regressão apresenta em relação às retas ideais (slope= 1, interceptação y = 0).
- **Erros de aleatoriedade:** quanto mais espalhados os pontos estiverem ao redor da reta de regressão, maiores são os erros de aleatoriedade.

Na figura, há vários pontos escondidos atrás de outros pontos. A reta de regressão azul está escondida atrás da reta de regressão verde.

- Na área **Figuras de mérito**, selecionar outra quantidade de variáveis latentes. Observar as alterações no diagrama de correlação.



Manuseio do diagrama

A exibição do diagrama pode ser personalizada e pontos únicos ou múltiplos podem ser selecionados (*ver capítulo 11.3, página 174*).

5 Verificar o gráfico de influência

O **Gráfico de influência** descreve as propriedades características dos espectros e ajuda a identificar outliers espectrais.

Um gráfico de influência pode ser exibido para o método de cálculo PLS ou PCA. Selecionar um método de cálculo da lista:

incorreto, a previsão de amostras semelhantes pode levar a resultados incorretos.

Espectros com altos resíduos Q exibem peculiaridades que não foram modeladas com sucesso. Por exemplo, porque componentes químicos incomuns estão presentes nas amostras afetadas.

 As linhas tracejadas mostram os valores críticos (valores limite) para o nível de significância definido.

A figura acima não mostra nenhum outlier possível. Todos os pontos estão claramente dentro das linhas tracejadas.

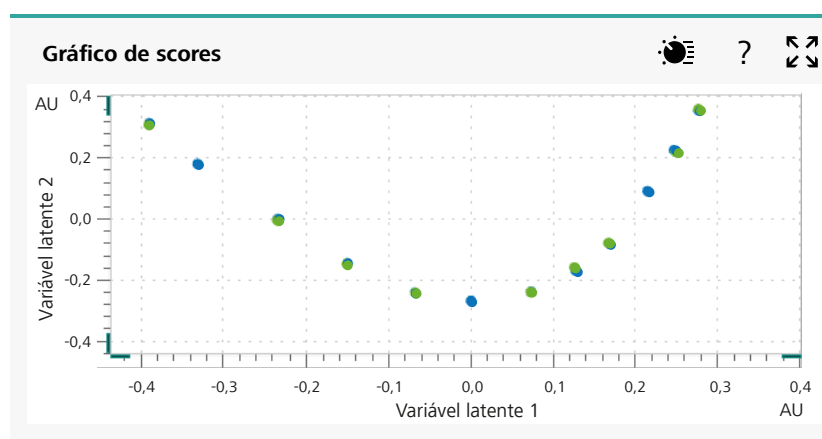
6 Verificar o gráfico de scores

 Enquanto o valor Hotelling T^2 de um espectro resume os scores de todas as variáveis latentes em um único valor, o gráfico de scores permite uma análise ainda mais detalhada dos scores.

O gráfico de scores para modelos de quantificação é baseado no método de cálculo **PLS** e leva em consideração os pré-tratamentos de dados definidos e as faixas de comprimento de onda ([ver "Parametrizar o modelo de quantificação", página 87](#)).

Cada ponto representa um espectro. Os scores das duas primeiras variáveis latentes podem ser lidos no eixo x e no eixo y. Sob  **Propriedades**, também é possível exibir todos os outros pares de variáveis latentes. Os scores são normalizados, cada variável latente recebe o mesmo peso.

Exemplo: gráfico de scores dos espectros EtOH para as variáveis latentes 1 e 2:



- Se for atribuído outro conjunto de dados às amostras, atribuir todos em um passo:
 - No gráfico de influência, no diagrama de correlação ou no gráfico de scores, selecionar todos os novos pontos a serem atribuídos (*ver "Selecionar vários pontos ou curvas", página 176*).
 - Abrir o menu de contexto ao clicar com o botão direito em um dos pontos selecionados. Selecionar o conjunto de dados adequado.
 - Ao clicar em **[Calcular]**, calcular novamente o modelo de quantificação.
- Após a nova atribuição ao espectro, validar novamente o modelo de quantificação.

8 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Duplicar o modelo de quantificação

O modelo de quantificação pode ser duplicado para acessar o estado atual, caso necessário:

1. Salvar o modelo de quantificação.
2. Em **Calibração e avaliação ► Modelos de quantificação**, selecionar o modelo de quantificação.
3. Duplicar o modelo de quantificação selecionado ao clicar em .
4. Abrir o modelo de quantificação duplicado e continuar a otimização.

5.3.4 Parametrizar o modelo de quantificação

O passo do processo **Parametrizar o modelo de quantificação** possibilita uma otimização automática ou manual dos espectros. Os artefatos de não linearidades serão corrigidos. A execução correta aprimora a parametrização, a exatidão e a robustez do modelo.

A parametrização é aplicada a:

- todos os espectros no conjunto de dados de calibração
- todos os espectros no conjunto de dados de validação e no conjunto de dados de outliers

 Na previsão na área de trabalho **Amostras**, o espectro de uma amostra é registrado e avaliado com um modelo. A parametrização definida no modelo também é aplicada a este espectro.

Há disponíveis duas possibilidades de parametrização:

- Definir as faixas de comprimento de onda a serem utilizadas.

2 Examinar os espectros

- Manuseio de tabelas (*ver capítulo 11.2, página 173*)
- Manuseio de diagramas (*ver capítulo 11.3, página 174*)

3 Passo do processo 'Parametrizar o modelo de quantificação'

- No navegador, clicar no passo do processo **Parametrizar o modelo de quantificação**.
- Na área **Pré-tratamentos de dados**, abrir a lista de seleção com ▼ e selecionar a área **Gráfico de loading**.

Neste passo do processo, os espectros podem ser examinados simultaneamente em forma de curva e em **Gráfico de loading**. O Gráfico de loading mostra como as variáveis de comprimento de onda originais contribuem para compor cada variável latente.

Próximos passos

- Seleção de comprimento de onda manual (*ver "Seleção de comprimento de onda manual", página 89*)
- Definir o pré-tratamento de dado manualmente (*ver "Definir o pré-tratamento de dado manualmente", página 93*)

5.3.4.1 Seleção de comprimento de onda manual

Uma seleção de comprimento de onda pode aprimorar o modelo de quantificação. Exemplo: caso haja altos ruídos de valores de absorbância, as áreas com os comprimentos de onda afetados podem ser excluídas.

O modelo utiliza as faixas de comprimento de onda definidas. Se nenhuma faixa de comprimento de onda estiver definida, o modelo utiliza todos os comprimentos de onda.

Exibir os espectros e loadings

Pré-requisitos:

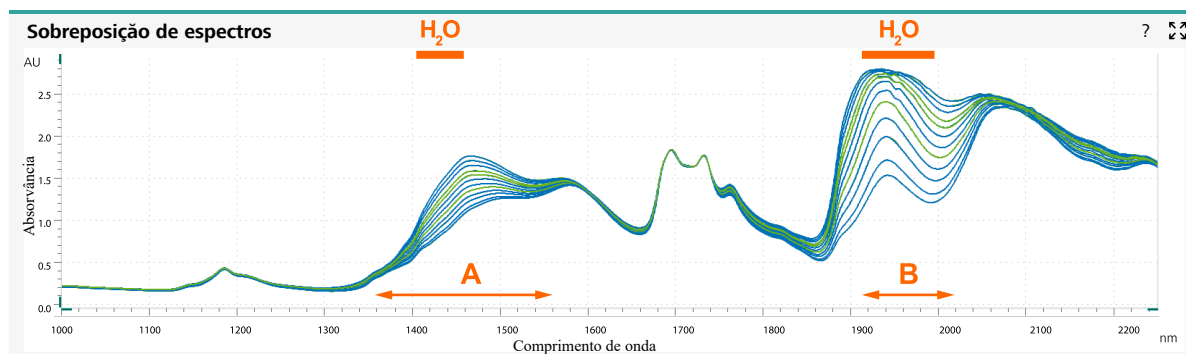
- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.

1 Passo do processo 'Parametrizar o modelo de quantificação'

- No navegador, clicar no passo do processo **Parametrizar o modelo de quantificação**.
- Exibir simultaneamente as áreas **Sobreposição de espectros**, **Gráfico de loading** e **Faixa de comprimento de onda**.

Sobreposição de espectros

As bandas de absorção de H₂O genéricas podem ser consultadas em um diagrama para servir como ponto de orientação aproximado. As bandas de absorção de H₂O se estendem de 1400 até 1450 nm e de 1900 até 1980 nm.

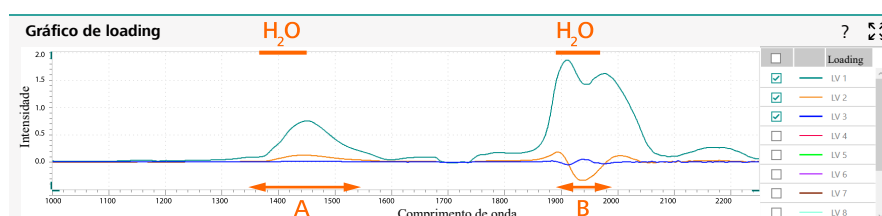


Os espectros EtOH apresentam variações claramente visíveis conforme os diferentes teores de H₂O das amostras (áreas **A** e **B**).

Porém, há uma diferença entre as 2 áreas. Ao contrário da área **B** (de 1900 até 2000 nm), a área **A** (de 1350 até 1550 nm) apresenta distâncias verticais regulares entre as linhas conforme as distâncias regulares dos valores de referência.

Gráfico de loading

Loadings mostram como as variáveis de comprimento de onda originais contribuem para compor cada variável latente.



As áreas já identificadas **A** (de 1350 até 1550 nm) e **B** (de 1900 até 2000 nm) apresentam os maiores loadings, principalmente para a variável latente 1 (verde). Portanto, essas são as áreas que mais contribuem para a formação da variável latente 1.

É irrelevante se os loadings são positivos ou negativos.

Devido aos artefatos na área **B**, parece ser útil testar um modelo com base na área **A** (de 1350 até 1550 nm).

Definir as faixas de comprimento de onda

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.
- O navegador está no passo do processo **Parametrizar o modelo de quantificação**.

1 Adicionar a faixa de comprimento de onda

- Na área **Faixa de comprimento de onda**, adicionar uma faixa de comprimento de onda ao clicar em .



A interface 'Faixa de comprimento de onda' apresenta um cabeçalho com o título e ícones de ajuda e redimensionamento. Abaixo, há uma barra de adição com um ícone de lista e um sinal de mais. O corpo da interface contém uma tabela com as seguintes colunas: '#', 'Comprimento inicial de onda' e 'Comprimento final de onda'. A primeira linha da tabela mostra o número '1' na primeira coluna, '1000.0 nm' na segunda e '2250.0 nm' na terceira. À direita da tabela, há um ícone de fechar (X).

#	Comprimento inicial de onda	Comprimento final de onda
1	1000.0 nm	2250.0 nm

Uma faixa de comprimento de onda será adicionada. A faixa cobre primeiramente todos os comprimentos de onda.

2 Determinar a faixa de comprimento de onda

Determinar a faixa de comprimento de onda de uma das seguintes formas:

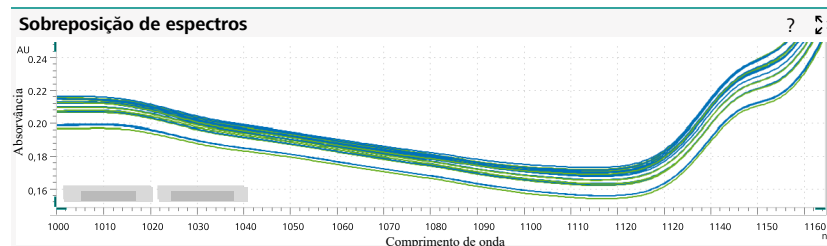
- Para determinar a faixa de comprimento de onda por meio da entrada de números, inserir **Comprimento inicial de onda** e **Comprimento final de onda** nos campos de introdução correspondentes.
- Para determinar a faixa de comprimento de onda no diagrama, proceder da seguinte forma:
 - Na área **Sobreposição de espectros**, clicar em **[Ativar o deslocamento]**.
 - Mover o cursor para a margem esquerda da área destacada até que o cursor seja exibido como .
 - Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar a margem esquerda até a posição desejada.
 - Repetir o mesmo processo no lado direito da área destacada.
 - Para mover uma faixa de comprimento de onda, mover o cursor sobre a área até que o cursor seja exibido como .
 - Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar a faixa para a esquerda ou para a direita.
 - Clicar em **[Desativar o deslocamento]**.

i Se a seleção de comprimento de onda recém-criada for levada em consideração na divisão do conjunto de dados ou na detecção de outliers, o conjunto de dados poderá ser dividido novamente.

5.3.4.2 Definir o pré-tratamento de dado manualmente

Um pré-tratamento de dados adequado pode aprimorar o modelo de quantificação. Exemplo: deslocamentos da linha de base não contêm informações relevantes para a maioria das aplicações e podem ser removidos.

Espectros EtOH



Em espectros EtOH, pequenos deslocamentos de linha de base entre os espectros são visíveis ao aumentar a faixa de 1000 até 1200 nm. Eles são deslocamentos de linha de base constantes (independentes do comprimento de onda).

i Os deslocamentos de linha de base são devidos à formação de bolhas de gás em uma amostra propositalmente não desgaseificada para fins de demonstração em uma cubeta de fluxo. Um líquido transparente geralmente não apresenta deslocamentos de linha de base dessa magnitude.

O deslocamento de linha de base pode ser corrigido com um pré-tratamento de dados.

Definir o pré-tratamento de dado manualmente

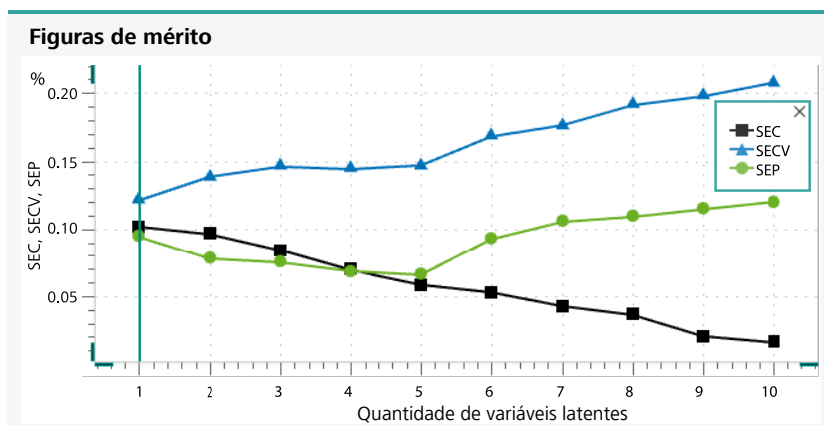
Pré-requisitos:

- O navegador está no passo do processo **Parametrizar o modelo de quantificação**.

1 Adicionar o passo de pré-tratamento de dados

- Na área **Pré-tratamentos de dados**, adicionar um passo de pré-tratamento de dados ao clicar em

- Validar o modelo. Comparar as figuras de mérito com os modelos criados anteriormente.



No caso de teor de H_2O em EtOH com uma faixa de comprimento de onda de 1350 até 1550 nm e um Gap-Segment com ordem de derivação 1, uma única variável latente ainda parece ser suficiente. O SECV foi minimamente aprimorado para 0,12%.

Como os deslocamentos de linha de base não contêm informações relevantes para esta aplicação, o pré-tratamento de dados pode ser mantido apesar do aprimoramento mínimo.

5 Salvar o modelo

- Clicar em ou pressionar as teclas [CTRL]+[S].

Se for necessário considerar o novo pré-tratamento de dados criado na divisão do conjunto de dados ou na detecção de outliers, o conjunto de dados pode ser dividido novamente.

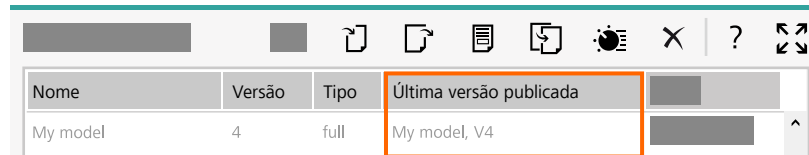
5.4 Publicar o modelo de quantificação

Para que um modelo possa ser utilizado em determinações, o modelo deve ser publicado. Isso permite continuar a desenvolver o modelo sem influenciar a versão publicada e as determinações executadas com ele.

Publicar o modelo de quantificação

Pré-requisito:

- O modelo foi calculado e salvo.
- O modelo está aberto.



Nome	Versão	Tipo	Última versão publicada
My model	4	full	My model, V4

O comando **PREDICT** poderá acessar a versão publicada do modelo.

Visão geral de modelos

Se forem selecionados um ou mais modelos de quantificação, a visão geral de modelos exibe no lado direito os dados mais importantes em uma visão geral (no máximo 5 modelos diferentes).

Se a última versão salva não corresponder à última versão publicada, a visão geral de modelos exibe as duas versões.

5.5 Correção da interceptação do eixo y / slope

A **Correção da interceptação do eixo y / slope** permite a correção de erros sistêmicos na aplicação de um modelo de quantificação. O pré-requisito para isso é um modelo de quantificação robusto e confiável. Os erros devem ser estatisticamente significativos, mas não muito grandes.

 Erros sistêmicos podem ser vistos no diagrama de correlação como desvios das retas de regressão em relação às retas ideais (slope = 1, interceptação y = 0).

Erros de aleatoriedade também podem ser vistos no diagrama de correlação. Quanto mais espalhados os pontos estiverem ao redor da reta de regressão, maiores são os erros de aleatoriedade. Os erros de aleatoriedade não podem ser corrigidos com a correção da interceptação do eixo y / slope.

Uma correção da interceptação do eixo y / slope é utilizada nos seguintes casos:

- Se um modelo de quantificação for revalidado ou monitorado com amostras de controle e for constatado que as figuras de mérito não correspondem mais aos requisitos, p. ex., devido a alterações no ambiente.
- Se um modelo de quantificação tiver sido criado com espectros XDS/DS importados (ver *"Troca de XDS/DS Analyzer (quantificação)"*, página 186).

Há 2 correções disponíveis:

- **Viés:** corrige o viés – o desvio médio entre os valores de referência e os valores calculados das amostras. Após a correção, o viés é igual a 0.

Criar a correção da interceptação do eixo y / slope

Vários modelos de quantificação (opcional)

- Se diferentes modelos de quantificação precisarem ser corrigidos, criar uma correção da interceptação do eixo y / slope separada para cada modelo.
- Se várias versões semelhantes do mesmo modelo de quantificação precisarem ser corrigidas, uma única correção da interceptação do eixo y / slope será suficiente.

As versões semelhantes podem diferir nos seguintes pontos:

- diferentes nomes do modelo de quantificação
- diferentes nomes do parâmetro de referência
- diferentes conjuntos de dados de outliers, desde que o conjunto de dados de calibração não seja afetado
- diferentes conjuntos de dados de validação, desde que o conjunto de dados de calibração não seja afetado
- diferentes parâmetros de validação cruzada

Entretanto, as versões semelhantes não devem apresentar diferenças que influenciem o resultado de previsão:

- Os conjuntos de dados de calibração devem ser idênticos.
- A parametrização deve ser idêntica.
- O número de variáveis latentes deve ser idêntico.

1 Criar uma nova correção da interceptação do eixo y / slope

- Em **Calibração e avaliação** ► **Correções da interceptação do eixo y / inclinação**, clicar em .

2 Nomear a correção da interceptação do eixo y / slope

- Inserir um nome adequado no campo **Nome**, p. ex., o nome do modelo de quantificação a ser corrigido.

3 Selecionar as amostras

- Selecionar uma ou mais **Listas de amostras** ou **Resultados de busca** a partir das quais deverão ser utilizadas amostras para a criação da correção da interceptação do eixo y /slope.

-  Caso o parâmetro de referência tenha várias denominações nas listas de amostras ou resultados de busca, podem ser selecionadas todas estas denominações.

7 Confirmar a entrada

- Clique em **[Criar]** para criar a nova correção da interceptação do eixo y / slope.

A correção será calculada com base nos valores de referência e nos valores calculados das amostras selecionadas. Todas as amostras que atenderem às duas condições a seguir serão consideradas:

- Os dados da amostra contêm um valor de referência para o parâmetro de referência selecionado.
- A amostra possui um resultado de quantificação calculado pelo modelo de quantificação selecionado.

Uma nova guia mostra a correção da interceptação do eixo y / slope. A área **Amostras** lista as amostras consideradas.

Amostras ? 					
	Nome da amostra	Nome da subamostra	Valor de referência	Valor calculado	Valor corrigido
			3,00 %	3,22 %	3,28 %
			3,00 %	3,22 %	3,28 %
			4,00 %	3,87 %	3,00 %
			4,00 %	3,87 %	3,00 %
			5,00 %	4,93 %	4,94 %

8 Tipo da correção

Selecionar o tipo da correção **Viés** ou **Slope/Interceptação Y**.

Tipo da correção: ☒ Viés ☐ Slope / interceptação y

9 Marcar o outlier

- Para marcar um espectro como outlier, clicar no espectro com o botão direito na área **Amostras** e excluir o espectro do cálculo com um clique em **Registro de dados de outliers**.

O símbolo  marca o espectro como outlier. O espectro será removido da área **Diagrama de correlação** e de todos os cálculos.

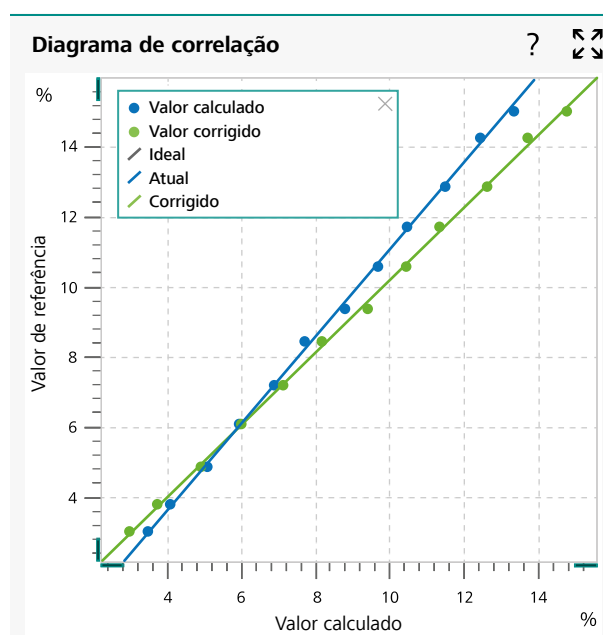
- Para remover a marcação de outlier, clicar com o botão direito do mouse no espectro novamente e depois clicar em **Conjunto de dados de correção**.

Os valores calculados (pontos azuis) serão corrigidos ao redor do viés. A reta de regressão corrigida (verde) corta a reta ideal tracejada em 45°, de modo a resultar em um viés de 0.

O exemplo no diagrama de correlação acima resulta em um aprimoramento do SEP de 0,82 para 0,24.

 Para um valor estimado confiável do viés, são necessárias pelo menos 20 amostras.

Diagrama de correlação para uma correção da interceptação do eixo y / slope



Os valores calculados (pontos azuis) serão corrigidos ao redor do slope e da interceptação y. Os valores corrigidos (pontos verdes) têm uma reta de regressão ideal (45°, interceptação y 0).

O exemplo no diagrama de correlação acima resulta em um aprimoramento do SEP de 0,86 para 0,12.

 Para um valor estimado confiável do slope, são necessárias pelo menos 30 amostras.

11 Valores de correção

Na área **Valores de correção**, são exibidos o SEP e os valores de correção para slope e interceptação Y, dependendo do tipo da correção:

6 Modelo de identificação

i Um esclarecimento da sequência no OMNIS Software pode ser encontrado no anexo (*ver "Desenvolvimento de um modelo", página 193*).

Um modelo de identificação fornece de acordo com cada uso:

- Uma **identificação** de uma amostra desconhecida (p. ex., frutose). O resultado é um nome do produto.
- Uma **verificação** do pertencimento de produto (p. ex. frutose) de uma amostra. O resultado é sim/não – verificação bem-sucedida ou fracassada.

6.1 Criar o modelo de identificação

Criar o modelo de identificação

Pré-requisito:

- Um conjunto de dados com espectros e nomes de produto foi criado (*ver "Registrar os espectros", página 62*).

1 Criar e nomear um modelo de identificação

- Em **Calibração e avaliação ► Modelos de identificação**, clicar em .
Um novo modelo de identificação é exibido em uma nova guia.
- Inserir um nome adequado no campo de introdução **Nome do modelo de identificação**.

2 Selecionar as amostras

- Exibir todas as listas de amostras ao clicar em **Listas de amostras**.
- Selecionar todas as listas de amostras preparadas.

Criar modelo de identificação

Nome do modelo de identificação

Nome do aluno de matemática

Listas de amostras

Resultados de busca

Importação XDS/DS

Nome	Salvo

Produto	Quantidade de espectros

 As amostras também podem ser selecionadas por um resultado de busca. Além disso podem ser importadas amostras de equipamentos XDS e DS (*ver "Troca de XDS/DS Analyzer (quantificação)", página 186*).

 A seleção de amostras pode ser adaptada posteriormente.

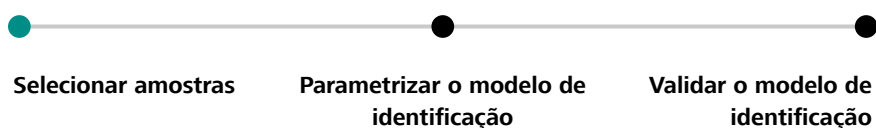
A seleção deve conter amostras com um parâmetro de produto. A coluna **Produto** lista os produtos contidos.

3 Criar o modelo de identificação

- Clicar em **[Criar]**.
- Salvar o modelo: clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

6.2 Selecionar as amostras e dividir o conjunto de dados

A guia do modelo de identificação mostra na parte superior uma barra de navegação horizontal, o **navegador**. O navegador o orienta nos passos seguintes do desenvolvimento de modelo.



Apresentação de espectros

Nos 3 passos do processo, os espectros individuais são exibidos na forma de curvas, pontos ou linhas de tabela.

Os espectros selecionados são destacados simultaneamente em todas as apresentações e passos do processo.

Tabelas e diagramas

O manuseio de tabelas e diagramas é descrito no anexo:

- Manuseio de tabelas ([ver capítulo 11.2, página 173](#))
- Manuseio de diagramas ([ver capítulo 11.3, página 174](#))

Passo do processo 'Selecionar amostras'

A área **Lista de produtos** mostra os produtos das amostras selecionadas:

Lista de produtos			?	
	Produto	Quantidade de espectros	Grupo de produtos	
				
				
				

Cada produto é identificado por uma cor de produto. Ao clicar em uma cor de produto, é possível selecionar outra cor.

Assim que for selecionado pelo menos um produto na lista de produtos, a área **Lista de espectros** exibirá todos os espectros dos produtos selecionados:

Lista de espectros									?	
		Nome da amostra	Nome da subamostra	Fonte	Produto					
										
										
										
										

Um campo de introdução exibe cada um dos produtos pertencentes à amostra (marcados em laranja na imagem).

Os ícones a seguir simbolizam a atribuição aos conjuntos de dados:



O espectro está atribuído ao conjunto de dados de calibração.



O espectro está atribuído ao conjunto de dados de validação.



O espectro está atribuído ao conjunto de dados de outliers.



Exibe dados em falta ou inválidos. Consultar a tooltip.

Os espectros na área **Lista de espectros** também aparecem na área **Sobreposição de espectros** e são exibidos da seguinte forma:

- Espectros no conjunto de dados de calibração em **azul**, espectros no conjunto de dados de validação em **verde** e espectros no conjunto de dados de outliers em **vermelho**.
- Se o seletor **Exibir cores de produto** estiver ativado, os espectros são exibidos nas respectivas cores de produto.

O passo do processo **Selecionar amostras** permite fazer o seguinte:

- **Adaptar a seleção de amostras**

Adicionar mais espectros ou excluir espectros.

- **Dividir o conjunto de dados**

Divisão do conjunto de dados automática ou manual:

- **Conjunto de dados de calibração:** o modelo será calculado novamente com os espectros e pertencimentos de produto do conjunto de dados de calibração.
- **Conjunto de dados de validação:** os espectros e pertencimentos de produto do conjunto de dados de validação servem exclusivamente para a validação do modelo.
- **Conjunto de dados de outliers:** o conjunto de dados de outliers não influencia o modelo ou a validação dele. Os outliers são apresentados somente por motivos informativos em algumas tabelas.

 Um modelo pode ser desenvolvido sem conjunto de dados de validação, p. ex., quando estiver disponível apenas uma quantidade limitada de amostras em uma primeira fase ou quando a validação for efetuada exclusivamente com um conjunto de dados externo.

Adaptar a seleção de amostras

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano (ver "*Criar o modelo de identificação*", página 105).
- O navegador está no passo do processo **Selecionar amostras**.

1 Adicionar ou excluir os espectros

A seleção de amostra e o pertencimento aos produtos podem ser adaptados a qualquer momento na área **Lista de espectros**:

- Para selecionar as amostras cujos espectros devem ser adicionados à lista de espectros, clicar em **LN+**.
- Para remover espectros da lista de espectros, selecionar os espectros e clicar em **LN-**.

Aviso: as respectivas amostras, inclusive os espectros, permanecem no banco de dados.

2 Alterar pertencimento ao produto

- Selecionar todos os espectros aos quais deve ser atribuído outro produto.
- Clicar com o botão direito nos espectros selecionados e selecionar **Atribuir produto** no menu de contexto.

É exibida uma janela de entrada:

- Clicar no campo **Novo produto**. Selecionar um produto existente ou inserir um novo nome do produto.
- Ao clicar em **[Atribuir]**, o produto é atribuído ao espectro selecionado.

3 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Dividir o conjunto de dados automaticamente

A detecção de outliers possibilita a criação automática de um conjunto de dados de outliers. Os espectros que permanecerem podem ser divididos automaticamente em um conjunto de dados de calibração ou um conjunto de dados de validação.

Se tiverem sido coletadas amostras separadas para calibração e para validação, as amostras podem ser atribuídas manualmente.

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.
- O navegador está no passo do processo **Selecionar amostras**.

1 Acessar a divisão do conjunto de dados

- Na área **Lista de espectros**, clicar em .

É aberto o diálogo **Divisão do conjunto de dados**.

2 Determinar o conjunto de dados de outliers

- Para atribuir espectros automaticamente ao conjunto de dados de outliers, ativar o seletor **Determinar outliers**. A detecção de outliers automática reconhece outliers espectrais com base em desvios nos espectros.
 - Caso necessário, adaptar **Nível de significância**. Quanto maior for o nível de significância, mais outliers espectrais serão reconhecidos. Valores típicos são 5% ou 1%.

- No passo do processo **Selecionar amostras** clicar em uma das áreas  e selecionar o diagrama **Gráfico de influência** ou **Gráfico de scores**.

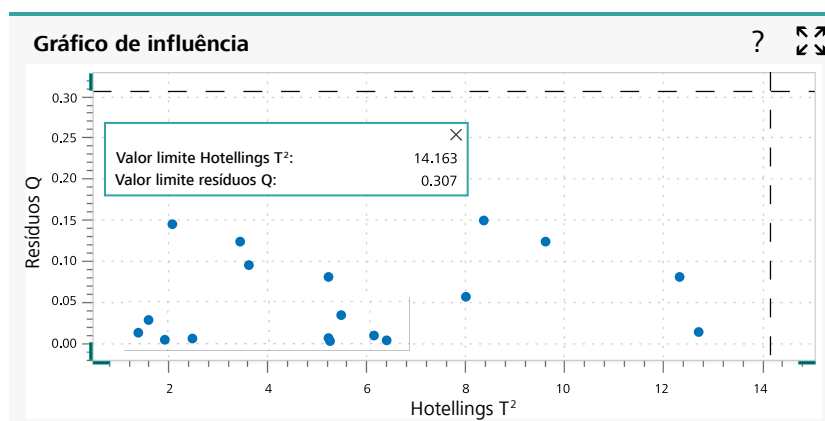
O gráfico de influência e o gráfico de scores são baseados no método de cálculo **PCA** (análise de componentes principais). A quantidade de componentes principais é escolhida de forma que a variância declarada seja de pelo menos 95%.

Os espectros na seguinte forma servem como ponto de partida para PCA:

- Espectros sem pré-tratamento de dados e seleção de comprimento de onda, se a opção **Aplicar a parametrização** foi desativada durante a divisão automática do conjunto de dados.
 - Espectros com pré-tratamento de dados e seleção de comprimento de onda, se a opção **Aplicar a parametrização** foi ativada durante a divisão automática do conjunto de dados.
- Aviso se a opção estiver ativada: se a parametrização for alterada, o gráfico de influência e o gráfico de scores só estarão disponíveis após uma nova divisão automática do conjunto de dados.

Gráfico de influência

O **Gráfico de influência** descreve as propriedades características dos espectros e ajuda a identificar outliers.



Manuseio do diagrama

A exibição do diagrama pode ser personalizada e pontos únicos ou múltiplos podem ser selecionados (*ver capítulo 11.3, página 174*).

Cada ponto representa um espectro. Valores Hotelling T^2 e resíduos Q altos indicam possíveis outliers.

Espectros com altos valores para Hotellings T^2 indicam uma composição extrema das amostras afetadas.

Espectros com altos resíduos Q indicam componentes químicos incomuns nas amostras afetadas.

 As linhas tracejadas mostram os valores críticos (valores limite) para o nível de significância definido. Se nenhuma detecção de outliers foi realizada durante a divisão automática do conjunto de dados, o nível de significância é de 5%.

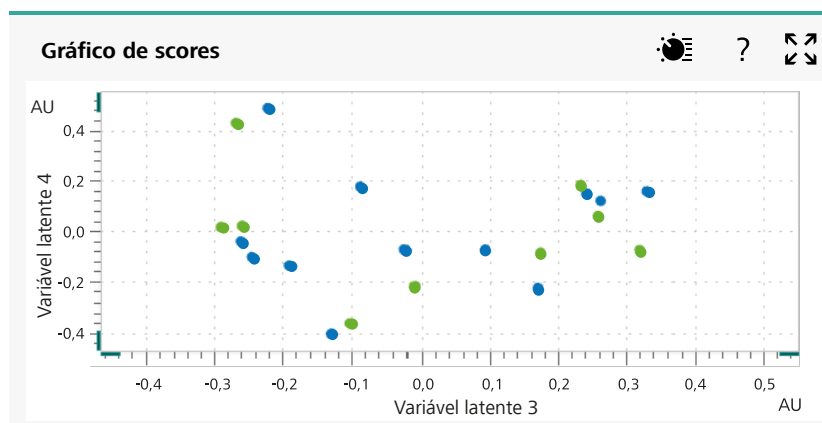
A figura acima não mostra nenhum outlier possível. Todos os pontos estão dentro das linhas tracejadas.

Gráfico de scores

 Enquanto o valor Hotelling T^2 de um espectro resume os scores de todos os componentes principais em um único valor, o gráfico de scores permite uma análise ainda mais detalhada dos scores.

Cada ponto representa um espectro no gráfico de scores. Os scores para os dois primeiros componentes principais podem ser lidos no eixo x e no eixo y. Os scores são normalizados, cada componente principal recebe o mesmo peso.

Por meio de  **Propriedades**, também é possível exibir todos os outros pares de componentes principais.



Dividir o conjunto de dados manualmente (opcional)

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.
- O navegador está no passo do processo **Selecionar amostras**.

- i** Se uma divisão automática do conjunto de dados for executada antes da divisão manual, **Gráfico de influência** e **Gráfico de scores** estarão disponíveis.

1 Atribuir os espectros novamente

- Selecione os espectros em uma das áreas.
Exemplo de seleção no gráfico de influência:
 - Abra a área **Gráfico de influência**.
 - Selecione um ou vários pontos no gráfico de influência (*ver "Selecionar vários pontos ou curvas", página 176*).
 - Abra o menu de contexto clicando com o botão direito em um dos pontos selecionados. Atribua os espectros a um conjunto de dados:
 -  **Registro de dados de calibração**
 -  **Registro de dados de validação**
 -  **Registro de dados de outliers**

2 Salvar o modelo

- Clique em  ou pressione as teclas **[CTRL]+[S]**.

6.3 Calcular o modelo de identificação

Um primeiro modelo pode ser calculado sem parametrização. Por meio dele, é possível obter uma escala de comparação para os resultados de validação. É possível avaliar melhor a influência de uma parametrização posterior.

- i** Se ruídos ou outros artefatos inutilizarem alguns comprimentos de onda, esses comprimentos de onda podem ser diretamente excluídos (*ver "Parametrizar o modelo de identificação", página 117*).

Calcular o modelo

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo de identificação está aberto e em primeiro plano.

1 Iniciar o cálculo

- Calcule o modelo ao clicar em **[Calcular]**.

2. Avaliação com as probabilidades modificadas do passo 1:
 - a. Se nenhuma probabilidade estiver acima do limiar de probabilidade, a identificação falhará (status de identificação **Não identificado**).
 - b. Se uma única probabilidade estiver acima do limiar de probabilidade, a amostra será identificada com sucesso e atribuída ao produto correspondente (status de identificação **Identificado**).
 - c. Se várias probabilidades estiverem acima do limiar de probabilidade, a previsão será ambígua e a identificação falhou (status de identificação **Ambíguo**).

Resultado de validação de uma amostra

O OMNIS Software compara o produto determinado pelo modelo com o produto esperado. A partir disso, obtém-se o resultado de validação:

- **Com êxito:** a identificação foi bem-sucedida e corresponde ao produto esperado.
- **Falhou:** nenhuma correspondência, nenhuma identificação ou identificação ambígua.

Área Visão geral de validação

A área **Visão geral de validação** resume os resultados para as amostras do conjunto de dados de calibração e para o conjunto de dados de validação (se disponível).

À esquerda há uma visão geral de todas as amostras de calibração e amostras de validação:

Total	
Bem-sucedido %	Amostras classificadas corretamente em %
Bem-sucedido	Quantidade de amostras classificadas corretamente
Falhou	Quantidade de amostras classificadas incorretamente
Número de espectros	Número de espectros no conjunto de dados de calibração e no conjunto de dados de validação

À direita há uma visão geral dos produtos individuais e grupos de produtos:

Produto / Grupo de produto	Falhou	Bem-sucedido	Bem-sucedido %
Produto A	Quantidade de amostras do produto A que não foram classificadas como produto A	Quantidade de amostras do produto A classificadas corretamente	Amostras do produto A classificadas corretamente em %
Produto B	Quantidade de amostras do produto B que não foram classificadas como produto B	Quantidade de amostras do produto B classificadas corretamente	Amostras do produto B classificadas corretamente em %
Grupo de produto C	Quantidade de amostras do grupo de produto C que não foram classificadas como grupo de produto C	Quantidade de amostras do grupo de produto C classificadas corretamente	Amostras do grupo de produto C classificadas corretamente em %

Área Resultados de validação

A área **Resultados de validação** mostra os resultados mais detalhados de cada amostra. São exibidas as amostras de todos os produtos selecionados na área **Visão geral de validação**.

 Para cada amostra, os produtos cujas probabilidades originais estão acima do limiar de probabilidade são exibidos. Se uma probabilidade de 0,0% for exibida, a qualificação para o produto correspondente falhou.

Manusear e copiar os dados

- Manuseio de tabelas (*ver capítulo 11.2, página 173*)

Otimizar o modelo de identificação

As seguintes medidas podem ajudar a aprimorar o modelo de identificação.

1 Adaptar o limiar de probabilidade

- Se muitas previsões forem ambíguas ou ocorrerem muitas probabilidades de 0,0%, o limiar de probabilidade pode ser aumentado.
- Se muitas amostras não forem identificadas porque o limiar de probabilidade não foi atingido, o limiar de probabilidade pode ser reduzido.

- Para adaptar o Limiar de probabilidade, execute os seguintes passos:
 - Clicar em  para abrir as propriedades do modelo de identificação.
 - Na lista de seleção, selecionar **Parâmetros**.
 - Adaptar **Limiar de probabilidade**. O valor padrão é 80%.
 - Calcular e validar novamente o modelo de identificação.

2 Adaptar parametrização

- Adaptar pré-tratamento de dados (ver "*Pré-tratamento de dados*", página 121).
- Adaptar faixas de comprimento de onda (ver "*Seleção de comprimento de onda*", página 119).

3 Desenvolver Hierarquia de modelos

Uma **Hierarquia de modelos** possibilita uma estruturação hierárquica de modelos de identificação e a análise quantitativa de amostras identificadas (ver capítulo 8, página 141).

6.5 Parametrizar o modelo de identificação

O passo do processo **Parametrizar o modelo de identificação** possibilita a otimização dos espectros. Os artefatos e não linearidades serão corrigidos. A execução correta aprimora a parametrização, a exatidão e a robustez do modelo.

A parametrização é aplicada a:

- todos os espectros no conjunto de dados de calibração
- todos os espectros no conjunto de dados de validação e no conjunto de dados de outliers

 Na previsão na área de trabalho **Amostras**, o espectro de uma amostra é registrado e avaliado com um modelo. A parametrização definida no modelo também é aplicada a este espectro.

Há disponíveis duas possibilidades de parametrização:

- Definir as faixas de comprimento de onda a serem utilizadas.
- Utilizar pré-tratamentos de dados para colocar os espectros em uma forma mais adequada.

O exame visual dos espectros começa no passo do processo **Selecionar amostras**.

6.5.1 Seleção de comprimento de onda

Uma seleção de comprimento de onda pode aprimorar o modelo de identificação. Exemplo: caso haja altos ruídos de valores de absorbância, as áreas com os comprimentos de onda afetados podem ser excluídas.

O modelo utiliza as faixas de comprimento de onda definidas. Se nenhuma faixa de comprimento de onda estiver definida, o modelo utiliza todos os comprimentos de onda.

Definir as faixas de comprimento de onda

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.

1 Seleção dos espectros a serem apresentados

Selecionar os produtos cujos espectros devem ser exibidos:

- No passo do processo **Selecionar amostras**, na área **Lista de produtos**, selecionar os produtos.
ou
- No passo do processo **Parametrizar o modelo de identificação**, na lista de produtos, selecionar os produtos.

2 Adicionar a faixa de comprimento de onda

- No navegador, mudar para o passo do processo **Parametrizar o modelo de identificação**.
- Na área **Faixa de comprimento de onda**, adicionar uma faixa de comprimento de onda ao clicar em .

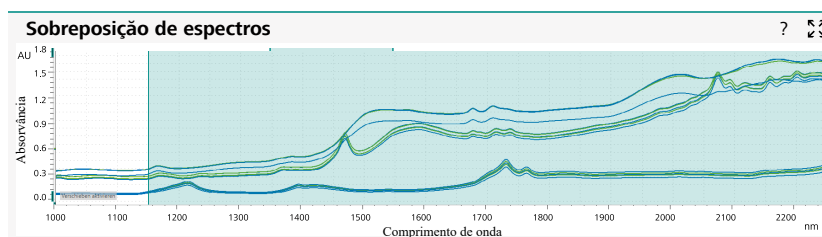
Faixa de comprimento de onda			?	
#	Comprimento inicial de onda	Comprimento final de onda		
1	1000.0 nm	2250.0 nm		

Uma faixa de comprimento de onda será adicionada. A faixa cobre primeiramente todos os comprimentos de onda.

3 Determinar a faixa de comprimento de onda

Determinar a faixa de comprimento de onda de uma das seguintes formas:

- Para determinar a faixa de comprimento de onda por meio da entrada de números, inserir **Comprimento inicial de onda** e **Comprimento final de onda** nos campos de introdução correspondentes.
- Para determinar a faixa de comprimento de onda no diagrama, proceder da seguinte forma:
 - Na área **Sobreposição de espectros**, clicar em **[Ativar o deslocamento]**.
 - Mover o cursor para a margem esquerda da área destacada até que o cursor seja exibido como $\leftarrow \rightarrow$.
 - Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar a margem esquerda até a posição desejada.
 - Repetir o mesmo processo no lado direito da área destacada.
 - Para mover uma faixa de comprimento de onda, mover o cursor sobre a área até que o cursor seja exibido como $\leftrightarrow$. Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar a faixa para a esquerda ou para a direita.
 - Clicar em **[Desativar o deslocamento]**.



Na imagem, está definida uma faixa de comprimento de onda de 1150 até 2250 nm. Essa faixa será utilizada pelo modelo.

4 Adicionar outras faixas de comprimento de onda

Outras faixas de comprimento de onda podem ser adicionadas ao clicar em .

As faixas de comprimento de onda não devem se sobrepor

Primeiramente, uma nova faixa de comprimento de onda se sobrepõe às outras faixas de comprimento de onda existentes. Adaptar a faixa de comprimento de onda de modo que não haja mais sobreposições.

5 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

- i** Se a seleção de comprimento de onda recém-criada for levada em consideração na divisão do conjunto de dados ou na detecção de outliers, o conjunto de dados poderá ser dividido novamente.

6.5.2 Pré-tratamento de dados

Um pré-tratamento de dados adequado pode aprimorar o modelo de identificação. Exemplo: deslocamentos da linha de base não contêm informações relevantes para a maioria das aplicações e podem ser removidos.

Definir o pré-tratamento de dados

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.

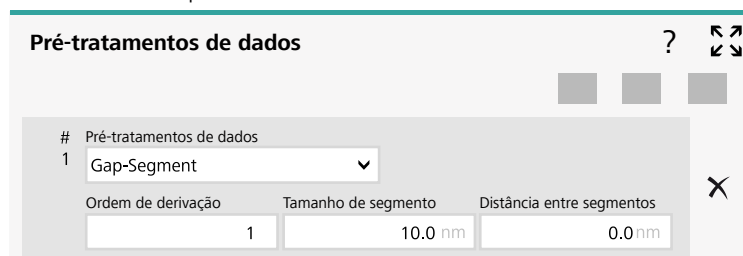
1 Seleção dos espectros a serem apresentados

Selecionar os produtos cujos espectros devem ser exibidos:

- No passo do processo **Selecionar amostras**, na área **Lista de produtos**, selecionar os produtos.
- ou
- No passo do processo **Parametrizar o modelo de identificação**, na lista de produtos, selecionar os produtos.

2 Adicionar o passo de pré-tratamento de dados

- No navegador, mudar para o passo do processo **Parametrizar o modelo de identificação**.
- Na área **Pré-tratamentos de dados**, adicionar um passo de pré-tratamento de dados ao clicar em .
- No campo **Pré-tratamento de dados**, selecionar o tipo de pré-tratamento de dados e preencher os campos correspondentes. Exemplo de Gap-Segment com uma derivada de primeira ordem que remove deslocamentos de linha de base constantes (independentes do comprimento de onda):

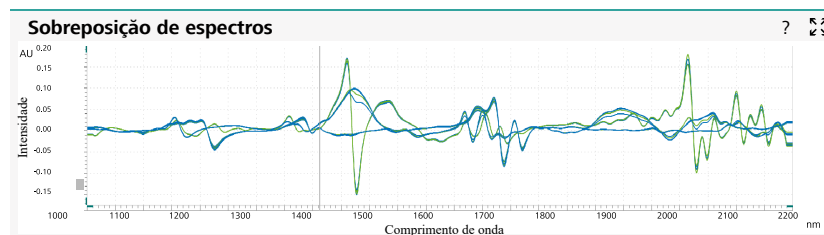


A interface 'Pré-tratamentos de dados' apresenta uma barra de título com o título e ícones de ajuda e redimensionamento. Abaixo, há uma barra com três botões de seleção. O formulário principal contém:

- Um campo rotulado '# Pré-tratamentos de dados' com o valor '1'.
- Um menu suspenso rotulado 'Pré-tratamento de dados' com 'Gap-Segment' selecionado.
- Três campos de entrada: 'Ordem de derivação' (valor: 1), 'Tamanho de segmento' (valor: 10.0 nm) e 'Distância entre segmentos' (valor: 0.0 nm).
- Um ícone de fechar (X) no canto inferior direito.

Os espectros pré-tratados dos produtos selecionados no passo 1 serão exibidos imediatamente na área **Sobreposição de espectros**.

Após o pré-tratamento de dados, os espectros têm outra aparência, por ex.:



3 Adicionar outros passos de pré-tratamentos de dados

Outros passos de pré-tratamentos de dados podem ser adicionados ao clicar em .

 Ao utilizar diversos passos de pré-tratamento de dados, a ordem pode ser decisiva. Gap-Segment ou Savitzky-Golay são utilizados preferencialmente em relação a SNV e SNV preferencialmente em relação a Detrend.

Ao clicar em e , é possível deslocar linhas para cima ou para baixo para definir a ordem.

4 Salvar o modelo

- Clicar em ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

 Se for necessário considerar o novo pré-tratamento de dados criado na divisão do conjunto de dados ou na detecção de outliers, o conjunto de dados pode ser dividido novamente.

6.6 Publicar o modelo de identificação

Para que um modelo possa ser utilizado em determinações, o modelo deve ser publicado. Isso permite continuar a desenvolver o modelo sem influenciar a versão publicada e as determinações executadas com ele.

Publicar o modelo de identificação

Pré-requisito:

- O modelo foi calculado e salvo.

- O modelo está aberto.

1 Abrir o diálogo

- Clicar em  para abrir o diálogo **Publishar o modelo de identificação**.

 Se o modelo já tiver sido publicado e utilizado em métodos anteriormente, esses métodos podem ser automaticamente atualizados ao ativar a caixa de controle **Atualizar métodos**.

Aviso: não serão atualizados automaticamente:

- Métodos abertos
- Métodos assinados e publicados
- Se o filtro de permissões de dados estiver ativado: métodos sem permissões de dados do usuário que fez login atualmente

2 Publicar

- Ao clicar em **[Publicar]**, publicar o modelo.

Em **Calibração e avaliação ► Modelos de identificação**, é exibida a última versão publicada:

Nome	Versão	Tipo	Última versão publicada
My model	4	full	My model, V4

O comando **PREDICT** poderá acessar a versão publicada do modelo.

Criar modelo de qualificação

Nome do modelo de qualificação

Listas de amostras

Resultados de busca

Importação XDS/DS

Conjunto de dados de calibração

Nome	Salvo

 As amostras também podem ser selecionadas por um resultado de busca. Além disso podem ser importadas amostras de equipamentos XDS e DS (ver "[Troca de XDS/DS Analyzer \(quantificação\)](#)", página 186).

 A seleção de amostras pode ser adaptada posteriormente.

3 Selecionar as amostras de validação (opcional)

- Clicar em **Adicionar o conjunto de dados de validação**.
- Atribuir as listas de amostras preparadas para os conjuntos de dados de validação ao conjunto de dados de validação positivo ou negativo usando as caixas de controle correspondentes.

Conjunto de dados de validação

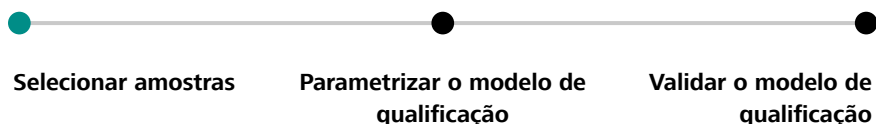
Nome	Salvo	Positivo	Negativo
		☐	☒
		☐	☒
		☐	☐

4 Criar o modelo de qualificação

- Clicar em **[Criar]**.
- Salvar o modelo: clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

7.2 Selecionar as amostras e dividir o conjunto de dados

A guia do modelo de qualificação mostra na parte superior uma barra de navegação horizontal, o **navegador**. O navegador o orienta nos passos seguintes do desenvolvimento de modelo.



Apresentação de espectros

Nos 3 passos do processo, os espectros individuais são exibidos na forma de curvas, pontos ou linhas de tabela.

Os espectros selecionados são destacados simultaneamente em todas as apresentações e passos do processo.

Tabelas e diagramas

O manuseio de tabelas e diagramas é descrito no anexo:

- Manuseio de tabelas (*ver capítulo 11.2, página 173*)
- Manuseio de diagramas (*ver capítulo 11.3, página 174*)

Passo do processo 'Selecionar amostras'

A área **Registro de dados de calibração** lista todos os espectros no conjunto de dados de calibração:

Lista de espectros

Nome da amostra

Nome da subamostra

Fonte

Se amostras foram selecionadas para os conjuntos de dados de validação, seus espectros aparecem na área **Registro de dados de validação**.

Os ícones a seguir caracterizam a atribuição aos conjuntos de dados:

	O espectro está atribuído ao conjunto de dados de calibração.
	O espectro está atribuído ao conjunto de dados de validação positivo.
	O espectro está atribuído ao conjunto de dados de validação negativo.

	O espectro foi atribuído manualmente ao conjunto de dados.
	O espectro foi atribuído automaticamente ao conjunto de dados.
	O espectro foi registrado no OMNIS Software.
	O espectro foi importado de um arquivo externo.

Na área **Sobreposição de espectros**, os espectros no conjunto de dados de calibração são mostrados em **azul**, os espectros no conjunto de dados de validação positivo em **verde** e os espectros no conjunto de dados de validação negativo em **vermelho**.

O passo do processo **Selecionar amostras** permite fazer o seguinte:

- **Adaptar a seleção de amostras**
Adicionar mais espectros ou excluir espectros.
- **Dividir o conjunto de dados**
Divisão do conjunto de dados automática ou manual:
 - **Conjunto de dados de calibração**: o modelo será calculado novamente com os espectros do conjunto de dados de calibração.
 - **Conjunto de dados de validação**: os espectros dos conjuntos de dados de validação são usados exclusivamente para validar o modelo.

 Um modelo pode ser desenvolvido sem conjunto de dados de validação, p. ex., quando estiver disponível apenas uma quantidade limitada de amostras em uma primeira fase ou quando a validação for efetuada exclusivamente com um conjunto de dados externo.

Adaptar a seleção de amostras

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano (ver "*Criar o modelo de qualificação*", página 124).
- O navegador está no passo do processo **Selecionar amostras**.

1 Adicionar ou excluir os espectros

- Adicionar espectros: na área **Registro de dados de calibração** ou na área **Registro de dados de validação** clicar em .
 - Remover espectros: selecionar os espectros e clicar em .
- Aviso: as respectivas amostras, inclusive os espectros, permanecem no banco de dados.

2 Salvar o modelo

- Clicar em ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Dividir o conjunto de dados automaticamente

A divisão inclui todos os espectros do conjunto de dados de calibração e os dois conjuntos de dados de validação. A divisão oferece as seguintes possibilidades:

- Criação automática de um conjunto de dados de validação (opcional)
Os espectros para o conjunto de dados de validação negativa são determinados pela detecção de outliers (outliers espectrais).
- Criação automática de um conjunto de dados de validação positivo (opcional)
Os espectros que permanecerem podem ser divididos automaticamente em conjunto de dados de calibração ou um conjunto de dados de validação positivo.

As amostras também podem ser atribuídas manualmente a qualquer momento.

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.
- O navegador está no passo do processo **Selecionar amostras**.

1 Acessar a divisão do conjunto de dados

- Na área **Registro de dados de calibração**, clicar em .
- É aberto o diálogo **Divisão do conjunto de dados**.

2 Determinar o conjunto de dados de validação negativo (opcional)

- Para atribuir automaticamente outliers espectrais ao conjunto de dados de validação negativo, ativar o seletor **Determinar espectros negativos** aktivieren.
 - Caso necessário, adaptar **Nível de significância**. Quanto maior for o nível de significância, mais outliers espectrais serão reconhecidos. Valores típicos são 5% ou 1%.

i A detecção de espectros negativos deve ser usada com cautela. Um nível de significância alto pode melhorar a confiabilidade dos resultados positivos. Entretanto, amostras mais positivas podem ser ignoradas e classificadas incorretamente como negativas.

Os espectros no conjunto de dados de validação negativo devem ser examinados para determinar se são realmente outliers. O gráfico de influência e o gráfico de scores são úteis para isso.

3 Determinar o conjunto de dados de validação positivo (opcional)

Na divisão automática ocorre uma verificação para que o conjunto de dados de calibração e o conjunto de dados de validação positivo sejam representativos em relação à totalidade do material e independentes um do outro.

- Para atribuir espectros automaticamente ao conjunto de dados de validação positivo, ativar o seletor **Determinar espectros positivos**.
 - No campo **Percentual**, definir a porcentagem de espectros para o conjunto de dados de validação positivo, p. ex. entre 20% e 30%.

4 Definir as opções

Definir opções para a divisão do conjunto de dados:

- **Aplicar a parametrização**: aplicar o pré-tratamento de dados e seleção de comprimento de onda aos espectros (ver "*Parametrizar o modelo de qualificação*", página 135).
Aviso: alterações posteriores na parametrização não têm qualquer efeito sobre a atribuição de conjuntos de dados. A não ser que o conjunto de dados seja dividido novamente.
- **Manter espectros negativos**: manter os espectros existentes no conjunto de dados de validação negativo e ignorá-los durante a divisão. Esta opção pode levar a um aumento do conjunto de dados de validação negativo, mesmo sem alteração de **Nível de significância**.
- **Manter espectros positivos**: manter os espectros existentes no conjunto de dados de validação positivo e ignorá-los durante a divisão. Esta opção leva a um aumento do conjunto de dados de validação positivo, mesmo sem alteração de **Percentual**.

 Se espectros separados tiverem sido adicionados para os conjuntos de dados de validação, as opções **Manter espectros negativos** e **Manter espectros positivos** deverão ser ativadas. Caso contrário, todos os espectros serão mesclados e redvidos, o que pode levar a resultados indesejáveis.

5 Iniciar a divisão automática

- Clicar em **[Dividir]**.

O conjunto de dados será dividido conforme as configurações realizadas.

6 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Gráfico de influência e gráfico de scores

Após a divisão automática do conjunto de dados, os diagramas gráfico de influência e gráfico de scores estão disponíveis:

- No passo do processo **Selecionar amostras** clicar em uma das áreas  e selecionar o diagrama **Gráfico de influência** ou **Gráfico de scores**.

O gráfico de influência e o gráfico de scores são baseados no método de cálculo **PCA** (análise de componentes principais). A quantidade de componentes principais é escolhida de forma que a variância declarada seja de pelo menos 95%.

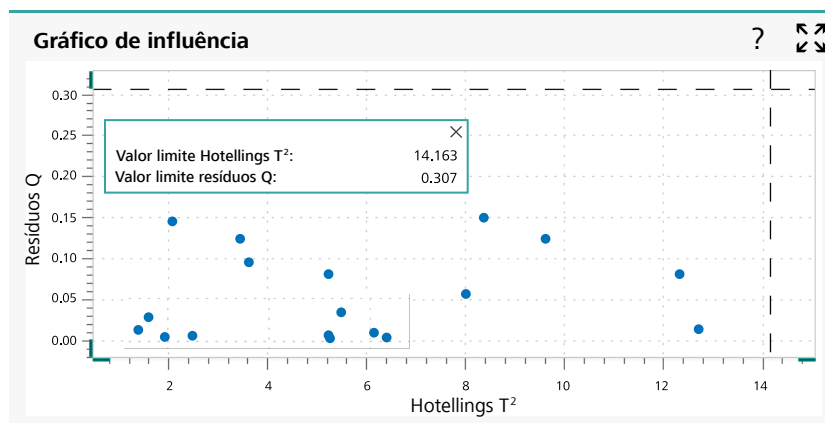
Os espectros na seguinte forma servem como ponto de partida para PCA:

- Espectros sem pré-tratamento de dados e seleção de comprimento de onda, se a opção **Aplicar a parametrização** foi desativada durante a divisão automática do conjunto de dados.
- Espectros com pré-tratamento de dados e seleção de comprimento de onda, se a opção **Aplicar a parametrização** foi ativada durante a divisão automática do conjunto de dados.

Aviso se a opção estiver ativada: se a parametrização for alterada, o gráfico de influência e o gráfico de scores só estarão disponíveis após uma nova divisão automática do conjunto de dados.

Gráfico de influência

O **Gráfico de influência** descreve as propriedades características dos espectros e ajuda a detectar outliers espectrais para o conjunto de dados de validação negativo.



i Manuseio do diagrama

A exibição do diagrama pode ser personalizada e pontos únicos ou múltiplos podem ser selecionados (*ver capítulo 11.3, página 174*).

Cada ponto representa um espectro. Valores Hotelling T^2 e resíduos Q altos indicam possíveis outliers.

Espectros com altos valores para Hotellings T^2 indicam uma composição extrema das amostras afetadas.

Espectros com altos resíduos Q indicam componentes químicos incomuns nas amostras afetadas.

i As linhas tracejadas mostram os valores críticos (valores limite) para o nível de significância definido. Se nenhum espectro negativo for detectado durante a divisão automática do conjunto de dados, o nível de significância é de 5%.

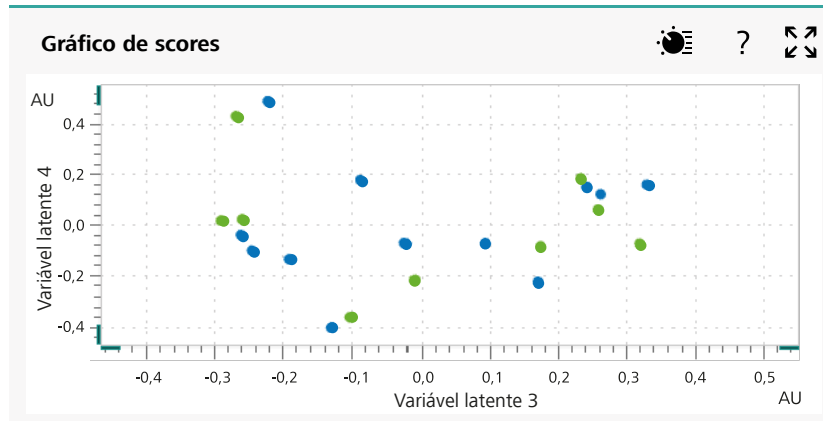
A figura acima não mostra nenhum espectro negativo possível. Todos os pontos estão dentro das linhas tracejadas.

Gráfico de scores

i Enquanto o valor Hotelling T^2 de um espectro resume os scores de todos os componentes principais em um único valor, o gráfico de scores permite uma análise ainda mais detalhada dos scores.

Cada ponto representa um espectro no gráfico de scores. Os scores para os dois primeiros componentes principais podem ser lidos no eixo x e no eixo y. Os scores são normalizados, cada componente principal recebe o mesmo peso.

Por meio de  **Propriedades**, também é possível exibir todos os outros pares de componentes principais.



Dividir o conjunto de dados manualmente (opcional)

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.
- O navegador está no passo do processo **Selecionar amostras**.

 Se uma divisão automática do conjunto de dados for executada antes da divisão manual, **Gráfico de influência** e **Gráfico de scores** estarão disponíveis.

1 Atribuir os espectros novamente

- Selecionar os espectros em uma das áreas.

Exemplo de seleção no gráfico de influência:

- Abrir a área **Gráfico de influência**.
- Selecionar um ou vários pontos no gráfico de influência (*ver "Selecionar vários pontos ou curvas", página 176*).
- Abrir o menu de contexto clicando com o botão direito em um dos pontos selecionados. Atribuir os espectros a um conjunto de dados:

Conjunto de dados de validação positivo

Conjunto de dados de validação negativo

Registro de dados de calibração

2 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

7.3 Calcular o modelo de qualificação

Um primeiro modelo pode ser calculado sem parametrização. Por meio dele, é possível obter uma escala de comparação para os resultados de validação. É possível avaliar melhor a influência de uma parametrização posterior.

 Se ruídos ou outros artefatos inutilizarem alguns comprimentos de onda, esses comprimentos de onda podem ser diretamente excluídos (*ver "Parametrizar o modelo de qualificação", página 135*).

Calcular o modelo

Pré-requisito:

- Na área de trabalho **Calibração e avaliação**, o modelo de qualificação está aberto e em primeiro plano.

1 Iniciar o cálculo

- Calcular o modelo ao clicar em **[Calcular]**.

 Se o botão **[Calcular]** estiver inativo, as seguintes causas podem estar presentes:

- O modelo já foi calculado e não houve alterações desde então.
- Um dos passos do processo contém uma entrada incorreta. No navegador, o passo do processo da área afetada é representado em **vermelho**. O campo com a entrada incorreta está delineado em vermelho.

7.4 Validar o modelo de qualificação

O passo do processo **Validar o modelo de qualificação** possibilita uma validação com as seguintes amostras:

- **Amostras no conjunto de dados de calibração**
Essas amostras foram utilizadas para a criação do modelo. Portanto, uma classificação correta pelo modelo é mais simples do que em outras amostras.
- **Amostras no conjunto de dados de validação positivo e negativo (se disponível)**
Essas amostras são independentes do modelo. Seus resultados de validação estão em uma escala melhor para a qualificação de amostras desconhecidas.

No caso de uma nova divisão do conjunto de dados, o modelo de qualificação pode ser adaptado aos requisitos por meio da detecção de espectros negativos:

- Um nível de significância mais alto pode aumentar a confiabilidade dos resultados positivos. Isso significa: menos resultados falsos positivos, mas mais amostras positivas são perdidas.
- Um nível de significância mais baixo (ou omissão da detecção de espectros negativos) pode resultar em menos amostras positivas perdidas. Isso significa: menos resultados falsos negativos, mas mais amostras negativas são classificadas incorretamente como positivas.

7.5 Parametrizar o modelo de qualificação

O passo do processo **Parametrizar o modelo de qualificação** possibilita a otimização dos espectros. Os artefatos e não linearidades serão corrigidos. A execução correta aprimora a parametrização, a exatidão e a robustez do modelo.

A parametrização é aplicada a:

- todos os espectros no conjunto de dados de calibração
- todos os espectros nos dois conjuntos de dados de validação

i Na previsão na área de trabalho **Amostras**, o espectro de uma amostra é registrado e avaliado com um modelo. A parametrização definida no modelo também é aplicada a este espectro.

Há disponíveis duas possibilidades de parametrização:

- Definir as faixas de comprimento de onda a serem utilizadas.
- Utilizar pré-tratamentos de dados para colocar os espectros em uma forma mais adequada.

O exame visual dos espectros começa no passo do processo **Selecionar amostras**.

Representar os espectros

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.

1 Passo do processo 'Selecionar amostras'

- No navegador, clicar no passo do processo **Selecionar amostras**.

Neste passo do processo, os espectros podem ser examinados simultaneamente em forma de uma tabela e em forma de curva. Se uma

divisão do conjunto de dados automática foi realizada, o gráfico de influência e o gráfico de scores também estarão disponíveis.

2 Examinar os espectros

- Manuseio de tabelas (*ver capítulo 11.2, página 173*)
- Manuseio de diagramas (*ver capítulo 11.3, página 174*)

Próximos passos

- Seleção de comprimento de onda (*ver "Seleção de comprimento de onda", página 136*)
- Definir o pré-tratamento de dados (*ver "Pré-tratamento de dados", página 138*)

7.5.1 Seleção de comprimento de onda

Uma seleção de comprimento de onda pode aprimorar o modelo de qualificação. Exemplo: caso haja altos ruídos de valores de absorbância, as áreas com os comprimentos de onda afetados podem ser excluídas.

O modelo utiliza as faixas de comprimento de onda definidas. Se nenhuma faixa de comprimento de onda estiver definida, o modelo utiliza todos os comprimentos de onda.

Definir as faixas de comprimento de onda

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, o modelo está aberto e em primeiro plano.

1 Passo do processo 'Parametrizar o modelo de qualificação'

- No navegador, clicar em **Parametrizar o modelo de qualificação**.

2 Adicionar a faixa de comprimento de onda

- Na área **Faixa de comprimento de onda**, adicionar uma faixa de comprimento de onda ao clicar em .

Faixa de comprimento de onda

? ↺ ↻

#

Comprimento inicial de onda

Comprimento final de onda

1

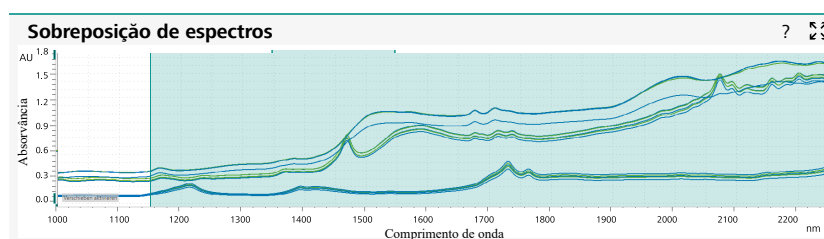
✕

Uma faixa de comprimento de onda será adicionada. A faixa cobre primeiramente todos os comprimentos de onda.

3 Determinar a faixa de comprimento de onda

Determinar a faixa de comprimento de onda de uma das seguintes formas:

- Para determinar a faixa de comprimento de onda por meio da entrada de números, inserir **Comprimento inicial de onda** e **Comprimento final de onda** nos campos de introdução correspondentes.
- Para determinar a faixa de comprimento de onda no diagrama, proceder da seguinte forma:
 - Na área **Sobreposição de espectros**, clicar em **[Ativar o deslocamento]**.
 - Mover o cursor para a margem esquerda da área destacada até que o cursor seja exibido como $\leftrightarrow$.
 - Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar a margem esquerda até a posição desejada.
 - Repetir o mesmo processo no lado direito da área destacada.
 - Para mover uma faixa de comprimento de onda, mover o cursor sobre a área até que o cursor seja exibido como $\rightleftarrows$. Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar a faixa para a esquerda ou para a direita.
 - Clicar em **[Desativar o deslocamento]**.



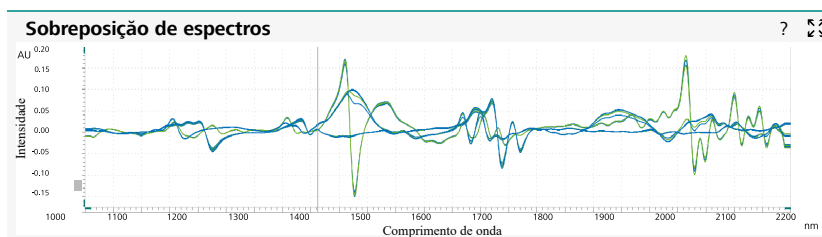
Na imagem, está definida uma faixa de comprimento de onda de 1150 até 2250 nm. Essa faixa será utilizada pelo modelo.

4 Adicionar outras faixas de comprimento de onda

Outras faixas de comprimento de onda podem ser adicionadas ao clicar em

As faixas de comprimento de onda não devem se sobrepor

Primeiramente, uma nova faixa de comprimento de onda se sobrepõe às outras faixas de comprimento de onda existentes. Adaptar a faixa de comprimento de onda de modo que não haja mais sobreposições.



2 Adicionar outros passos de pré-tratamentos de dados

Outros passos de pré-tratamentos de dados podem ser adicionados ao clicar em .

 Ao utilizar diversos passos de pré-tratamento de dados, a ordem pode ser decisiva. Gap-Segment ou Savitzky-Golay são utilizados preferencialmente em relação a SNV e SNV preferencialmente em relação a Detrend.

Ao clicar em  e , é possível deslocar linhas para cima ou para baixo para definir a ordem.

3 Salvar o modelo

- Clicar em  ou pressionar as teclas [CTRL]+[S].

 Se for necessário considerar o novo pré-tratamento de dados criado na divisão do conjunto de dados, o conjunto de dados pode ser dividido novamente.

7.6 Publicar o modelo de qualificação

Para que um modelo possa ser utilizado em determinações, o modelo deve ser publicado. Isso permite continuar a desenvolver o modelo sem influenciar a versão publicada e as determinações executadas com ele.

Publicar o modelo de qualificação

Pré-requisito:

- O modelo foi calculado e salvo.
- O modelo está aberto.

1 Abrir o diálogo

- Clicar em  para abrir o diálogo **Publicar o modelo de qualificação**.

8 Hierarquia de modelos

Uma hierarquia de modelos permite o seguinte:

- **Estruturar modelos de identificação hierarquicamente**
Se um modelo de identificação tiver dificuldade em distinguir produtos semelhantes entre si, essa diferenciação poderá ser delegada a submodelos otimizados para essa finalidade.
Exemplo: um modelo de identificação com 4 produtos diferentes pode não diferenciar claramente entre produtos semelhantes como frutose e glucose. Se frutose e glucose forem reunidas em um grupo de produto "açúcar", o modelo principal terá condições de diferenciar entre açúcar e os dois outros produtos. Se uma amostra é identificada como açúcar, um submodelo assume a classificação entre frutose e glucose.
Caso necessário, é possível adicionar mais níveis hierárquicos.
- **Vincular modelos de quantificação a produtos**
As amostras identificadas podem ser analisadas quantitativamente. Para cada parâmetro de interesse, um modelo de quantificação é vinculado ao produto correspondente. Opcionalmente, pode ser utilizada uma correção da interceptação do eixo y / slope.
- **Estruturar hierarquicamente os modelos de quantificação**
Em alguns casos, uma estrutura hierárquica de modelos de quantificação pode alcançar uma capacidade de previsão melhor do que um modelo de quantificação único. Neste processo, os modelos de quantificação subordinados são otimizados individualmente para uma parte da faixa de valores de referência do modelo de nível superior.
Exemplo: se o modelo de quantificação de nível superior fornecer um resultado < 5 , um modelo de quantificação subordinado para valores < 5 é acionado e determina o resultado final. De forma análoga para resultados ≥ 5 .
- **Hierarquia de modelos dos modelos de quantificação**
Em uma hierarquia de modelos, um ou mais modelos de quantificação podem ser listados um abaixo do outro, com ou sem modelos de quantificação subordinados. No método, um único comando **PRE-DICT** é suficiente para prever todos os parâmetros de interesse.

Uma hierarquia de modelos fornece de acordo com cada uso:

- Uma **identificação** de uma amostra desconhecida (p. ex., frutose). O resultado é um nome do produto.
 - Opcionalmente uma ou mais **quantificações** dependendo do produto determinado.

- Uma **verificação** do pertencimento de produto (p. ex. frutose) de uma amostra. O resultado é sim ou não – verificação bem-sucedida ou fracassada.
 - Opcionalmente, dependendo do produto determinado e independentemente do resultado da verificação, uma ou mais **quantificações**.
- Uma ou mais **quantificações**.

8.1 Desenvolver hierarquia de modelos

8.1.1 Desenvolver modelos

Primeiramente, devem ser desenvolvidos os modelos de identificação e/ou modelos de quantificação, que deverão ser utilizados na hierarquia de modelos.

Desenvolver modelos de identificação

Se a hierarquia de modelos deva conter modelos de identificação, desenvolvê-los da seguinte forma.

1 Modelo principal

- Desenvolver um modelo de identificação para todos os produtos existentes (*ver capítulo 6, página 105*).
- Se for difícil distinguir produtos individuais uns dos outros, estes produtos podem ser combinados em um grupo de produtos:
 - No passo do processo **Selecionar amostras**, na área **Lista de produtos**, para os produtos a serem combinados, definir um nome comum na coluna **Grupo de produto**. No exemplo a seguir, os produtos **C1** e **C2** constituem, juntos, o grupo de produto **C**:

Lista de productos		
Producto	Quantidade de espectros	Grupo de productos
A		
B		
C1		C
C2		C

Consequentemente, o modelo trata o grupo de produto **C** como um produto individual. O modelo não classifica mais entre A/B/C1/C2, mas sim entre A/B/C.

 Se necessário, outros grupos de produto podem ser constituídos.

2 Submodelos

Para cada grupo de produto do modelo principal, desenvolver um modelo de identificação (*ver capítulo 6, página 105*).

No exemplo acima, um modelo subordinado é desenvolvido com todas as amostras que pertencem aos produtos **C1** e **C2**. Para isso, devem ser utilizadas as mesmas amostras do modelo principal para o grupo de produto **C**.

 Ao clicar com o botão direito em **Lista de produtos**, podem ser criados modelos subordinados para o grupo de produto definido.

3 Outros níveis hierárquicos

Se um modelo subordinado contiver mais de 2 produtos, também é possível resumir outros produtos em um grupo de produto, caso necessário. Para esse grupo de produto, desenvolver mais um modelo de identificação separado. Dessa forma, são criados níveis hierárquicos adicionais.

Desenvolver os modelos de quantificação

Se a hierarquia de modelos deva conter modelos de quantificação, desenvolvê-los da seguinte forma.

1 Modelos de quantificação para cada parâmetro de interesse

Desenvolver os modelos de quantificação apropriados para todos os parâmetros de interesse quantitativos (*ver capítulo 5, página 67*).

2 Modelos de quantificação subordinados

Se para um modelo de quantificação forem necessários modelos de quantificação subordinados, desenvolver os modelos de quantificação subordinados.

8.1.2 Inserir os modelos na hierarquia de modelos

Pré-requisito: todos os modelos a serem usados na hierarquia de modelos foram criados (*ver "Desenvolver modelos", página 142*) e publicados.

Os próximos passos são criar a hierarquia do modelo e inserir os modelos na hierarquia de modelos:

- Inserir o modelo principal publicado ou modelos de quantificação publicados.
- Vincular os submodelos publicados a grupos de produto.
- Vincular os modelos de quantificação publicados a produtos.
- Vincular os modelos de quantificação subordinados publicados com modelos de quantificação de nível superior.

Criar a hierarquia de modelos

1 Criar a hierarquia de modelos

- Em **Calibração e avaliação** ► **Hierarquias de modelos**, clicar em .
- Uma nova hierarquia de modelos é exibida em uma nova guia.

2 Denominar a hierarquia de modelos

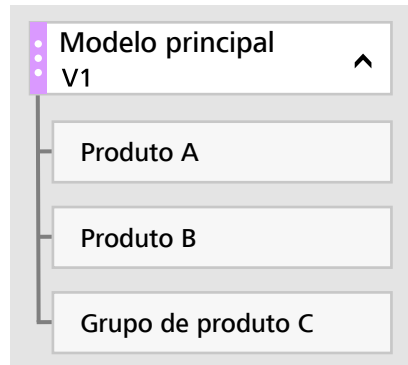
- Clicar em  na barra de ferramentas superior para abrir a janela **Propriedades**.
- Sob **Propriedades** ► **Geral**, no campo **Nome**, digitar o nome desejado.

Inserir os modelos de identificação na hierarquia de modelos

Se a hierarquia de modelos deva conter modelos de identificação, inseri-los da seguinte forma.

1 Adicionar o modelo principal

- O passo do processo **Editar a hierarquia de modelos** contém o editor de hierarquia de modelos. Primeiramente, o editor de hierarquia de modelos ainda está vazio.
- Com um clique em , abrir a janela **Biblioteca**.
- Em **Biblioteca** ► **Modelos de identificação**, puxar o modelo principal para a direita ao arrastar e soltar para inseri-lo no editor de hierarquia de modelos.



 A seta vertical é usada para dobrar e desdobrar os produtos.

 Se um modelo não puder ser encontrado na biblioteca:

- Certificar-se de que o modelo esteja publicado.
- Atualize a visualização na biblioteca clicando em .

2 Ligar modelo subordinado a um grupo de produtos

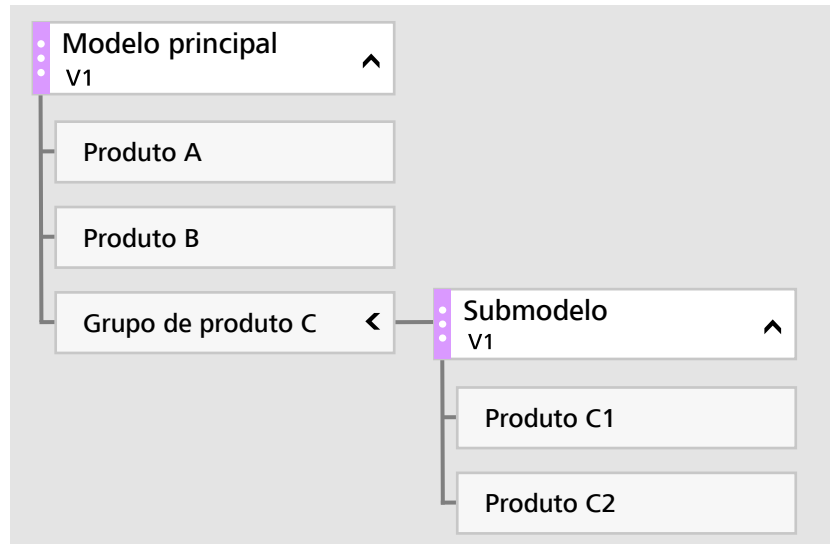
Se grupos de produtos foram definidos no modelo principal:

- Em **Biblioteca ► Modelos de identificação**, inserir o submodelo ao arrastar e soltar ao lado do grupo de produto correspondente. Uma linha vertical verde indica a posição de inserção:



- **Outros modelos subordinados e níveis hierárquicos**
Vincular mais modelos subordinados da mesma forma ao grupo de produto correspondente.

Exemplo: um submodelo está vinculado a um grupo de produtos.



 A seta horizontal é usada para dobrar e desdobrar o submodelo.

 Os submodelos podem ser vinculados a grupos de produtos ou a produtos.

3 Estipular versão a modelos

Os modelos contidos na hierarquia de modelos permanecem inalterados, mesmo que uma nova versão esteja publicada para um modelo. Se necessário, remover o modelo correspondente da hierarquia de modelos e inserir uma versão mais recente.

4 Salvar a hierarquia de modelos

- Clicar em ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

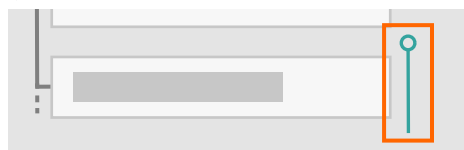
Inserir os modelos de quantificação na hierarquia de modelos

Se a hierarquia de modelos tiver que conter modelos de quantificação, inseri-los da seguinte forma.

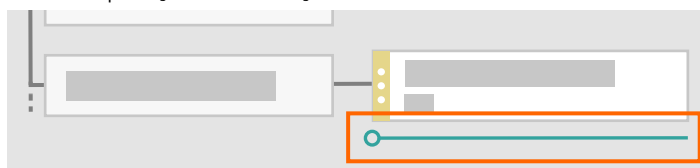
1 Hierarquia de modelos com modelos de identificação

Se a hierarquia de modelos também contiver modelos de identificação, os modelos de quantificação deverão ser vinculados aos produtos:

- Em **Biblioteca ► Modelos de quantificação**, inserir o modelo de quantificação arrastando e soltando ao lado do produto correspondente. Uma linha vertical verde indica a posição de inserção:

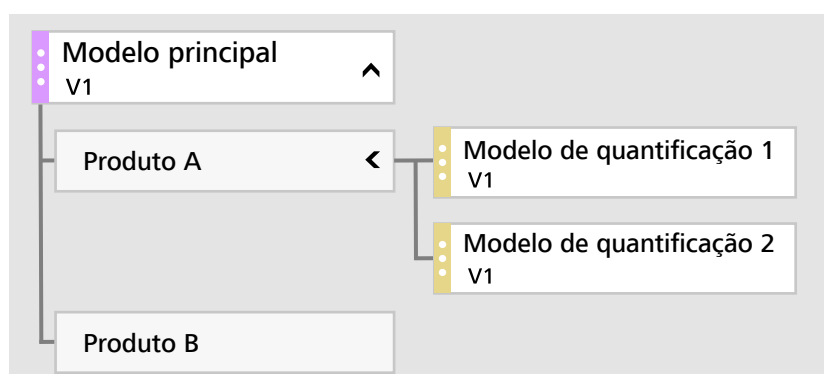


- Se for necessário prever vários parâmetros de interesse quantitativos para o mesmo produto:
 - Inserir os outros modelos de quantificação um abaixo do outro usando arrastar e soltar. Uma linha horizontal verde indica a posição de inserção:



- Se análises quantitativas forem planejadas para outros produtos, vincule os modelos de quantificação correspondentes da mesma maneira.

Exemplo: 2 modelos de quantificação estão vinculados a um produto.



i Os modelos de quantificação podem ser vinculados a grupos de produtos ou a produtos.

2 Hierarquia de modelos sem modelos de identificação

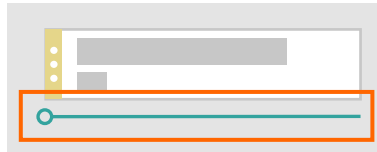
Se a hierarquia de modelos deva conter somente modelos de quantificação:

- O passo do processo **Editar a hierarquia de modelos** contém o editor de hierarquia de modelos. Primeiramente, o editor de hierarquia de modelos ainda está vazio.

- Com um clique em , abrir a janela **Biblioteca**.
- Em **Biblioteca** ► **Modelos de quantificação**, inserir o primeiro modelo de quantificação arrastando para direita e soltando no editor de hierarquia de modelos.



- Se a hierarquia de modelos tiver que prever vários parâmetros de interesse, inserir os modelos de quantificação adicionais um abaixo do outro usando arrastar e soltar. Uma linha horizontal verde indica a posição de inserção:

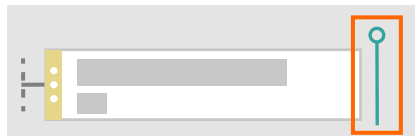


-  Se um modelo não puder ser encontrado na biblioteca:
- Certificar-se de que o modelo esteja publicado.
 - Atualize a visualização na biblioteca clicando em .

3 Modelos de quantificação subordinados

Para adicionar modelos de quantificação subordinados à hierarquia de modelos, proceder da seguinte forma:

- Sob **Biblioteca** ► **Modelos de quantificação**, inserir o modelo de quantificação subordinado usando arrastar e soltar ao lado do modelo de quantificação de nível superior. Uma linha vertical verde indica a posição de inserção:



- No diálogo **Adicionar a condição**, especificar a condição sob a qual o modelo de quantificação subordinado deve ser aplicado. A condição deve incluir um subconjunto dos valores previstos do modelo de quantificação de nível superior, p. ex. < 5 . Após a adição da condição, o modelo de quantificação subordinado é então vinculado ao modelo de quantificação de nível superior.

-

- Em **Propriedades** ► **Parâmetros**, definir a correção da interceptação do eixo y / slope.



O símbolo ↗ indica que o modelo de quantificação está vinculado a uma correção da interceptação do eixo y / slope. O resultado corrigido é usado na verificação de condições para quaisquer modelos de quantificação subordinados.

5 Versionar os modelos e correções da interceptação do eixo y / slope

Os modelos e correções da interceptação do eixo y / slope contidos na hierarquia de modelos permanecem inalterados, mesmo que uma nova versão do modelo ou da correção da interceptação do eixo y / slope seja publicada. Se necessário, remover o modelo ou a correção da interceptação do eixo y / slope correspondente da hierarquia de modelos e inserir uma versão mais recente.

6 Salvar a hierarquia de modelos

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

8.2 Validar a hierarquia de modelos

Hierarquias de modelos com modelos de quantificação

Nenhum modelo de quantificação é avaliado ao validar as hierarquias de modelos. Para modelos de quantificação com modelos de quantificação subordinados, no entanto, é verificado se os seguintes pré-requisitos são atendidos:

- As condições devem abranger todo o intervalo de números racionais.
- As condições não devem estar sobrepostas.

Verificar as condições

- Clicar em **Validar internamente**.
- Se nenhuma mensagem de erro for exibida, os pré-requisitos foram atendidos.
- Caso contrário, a mensagem de erro informará onde e por que os pré-requisitos não foram atendidos.

Validação interna ou validação externa

Para hierarquias de modelos com modelos de identificação, o passo do processo **Validar a hierarquia de modelos** 2 oferece diferentes validações:

- **Validação interna**

A validação interna utiliza o conjunto de dados de calibração e, se disponível, o conjunto de dados de validação do modelo principal.

- **Validação externa**

A validação externa utiliza um conjunto de dados separado externo. Para o conjunto de dados externo, as amostras são coletadas e medidas em um dia diferente, se possível por uma pessoa diferente e usando um equipamento diferente.

Validar a hierarquia de modelos

Pré-requisito:

- Na barra de funções **Calibração e avaliação**, a hierarquia de modelos foi criada, está aberta e em primeiro plano (*ver capítulo 8.1, página 142*).
- Se for feita uma validação externa, está disponível um conjunto de dados correspondente com espectros e nomes de produtos (*ver "Registrar os espectros", página 62*).

1 Alternar para o passo do processo 'Validação'

- No navegador, alternar para o passo do processo Validação clicando em **Validar a hierarquia de modelos**.

2 Efetuar a validação interna ou validação externa

Validação interna

- Clicar em **Validar internamente**.



A validação interna utiliza somente espectros do modelo principal (conjunto de dados de calibração e, se disponível, conjunto de dados de validação). Outliers e espectros adicionais em modelos subordinados não são incluídos.

Validação externa

- Clicar em **Validar externamente**.
- Selecionar amostras de Listas de amostras ou de Resultados de busca.
A seleção deve conter amostras com um parâmetro de produto. A coluna **Produto** lista os produtos contidos.
- Clicar em **[Validar]**.

3 Verificar os resultados de validação

- No passo do processo **Validar a hierarquia de modelos**, verificar a área **Visão geral de validação**. A Visão geral de validação resume os resultados da mesma forma que em um modelo individual (*ver "Área Visão geral de validação", página 115*). Ao fazer isso, a hierarquia de modelos é considerada como um único modelo grande. O resultado de validação de um espectro pode ser bem-sucedido ou falhar.
 - Verificar resultados de espectros individuais:
 - Na área **Visão geral de validação**, selecionar todos os produtos cujos espectros individuais devam ser exibidos.
 - A área **Resultados de validação** lista os espectros dos produtos selecionados.
- Resultado da hierarquia de modelos** mostra o respectivo resultado final da hierarquia de modelos. Em seguida, é apresentada a avaliação passo a passo para cada nível hierárquico. O **Resultado do nível 1** mostra o resultado do modelo principal. A seguir, seguem os resultados dos respectivos modelos subordinados em todos os outros níveis hierárquicos.

8.3 Publicar a hierarquia de modelos

Para que uma hierarquia de modelos possa ser usada para determinações, a hierarquia de modelos deve ser publicada.

Publicar jerarquía de modelos

Pré-requisito:

- A hierarquia de modelos está salva.
- A validação é opcional. A Metrohm recomenda executar uma validação.
- A hierarquia de modelos está aberta.

1 Abrir o diálogo

- Clicar em  para abrir o diálogo **Publicar hierarquia de modelos**.

i Se a hierarquia de modelos já tiver sido publicada e utilizada em métodos anteriormente, esses métodos podem ser atualizados automaticamente ao ativar a caixa de controle **Atualizar métodos**.

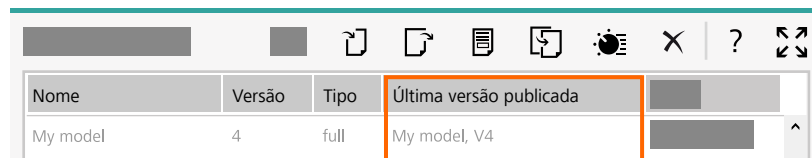
Aviso: não serão atualizados automaticamente:

- Métodos abertos
- Métodos assinados e publicados
- Se o filtro de permissões de dados estiver ativado: métodos sem permissões de dados do usuário que fez login atualmente

2 Publicar

- Clicar em **[Publicar]** para publicar a hierarquia de modelos.

Em **Calibração e avaliação ► Hierarquias de modelos**, é exibida a última versão publicada:



Nome	Versão	Tipo	Última versão publicada
My model	4	full	My model, V4

O comando **PREDICT** poderá acessar a versão publicada da hierarquia de modelos.

9 Previsão

Na previsão, um modelo é aplicado ao espectro de uma amostra desconhecida. Dependendo do modelo, o seguinte pode ser previsto:

- Parâmetros de interesse (quantificação)
- Pertencimento de produto ou resultado de verificação (identificação)
- Resultado de qualificação (qualificação)

 As amostras para a previsão devem ser tratadas igualmente e medidas como as amostras com as quais o modelo foi criado.

 Um esclarecimento da sequência no OMNIS Software pode ser encontrado no anexo (*ver "Previsão", página 194*).

9.1 Preparar a previsão

Para a preparação da previsão, criar um método, um procedimento operacional, um perfil da amostra e uma lista de amostras da forma descrita a seguir. Os métodos contêm um comando **PREDICT** que estabelece uma conexão com o modelo.

Elaborar o método

1 Assumir e nomear método

Os espectros devem ser registrados com as mesmas configurações que os espectros para o desenvolvimento de modelo. A forma mais fácil é assumir o método utilizado para o desenvolvimento de modelo (ver "Preparar o registro do espectro", página 50).

- Em **Processos** ► **Métodos**, selecionar o método que foi utilizado para o desenvolvimento de modelo.
- Duplicar o método selecionado ao clicar em .
- Abrir o método duplicado ao clicar duas vezes no nome do método.
- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades** ► **Geral**, inserir um nome adequado no campo **Nome**.

2 Inserir o comando PREDICT

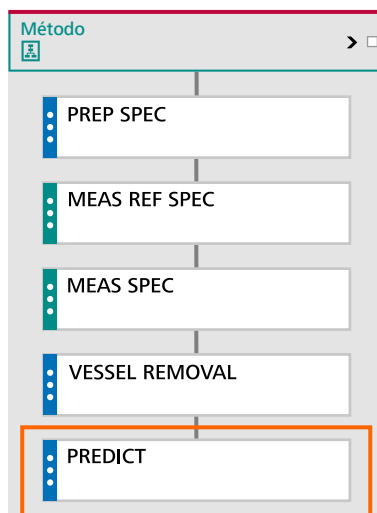
PREDICT cria uma previsão para o espectro registrado.

- Abrir a janela **Biblioteca** ao clicar em .
- Em **Biblioteca** ► **Comandos**, procurar o comando **PREDICT** e inserí-lo no método por meio de arrastar e soltar.

Observar a ordem correta dos comandos:

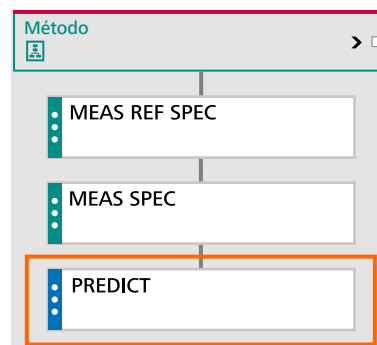
Amostras de líquidos

Estrutura básica



Amostras de sólidos

Estrutura básica



O comando **PREDICT** também pode estar antes ou ao lado do comando **VESSEL REMOVAL**.

3 Configurar parâmetro de comando PREDICT

- Selecionar o comando PREDICT.
- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .

- Sob **Propriedades** ► **Parâmetros**, definir os parâmetros de comando:
 - **Referenciar espectro**
Abrir a lista **Nome do comando de medição**. Selecionar o nome do comando **MEAS SPEC** que vai registrar o espectro a ser avaliado.
 - **Referenciar o modelo**
Selecionar o **Estrutura** do modelo: **Modelo único** ou **Hierarquia de modelos**.
 - Se a estrutura **Modelo único** foi selecionada, selecionar **Tipo de modelo**: modelo de quantificação, modelo de identificação ou modelo de qualificação.
 - Selecionar o modelo publicado ou a hierarquia de modelos publicada.
Quantificação: Se necessário, selecionar uma correção da interceptação do eixo y / slope.
Verificação: Se o modelo de identificação ou hierarquia de modelos for usado para verificação, ligar a opção **Utilizar para a verificação**.

4 Diversos parâmetros de interesse (quantificação)

Se for necessário prever mais de um parâmetro de interesse para cada amostra (*ver "Diversos parâmetros de interesse (quantificação)", página 161*), proceder da seguinte forma:

- Para cada parâmetro de interesse, inserir um comando **PREDICT**.
Aviso: uma hierarquia de modelos requer apenas um comando **PREDICT**, independentemente do número de modelos de quantificação que contém.
- Para cada comando **PREDICT**, definir o parâmetro de comando da forma descrita anteriormente. Todos os comandos **PREDICT** referenciam o mesmo espectro, mas para cada parâmetro de interesse deve haver um modelo de quantificação diferente.

5 Salvar o método

- Validar o método ao clicar em .
- Salvar o método clicando em  ou pressionando as teclas **[CTRL]+[S]**.

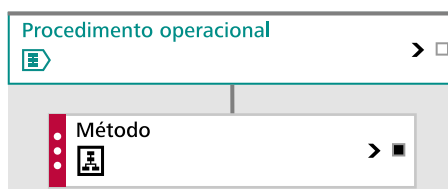
Elaborar o procedimento operacional

1 Criar e nomear o procedimento operacional

- Em **Processos** ► **Procedimentos operacionais**, clicar em +. O novo procedimento operacional é exibido em uma guia.
- Abrir a janela **Propriedades** ao clicar em .
- Em **Propriedades** ► **Geral**, inserir um nome adequado no campo **Nome**.

2 Inserir o método

- Abrir a janela **Biblioteca** ao clicar em .
- Inserir o método criado ao arrastar e soltar **Biblioteca** ► **Métodos** no procedimento operacional.



3 Definir monitoramento de resultado (opcional)

- Na **Quantificação**, é possível utilizar um monitoramento de resultado. Exemplo: monitorar se o resultado da análise permanece dentro de determinados limites, p. ex., dentro da faixa de valores de referência da amostra de calibração.

Na **Identificação**, geralmente não é utilizado o monitoramento de resultado. Porém, se necessário, é possível monitorar da mesma forma a variável de comando '**IdentificationProbability.Final.nome do comando**'.

- Clicar em .
- Com um clique em , abrir a janela **Propriedades**.
- Selecionar a subárea **Propriedades** ► **Monitoramento de resultado**.
- Clicar em **[Monitorar resultados]**.

Elaborar o perfil da amostra

Um perfil da amostra simplifica a criação de diversas amostras do mesmo tipo.

1 Assumir e nomear perfil da amostra

Assumir o perfil da amostra utilizado para o desenvolvimento de modelo (ver "[Preparar o registro do espectro](#)", página 50).

- Em **Amostras** ► **Perfis da amostra**, selecionar o perfil da amostra que foi utilizado para o desenvolvimento de modelo.
- Duplicar o perfil da amostra selecionado ao clicar em .
- Abrir o perfil da amostra duplicado ao clicar duas vezes no nome do perfil da amostra.
- Inserir um nome adequado no campo **Nome do perfil da amostra**.

2 Campo de introdução para o nome da amostra

Se necessário, adaptar o valor padrão para o nome da amostra.

Dados da amostra

Nome do campo, curto

Nome

Nome do campo, longo

Nome

Tipo de campo de introdução

Texto ▼

Utilizar como

Campo de introdução ▼

▲ Propriedades campo de introdução

Valor padrão

My Sample name

3 Parâmetros de referência / parâmetros de produto

O perfil da amostra contém dados da amostra para o parâmetro de referência (Quantificação) ou para o parâmetro de produto (identificação, verificação).

- **Quantificação e identificação:** dados da amostra não são obrigatórios para a previsão. O campo de introdução pode ser excluído ou usado para amostras de controle. As amostras de controle servem para o monitoramento do modelo e do equipamento, assim como para confirmar se o sistema continua a ser adequado para a execução de análises.
- **Verificação:** Nos dados da amostra é definido o produto para o qual a amostra é verificada:
 - **Tipo de campo de introdução:** **Lista de seleção**
 - O campo de introdução do produto deve ser criado para uso como produto: **Utilizar como: Produto**
 - Os elementos da lista com os nomes dos produtos já devem existir.
 - **Valor padrão:** **Vazio**
 - Ativar a caixa de controle **Permitir campo vazio e Forçar a entrada.**
- **Qualificação:** dados de amostra específicos não são necessários para previsão.

4 Adicionar outros dados da amostra (opcional)

- Na área **Dados da amostra**, se necessário adicionar um campo de introdução clicando em  .

5 Definir o procedimento operacional e o número de subamostras

- Na área **Procedimentos operacionais / Subamostras**, selecionar o procedimento operacional criado.
- Definir a quantidade de subamostras: **1**





Procedimentos operacionais / Subamostras



	Procedimentos operacionais	Quantidade de subamostras
1		1

6 Salvar o perfil da amostra

- Clicar em ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Elaborar a lista de amostras

1 Criar e nomear a lista de amostras

- Em **Amostras** ► **Listas de amostras**, clicar em +.
Uma nova guia é aberta.

- Inserir um nome adequado no campo **Nome**.

Lista de amostras 

2 Adicionar as amostras

- Na lista de seleção à esquerda do ícone , selecionar o perfil da amostra criado.

A seguir, as amostras adicionadas serão criadas conforme as especificações no perfil da amostra selecionado.

- Clicar em  para adicionar uma nova amostra à lista de amostras. Adicionar a quantidade necessária de amostras. Cada linha da lista de amostras contém uma amostra identificada com o ícone . À direita delas seguem os dados da amostra. E, depois disso, segue a subamostra identificada com  e os dados da subamostra. As amostras serão criadas conforme as especificações no perfil da amostra selecionado. Cada amostra contém 1 subamostra que utiliza o procedimento operacional definido.

	Nome da amostra	Nome dos parâmetros de referência		N.º	Nome da subamostra	Procedimento operacional
	Amostra 1	%		1	Subamostra 1	
	Amostra 2	%		2	Subamostra 2	
	Amostra 3	%		3	Subamostra 3	

Figura 6 Lista de amostras (exemplo para quantificação)

- O nome da amostra e o nome da subamostra podem ser editados, se necessário.
- Verificação: se o produto para o qual as amostras estão sendo verificadas já for conhecido:
 - Selecionar o produto no campo de introdução do produto.

3 Salvar a lista de amostras

- Clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

9.1.1 Diversos parâmetros de interesse (quantificação)

Para prever diversos parâmetros de interesse quantitativos para cada amostra, utilizar as seguintes modificações no desenvolvimento de modelo e na preparação da previsão.

Amostras para o desenvolvimento de modelos de quantificação

- Preparar o registro do espectro

No perfil da amostra, adicionar um campo de introdução separado para cada parâmetro de referência.

Dados da amostra

Nome do campo curto

H2O

Nome do campo longo

Nome do campo curto

Methyl acetate

Nome do campo longo

Nome do campo curto

Methanol

Nome do campo longo

Tipo de campo de introdução

Número

Usar como

Campo de introdução

▲ Campo de introdução Propriedades

Valor padrão

Valor mínimo

0

Valor máximo

5

Unidade

%

☒ Campo editável
 ☒ Permitir campo vazio
 ☐ Entrada obrigatória

Tipo de campo de introdução

Número

Usar como

Campo de introdução

▲ Campo de introdução Propriedades

Valor padrão

Valor mínimo

0

Valor máximo

50

Unidade

%

☒ Campo editável
 ☒ Permitir campo vazio
 ☐ Entrada obrigatória

Tipo de campo de introdução

Número

Usar como

Campo de introdução

▲ Campo de introdução Propriedades

Valor padrão

Valor mínimo

49

Valor máximo

99,7

Unidade

%

☒ Campo editável
 ☒ Permitir campo vazio
 ☐ Entrada obrigatória

A lista de amostras contém um campo de introdução para cada parâmetro de referência.

	Nome da amostra	H2O	Methyl acetate	Methanol				
		%	%	%				
		%	%	%				
		%	%	%				
		%	%	%				

- **Registrar espectros**

Registrar os espectros como de costume.

Desenvolver os modelos de quantificação

- Criar um modelo de quantificação separado para cada parâmetro de interesse.

Preparar a previsão

Variante 1: com hierarquia de modelos

Esta variante requer a criação de uma hierarquia de modelos que contenha todos os modelos de quantificação. Se necessário, a hierarquia de modelos também oferece a possibilidade de obter melhor capacidade de previsão usando modelos de quantificação subordinados.

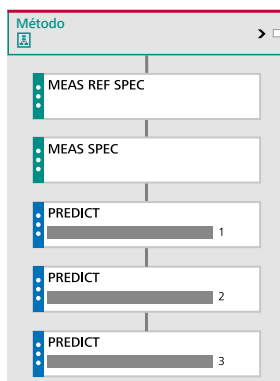
No método, apenas um único comando **PREDICT** é necessário:

- Criar a hierarquia de modelos (ver *"Inserir os modelos na hierarquia de modelos"*, página 143).
- Inserir os modelos de quantificação na hierarquia de modelos (ver *"Inserir os modelos na hierarquia de modelos"*, página 143).
- Referenciar a hierarquia de modelos no método no comando PREDICT.

Variante 2: vários comandos PREDICT

Esta variante requer vários comandos **PREDICT** no método. Cada comando referencia um modelo de quantificação:

- Para cada parâmetro de interesse, inserir um comando **PREDICT** no método:



- Nomear cada comando **PREDICT** com o nome de um dos parâmetros de interesse.
- Referenciar o modelo de quantificação apropriado em cada comando **PREDICT**.
- Referenciar o mesmo espectro em cada comando **PREDICT**, ou seja, o mesmo comando **MEAS SPEC**.

9.2 Iniciar a previsão



ATENÇÃO

Substâncias inflamáveis sobre superfície quente

Risco de incêndio e queimaduras ao derramar substâncias inflamáveis. Amostras, frascos de amostra, suportes de amostra e apresentações de amostra podem atingir temperaturas de até 85 °C.

- Evitar fontes de ignição.
- Utilizar proteção de aterramento.
- Utilizar um dispositivo de sucção.
- Eliminar imediatamente líquidos e sólidos derramados.



CUIDADO

Aumento do volume da amostra devido ao aquecimento

Ferimentos e riscos à saúde causados por transbordamento, quebra do recipiente da amostra ou pela tampa lançada com violência.

- Encher o recipiente de amostra somente até a altura mínima de 2 cm. O líquido pode aumentar de volume no espaço restante. Alternativamente, usar tampas com perfurações capilares.
- Pressionar suavemente a tampa para que o recipiente de amostra não seja danificado.



CUIDADO

Frasco de amostra quente

Queimaduras na pele ao entrar em contato com superfícies quentes ou líquidos quentes. Amostras, frascos de amostra, suportes de amostra e apresentações de amostra podem atingir temperaturas de até 85 °C.

- Usar equipamentos de proteção pessoal e luvas resistentes a altas temperaturas.
- Eliminar imediatamente líquidos e sólidos derramados.

Iniciar a previsão

Pré-requisitos:

- A previsão está preparada (ver "Preparar a previsão", página 154).
- O espectrômetro está reservado (ver "Reservar e liberar os equipamentos", página 27).
- O suporte de amostra correto foi colocado. O suporte de amostra deve ser adequado ao recipiente de amostra utilizado.

1 Abrir a lista de amostras

- Se a lista de amostras tiver sido fechada, abrir a lista de amostras em **Amostras ► Listas de amostras** ao clicar duas vezes.



Verificação

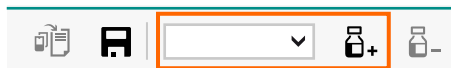
Para verificação, o produto para o qual a amostra está sendo verificada deve ser definido nos dados da amostra. O campo de introdução do produto deve ser criado para uso como produto. Maiúsculas/minúsculas não são relevantes.

Se o nome de um grupo de produto vinculado a outro modelo de identificação for inserido no campo de entrada do produto, a verificação sempre falhará. O mesmo se aplica a um produto, que está vinculado a um outro modelo de identificação.

2 Adicionar outras amostras (opcional)

Se forem necessárias outras amostras:

- Na lista de seleção à esquerda do ícone , selecionar o perfil da amostra criado.



Amostras novas adicionadas serão criadas conforme as especificações no perfil da amostra selecionado.

- Ao clicar em , adicionar novas amostras à lista de amostras.
- O nome da amostra e o nome da subamostra podem ser editados, se necessário.
- Verificação: no campo de introdução do produto, selecionar o produto para o qual a amostra será verificada.
- Salvar a lista de amostras: clicar em  ou pressionar as teclas [CTRL]+[S].

3 Executar as determinações

AVISO

Danos no sensor de temperatura durante o controle de temperatura no recipiente de amostra

Se o recipiente de amostra for retirado enquanto o sensor estiver em contato direto com o recipiente de amostra, o sensor pode ser danificado.

- Só retirar o recipiente de amostra quando a medição estiver terminada e o sensor de temperatura estiver afastado do recipiente de amostra.
- Selecionar a subamostra a ser analisada de uma das seguintes formas:
 - Selecionar a subamostra ao clicar no ícone .
 - Para fins de análise, basta selecionar uma única célula da subamostra.
- Preparar a amostra física correspondente. Colocar o recipiente de amostra no suporte de amostra.
- Iniciar a determinação ao clicar em . Um número no botão informa quantas subamostras serão executadas.

- O procedimento operacional atribuído à subamostra será iniciado. Seguir eventuais instruções na área **Curvas e dados ► Dados online**. Se a temperatura no recipiente de amostra for controlada, retirar o recipiente de amostra somente depois da solicitação.
- Após a conclusão bem-sucedida da análise, o status da subamostra é exibido como .
- Executar as determinações para todas as outras amostras da mesma forma.
-  A temperatura alvo pode ser no máx. 5,0 K abaixo da temperatura ambiente.
-  Se os processos forem adequados para determinações em série, podem ser selecionadas ao mesmo tempo várias subamostras. Alternativamente,  inicia todas as subamostras executáveis em uma lista de amostras.
- Amostras de líquidos: o comando **VESSEL REMOVAL** possibilita determinações em série.
 - Amostras de sólidos: para a execução de determinações em série, devem ser previstas ações do usuário (por exemplo, com o comando **WAIT**).

Resultados de previsão

Os resultados de previsão das amostras seleccionadas podem ser encontrados na área **Resultados ► Previsões** (ver capítulo 9.3, página 166).

9.3 Resultados de previsão

Exibir os resultados de previsão:

- Selecionar uma ou várias subamostras.
- Os resultados da previsão de todas as subamostras selecionadas e já analisadas podem ser encontrados sob **Amostras ► Lista de amostras ► Resultados ► Previsões**.

Exemplo para quantificação, subárea **Visão geral**:

Resultados		Predições	Visão geral	?	↕
Informação da amostra			Resultados de quantificação		
N.º	Nome da amostra	Nome da subamostra	H2O / %		
1			4.7		
2			6.1		
3			8.0		

Várias subáreas estão disponíveis:

- A subárea **Visão geral** exibe os resultados finais para cada subamostra.
- A subárea **Visualização detalhada** exibe resultados detalhados de previsão para cada subamostra. Caso tenham sido utilizados modelos ou hierarquias de modelos diferentes, seus resultados serão apresentados em tabelas separadas. Uma subamostra pode aparecer em várias tabelas. Se necessário, as respectivas propriedades do modelo podem ser exibidas.
- Quantificação: na subárea **Pós-processamento**, as subamostras avaliadas podem ser avaliadas usando outros modelos de quantificação.
- Hierarquia de modelos: na subárea **Pós-processamento**, as subamostras avaliadas podem ser avaliadas usando uma hierarquia de modelos diferente.

 Se necessário, os resultados de previsão também podem ser exibidos nos dados da subamostra (ver "*Variáveis de comando PRE-DICT*", página 178).

Dependendo do modelo, os resultados são exibidos da seguinte forma:

Resultados em Amostras ► Lista de amostras ► Resultados ► Previsões		
	Subárea Visão geral	Subárea Visualização detalhada
Quantificação	Resultado de quantificação (inclusive Correção da interceptação do eixo y / slope)	▪ Valor calculado: resultado de previsão sem Correção da interceptação do eixo y / slope ▪ Valor corrigido: resultado de previsão com Correção da interceptação do eixo y / slope Aviso: se nenhuma correção da interceptação do eixo y / slope tiver sido utilizada, o valor corrigido é idêntico ao valor calculado. ▪ Hotelling T² e Resíduos Q são exibidos caso o valor limite correspondente seja excedido.
Identificação	Resultado de identificação: ▪ Se a identificação for bem-sucedida: nome do produto identificado. ▪ Se a identificação falhar: o status da identificação (Não identificado ou Ambíguo).	Adicionalmente: ▪ Probabilidade do produto identificado

Resultados em Amostras ► Lista de amostras ► Resultados ► Previsões		
	Subárea Visão geral	Subárea Visualização detalhada
Verificação	▪ Resultado de identificação ▪ Resultado de verificação: Com êxito ou Falhou	Adicionalmente: ▪ Produto esperado ▪ Probabilidade do produto identificado
Qualificação	Resultado de qualificação: Com êxito ou Falhou	Adicionalmente: ▪ Agrupamento por modelos ▪ Propriedades do modelo
Hierarquia de modelos	Os resultados finais de identificação, quantificação e verificação devem ser listados lado a lado. Aviso: se a identificação falhar, a quantificação não poderá ser realizada.	Os resultados de previsão detalhados para todos os modelos utilizados são listados lado a lado, cada um com uma indicação do nível hierárquico. Para os modelos de quantificação subordinados, a condição definida para a execução do modelo também deve ser especificada.

Advertência de status para subamostras

- Verificar as subamostras na lista de amostras. Caso ocorram erros ou avisos, uma advertência de status será exibido:



- Os resultados de previsão afetados são marcados com o ícone de status .
- Manter o cursor sobre um dos ícones para exibir as respectivas causas.
- As causas podem ser:
- Erro no teste de execução antes de determinar a subamostra.
 - Identificação: a identificação da amostra falhou (Não identificado ou Ambíguo).
 - Verificação: a verificação da amostra falhou.
 - Qualificação: a qualificação da amostra falhou.
 - Quantificação: o espectro registrado é um outlier espectral (outlier Hotelling T^2 ou outlier resíduos Q).
 - Quantificação: ultrapassagem dos limites definidos no monitoramento de resultado (consultar o item a seguir).

Quantificação: limites de advertência e limites de intervenção

Se um monitoramento de resultado estiver definido no procedimento operacional (*ver "Elaborar o procedimento operacional", página 157*), o status de monitoramento pode ser verificado da seguinte forma:

- Abrir a área **Resultados** ► **Previsões** ► **Monitoramento**.

- Selecionar a subamostra cujo status de monitoramento deve ser verificado.

Aviso: caso sejam selecionadas diversas amostras, será exibido o status da última amostra em que o usuário clicou.

Conforme o valor do resultado, é exibido um ícone de status:

	O valor está dentro dos Limites de advertência definidos.
	O valor está fora dos Limites de advertência definidos, mas está dentro dos Limites de intervenção definidos.
	O valor está fora dos Limites de intervenção definidos.

Verificação visual dos espectros (opcional)

- Abrir a área **Curvas e dados** ► **Curvas**.
- Exibir o espectro individual:
 - Na lista de amostras, selecionar a subamostra correspondente (marcada com o ícone .
- Exibir vários espectros:
 - Ativar a sobreposição de curvas clicando em .
 - Selecionar várias subamostras na lista de amostras usando as teclas **[CTRL]** ou **[SHIFT]**.
- Verificar os espectros (*ver capítulo 11.3, página 174*).

- Repetir os testes de desempenho do equipamento.
 - Se o teste de comprimento de onda falhar, repetir a calibração do comprimento de onda. Depois disso, se o teste de comprimento de onda falhar novamente, entrar em contato com o representante técnico da Metrohm local.
 - Se o teste de ruído falhar, entrar em contato com o representante técnico da Metrohm local.
 - Se o teste da linearidade fotométrica falhar, entrar em contato com o representante técnico da Metrohm local.

10.2 Calibração do comprimento de onda

Após determinadas ações, deve ser executada uma calibração do comprimento de onda para o equipamento no OMNIS Software. (ver ["Iniciar a calibração do comprimento de onda"](#), página 37)

Tarefa	Comando OMNIS	Intervalo de execução recomendado	Resultado
Calibração do comprimento de onda	CAL WL e VAL WL	Após trocar componentes de hardware. Após o transporte do equipamento por tempo prolongado.	O eixo x do espectro está calibrado.

10.3 Manutenção do equipamento

A manutenção do equipamento deve ser feita regularmente.

Tarefa	Intervalo de execução	Resultado
Manutenção pelo representante técnico da Metrohm local	Anualmente. Caso necessário, com maior frequência.	O equipamento continua correspondendo às especificações técnicas. As esteiras filtrantes foram verificadas e, se necessário, substituídas. O padrão de comprimento de onda interno foi recertificado.



Recertificar os padrões de referência externos

Se padrões de referência forem usados para testes de desempenho do equipamento externos, esses padrões deverão ser recertificados periodicamente.

- Observar a próxima data de calibração recomendada no certificado.



11 Anexo

11.1 Relatórios

No OMNIS Software, há diversas opções para a criação automática ou manual de relatórios (consultar a [Metrohm Knowledge Base](#)).

 Geralmente, os relatórios informam o nome do usuário informado no Windows, que pode ser diferente do nome do usuário no OMNIS.

11.2 Manuseio de tabelas

Tabelas em modelos e hierarquias de modelos podem ser manuseadas conforme descrito abaixo. As técnicas descritas também podem ser utilizadas para outras tabelas.

Maximizar e minimizar a área

- Maximizar a subárea que contém a tabela com um clique em .
- Minimizar a subárea com um clique em .

Alterar as larguras de coluna

1. Posicionar o cursor na barra de título entre a primeira e a segunda coluna.
O cursor muda para .
2. Com o botão esquerdo do mouse pressionado, deslocar o cursor para a direita ou para a esquerda.
3. Quando a largura desejada para a primeira coluna for atingida, solte o botão do mouse.
4. Ajustar as outras colunas uma após a outra da mesma maneira.

Ordenar as linhas da tabela

1. Clicar no título de uma coluna para ordenar as linhas em relação a essa coluna.
2. Se necessário, inverter a ordem de classificação clicando novamente no título de coluna.

Selecionar uma ou várias linhas da tabela

Nova seleção:

- Clicar em uma única linha.
ou

1. Clicar com o botão direito no diagrama.
2. No menu de contexto, selecionar **[Exibir/ocultar janela de detalhes]**.

Fazer zoom

Fazer zoom com a roda do mouse:

1. Posicionar o cursor no diagrama.
2. Com a roda do mouse, girar para frente para aumentar e para trás para diminuir.
 - a. Fazer zoom apenas verticalmente: pressionar a tecla **[CTRL]** ao mesmo tempo.
 - b. Fazer zoom apenas horizontalmente: pressionar a tecla **[SHIFT]** ao mesmo tempo.

Fazer zoom com o botão do mouse:

- Com o botão esquerdo do mouse pressionado, expandir uma área começando no canto inferior esquerdo ou superior esquerdo.
ou
- Manter pressionadas as teclas **[CTRL]+[SHIFT]** e pressionar o botão esquerdo do mouse para ampliar e o botão direito do mouse para diminuir.
 - Fazer zoom somente verticalmente: com a tecla **[CTRL]** pressionada, pressionar o botão esquerdo do mouse para ampliar e o botão direito do mouse para diminuir.
 - Fazer zoom somente horizontalmente: com a tecla **[CTRL]** pressionada, pressionar o botão esquerdo do mouse para ampliar e o botão direito do mouse para diminuir.

Fazer zoom com os elementos de zoom:

1. Posicionar o cursor sobre um dos elementos de zoom verdes no começo ou no fim do eixo x ou do eixo y.
O cursor muda para  ou .
2. Com o botão esquerdo do mouse pressionado, mover o cursor ao longo do eixo ou além do eixo.
3. Assim que a visualização desejada for alcançada, soltar o botão do mouse.

Deslocar a área exibida

Deslocar na direção desejada:

1. Posicionar o cursor no diagrama.
2. Deslocar a área exibida em uma direção desejada mantendo o botão direito do mouse pressionado.
3. Assim que a visualização desejada for alcançada, soltar o botão do mouse.

- **Ativar a seleção múltipla**

Clicar em **Ativar a seleção múltipla**.

Uma parte das funções acima para personalização do diagrama é substituída pelas seguintes funções.

- **Nova seleção**

Com o botão esquerdo do mouse pressionado, expandir uma área.

Todos os pontos dentro da área são selecionados. Os pontos fora da área são desmarcados.

- **Expandir a seleção**

Com o botão **[SHIFT]** pressionado, clicar em pontos individuais ou expandir uma área.

Os pontos correspondentes são selecionados. A seleção dos pontos restantes permanece inalterada.

- **Reduzir a seleção**

Com o botão **[ALT]** pressionado, clicar em pontos individuais ou expandir uma área.

Os pontos correspondentes são desmarcados. A seleção dos pontos restantes permanece inalterada.

- **Inverter a seleção**

Com o botão **[CTRL]** pressionado, clicar em pontos individuais ou expandir uma área.

A seleção dos respectivos pontos é invertida. A seleção dos pontos restantes permanece inalterada.

- **Cancelar a seleção**

Clicar na área vazia do diagrama.

- **Desativar a seleção múltipla**

Clicar em **Desativar a seleção múltipla**, para poder usar as funções padrão de modo a personalizar o diagrama novamente.

Copiar o diagrama para a área de transferência do Windows

1. Clicar com o botão direito no diagrama.
2. No menu de contexto, selecionar **[Copiar diagrama]**.

O diagrama pode agora ser inserido em qualquer arquivo.

- Identificação: **Product.Identification.Result.nome do comando**
O produto determinado ou o grupo de produtos determinados da amostra identificada. Se a identificação falhar, a variável permanece vazia.

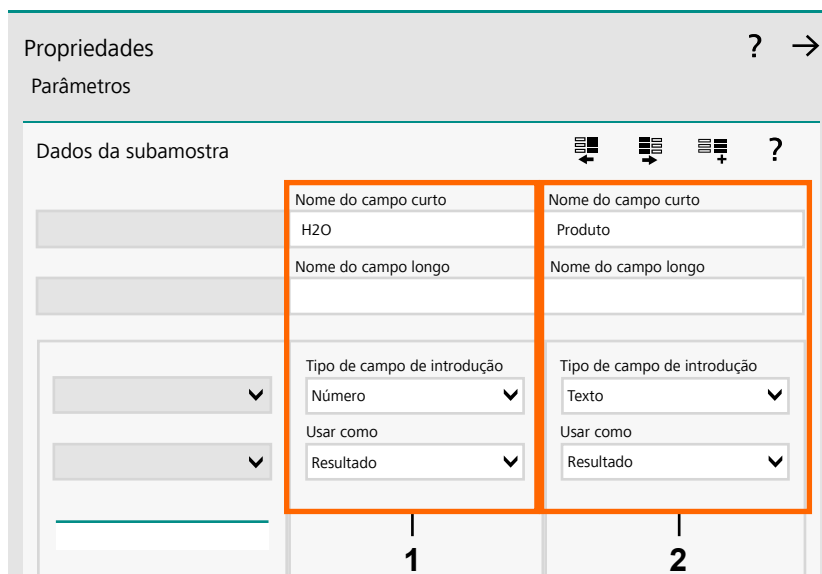
Pré-requisito:

Para a preparação da previsão, foi criado um método e um procedimento operacional (*ver "Preparar a previsão", página 154*).

1 Criar dados da subamostra

- Abrir o procedimento operacional correspondente.
- Clicar em .
- Abrir **Propriedades ► Parâmetros**.
- Clicar em  para criar um campo de dados da subamostra.
 - Informar como **Nome do campo, curto** um nome adequado para o resultado previsto ou inserir o produto determinado.
 - **Quantificação**: para a criação de um campo de dados numérico como **Tipo de campo de introdução**, selecionar a opção **Número**.
Identificação: para a criação de um campo de dados numérico como **Tipo de campo de introdução**, selecionar a opção **Texto**.
 - O campo de dados deve ser preenchido com o resultado de um comando **CALC**. Portanto, selecionar em **Utilizar como** a opção **Resultado**.
Aviso: campos de entrada para um **Resultado** não podem ser editados manualmente.

Exemplo para quantificação (1) e para identificação (2):



- Salvar o procedimento operacional: clicar em ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

 O nome de variável para os dados da subamostra criados depende do **Nome do campo, curto** selecionado:
'Nome do campo curto.CurrentSubsampleData'

 **Quantificação:** se forem previstos vários parâmetros de interesse para cada amostra, criar vários dados da subamostra para os resultados previstos.

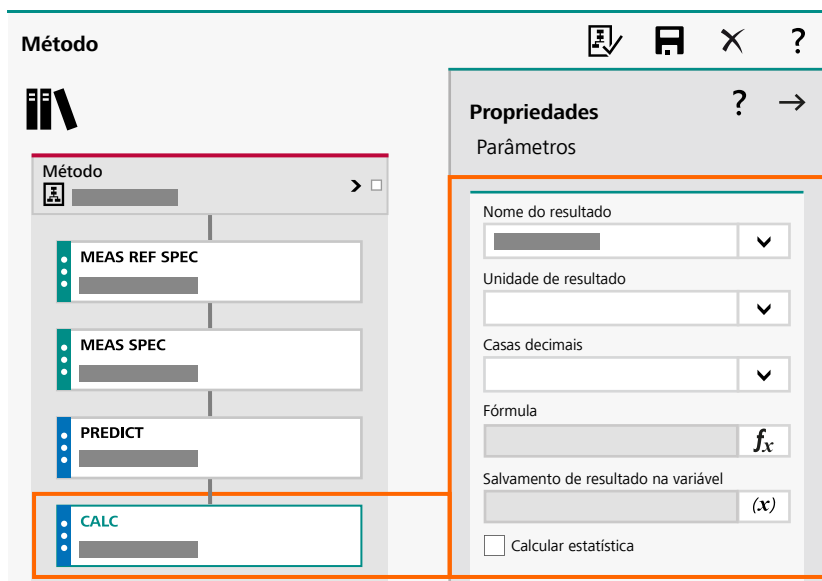
2 Inserir um comando CALC para o resultado previsto

Preencher os dados da subamostra criados com o resultado de um comando **CALC**:

- Abrir o método correspondente.
 - Inserir um comando **CALC**.
- Ordenar o comando **CALC** abaixo do comando **PREDICT**.

Calcular valor a ser exibido

- Selecionar o comando **CALC** e abrir **Propriedades** ► **Parâmetros**.
 - Informar como **Nome do resultado** um nome adequado para o resultado previsto ou inserir o produto determinado.
 - Quantificação: inserir a **Unidade de resultado** e a quantidade de **Casas decimais** necessários.



Método

Método

- MEAS REF SPEC
- MEAS SPEC
- PREDICT
- CALC**

Propriedades

Parâmetros

Nome do resultado

Unidade de resultado

Casas decimais

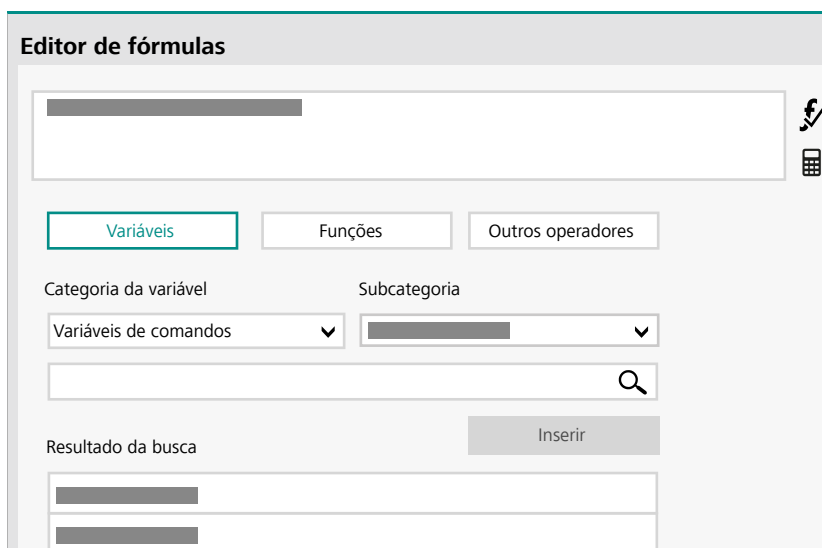
Fórmula

Salvamento de resultado na variável

☐ Calcular estatística

Calcular a estatística é utilizado em várias subamostras de uma amostra. Desativar **Calcular a estatística**.

- No campo **Fórmula**, clicar em **fx** para abrir o editor de fórmulas.



Editor de fórmulas

Variáveis Funções Outros operadores

Categoria da variável Subcategoria

Variáveis de comandos

Resultado da busca

Inserir

- Criar uma fórmula usando a categoria da variável **Variáveis de comando**. Para a exibição do resultado, a fórmula deve ser composta de somente uma única variável de comando **PREDICT**:
 - Identificação:
Product.Identification.Result.nome do comando
 - Quantificação:
Predicted.Quantification.Result.nome do comando
 Se uma variável de hierarquia de modelo com um índice tiver sido selecionada, ajustar o índice no campo de introdução superior conforme necessário, p. ex.: '**Predicted.Quantification{2}.Result.nome do comando**' ([ver capítulo 11.4.1, página 183](#))
- Verificar a validade da fórmula inserida ao clicar em .
- **Aviso:** o resultado da previsão será gerado somente após o tempo de execução de uma determinação. Portanto, ao clicar em  durante o cálculo da fórmula será exibido o resultado **Inválido**.
- Fechar o editor de fórmulas ao clicar em →.

Salvar o valor calculado nos dados da subamostra

- No campo **Salvar o resultado como variável**, clicar em **(x)**.
 - Selecionar a categoria da variável **Dados da subamostra**.
 - Como subcategoria, selecionar o procedimento operacional correspondente.
- O Resultado da busca exibe os dados da subamostra definidos no procedimento operacional selecionado.
- Selecionar a nova variável criada.
- A variável selecionada será inserida no campo **Variáveis**.

Variáveis ?

.CurrentSubsampleData 

Categoria da variável Subcategoria

Dados da subamostra ▼

▼

Inserir termo de pesquisa 

Resultado da busca

.CurrentSubsampleDate

.CurrentSubsampleData

Aplicar

Cancelar

- Clicar em **Aplicar**.

- Salvar o método: clicar em  ou pressionar as teclas **[CTRL]+[S]**.

Quantificação: se forem previstos vários parâmetros de interesse para cada amostra, inserir um comando **CALC** para cada resultado criado.

Analisar amostras

1 Abrir a lista de amostras

- Se a lista de amostras tiver sido fechada, abrir a lista de amostras em **Amostras ► Listas de amostras** ao clicar duas vezes.

2 Na lista de amostras, para cada amostra que ainda não foi analisada é exibido um campo para os dados da subamostra criados:

Nome da amostra	Nome da subamostra			
				

Após a previsão, esse campo exibe o resultado.

Identificação: se a identificação falhar, o resultado permanece vazio.

Outras variáveis

Da mesma forma descrita anteriormente, podem ser exibidas outras variáveis nos dados da subamostra (*ver capítulo 2.3.2, página 21*).

11.4.1 Hierarquia de modelos – índice para modelos de quantificação

Uma hierarquia de modelos pode conter vários modelos de quantificação. Para que as variáveis de comando **PREDICT** possam distinguir entre os modelos de quantificação, são usados números de índice.

O primeiro modelo de quantificação vinculado a um produto ou grupo de produto específico obtém o índice 1. Se modelos de quantificação adicionais estiverem vinculados ao mesmo produto ou grupo de produto, o índice é incrementado. A incrementação ocorre com base na ordem dos modelos de quantificação na hierarquia de modelos.

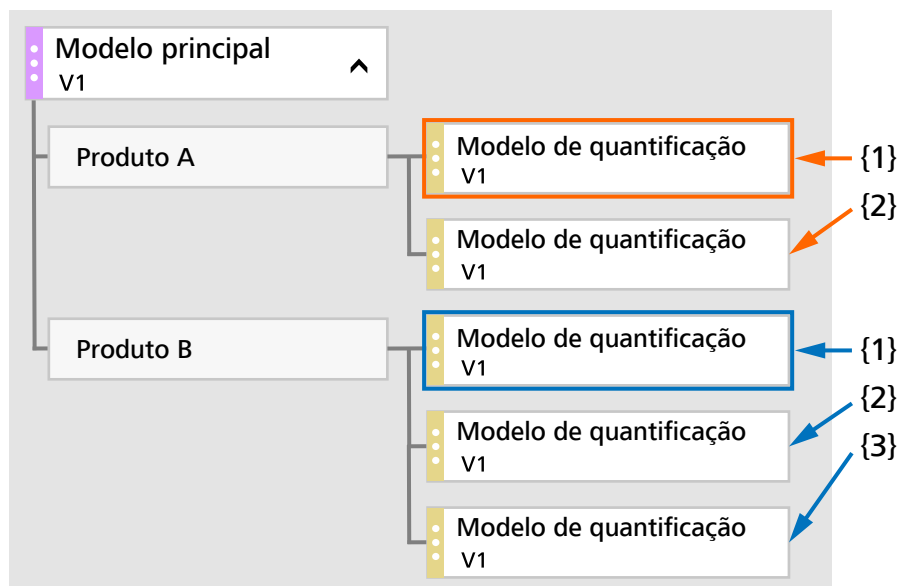


Figura 7 Números do índice para modelos de quantificação em uma hierarquia de modelos

As variáveis de comando **PREDICT** fazem referência ao modelo de quantificação por meio do número do índice.

Exemplo: '**Predicted.Quantification{1}.Result**.nome do comando'

Se uma amostra for identificada como produto A durante a previsão, todos os modelos de quantificação vinculados ao produto A serão utilizados. Neste caso, a variável de comando acima faz referência ao modelo de quantificação vinculado ao produto A com índice 1 (emoldurado em laranja na imagem).

Se uma amostra for identificada como produto B, a variável de comando acima faz referência ao modelo de quantificação vinculado ao produto B com Índice 1 (destacado em azul na imagem).

Se a variável de comando para o modelo de quantificação com moldura azul for usada de uma maneira diferente do modelo de quantificação com moldura laranja, um comando **IF** pode limitar a edição a um pertencimento de produto específico.

 Em uma hierarquia de modelos sem modelos de identificação, o modelo de quantificação mais alto recebe o índice 1. Para os modelos de quantificação subsequentes, o índice é incrementado sequencialmente.

Modelos de quantificação subordinados

Nenhum número do índice é atribuído aos modelos de quantificação subordinados. A variável de comando **PREDICT** deverá referenciar o modelo de quantificação de nível superior. A variável, por outro lado, fornece os valores do modelo subordinado utilizado para cada subamostra.

11.5 Exportar e importar modelos

Os modelos podem ser exportados e importados para serem utilizados em outra instalação OMNIS.

Exportar modelos

1 Abrir o diálogo de exportação

- Na área de trabalho **Calibração e avaliação**, abrir uma das seguintes subáreas:
 - **Modelos de quantificação**
 - **Correções da interceptação do eixo y / inclinação**
 - **Modelos de identificação**
 - **Modelos de qualificação**
 - **Hierarquias de modelos**

- Clicar em .

Um diálogo de exportação é aberto.

2 Gerar os arquivos de exportação

- Selecionar todos os modelos a serem exportados.
- Se apenas modelos publicados do **tipo full** foram selecionados, o **Tipo de exportação** poderá ser definido:
 - Um modelo **Tipo full** está completo e em condições de funcionar. Após a importação, o modelo pode ser editado e salvo.
 - Se um modelo tiver sido publicado, a última versão publicada pode ser exportada como **tipo light**. Este modelo pode ser utilizado somente para previsões.
- Se necessário, adaptar a pasta de destino.

 Os seguintes caracteres especiais ou cadeias de caracteres não devem ser usados: > < : " / \ | * ? e CON, PRN, AUX, NUL, de COM1 até COM9, de LPT1 até LPT9.

- Com um clique em **[Exportar]**, criar os arquivos de exportação.

Os modelos serão exportados na pasta especificada.

Importar os modelos

1 Abrir o diálogo de importação

- Na área de trabalho **Calibração e avaliação**, abrir uma das seguintes subáreas:
 - **Modelos de quantificação**
 - **Correções da interceptação do eixo y / inclinação**
 - **Modelos de identificação**
 - **Modelos de qualificação**
 - **Hierarquias de modelos**
- Clicar em 

2 Abrir os arquivo

- Selecionar a pasta e todos os arquivos *.opmo ou arquivos *.osic a serem importados.
- Clicar em **[Abrir]**.

Os modelos são importados para o OMNIS Software.

11.6 Troca de XDS/DS Analyzer (quantificação)

Na troca de um DS2500 ou XDS Analyzer, os espectros e parâmetros de referência utilizados para a criação de um modelo de quantificação para XDS/DS Analyzer podem ser importados no OMNIS Software. Com esses dados, um modelo de quantificação pode ser desenvolvido.

No segundo passo, é criado um modelo de correção da interceptação do eixo y / slope. Para isso, são utilizados espectros registrados com o OMNIS Software. Os valores de referência desses espectros devem ser conhecidos.

Para a correção da interceptação do eixo y / slope, são usadas menos amostras do que para o desenvolvimento do modelo de quantificação:

- Para um valor estimado confiável do viés, são necessárias pelo menos 20 amostras.
- Para um valor estimado confiável do slope, são necessárias pelo menos 30 amostras.

Desenvolver modelo de quantificação

Pré-requisito:

- Está disponível o arquivo de espectros (.da) em que os espectros XDS/DS estão contidos.

- Na mesma pasta, está disponível o arquivo de parâmetro de referência (.cn) em que os parâmetros de referência estão contidos.

1 Criar e nomear modelo de quantificação

- Em **Calibração e avaliação** ► **Modelos de quantificação**, clicar em .
- Inserir um nome adequado no campo de introdução **Nome do modelo de quantificação**.

2 Importar espectros

- Clicar em **Importação XDS/DS**.

Criar modelo de quantificação

Nome do modelo de quantificação

Listas de amostras	Resultados de busca	Importação XDS/DS
--------------------	---------------------	-------------------

- Clicar em .
- Selecionar o arquivo de espectro (.da) a ser importado.
- Confirmar a seleção clicando em **[Abrir]**.
- Clicar em **[Continuar]**.

3 Selecionar o parâmetro de referência

- Selecionar os parâmetros de referência da lista **Parâmetro de referência / Unidade**.
- No campo de introdução **Unidade dos parâmetros de referência**, selecionar a unidade dos parâmetros de referência.

Todos os espectros que tiverem as designações selecionadas dos parâmetros de referência serão adicionados ao modelo de quantificação.

4 Desenvolvimento de modelo automático ou manual

Há disponíveis diversas possibilidades para o desenvolvimento de modelos:

- Desenvolvimento de modelo automático com o **OMNIS Model Developer (OMD)**: clicar em **[Iniciar OMD]**.
Continuar com o [capítulo 5.2, Desenvolvimento de modelo automático – OMD, página 69](#).
- Desenvolvimento de modelo manual: clicar em **[Criar]**.
Continuar com o [capítulo 5.3, Desenvolvimento de modelo manual, página 72](#).

5 Desenvolvimento de modelo automático ou manual

 Se for necessário adaptar manualmente a seleção da amostra primeiro para desenvolver o modelo automaticamente depois, continuar com o desenvolvimento de modelo manual.

- **Desenvolvimento de modelo automático:** clicar em **[Iniciar OMD]**.
Continuar com o *capítulo 5.2, Desenvolvimento de modelo automático – OMD, página 69*.
- **Desenvolvimento de modelo manual:** clicar em **[Criar]**.
Continuar com o *capítulo 5.3, Desenvolvimento de modelo manual, página 72*.

6 Publicar o modelo

- Publicar o modelo de quantificação (ver "Publicar o modelo de quantificação", página 95).

Amostras para a correção da interceptação do eixo y / slope

Toda amostra para a correção da interceptação do eixo y / slope precisa de:

- Um valor de referência para o parâmetro a ser corrigido.
- Um espectro.
- Um valor calculado para cada espectro.

1 Coletar as amostras

- Coletar as amostras físicas para a correção da interceptação do eixo y / slope como se fossem amostras para o desenvolvimento de um modelo de quantificação (*ver capítulo 4, página 49*). Uma quantidade pequena de amostras é suficiente.

2 Preparar registro do espectro e previsão

- Criar um método, um procedimento operacional, um perfil da amostra e uma lista de amostras como se fossem amostras para o desenvolvimento de um modelo de quantificação (ver "*Preparar o registro do espectro*", página 50). Mas:

▪ Método

No método, após o comando **MEAS SPEC** e, se disponível, após o comando **VESSEL REMOVAL**, adicionar um comando **PREDICT**.

Como parâmetro de comando **PREDICT**, informar o seguinte:

- **Nome do comando de medição**
- O **Modelo de quantificação** desenvolvido com os espectros importados.

3 Registrar os espectros e prever os parâmetros de interesse

- Registrar os espectros e prever os parâmetros de interesse como se fossem amostras para o desenvolvimento de um modelo de quantificação (*ver "Registrar os espectros", página 62*).

A seguir, cada amostra terá um espectro, um valor de referência e um valor previsto.

Com diversos parâmetros de interesse, cada amostra terá um espectro e, para cada parâmetro de interesse um valor de referência e um valor previsto.

Criar a correção da interceptação do eixo y / slope

- Criar uma correção da interceptação do eixo y / slope. Para isso, são utilizados espectros registrados com o OMNIS Software. Os valores de referência desses espectros devem ser conhecidos.
(*ver "Correção da interceptação do eixo y / slope", página 97*)

Previsão

1 Preparar a previsão

- Preparar os processos necessários para a previsão (*ver "Preparar a previsão", página 154*).

Ao fazer isso, informar no comando **PREDICT** o modelo de quantificação e a respectiva correção da interceptação do eixo y / slope.

2 Executar previsão

- Executar a previsão (*ver "Iniciar a previsão", página 163*).



A execução da análise deve ser monitorada com amostras controle. Amostras controle devem ser analisadas tanto com o método espectroscópico quanto com o método de referência. Os resultados de ambos os métodos podem ser comparados.

A barra de funções **Amostras** contém uma lista de amostras com uma amostra. A amostra contém uma subamostra. Um procedimento operacional está atribuído à subamostra.

Normalmente, as amostras servem para analisar amostras reais. Mas, neste caso, a amostra serve para executar uma calibração do comprimento de onda. Assim que a respectiva subamostra for iniciada, os seguintes passos serão executados:

1. A subamostra inicia o procedimento operacional atribuído.
2. O procedimento operacional executa o método contido nele.
3. O método executa o comando **CAL WL**. O comando é executado com o sistema de trabalho atribuído ao método.
O sistema de trabalho contém um dispositivo do equipamento OMNIS NIR Analyzer. Esse equipamento executa uma calibração do comprimento de onda. Os dados da calibração são salvos no equipamento.

Registrar valores de referência ou nomes de produtos

Para poder criar um modelo, é necessário registrar um valor de referência (quantificação) ou um nome do produto (identificação) para cada amostra de calibração e amostra de validação. Para qualificação, é preciso saber se as amostras individuais devem ser classificadas como positivas ou negativas.

Exemplo para quantificação

A seguinte [figura 9](#) mostra o registro de um valor de referência para o parâmetro de interesse, p. ex., o teor de água em uma amostra.

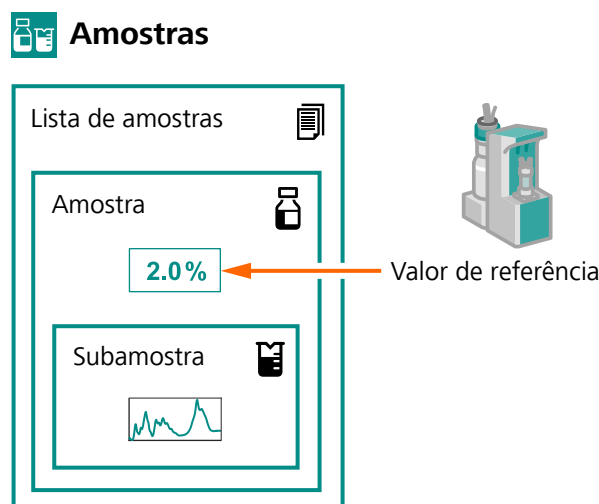


Figura 9 Registrar valor de referência

O parâmetro de interesse é medido com um método de referência, p. ex., titulação. O valor medido serve como valor de referência.

O valor de referência para cada amostra na lista de amostras é inserido no respectivo campo de introdução.

Registrar espectros das amostras de calibração

Para criar um modelo, um espectro deve ser registrado para cada amostra de calibração e cada amostra de validação.

A seguinte *figura 10* mostra uma apresentação esquematizada do registro de um espectro.

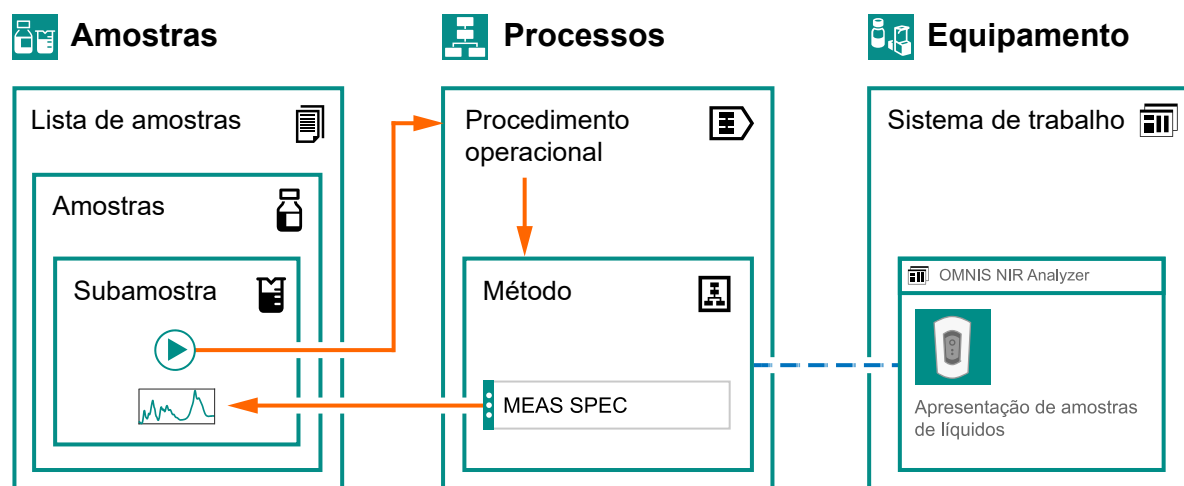
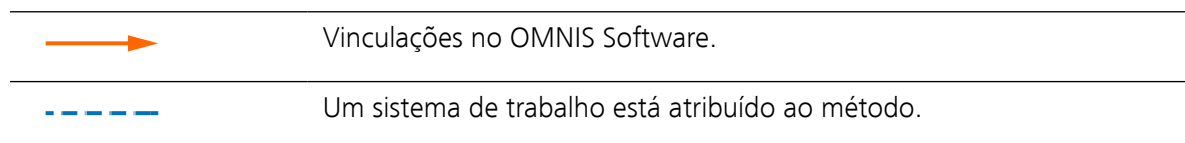


Figura 10 Registrar espectro de uma amostra de calibração



A barra de funções **Amostras** contém uma lista de amostras com amostras de calibração. Cada amostra contém uma subamostra. Para cada subamostra, está atribuído um procedimento operacional.

Assim que uma subamostra for iniciada, os seguintes passos serão executados:

1. A subamostra inicia o procedimento operacional atribuído.
2. O procedimento operacional executa o método contido nele.
O método executa o comando **MEAS SPEC**. O comando é executado com o sistema de trabalho atribuído ao método.
O sistema de trabalho contém um dispositivo (por exemplo **Liquid Sample Presentation**). O dispositivo registra um espectro e transmite-o ao OMNIS Software. O OMNIS Software salva o espectro nos dados da subamostra.

Desenvolvimento de um modelo

Quantificação: a partir dos espectros e valores de referência das amostras de calibração, é criado um modelo de quantificação automaticamente com o **OMD** (OMNIS Model Developer) ou manualmente.

Identificação: a partir dos espectros e nomes de produto das amostras de calibração, é criado um modelo de identificação.

Qualificação: um modelo de qualificação é criado a partir dos espectros das amostras de calibração.

Exemplo para quantificação

A seguinte [figura 11](#) mostra os passos para o desenvolvimento manual de um modelo de quantificação.

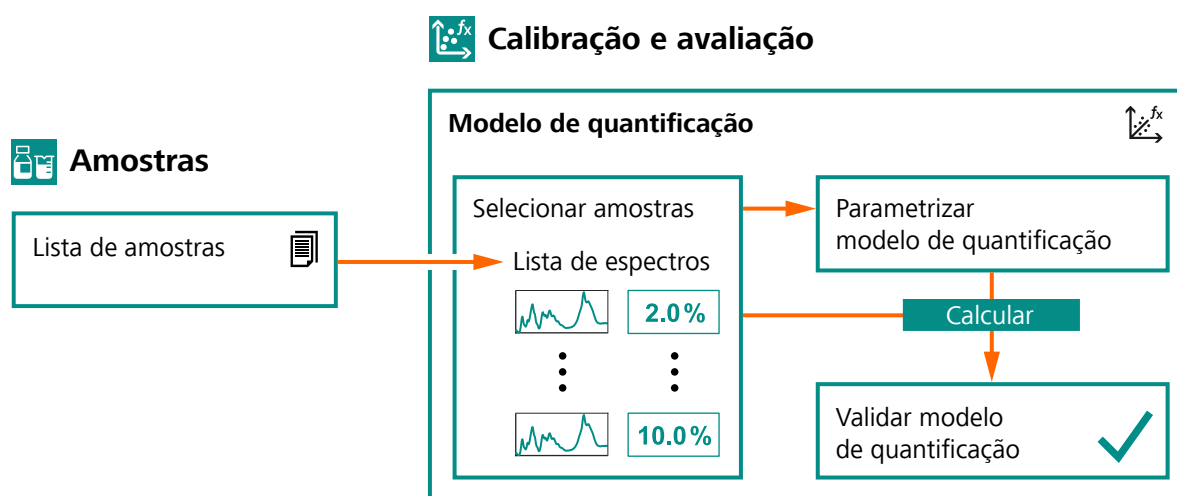


Figura 11 Desenvolver modelo (exemplo para quantificação)

Primeiramente, as amostras e seus valores de referência devem ser transmitidos para uma lista de espectros. Em seguida é efetuado o desenvolvimento do modelo em 3 passos do processo:

1. O passo do processo **Selecionar amostras** possibilita reconhecer outliers, determinar espectros de validação e informar um método de validação cruzada.
2. No passo do processo **Parametrizar modelo de quantificação** é possível aplicar pré-tratamentos de dados nos espectros e definir faixas de comprimento de onda.
3. Após o cálculo de um modelo, o passo do processo **Validade modelo de quantificação** avalia se o modelo corresponde aos requisitos.

Os passos anteriores podem ser adaptados para a otimização do modelo. Se um modelo adequado tiver sido determinado, ele pode ser **publicado**. O modelo publicado poderá ser utilizado para a previsão de amostras desconhecidas.

Previsão

Na previsão, um modelo é aplicado ao espectro de uma amostra desconhecida. Dependendo do modelo, o seguinte pode ser previsto:

- Parâmetros de interesse (quantificação)
- Pertencimento de produto ou resultado de verificação (identificação)
- Resultado de qualificação (qualificação)

Exemplo de quantificação: a seguinte *figura 12* esclarece a previsão de um parâmetro de interesse.

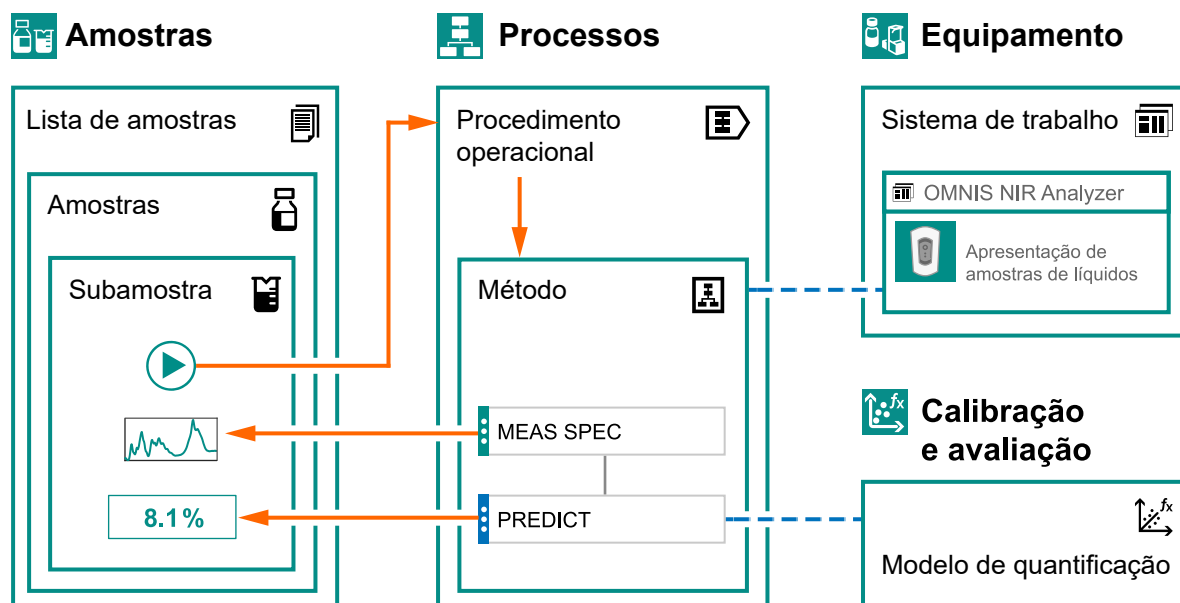
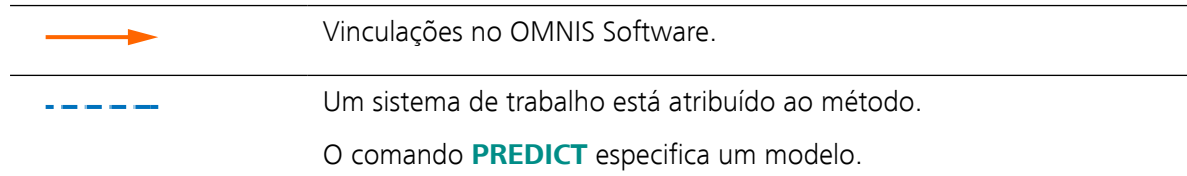


Figura 12 Prever parâmetros de interesse (exemplo para quantificação)



A barra de funções **Amostras** contém uma lista de amostras com amostras preparadas para a análise. Cada amostra contém uma subamostra. Para cada subamostra, está atribuído um procedimento operacional.

Assim que uma subamostra for iniciada, os seguintes passos serão executados:

1. A subamostra inicia o procedimento operacional atribuído.

2. O procedimento operacional executa o método contido nele. O método contém pelo menos 2 comandos:
 - a. **Comando de medição**

O comando **MEAS SPEC** registra um espectro da amostra. O comando é executado com o sistema de trabalho atribuído ao método.

O sistema de trabalho contém um dispositivo (por exemplo **Liquid Sample Presentation**). Com ele, o equipamento registra um espectro e o transmite ao OMNIS Software.
 - b. **Previsão**

No comando **PREDICT** há um comando de medição e um modelo selecionado. O modelo avalia o espectro que foi registrado com o comando de medição. Isso resulta em uma previsão, p. ex., de um teor de água de 8,1%.