



Application Note AN-RS-031

简单的RMID模型构建

Mira Cal P 和 ModelExpert

混合了主成分分析(PCA)、准无限参数和预处理选项的材料验证模型非常复杂。每个模型都必须经过严格的构建、评估和验证,然后才能投入日常使用。通常,即使拥有丰富经验的人员也需要几天的时间才能完成。

Mira P简化了材料的验证。Mira P具有简短、明确的用户工作流程、直观的结果和简单的操作,是非常简单

的RMID工具之一。Mira Cal P的ModelExpert是您可靠的工具,ModelExpert可自动确定稳健方法开发的非常适合的模型参数。只需收集训练集和验证集数据,ModelExpert就会优化样本分析。使用Mira P和ModelExpert,即使是非技术用户也可以在很短的时间内获得更好的结果。

简介

ModelExpert是一个集成到Mira Cal P中的函数,它使用用户提供的训练集和验证集样本优化模型参数。此

例程迭代192个统计参数组合,以确保将最佳模型应用于客户采样。

描述

ModelExpert充分体现了工作特征(ROC)曲线的优势。ROC曲线是评估机器学习模型的一个组成部分。ROC方法根据曲线下面积(AUC)得分对组合进行排名

方法

要使用ModelExpert功能,用户首先在Mira Cal P中创建一个新的训练集。ModelExpert位于菜单中的训练集下。选择ModelExpert后,软件会自动为给定数据运行所有可能的模型设置组合(例如,标准化、基线删除、主要组件),同时显示“查找模型设置”(图1)。

除了剔除在给定置信区间内产生假阳性/阴性的组合外,ModelExpert排名还包括关于哪些组合表现优于其他组合的相关信息。

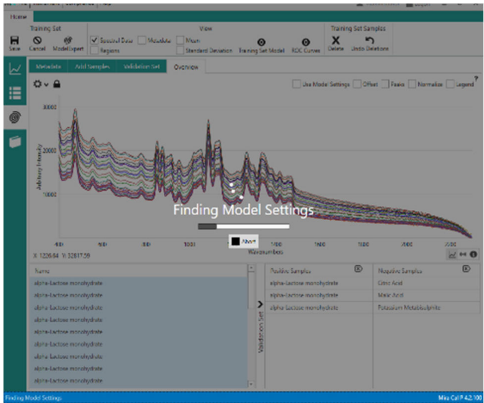


图 1. ModelExpert例程期间的Mira Cal P屏幕截图。

结果

ModelExpert结果显示在弹出窗口中(图2)。此窗口汇总了生成的ModelExpert设置。可以生成PDF报告,其中包含有关模型设置、ROC曲线和验证样本以及相关p值的更多信息。选择“保存训练集”后,所有优化的模型参数都将应用于关联的训练集和验证集。

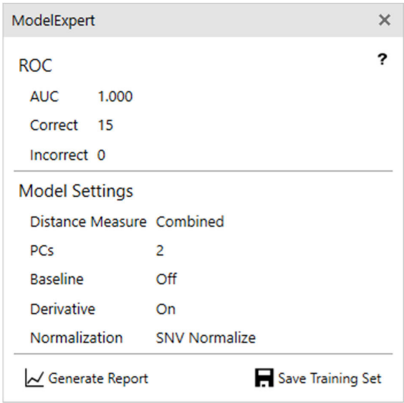


图 2. ModelExpert结果弹窗

结论

总的来说,ModelExpert功能是一种使用客户数据生成最佳参数和样本数据处理的简单而透明的方法,只需在Mira Cal P中单击几下鼠标即可。Metrohm

Raman致力于为RMID提供简单、高效和准确的使用方法。

CONTACT

瑞士万通中国
北京市海淀区上地东路1号
院1号楼7层702
100085 北京

marketing@metrohm.com.cn

仪器配置



MIRA P Advanced

瑞士万通快速拉曼分析仪 (MIRA) P 是一款性能强大的手持式拉曼光谱仪,可用于各种材料的快速无损测定和验证,例如药物有效成分和赋形剂。MIRA P 小而坚固,配备了瑞士万通的ORS技术。MIRA P 符合 FDA 联邦法规 21 章第 11 款的规定

。Advanced Package 包含一个附加透镜,可用它直接分析材料或者在材料容器中分析(3b 级激光器),还有一个小管支架套筒用于分析玻璃小管中的样本(1 级激光器)。