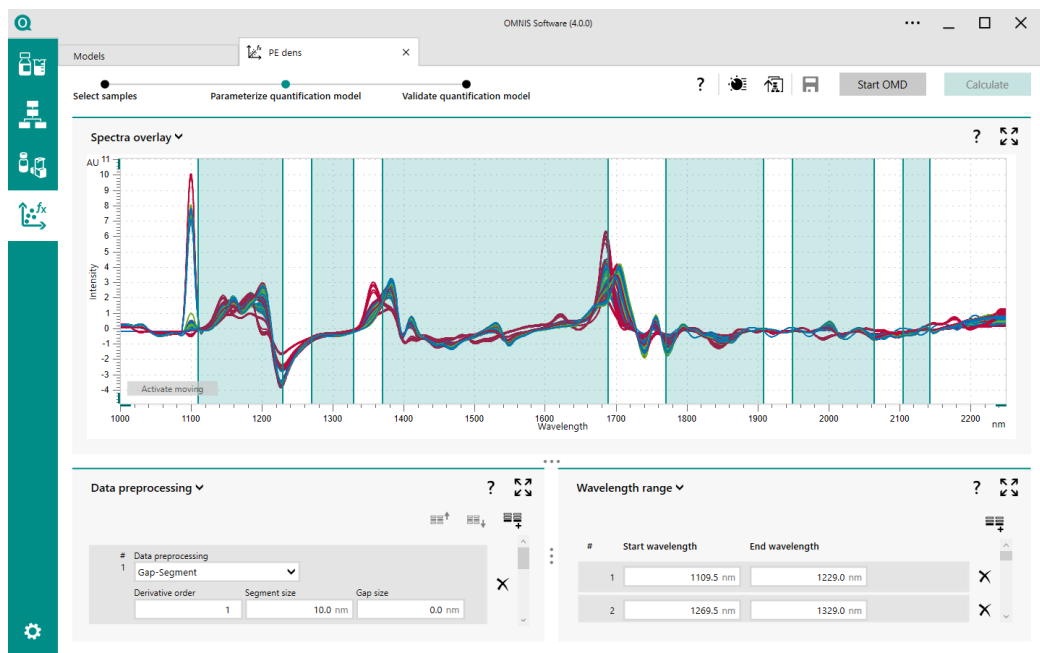


# OMNIS NIR (Lab)



La spectroscopie OMNIS pas à pas

Didacticiel

8.0600.8202FR / v6 / 2025-10-10





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

# OMNIS NIR (Lab)

Version logicielle d'OMNIS 4.6

Didacticiel

8.0600.8202FR / v6 /  
2025-10-10

Technical Communication  
Metrohm AG  
CH-9100 Herisau

La présente documentation est protégée par les droits d'auteur. Tous droits réservés.

La présente documentation est un document original.

La présente documentation a été élaborée avec le plus grand soin. Cependant, des erreurs ne peuvent être totalement exclues. Veuillez communiquer vos remarques à ce sujet directement à l'adresse citée ci-dessus.

### **Exclusion de responsabilité**

Les défauts résultant de circonstances dont Metrohm n'est pas responsable, par exemple, stockage inapproprié, utilisation non conforme etc., sont expressément exclus de la garantie. Les modifications non autorisées du produit (par exemple, transformations ou ajouts) excluent toute responsabilité du fabricant pour les dommages qui en résultent et leurs conséquences. La documentation du produit Metrohm fournit des instructions et des remarques à respecter strictement. Dans le cas contraire, la responsabilité de Metrohm est exclue.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Aperçu</b>	<b>1</b>
1.1	Introduction	1
1.2	Informations concernant la documentation	1
1.3	Licences OMNIS	1
1.4	Droits d'utilisateur	2
1.5	Informations complémentaires	2
<b>2</b>	<b>Aperçu rapide du logiciel OMNIS</b>	<b>4</b>
2.1	Structure et fonctions	4
2.1.1	Zones de travail	4
2.1.2	Onglets et sous-parties	4
2.1.3	Zone de travail Échantillons	6
2.1.4	Zone de travail Procédures	7
2.1.5	Zone de travail Matériel	8
2.1.6	Zone de travail Calibrage et évaluation	9
2.2	Introduction pratique	11
2.3	Fonctions OMNIS	18
2.3.1	Enregistrement de spectre	19
2.3.2	Prédiction	21
2.3.3	Calculs et statistiques	25
2.3.4	Calibrage de la longueur d'onde	26
2.3.5	Tests de performance de l'appareil	27
2.4	Réserver et libérer des appareils	27
2.5	Régulation de température (Liquid Sample Presentation)	29
<b>3</b>	<b>Préparation de l'appareil</b>	<b>31</b>
3.1	Créer un système de travail	31
3.2	Calibrage de la longueur d'onde	33
3.2.1	Préparer un calibrage de la longueur d'onde	33
3.2.2	Démarrer le calibrage de la longueur d'onde	37
3.3	Tests de performance de l'appareil	39
3.3.1	Préparer les tests de performance internes de l'appareil	40
3.3.2	Exécuter des tests de performance internes de l'appareil	44
3.3.3	Tests de performance externes de l'appareil (optionnels)	46
<b>4</b>	<b>Préparer un développement de modèle</b>	<b>49</b>
4.1	Préparer un enregistrement de spectres	50
4.2	Enregistrer des spectres	61

<b>5</b>	<b>Modèle de quantification</b>	<b>67</b>
5.1	Créer un modèle de quantification .....	67
5.2	Développement automatique de modèle - OMD .....	69
5.3	Développement manuel de modèle .....	72
5.3.1	Sélectionner des échantillons et répartir un ensemble de données .....	72
5.3.2	Calculer un modèle de quantification .....	79
5.3.3	Valider un modèle de quantification .....	80
5.3.4	Paramétrer un modèle de quantification .....	88
5.4	Publier un modèle de quantification .....	96
5.5	Correction de pente/d'ordonnée à l'origine .....	97
<b>6</b>	<b>Modèle d'identification</b>	<b>107</b>
6.1	Créer un modèle d'identification .....	107
6.2	Sélectionner des échantillons et répartir un ensemble de données .....	108
6.3	Calculer un modèle d'identification .....	116
6.4	Valider un modèle d'identification .....	116
6.5	Paramétrer un modèle d'identification .....	119
6.5.1	Sélection des longueurs d'onde .....	121
6.5.2	Prétraitement des données .....	123
6.6	Publier un modèle d'identification .....	125
<b>7</b>	<b>Modèle de qualification</b>	<b>126</b>
7.1	Créer un modèle de qualification .....	126
7.2	Sélectionner des échantillons et répartir un ensemble de données .....	128
7.3	Calculer un modèle de qualification .....	135
7.4	Valider un modèle de qualification .....	135
7.5	Paramétrer un modèle de qualification .....	137
7.5.1	Sélection des longueurs d'onde .....	138
7.5.2	Prétraitement des données .....	140
7.6	Publier un modèle de qualification .....	142
<b>8</b>	<b>Hierarchie des modèles</b>	<b>143</b>
8.1	Développer une hiérarchie des modèles .....	144
8.1.1	Développer des modèles .....	144
8.1.2	Insérer des modèles dans la hiérarchie des modèles .....	145
8.2	Valider une hiérarchie des modèles .....	152
8.3	Publier une hiérarchie des modèles .....	154

<b>9</b>	<b>Prédiction</b>	<b>156</b>
9.1	<b>Préparer une prédiction</b> .....	<b>156</b>
9.1.1	Plusieurs paramètres d'intérêt (quantification) .....	163
9.2	<b>Démarrer une prédiction</b> .....	<b>165</b>
9.3	<b>Résultats de prédiction</b> .....	<b>169</b>
<b>10</b>	<b>Intervalles de test et de maintenance</b>	<b>172</b>
10.1	Tests de performance de l'appareil .....	172
10.2	Calibrage de la longueur d'onde .....	173
10.3	Maintenance des appareils .....	173
<b>11</b>	<b>Annexe</b>	<b>174</b>
11.1	Rapports .....	174
11.2	Manipuler des tableaux .....	174
11.3	Manipuler des diagrammes .....	175
11.4	<b>Variables de fonctions PREDICT</b> .....	<b>179</b>
11.4.1	Hierarchie des modèles – Index pour modèles de quantification .....	185
11.5	Exporter et importer des modèles .....	186
11.6	Changement d'analyseur XDS/DS (quantification) .....	187
11.7	Flux de travail pour l'OMNIS NIR Analyzer .....	192



# 1 Aperçu


## 1.1 Introduction

Ce didacticiel décrit le maniement des appareils de la famille de produits **OMNIS NIR Analyzer**, basés sur le Version logicielle d'OMNIS 4.6.

Ce didacticiel donne un bref aperçu général du logiciel OMNIS et décrit la configuration de l'appareil, le développement de modèle et la prédiction.

## 1.2 Informations concernant la documentation

Représentations possibles dans la documentation :

(1)	Renvoi au numéro de position dans la figure
<b>1</b>	Étape d'instruction
<b>Méthode</b>	Paramètres, lignes de menu, onglets et boîtes de dialogues
<b>Procédure ► Procédures de travail</b>	Chemin de menu
<b>[Suivant]</b>	Bouton ou touche
	Informations complémentaires au texte descriptif

## 1.3 Licences OMNIS

OMNIS est une plateforme modulaire. Les fonctions de l'appareil et les modules logiciel peuvent être combinés librement :

- Les fonctions de l'appareil sont disponibles par packs de licence (voir [Metrohm Knowledge Base](#)).

Ce didacticiel requiert la licence fonctionnelle suivante :

- Licence fonctionnelle Lab NIR Spectroscopy



**Ouvrir l'aide via un browser**

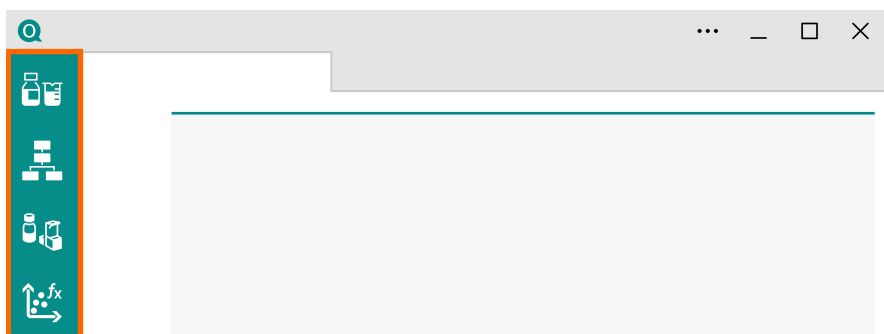
- Ouvrir <https://guide.metrohm.com/>.
- Cliquer sur le **logiciel OMNIS**.
- Sélectionner la version souhaitée du logiciel OMNIS sous le filtre **Version**.
- L'aide est également disponible sous format PDF pour la dernière version du logiciel OMNIS et pour les versions Long-term support : utiliser Filtre **Informations** ► **Publication** ► **Manuel d'utilisation**.

## 2 Aperçu rapide du logiciel OMNIS

### 2.1 Structure et fonctions

#### 2.1.1 Zones de travail

Le logiciel OMNIS divise l'interface utilisateur en plusieurs zones de travail. Les icônes sur le côté gauche de l'écran ouvrent chacune une zone de travail spécifique.



#### Zones de travail



Dans la zone de travail **Échantillons**, il est possible d'organiser des échantillons et d'analyser des sous-échantillons.



La zone de travail **Procédure** permet de définir des procédures de travail et des méthodes d'analyse des échantillons.



Les appareils et les accessoires peuvent être gérés dans la zone de travail **Matériel**.



Des modèles spectroscopiques peuvent être développés dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**. Un modèle permet de prédire les propriétés d'un échantillon.

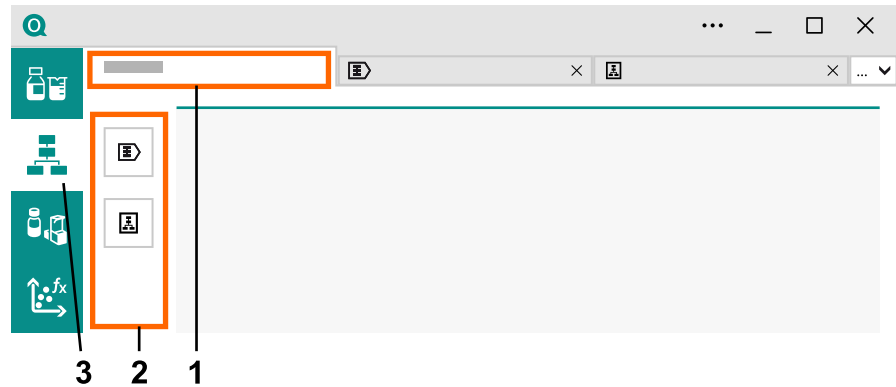
Il y a en outre la zone de travail **Paramétrages**.

Selon le système, les zones de travail **Administration des utilisateurs** et **Audit Trail** sont également disponibles.

#### 2.1.2 Onglets et sous-parties

Une zone de travail comprend un ou plusieurs **onglets**. Chaque onglet a un but précis. Dans la zone de travail Procédure, un onglet peut par exemple permettre d'éditer une procédure de travail.

Chaque zone de travail a ses propres onglets. L'onglet le plus à gauche (1) sert à organiser la zone de travail sélectionnée. De là, il est possible d'ouvrir d'autres onglets pour exécuter des tâches spécifiques.



Les zones de travail sont elles-mêmes divisées en **sous-parties**. L'onglet le plus à gauche (**1**) affiche les sous-parties (**2**) de l'espace de travail sélectionné (**3**).

### Sous-parties pertinentes

La *figure 1* suivante montre une représentation schématique. La zone de travail Échantillons contient une table d'échantillons. La table d'échantillons contient des échantillons et des sous-échantillons. Une procédure de travail est attribuée à chaque sous-échantillon.

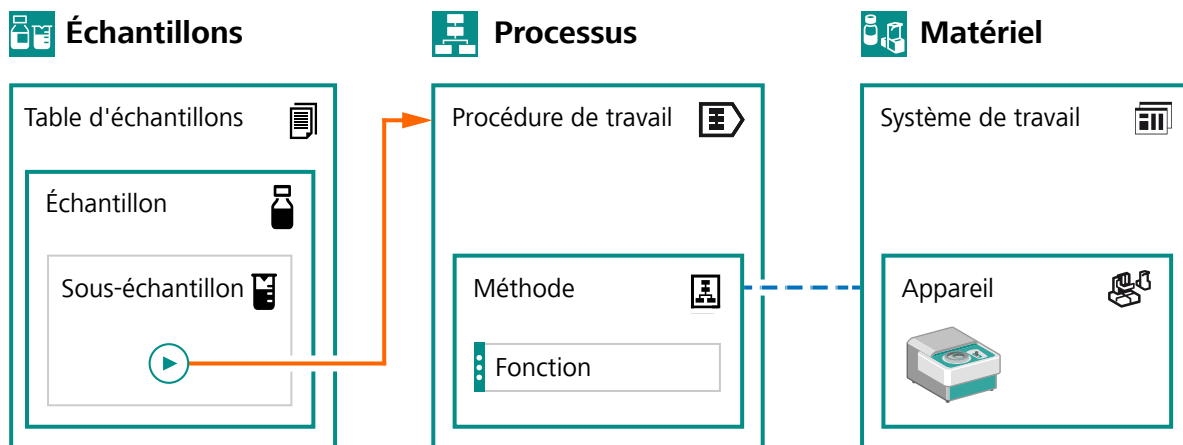


Figure 1 3 zones de travail avec des sous-domaines pertinents



Un sous-échantillon appelle une procédure de travail.



Un système de travail est attribué à la méthode.

Lorsqu'un sous-échantillon est analysé, le logiciel OMNIS lance la procédure de travail qui lui a été attribuée et exécute les méthodes et fonctions qu'elle contient.

Un système de travail est attribué à la méthode. Cela permet aux fonctions d'accéder au système de travail et aux groupes fonctionnels qu'il contient.

### 2.1.3 Zone de travail Échantillons

Un **échantillon** est la substance à analyser. Un échantillon est divisé en un ou plusieurs sous-échantillons.

Une procédure de travail est attribuée à un **sous-échantillon**. En cas d'analyse d'un sous-échantillon, la procédure de travail attribuée est exécutée.

Une **table d'échantillons** organise les échantillons et les sous-échantillons. Un échantillon ou un sous-échantillon peuvent être inclus dans une ou plusieurs tables d'échantillons.

Un **profil d'échantillon** est un modèle pour la création d'échantillons.

#### Échantillons – Vue d'ensemble



Dans la zone de travail **Échantillons**, il est possible d'organiser des échantillons et d'analyser des sous-échantillons.

La *figure 2* suivante montre un exemple simplifié de table d'échantillons avec un échantillon contenant lui-même un sous-échantillon.

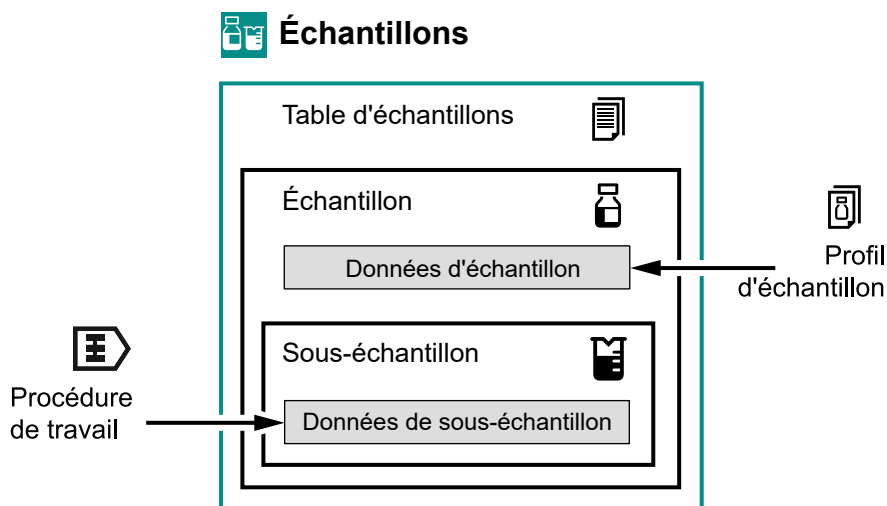


Figure 2 Zone de travail Échantillons



Spécification des champs de données.

Des champs de données peuvent être créés pour les échantillons et les sous-échantillons. Par exemple, des données d'échantillon pour les valeurs de référence ou des données de sous-échantillon pour les résultats d'analyses.

La *figure 2* montre comment créer des champs de données :

- Un profil d'échantillon permet de prédéfinir des champs pour les données d'échantillon.

- Une procédure de travail permet de prédéfinir des champs pour les données de sous-échantillons.

Les champs de données peuvent être remplis de données manuellement ou automatiquement (par exemple, par une fonction).

### Échantillons – Sous-parties



La sous-partie **Tables d'échantillons** offre les fonctions suivantes :

- Créer et gérer des tables d'échantillons.
- Dans une table d'échantillons :
  - Ajouter de nouveaux échantillons ou sous-échantillons.
  - Éditer des sous-échantillons, ce qui permet d'exécuter pour chaque sous-échantillon la procédure de travail qui lui a été attribuée.  
La procédure de travail peut, par exemple, effectuer une analyse d'échantillon ou un calibrage de la longueur d'onde.



Dans la sous-partie **Tables d'échantillons filtrés**, les tables d'échantillons filtrés permettent d'extraire tous les échantillons et sous-échantillons de la base de données selon différents critères.

Les critères de filtrage peuvent être enregistrés pour définir une table d'échantillons filtrés.

Les échantillons trouvés peuvent être sauvegardés sous forme de table d'échantillons.



Dans la sous-partie **Profils d'échantillons**, un profil d'échantillon définit ce qui suit pour une série d'échantillons similaires :

- la structure des données d'échantillon, c.-à-d. le nombre et le type de champs de ces données ;
- les valeurs par défaut des champs des données d'échantillon ;
- une ou plusieurs procédures de travail standard, chacune s'appliquant à un nombre standard de sous-échantillons.

## 2.1.4 Zone de travail Procédures

### Procédures – Vue d'ensemble



La zone de travail **Procédure** permet de définir des procédures de travail et des méthodes d'analyse des échantillons.

La figure 3 suivante illustre les éléments constitutifs des procédures :

- **Procédures de travail**
- **Méthodes**
- **Fonctions** (par exemple, **MEAS SPEC**)

### **Processus**

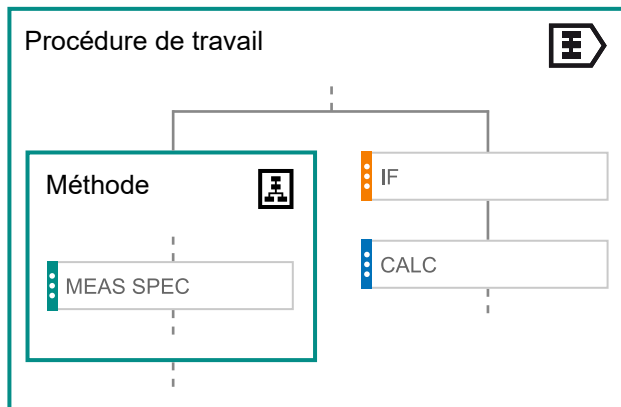




Figure 3 Zone de travail Procédures

### **Procédures – Sous-parties**

 Dans la sous-partie **Procédures de travail**, les procédures de travail peuvent être composées de méthodes et de fonctions. Les méthodes et les fonctions peuvent être organisées pour une exécution séquentielle ou simultanée.

 Dans la sous-partie **Méthodes**, les méthodes peuvent être composées de fonctions. Les fonctions peuvent être organisées pour une exécution séquentielle ou simultanée.

Une méthode peut contenir des fonctions pour contrôler les actions d'un système de travail. Ces fonctions sont exécutées dans le système de travail affecté à la méthode.

## **2.1.5 Zone de travail Matériel**

### **Matériel – Vue d'ensemble**

 Les appareils et les accessoires peuvent être gérés dans la zone de travail **Matériel**.

La figure 4 suivante montre comment rendre un appareil accessible :

1. Dans la sous-partie **Appareils**, tous les périphériques réseau et USB disponibles sont répertoriés dans un inventaire.
2. L'**Inventaire** permet de réserver un appareil. Les groupes fonctionnels de l'appareil deviennent ainsi disponibles pour l'utilisateur.
3. Dans la sous-partie **Systèmes de travail**, il est possible de composer un système de travail avec tous les groupes fonctionnels nécessaires à la détermination.

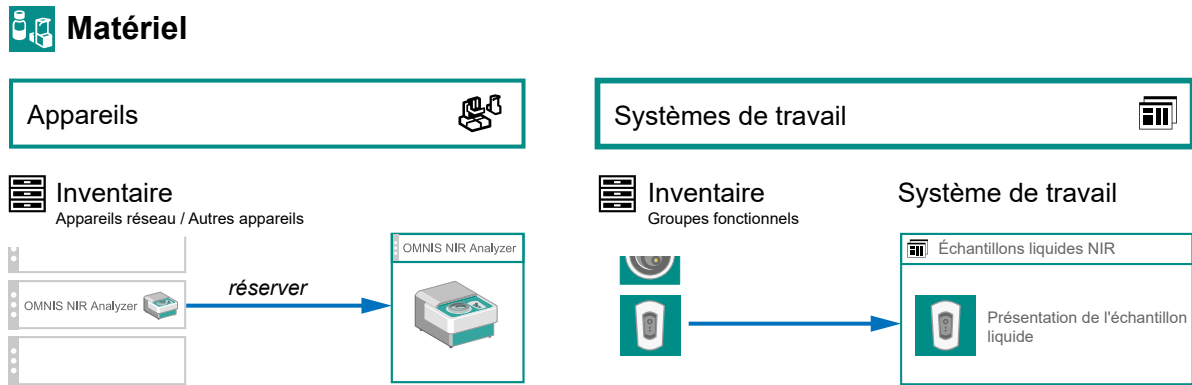


Figure 4 Zone de travail Matériel

### Matériel – Sous-parties



Dans la sous-partie **Appareils**, les appareils peuvent être réservés et libérés. Si un appareil est réservé, ses groupes fonctionnels sont à la disposition de l'utilisateur.

Une fois l'analyse effectuée, l'appareil peut être libéré pour que d'autres utilisateurs puissent y accéder.



Dans la sous-partie **Systèmes de travail**, les systèmes de travail peuvent être composés d'un ou plusieurs groupes fonctionnels. Le même groupe fonctionnel peut être contenu dans plusieurs systèmes de travail.

Pour analyser des échantillons, une méthode accède à un système de travail et utilise les groupes fonctionnels qu'il contient. Un système de travail peut être affecté à plusieurs méthodes.

**Remarque** : les groupes fonctionnels du système de travail peuvent être facilement remplacés si nécessaire. De cette manière, on peut effectuer des analyses sur différents appareils sans devoir modifier les méthodes.

#### 2.1.6 Zone de travail Calibrage et évaluation

Des modèles spectroscopiques peuvent être développés dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**. Un modèle permet d'analyser un échantillon sur la base du spectre enregistré :

- **Modèle de quantification** : prédiction d'un paramètre d'intérêt quantitatif (p. ex. teneur en eau de 5,1 %)
- **Modèle d'identification** : identification ou vérification d'un échantillon (p. ex. fructose)
- **Modèle de qualification** : qualification d'un échantillon (p. ex. : l'échantillon correspond aux spécifications)





La sous-partie **Hiéarchies des modèles** permet de développer des hiérarchies des modèles :

- Si les échantillons ne sont pas différenciables par un seul modèle d'identification, une hiérarchie des modèles peut relier hiérarchiquement plusieurs modèles d'identification.
- Si des analyses quantitatives doivent être effectuées pour des échantillons identifiés, une hiérarchie des modèles peut associer des modèles de quantification à des produits.
- Si des résultats plus précis sont requis pour un modèle de quantification, il est possible de créer et de lier des modèles de quantification secondaires. Chacun de ces modèles secondaires est optimisé pour une partie de l'intervalle de valeurs de référence du modèle de niveau supérieur.

## 2.2 Introduction pratique

L'introduction suivante donne une première idée du logiciel OMNIS.

### Zones de travail

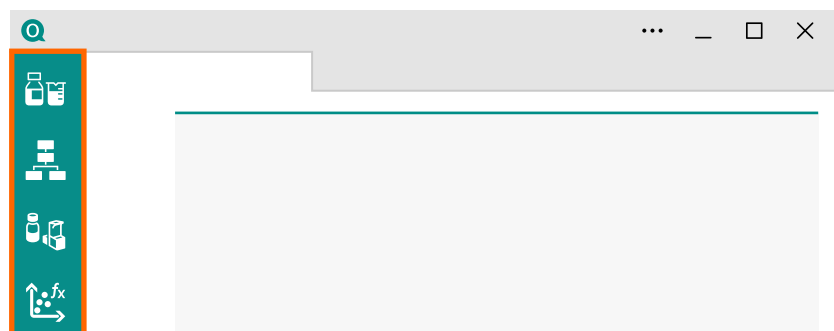
Le logiciel OMNIS divise l'interface utilisateur en plusieurs zones de travail. Les zones de travail peuvent avoir différentes sous-parties.


Dans ce didacticiel, les sous-parties sont indiquées par un chemin de menu. Exemple : la sous-partie **Méthodes** de la zone de travail **Procédure** est indiquée par **Procédure ► Méthodes**.

Comment ouvrir une telle sous-partie d'une zone de travail est expliqué ci-après.

#### 1 Ouvrir une zone de travail

Cliquer sur les icônes à gauche de l'écran pour passer d'une zone de travail à une autre.

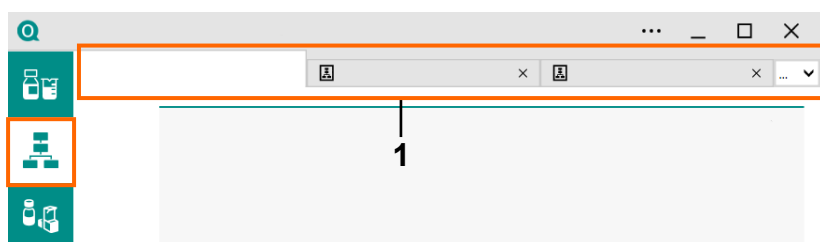


Pour l'exemple ci-dessus, ouvrir la zone de travail **Procédure** en cliquant sur l'icône correspondante .

### **Infobulles**

Si le curseur est passé sur une icône, une infobulle apparaît avec le nom de la zone de travail, une brève explication et un lien vers des informations complémentaires. De la même manière, il est possible d'afficher des infobulles sur d'autres éléments de l'interface utilisateur.

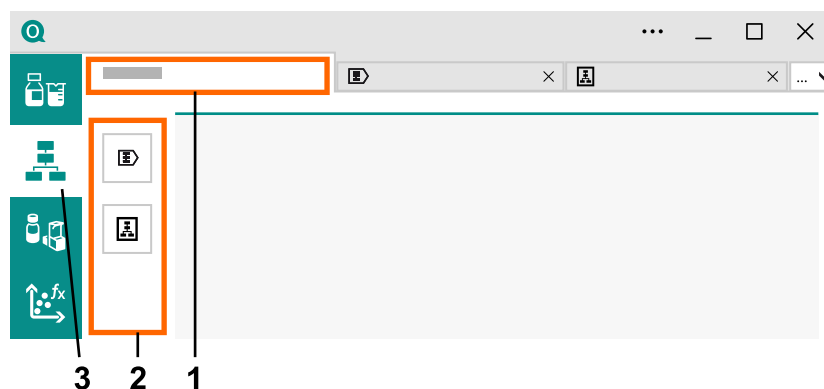
Pour afficher des infobulles sur un écran tactile, toucher l'élément plus longtemps.



La zone de travail peut contenir un ou plusieurs onglets (1).

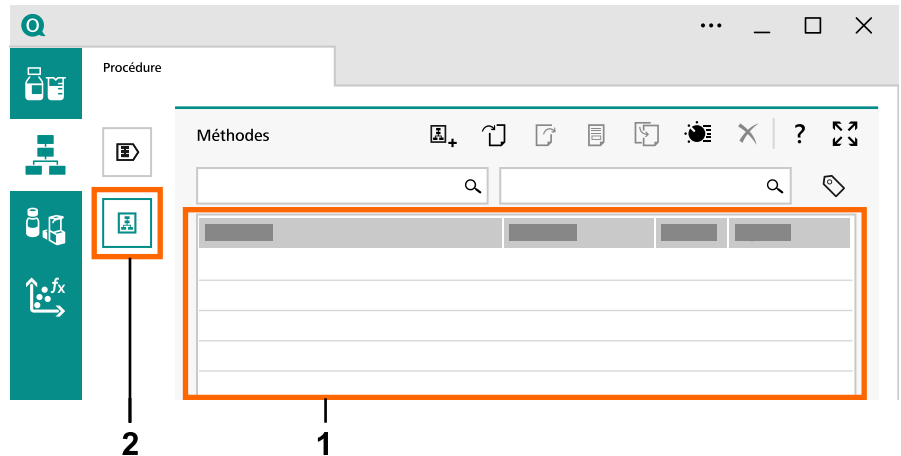
### **2 Ouvrir l'onglet Sous-partie**

Cliquer sur l'onglet le plus à gauche (1) pour afficher les sous-parties (2) de la zone de travail sélectionnée (3).



### **3 Ouvrir une sous-partie**

Ouvrir la sous-partie **Méthodes** en cliquant sur  (2).



La sous-partie **Méthodes** contient une liste générale de toutes les méthodes de la base de données (1).

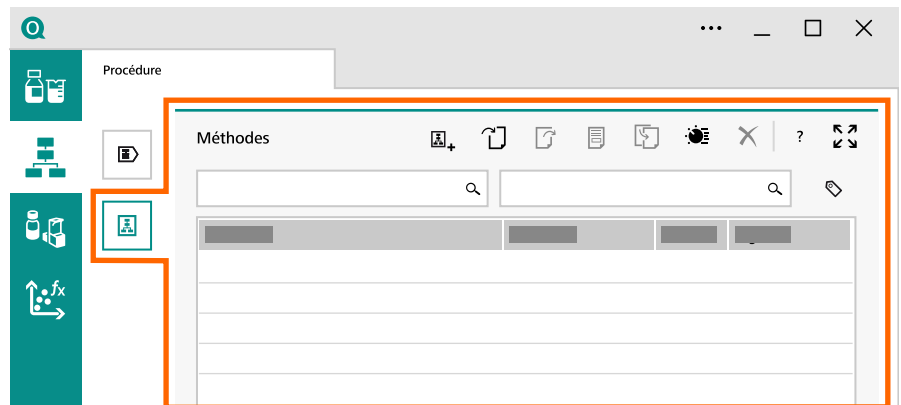
## Onglets

Comme illustré à l'étape 3 ci-dessus, la sous-partie d'une zone de travail peut contenir une liste générale. Si une entrée est ouverte dans la liste ou si une nouvelle entrée est créée, elle est représentée dans un onglet séparé.


La création d'une nouvelle méthode est décrite ci-après à titre d'exemple.

### 1 Ouvrir la sous-partie Méthodes

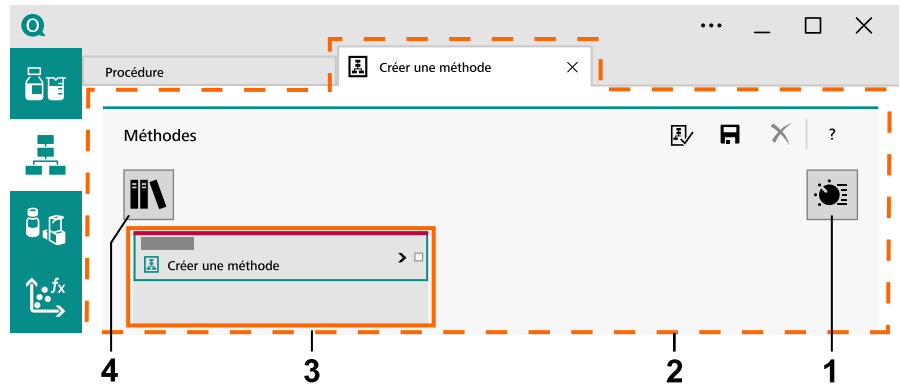
Ouvrir **Procédure** ► **Méthodes** comme décrit ci-dessus.



### 2 Créer une méthode

- Cliquer sur  +.

Un nouvel onglet appelé *Nouvelle méthode* (2), apparaît, dans lequel la méthode peut être créée (3).



Les icônes (1) et (4) donnent accès à d'autres fenêtres actuellement masquées, comme on le verra plus loin.

## Fenêtre

Les fenêtres font partie d'un onglet ou d'une partie dans l'onglet. Certaines fenêtres sont visibles, d'autres sont masquées et doivent être ouvertes via une icône.

### 1 Fenêtre de la bibliothèque

Une bibliothèque contient des éléments qui peuvent être insérés dans un processus.

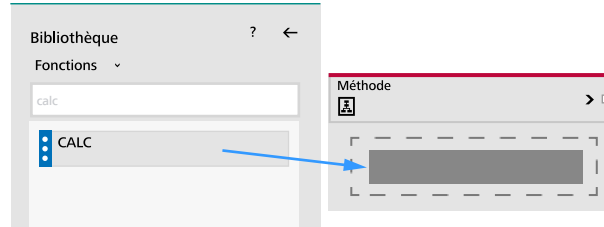
- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur . La fenêtre de la bibliothèque s'ouvre :



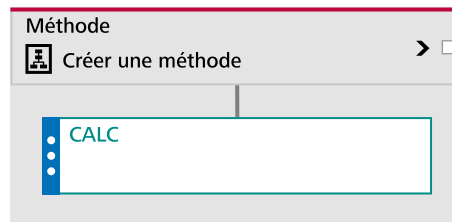
La fenêtre de la bibliothèque comporte plusieurs **sous-parties**, qui peuvent être sélectionnées dans la liste de sélection (1), par exemple, **Bibliothèque ► Fonctions**.

Le champ de recherche (2) permet de rechercher des éléments d'une sous-partie, par exemple, des fonctions (3).

- À titre d'exemple, insérer la fonction **CALC** dans la méthode :
  - Rechercher la fonction **CALC** sous **Bibliothèque ► Fonctions**.
  - Insérer la fonction **CALC** par glisser-déposer dans la méthode.




La méthode contient maintenant une fonction :



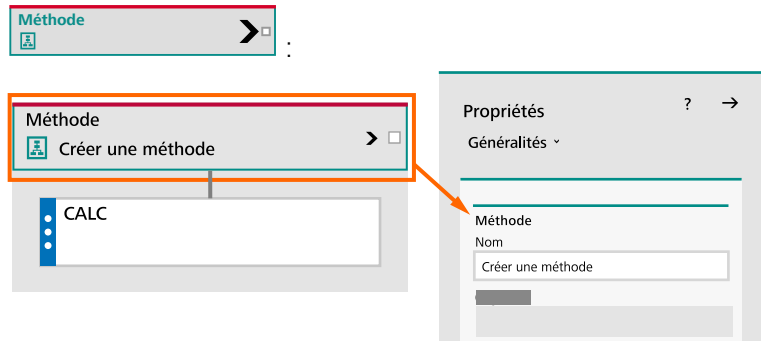
Si nécessaire, d'autres fonctions peuvent être insérées. Les fonctions superposées sont exécutées de manière séquentielle. Les fonctions juxtaposées sont exécutées en parallèle.

- Pour fermer la fenêtre de la bibliothèque, cliquer sur ←.

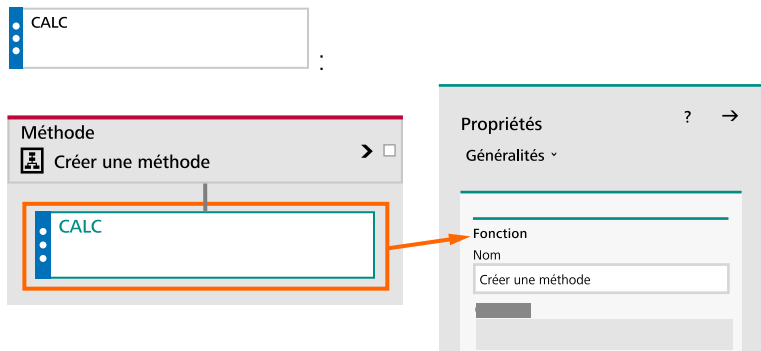
## 2 Fenêtre des propriétés

- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .  
Le contenu de la fenêtre des propriétés dépend de l'élément sélectionné :

- Accéder aux propriétés de la méthode en cliquant sur



- Accéder aux propriétés de la fonction en cliquant sur



- Un double-clic sur l'un des éléments ouvre la sous-partie **Propriétés ► Paramètres**.

- Pour fermer la fenêtre des propriétés, cliquer sur .

## Fin de l'introduction

### 1 Nommer une méthode

- Cliquer sur .
- Ouvrir **Propriétés ► Généralités**.


- Saisir un nom pour la méthode :

Propriétés ? →  
Généralités ▾

Méthode

Nom

## 2 Sauvegarder une méthode

- Sauvegarder la méthode en cliquant sur  ou en appuyant sur les touches **[Ctrl]+[S]**.


## 3 Ouvrir une liste générale

- Fermer l'onglet et revenir à l'onglet de la sous-partie (l'onglet le plus à gauche) **Procédure** ► **Méthodes**.

La méthode créée est maintenant affichée dans la liste générale :

Nom	Saved	Version	Tags
My first method		2021-10-05 14:18:15	1

## 4 Supprimer une méthode

- Sélectionner la méthode créée.
- Supprimer la méthode sélectionnée en cliquant sur .
- Remarque : tant qu'une méthode est ouverte dans un onglet, elle ne peut pas être supprimée.
- Un message de confirmation s'affiche.  
Vérifier le nom de la méthode à supprimer.
- Confirmer en cliquant sur **Supprimer**.


La méthode est supprimée de la base de données et de la liste générale.

## 2.3 Fonctions OMNIS

Les fonctions exécutent des tâches spécifiques. La fonction **MEAS SPEC** permet par exemple d'enregistrer un spectre. La fonction **MEAS SPEC** est utilisée dans une méthode et peut accéder au système de travail attribué à la méthode.

Certaines fonctions peuvent également être insérées dans des procédures de travail, comme la fonction **IF**.

Les fonctions sont représentées sur deux lignes. La première ligne contient le nom du type de fonction (p. ex. **MEAS SPEC**) et la deuxième ligne, le nom de fonction spécifique à un utilisateur.

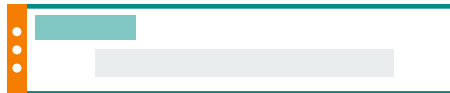
 Il est pertinent de changer le nom de fonction standard (par exemple, Acquérir le spectre 1) par un nom plus spécifique. Les renvois à la fonction sont automatiquement adaptés.

Le bord gauche de l'élément de la fonction a une couleur différente selon le type de fonction :

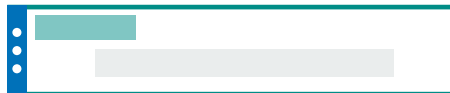
- Fonctions de mesure, de calibrage et de titrage



- Fonctions structurales agissant sur le déroulement de la méthode (par ex. ramifications et boucles)



- Fonctions de dosage et d'automatisation et autres fonctions



### Variables de fonctions

Chaque fonction possède au moins une variable créée au cours de la procédure et qui peut être utilisée dans une formule sous la désignation '**Nom de la variable**.*Nom de la fonction*'.

La variable suivante est disponible pour toutes les fonctions :

**'Finished.Nom de fonction'**

État de la fonction.

- **Non valide** : la fonction n'a pas (encore) été démarrée.
- **0** : la fonction est encore en cours d'exécution.
- **1** : la fonction s'est terminée sans problème.
- **2** : la fonction ne s'est pas terminée correctement. Une erreur ou un avertissement est survenu(e).
- **3** : la fonction a été ignorée par une fonction **SKIP** ou manuellement dans les **Données en temps réel**.
- **4** : la fonction a été arrêtée par une intervention manuelle de l'utilisateur (arrêt ou arrêt d'urgence), par une fonction **STOP** ou en raison d'une erreur survenue au cours d'une fonction se déroulant en parallèle.

### 2.3.1 Enregistrement de spectre

Nom de fonction	Description	Variables de fonction créées (suivies de <i>.nom de fonction</i> )
<b>PREP SPEC</b> Pour les groupes fonctionnels de type <b>Liquid Sample Presentation</b>	Prépare l'analyse des échantillons liquides : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ S'assure que le porte-échantillon utilisé est adapté au récipient d'échantillon prédéfini. Sinon, la détermination est annulée.</li> <li>▪ S'assure qu'un récipient d'échantillon est en place. Sinon, une invitation à insérer l'échantillon s'affiche.</li> <li>▪ Permet de réguler la température soit du récipient d'échantillon soit du porte-échantillon (voir "<i>Régulation de température (Liquid Sample Presentation)</i>", Chapitre 2.5, page 29).</li> </ul>	

Nom de fonction	Description	Variables de fonction créées (suivies de <i>.nom de fonction</i> )
<b>MEAS REF SPEC</b>	<p>Enregistre un spectre de référence sur le groupe fonctionnel attribué. Le spectre de référence est enregistré sur l'appareil.</p> <p>Il y a 1 spectre de référence par groupe fonctionnel. À chaque exécution de la fonction <b>MEAS REF SPEC</b>, le spectre de référence précédent est écrasé.</p> <p>Le spectre de référence enregistré est utilisé par toutes les fonctions <b>MEAS SPEC</b> exécutées sur le groupe fonctionnel correspondant.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Date.Result</b> Moment auquel le spectre de référence a été enregistré. En outre, pour les groupes fonctionnels de type <b>Liquid Sample Presentation</b> :</li> <li>▪ <b>TemperatureControlMode.Result</b> Site de la régulation de température               <ul style="list-style-type: none"> <li>– <b>Inactive</b> : aucune régulation de température.</li> <li>– <b>Sample holder</b> : la température a été réglée sur le porte-échantillon.</li> <li>– <b>Sample vessel</b> : la température a été réglée sur le récipient d'échantillon.</li> </ul> </li> <li>▪ <b>CurrentTemperature.Result</b> Température actuelle pendant l'exécution de la fonction. Unité : °C</li> </ul>
<b>MEAS SPEC</b>	<p>Enregistre un spectre d'un échantillon sur le groupe fonctionnel attribué.</p> <p>Le <b>spectre d'absorbance</b> de l'échantillon est calculé à l'aide du spectre et du spectre de référence enregistré sur l'appareil pour le groupe fonctionnel correspondant.</p>	<p>Pour les groupes fonctionnels de type <b>Liquid Sample Presentation</b> :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>TemperatureControlMode.Result</b> Site de la régulation de température               <ul style="list-style-type: none"> <li>– <b>Inactive</b> : aucune régulation de température.</li> <li>– <b>Sample holder</b> : la température a été réglée sur le porte-échantillon.</li> <li>– <b>Sample vessel</b> : la température a été réglée sur le récipient d'échantillon.</li> </ul> </li> <li>▪ <b>CurrentTemperature.Result</b> Température actuelle pendant l'exécution de la fonction. Unité : °C</li> </ul>

Nom de fonction	Description	Variables de fonction créées (suivies de <i>.nom de fonction</i> )
<b>VESSEL REMOVAL</b> Pour les groupes fonctionnels de type <b>Liquid Sample Presentation</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Peut assurer le prélèvement du récipient d'échantillon. Le déroulement du processus est interrompu jusqu'à ce que le récipient d'échantillon soit retiré. Cela permet un déroulement contrôlé lors des déterminations en série.</li> <li>Si la température est régulée sur le récipient d'échantillon, le capteur de température s'écarte du récipient d'échantillon. Dès que l'invitation à retirer le récipient d'échantillon s'affiche, le récipient d'échantillon peut être retiré sans endommager le capteur de température.</li> <li>La régulation de température peut être désactivée ou poursuivie sur le porte-échantillon.</li> </ul>	

### 2.3.2 Prédiction

#### PREDICT – Quantification

La fonction **PREDICT** utilise un modèle sur un spectre d'absorbance enregistré par la fonction **MEAS SPEC**.

Le modèle de quantification fournit une prédiction d'un paramètre d'intérêt quantitatif. En option, il est possible d'appliquer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine.

#### Variables de fonction créées (suivies de *.nom de fonction*)

- **Predicted.Quantification.Result**  
Résultat prédit pour le paramètre d'intérêt.
- **Uncorrected.Quantification.Result**  
Valeur prédite pour le paramètre d'intérêt sans application de la correction de pente/d'ordonnée à l'origine.
- **Unit.Quantification.Result**  
Unité du paramètre d'intérêt.
- **IsOutlier.OutlierDetection.Result**  
Évaluation indiquant si le spectre est une valeur atypique.  
**0** : le spectre **n'est pas** considéré comme valeur atypique.  
**1** : le spectre est considéré comme une valeur atypique ( $T^2$  de Hotelling ou résidus Q).



## PREDICT – Qualification

La fonction **PREDICT** utilise un modèle sur un spectre d'absorbance enregistré par la fonction **MEAS SPEC**.

Un modèle de qualification qualifie un échantillon en tant qu'échantillon positif (utilisable).

### Variables de fonction créées (suivies de *.nom de fonction*)

- **Status.Qualification.Result**
  - **1** : qualification réussie.
  - **0** : échec de la qualification.

## PREDICT – hiérarchie des modèles

La fonction **PREDICT** utilise une hiérarchie des modèles sur un spectre d'absorbance enregistré par la fonction **MEAS SPEC**.

La hiérarchie des modèles permet selon l'utilisation d'identifier un échantillon inconnu (p. ex. fructose) ou de vérifier l'appartenance d'un échantillon au produit ou une quantification des paramètres d'intérêt d'un échantillon.

### Variables de fonction créées (suivies de *.nom de fonction*)

- **Hiérarchie des modèles (identification)**
  - **Product.Identification.Result**  
Produit ou groupe de produits déterminé de l'échantillon identifié.  
Si l'identification a échoué, aucun résultat ne s'affiche.
  - **Status.Identification.Result**  
**Identifié** : identification réussie. Un produit ou un groupe de produits a pu être identifié.  
**Ambigu** : échec de l'identification. Les valeurs de probabilité de plusieurs produits dépassent le seuil de probabilité.  
**Non identifié** : échec de l'identification. Aucune valeur de probabilité d'un produit ne dépasse le seuil de probabilité.
  - **Probability.Identification.Result**  
**0,01 à 100** : la probabilité en pourcentage exprime la plausibilité avec laquelle l'échantillon appartient au produit ou au groupe de produits.  
**Non valide** : échec de l'identification.
- **Hiérarchie des modèles (vérification)**
  - **Status.Verification.Result**  
**0** : échec de la vérification.  
**1** : vérification réussie.



### 2.3.3 Calculs et statistiques

Nom de fonction	Description	Variables de fonction créées (suivies de <i>.nom de fonction</i> )
<b>CALC</b>	Effectue des calculs, par exemple, pour le traitement ultérieur du résultat prédit. La formule peut être créée à l'aide de l'éditeur de formules.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>'Nom du résultat'</b> Valeur du résultat du calcul. Remarque : le '<i>nom du résultat</i>' peut être défini ou calculé dans les paramètres de fonction. Le nom par défaut est '<i>Résultat 1</i>'.</li> <li>▪ <b>'MeanValue.<i>nom du résultat</i>'</b> Valeur moyenne de tous les résultats déjà déterminés auparavant avec la même version de procédure de travail et les mêmes versions de méthodes.</li> <li>▪ <b>'StandardDeviation.<i>nom du résultat</i>'</b> Écart-type absolu. Le calcul utilise les valeurs de sous-échantillon en cours ainsi que de tous les sous-échantillons qui ont déjà été déterminées avec la même version de la procédure de travail et les mêmes versions de méthodes.</li> </ul>
<b>EVAL BASE STATISTICS</b>	Détermine les valeurs statistiques de base d'un spectre. Les prétraitements de données et les gammes de longueur d'ondes à utiliser peuvent être définis.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Mean.Result</b> Valeur moyenne de l'absorbance.</li> <li>▪ <b>StandardDeviation.Result</b> Écart-type des valeurs d'absorbance.</li> <li>▪ <b>Minimum.Result</b> Valeur minimale de l'absorbance.</li> <li>▪ <b>Maximum.Result</b> Valeur maximale de l'absorbance.</li> <li>▪ <b>First.Result</b> Première valeur d'absorbance</li> <li>▪ <b>Last.Result</b> Dernière valeur d'absorbance</li> <li>▪ <b>Integral.Result</b> Valeur de l'intégrale du spectre.</li> </ul>

En outre, des fonctions structurelles telles que **IF**, **LOOP**, **SKIP**, **STOP**, **SYNC** ou **WAIT** sont disponibles.

Les fonctions **EXPORT** ou **REPORT** peuvent être utilisées pour générer une sortie des données de détermination.

### 2.3.4 Calibrage de la longueur d'onde

Nom de fonction	Description	Variables de fonction créées (suivies de <i>.nom de fonction</i> )
<b>CAL WL</b>	Effectue un calibrage de la longueur d'onde de l'appareil.  Le calibrage de la longueur d'onde normalise les valeurs de longueur d'onde, c.-à-d. l'axe x des spectres.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Date.Result</b> Moment, auquel le calibrage de la longueur d'onde a été effectué.</li> </ul>
<b>VAL WL</b>	Valide le calibrage de la longueur d'onde.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Date.Result</b> Moment auquel le calibrage de la longueur d'onde a été validé.</li> <li>▪ <b>OverallStatus.Result</b> <b>1</b> : la validation a réussi. <b>2</b> : la validation a échoué.</li> <li>▪ <b>ExpectedWavelength.Peak{X}</b> Longueur d'onde attendue (en nm) du pic X.</li> <li>▪ <b>MeasuredWavelength.Peak{X}</b> Longueur d'onde mesurée (en nm) du pic X.</li> <li>▪ <b>ExpectedBandwidth.Peak{X}</b> Largeur de bande attendue (en nm) du pic X.</li> <li>▪ <b>MeasuredBandwidth.Peak{X}</b> Largeur de bande mesurée (en nm) du pic X.</li> <li>▪ <b>Index.Peak{X}</b> Numéro du pic X. Exemple : 'Index.Peak{2}' a pour résultat 2.</li> </ul> <p>S'il n'y a pas de pic pour X, les variables de fonctions ci-dessus donnent le résultat : <i>Non valide</i></p>

### 2.3.5 Tests de performance de l'appareil

Nom de fonction	Description	Variables de fonction créées (suivies de <i>.nom de fonction</i> )
<b>TEST WL</b>	<p>Le test de longueur d'onde vérifie l'exactitude et la précision de la longueur d'onde.</p> <p><b>Interne</b> (obligatoire) : l'étalon de longueur d'onde interne est utilisé.</p> <p><b>Externe</b> (optionnel) : un étalon de longueur d'onde externe est utilisé.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Date.Result</b> Heure à laquelle le test de longueur d'onde a été effectué.</li> <li>▪ <b>OverallStatus.Result</b> <b>1</b> : le test a réussi. <b>2</b> : le test a échoué.</li> </ul>
<b>TEST NOISE</b>	<p>Le test du bruit de fond vérifie le bruit du signal.</p> <p><b>Interne</b> (obligatoire) : le chemin de référence de la présentation de l'échantillon utilisée est appliqué.</p> <p><b>Essai à flux faible</b> et <b>essai à flux élevé</b> (optionnels) : des standards de référence externes sont utilisés.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Date.Result</b> Moment auquel le bruit du signal a été testé.</li> <li>▪ <b>OverallStatus.Result</b> <b>1</b> : le test a réussi. <b>2</b> : le test a échoué.</li> </ul>
<b>TEST PHOTOMETRIC LINEARITY</b>	<p>L'essai externe optionnel vérifie la linéarité photométrique à l'aide de standards de référence externes.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Date.Result</b> Heure à laquelle la linéarité photométrique a été testée.</li> <li>▪ <b>OverallStatus.Result</b> <b>1</b> : le test a réussi. <b>2</b> : le test a échoué.</li> </ul>

## 2.4 Réserver et libérer des appareils

Un appareil donné ne peut être utilisé que par un seul système OMNIS à la fois.

L'appareil doit être réservé avant de pouvoir être utilisé. Tant que l'appareil est réservé, aucun autre système OMNIS ne peut y accéder.

### Réserver un appareil

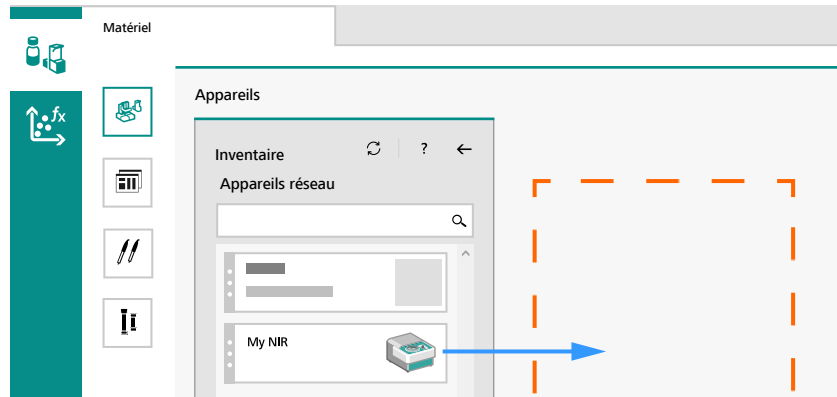
#### 1 Rechercher des appareils disponibles

- Ouvrir **Matériel** ► **Appareils**.
- Ouvrir la fenêtre **Inventaire** en cliquant sur .

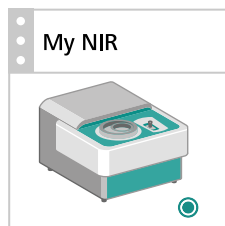
- Rechercher l'appareil nécessaire.  
Remarque : les appareils dont les icônes sont grisées ne sont pas disponibles.

## 2 Réserver un appareil

Déplacer l'appareil par glisser-déposer dans la surface de travail adjacente.



L'appareil est désormais réservé :



un voyant d'état vert à côté de l'appareil indique que l'appareil peut être utilisé.

- i** Au besoin, d'autres appareils peuvent être réservés.
- i** L'appareil reste réservé même si l'on quitte le logiciel OMNIS. L'appareil n'est libéré qu'à la fermeture de Windows. Dès que l'ordinateur est rallumé, l'appareil est à nouveau réservé. Que ce soit le même utilisateur ou non qui se connecte ne change rien.


## Libérer un appareil

Pour libérer définitivement un appareil réservé, procéder comme suit :

### 1 Ouvrir la sous-partie Appareils

- Ouvrir **Matériel** ► **Appareils**.

## 2 Libérer un appareil

- Sélectionner l'appareil à libérer.
- Cliquer sur  pour supprimer l'appareil sélectionné.

L'appareil est libéré et à la disposition d'autres utilisateurs.

## 2.5 Régulation de température (Liquid Sample Presentation)

La régulation de température règle, au choix, la température dans le porte-échantillon ou dans l'échantillon.

### Régulation de température dans le porte-échantillon

- Convient pour les porte-échantillons pour les flacons à usage unique, les cuves et les cellules à flux continu.
- Température de consigne dans le porte-échantillon : entre 25 °C et 80 °C (et jamais inférieure de plus de 5,0 K à la température ambiante).
- Exactitude des capteurs de température : < 0,5 K


### Régulation de température dans l'échantillon

- Convient pour les flacons à usage unique.
- Température de consigne de l'échantillon : entre 25 °C et 80 °C (et jamais inférieure de plus de 5,0 K à la température ambiante).
- Exactitude des capteurs de température : < 0,5 K
- Algorithme de régulation :
  - L'algorithme de régulation tient compte de la température de consigne définie de l'échantillon et de la température mesurée sur les capteurs. La mesure spectroscopique peut démarrer dès que la température modélisée est atteinte dans l'échantillon avec une stabilité suffisante et ne s'écarte pas de la température de consigne de plus de 0,5 K. Le cas échéant, la mesure spectroscopique démarre déjà peu après l'utilisation du flacon à usage unique.
  - Exactitude typique : 1,0 K (testé dans des échantillons d'eau pour des températures d'échantillon de 25 °C à 80 °C à une température ambiante de 23 °C).


### Activer la régulation de température

- Par une fonction **PREP SPEC** (paramètres de fonction **Régulation de température**).



- En contrôle manuel (uniquement pour la régulation de température sur le porte-échantillon) :
  - Sous **Matériel ► Appareils** double-cliquer sur l'appareil réservé pour ouvrir le **Contrôle manuel**.
  - Dans la partie **Réguler la température** entrer la température souhaitée dans le champ de saisie **Température de consigne porte-échantillon** et cliquer sur .

### **Couper la régulation de température**

- À l'aide d'une fonction **VESSEL REMOVAL** (Option **Désactiver**).
- En contrôle manuel :
  - Sous **Matériel ► Appareils** double-cliquer sur l'appareil réservé pour ouvrir le **Contrôle manuel**.
  - Dans la partie **Réguler la température**, cliquer sur . La régulation de température s'arrête que la température soit mesurée dans le porte-échantillon ou dans l'échantillon.
- La régulation de température s'arrête généralement après 2 heures d'inactivité ou si l'appareil est mis hors tension.


## 3 Préparation de l'appareil

Avant que l'appareil puisse acquérir des spectres, il nécessite une préparation :

- Un **système de travail** doit être en place.

Ensuite, les tâches ci-après permettent de comparer les spectres les uns aux autres :

- Le **calibrage de la longueur d'onde** calibre l'axe x des spectres.
- Les **tests de performance d'appareils** garantissent que les performances des appareils sont conformes aux exigences. Les tests de performance des appareils doivent être effectués régulièrement (*voir "Tests de performance de l'appareil", Chapitre 10.1, page 172*).

 De plus, les valeurs d'absorbance sur l'axe y des spectres doivent être standardisées. À cet effet, une fonction **MEAS REF SPEC** est utilisée avant chaque acquisition de spectres.

 Une illustration des déroulements dans le logiciel OMNIS se trouve en annexe (*voir « Préparation de l'appareil », page 192*).

### 3.1 Créer un système de travail

**Condition préalable :**


- Le spectromètre est réservé (*voir "Réserver et libérer des appareils", Chapitre 2.4, page 27*).

#### 1 Créer un système de travail


- Cliquer sur  dans **Matériel** ► **Systèmes de travail**.


Un nouvel onglet s'ouvre.


#### 2 Nommer un système de travail


- Sélectionner la sous-partie **Nouveau système de travail**. Le cadre de la sous-partie passe au vert.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, entrer un nom approprié dans le champ **Nom**.

### 3 Insérer un groupe fonctionnel

- Ouvrir la fenêtre **Inventaire** en cliquant sur .
- Insérer le groupe fonctionnel **Liquid Sample Presentation** ou **Solid Sample Presentation** par glisser-déposer dans le système de travail.

 Les appareils de type **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** mettent à disposition 2 groupes fonctionnels. Metrohm recommande de créer des systèmes de travail distincts avec chacun un des deux groupes fonctionnels.

 Un groupe fonctionnel peut de nouveau être retiré du système de travail :


- Sélectionner le groupe fonctionnel à supprimer.
- Cliquer sur  ou appuyer sur la touche **[Suppr]**.


 Au besoin, le nom du groupe fonctionnel peut être modifié :

- Sélectionner le groupe fonctionnel dont le nom doit être modifié.
- Saisir un nom approprié sous **Propriétés ► Généralités ► Nom**.

### 4 Sauvegarder un système de travail

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

 Un groupe fonctionnel peut être attribué à plusieurs systèmes de travail.


 Dès que le système de travail est créé, l'appareil peut être libéré et réservé à nouveau selon les besoins.

## 3.2 Calibrage de la longueur d'onde


Le calibrage de la longueur d'onde garantit de pouvoir comparer les valeurs de longueur d'onde des spectres. Elle utilise un étalon de longueur d'onde interne, traçable métrologiquement.

Le calibrage de la longueur d'onde se fait en 2 étapes :

1. La fonction **CAL WL** normalise les valeurs de longueur d'onde, c'est-à-dire l'axe x des spectres.
2. La fonction **VAL WL** valide le calibrage de la longueur d'onde. Pour pouvoir enregistrer des spectres avec le groupe fonctionnel, il faut d'abord réussir cette validation.

 Les appareils de type **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** mettent à disposition 2 groupes fonctionnels. Le calibrage de la longueur d'onde et la validation doivent être effectués séparément pour les deux unités fonctionnelles.

### 3.2.1 Préparer un calibrage de la longueur d'onde

 À la première utilisation du logiciel OMNIS, lire l'introduction (*voir "Introduction pratique", Chapitre 2.2, page 11*) avant de poursuivre.

Suivre les instructions ci-après pour créer une méthode avec les fonctions **CAL WL** et **VAL WL**. Établir ensuite une procédure de travail, un profil d'échantillon et une table d'échantillons. Ainsi, le calibrage de la longueur d'onde peut être lancé de la même manière que la détermination de l'échantillon.


#### Créer une méthode

##### 1 Créer une méthode

- Cliquer sur  dans **Procédure ► Méthodes**.

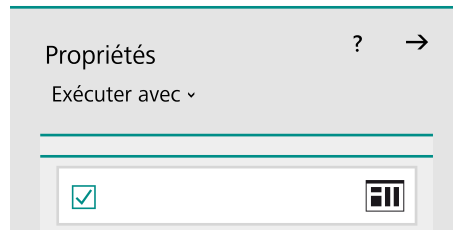
Un onglet s'ouvre avec la méthode nouvellement créée et le titre **Nouvelle méthode**.

##### 2 Nommer une méthode

- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés ► Généralités**, entrer le nom suivant dans le champ **Nom** : **Wavelength Cal/Val**.


### 3 Attribuer le système de travail à la méthode

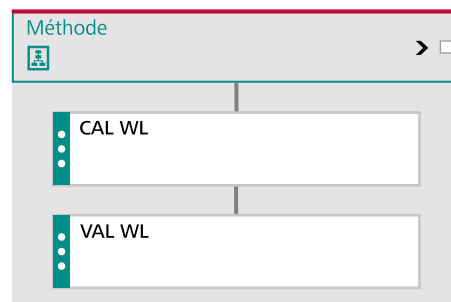
- Sélectionner le système de travail à utiliser sous **Propriétés** ► **Exécuter avec**.



- i Utiliser le même système de travail pour toutes les méthodes présentées dans ce document.

### 4 Insérer des fonctions

- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Rechercher la fonction **CAL WL** sous **Bibliothèque** ► **Fonctions**.
- Insérer la fonction **CAL WL** par glisser-déposer dans la méthode.
- Rechercher la fonction **VAL WL** et la placer sous la fonction **CAL WL**.



- i L'ordre des fonctions est important. Les instructions disposées les unes sous les autres sont exécutées séquentiellement. La fonction **CAL WL** est exécutée en premier, suivie de la fonction **VAL WL**.




- i Les fonctions enregistrent automatiquement un spectre de référence. Par conséquent, la fonction **MEAS REF SPEC** n'est pas nécessaire.

### 5 Sauvegarder une méthode

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## Établir une procédure de travail


### 1 Créer une procédure de travail

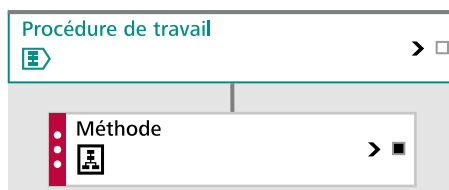
- **Procédure** ► **Procédures de travail** en cliquant sur  puis ouvrir .
- Créer une nouvelle procédure de travail en cliquant sur .

### 2 Nommer une procédure de travail

- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, entrer le nom suivant dans le champ **Nom** : **Wavelength Cal/Val**

### 3 Insérer une méthode

- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Insérer la méthode créée par glisser-déposer de **Bibliothèque** ► **Méthodes** dans la procédure de travail.



### 4 Sauvegarder une procédure de travail

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## Établir un profil d'échantillon

### 1 Créer un profil d'échantillon

- Cliquer sur  dans **Échantillons** ► **Profils d'échantillons**.

### 2 Nommer un profil d'échantillon

- Saisir le nom suivant dans le champ **Nom du profil d'échantillon** : **Wavelength Cal/Val**



### 3 Champ de saisie du nom de l'échantillon

La partie **Données d'échant.** comporte un champ pour saisir le nom de l'échantillon :

**Données d'échant.**

Nom de champ court  
Nom

Nom de champ long  
Nom

Type du champ de saisie  
Texte

Utiliser comme  
Champ de saisie

Propriétés champ saisie

Valeur par défaut  
My Sample name

- Saisir un **Valeur par défaut** pour le nom de l'échantillon.

### 4 Définir une procédure de travail et le nombre de sous-échantillons

- Dans la partie **Procédures de travail / Sous-échantillon**, sélectionner la procédure de travail **Wavelength Cal/Val**.
- Le **Nombre d'analyses** détermine combien de sous-échantillons seront automatiquement ajoutés pour chaque échantillon. Saisir **1**.

Procédures de travail / Sous-échantillon	
Procédures de travail	Nombre d'analyses
1	1

### 5 Sauvegarder un profil d'échantillon

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## Établir une table d'échantillons

### 1 Créer une table d'échantillons



- Cliquer sur  dans **Échantillons** ► **Tables d'échantillons**.

## 2 Attribuer un nom à la table d'échantillons



- Saisir le nom suivant dans le champ **Nom** : **Wavelength Cal/Val**  
Valider avec **[Entrée]**.



## 3 Sauvegarder une table d'échantillons

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.
-  Les échantillons sont ajoutés ultérieurement.

### 3.2.2 Démarrer le calibrage de la longueur d'onde

-  Respecter les intervalles d'exécution (*voir "Calibrage de la longueur d'onde", Chapitre 10.2, page 173*).
-  Metrohm recommande d'attendre 1 heure après la mise sous tension de l'appareil avant de lancer le calibrage de la longueur d'onde.

#### Démarrer le calibrage de la longueur d'onde

##### Condition préalable :

Le calibrage de la longueur d'onde est préparé (*voir "Préparer un calibrage de la longueur d'onde", Chapitre 3.2.1, page 33*).


## 1 Réserver un appareil

Réserver le spectromètre (*voir "Réserver et libérer des appareils", Chapitre 2.4, page 27*).

## 2 Ouvrir la table d'échantillons 'Wavelength Cal/Val'

- Ouvrir la zone de travail **Échantillons**.
- Si la table d'échantillons **Wavelength Cal/Val** a été fermée, ouvrir la sous-partie **Tables d'échantillons** dans l'onglet **Échantillons** et double-cliquer sur la table d'échantillons **Wavelength Cal/Val**.


## 3 Sélectionner le profil d'échantillon 'Wavelength Cal/Val'



- Sélectionner le profil d'échantillon **Wavelength Cal/Val** sur la liste de sélection à gauche de l'icône .







**i** Les échantillons ajoutés par la suite sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné.


#### 4 Ajouter un échantillon

- Ajouter un nouvel échantillon à la table d'échantillons en cliquant sur .



Une nouvelle entrée apparaît dans la table d'échantillons. Elle contient un échantillon marqué d'un  suivi de son sous-échantillon marqué d'un .

	Nom de l'échantillon		N°	Nom du sous-échantillon
	Échantillon 1		1	Sous-échantillon 1

Selon le profil d'échantillon, le nouvel échantillon contient 1 sous-échantillon qui utilise la procédure de travail **Wavelength Cal/Val**.

- Modifier les noms des échantillons et sous-échantillons selon les besoins.
- Sauvegarder la table d'échantillons en cliquant sur  ou en appuyant sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

#### 5 Exécuter le calibrage de la longueur d'onde

- Sélectionner l'échantillon inséré.
- Démarrer le calibrage de la longueur d'onde en cliquant sur . Une fois le calibrage terminé, l'état du sous-échantillon est affiché comme .

#### 6 Vérifier le résultat

- En bas à droite dans la partie, ouvrir **Résultats ► Données brutes**.


Les résultats du calibrage et de la validation s'affichent. Vérifier l'état global de la validation :

État global
Réussie

**i** **Avertissement d'état** : si la validation échoue, l'icône du sous-échantillon est indiquée en rouge dans la table d'échantillons :



**i** Des informations sur les derniers calibrage et validation de longueur d'onde effectués peuvent être visualisées dans les propriétés de l'appareil :

- Sélectionner l'appareil réservé sous **Matériel** ► **Appareils**.
- Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **Propriétés**.
- **Données spécifiques** ► **Données de calibrage et de test**

**i** La variable **OverallStatus.Result** de la fonction **VAL WL** indique l'état global de la validation :

- 1 : la validation a réussi.
- 2 : la validation a échoué.

### 3.3 Tests de performance de l'appareil

Des tests de performance internes et externes de l'appareil sont disponibles :

- **Tests de performance internes de l'appareil (obligatoire)**  
Pour pouvoir enregistrer des spectres avec le groupe fonctionnel, il faut d'abord réussir les tests de performance internes de l'appareil correspondant.
  - Le test de longueur d'onde vérifie l'exactitude et la précision de la longueur d'onde avec la fonction **TEST WL**. Il utilise un étalon de longueur d'onde interne, traçable métrologiquement.
  - Les tests du bruit de fond vérifient le bruit de fond photométrique, le bruit de fond pic à pic et le biais de ligne de base du bruit avec la fonction **TEST NOISE**.

- **Tests de performance externes de l'appareil (optionnels)**  
Les tests de performance externes de l'appareil permettent la validation selon les pharmacopées telles que USP <856>, Ph.Eur 2.2.40 et JP 2.27. Les fonctions suivantes sont utilisées : **TEST WL** (exactitude et précision de la longueur d'onde), **TEST NOISE** (bruit de fond photométrique, bruit de fond pic à pic et biais de ligne de base du bruit de fond à faible et forte intensité lumineuse) et **TEST PHOTOMETRIC LINEARITY** (linéarité photométrique). Les tests de performance externes de l'appareil nécessitent des standards de référence externes, traçables métrologiquement (*voir "Tests de performance externes de l'appareil (optionnels)", Chapitre 3.3.3, page 46*).

### 3.3.1 Préparer les tests de performance internes de l'appareil


Suivre les instructions ci-après pour créer une méthode avec les fonctions **TEST WL** et **TEST NOISE**. Établir ensuite une procédure de travail, un profil d'échantillon et une table d'échantillons. Les tests de performance d'appareils peuvent alors être lancés de la même façon qu'une détermination d'échantillon.

#### Établir une méthode

##### 1 Créer une méthode

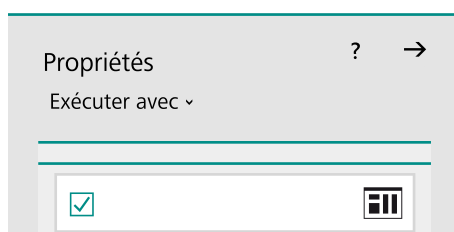
- Cliquer sur  dans **Procédure** ► **Méthodes**.

##### 2 Nommer une méthode


- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, saisir le nom **Test de performance d'appareils** dans le champ **Nom**.

##### 3 Attribuer le système de travail à la méthode


- Sélectionner le système de travail à utiliser sous **Propriétés** ► **Exécuter avec**.




#### 4 Insérer des fonctions

- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Rechercher la fonction **TEST WL** sous **Bibliothèque** ► **Fonctions**.
- Insérer la fonction **TEST WL** par glisser-déposer dans la méthode.
- Rechercher la fonction **TEST NOISE** et la placer sous la fonction **TEST WL**.



 Les fonctions enregistrent automatiquement un spectre de référence. Par conséquent, la fonction **MEAS REF SPEC** n'est pas nécessaire.

 Les tests de performances de l'appareil utilisent le chemin de référence correspondant à la présentation de l'échantillon. Le test de longueur d'onde utilise un étalon de longueur d'onde interne, traçable métrologiquement. Les tests de performance externes de l'appareil (optionnels) nécessitent des standards de référence externes (*voir "Tests de performance externes de l'appareil (optionnels)", Chapitre 3.3.3, page 46*).

#### 5 Sauvegarder une méthode

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

### Établir une procédure de travail

#### 1 Créer une procédure de travail


- Cliquer sur + dans **Procédure** ► **Procédures de travail**.

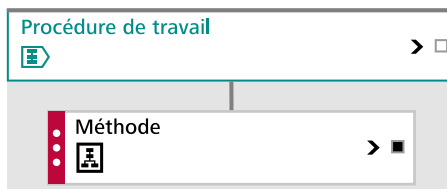
#### 2 Nommer une procédure de travail

- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .

- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, saisir le nom **Test de performance d'appareils** dans le champ **Nom**.

### 3 Insérer une méthode

- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Insérer la méthode créée par glisser-déposer de **Bibliothèque** ► **Méthodes** dans la procédure de travail.



### 4 Sauvegarder une procédure de travail

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## Établir un profil d'échantillon

### 1 Créer un profil d'échantillon

- Cliquer sur + dans **Échantillons** ► **Profils d'échantillons**.

### 2 Nommer un profil d'échantillon

- Saisir le nom **Test de performance d'appareils** dans le champ **Nom du profil d'échantillon**.



### 3 Champ de saisie du nom de l'échantillon

La partie **Données d'échant.** comporte un champ pour saisir le nom de l'échantillon :

**Données d'échant.**

Nom de champ court  
Nom

Nom de champ long  
Nom

Type du champ de saisie  
Texte

Utiliser comme  
Champ de saisie

▲ Propriétés champ saisie

Valeur par défaut  
My Sample name

- Saisir un **Valeur par défaut** pour le nom de l'échantillon.

#### 4 Définir une procédure de travail et le nombre de sous-échantillons

- Dans la partie **Procédures de travail / Sous-échantillon**, sélectionner la procédure de travail **Test de performance d'appareils** créée.
- Le **Nombre d'analyses** détermine combien de sous-échantillons seront automatiquement ajoutés pour chaque échantillon. Saisir **1**.

Procédures de travail / Sous-échantillon	
Procédures de travail	Nombre d'analyses
1	1

#### 5 Sauvegarder un profil d'échantillon

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

### Établir une table d'échantillons

#### 1 Créer une table d'échantillons

- Cliquer sur  dans **Échantillons** ► **Tables d'échantillons**.

**2 Attribuer un nom à la table d'échantillons**


- Saisir le nom **Test de performance d'appareils** dans le champ **Nom**.



Valider avec [Entrée].

**3 Sauvegarder une table d'échantillons**

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches [Ctrl]+[S].

 Les échantillons sont ajoutés ultérieurement.

**3.3.2 Exécuter des tests de performance internes de l'appareil**

-  Respecter les intervalles d'exécution recommandés (*voir "Tests de performance de l'appareil", Chapitre 10.1, page 172*).

**Exécuter un test de performance d'appareils****Condition préalable :**

Les tests de performance de l'appareil sont préparés (*voir "Préparer les tests de performance internes de l'appareil", Chapitre 3.3.1, page 40*).


**1 Réserver un appareil**

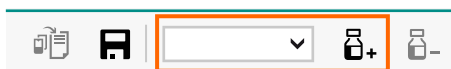
Réserver le spectromètre (*voir "Réserver et libérer des appareils", Chapitre 2.4, page 27*).


**2 Ouvrir la table d'échantillons « Test de performance d'appareils »**

- Ouvrir la zone de travail **Échantillons**.
- Si la table d'échantillons **Test de performance de l'appareil** a été fermée, dans l'onglet **Échantillons** ouvrir la sous-partie **Tables d'échantillons** et double-cliquer sur la table d'échantillons **Test de performance d'appareils**.


**3 Sélectionner le profil d'échantillon 'Test de performance d'appareils'**



- Sélectionner le profil d'échantillon **Test de performance d'appareils** dans la liste de sélection à gauche de l'icône .



 Les échantillons ajoutés par la suite sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné.


#### 4 Ajouter un échantillon

- Ajouter un nouvel échantillon à la table d'échantillons en cliquant sur .


Une nouvelle entrée apparaît dans la table d'échantillons. Elle contient un échantillon marqué d'un  suivi de son sous-échantillon marqué d'un .


	Nom de l'échantillon		N°	Nom du sous-échantillon
	Échantillon 1		1	Sous-échantillon 1

Selon le profil d'échantillon, le nouvel échantillon contient 1 sous-échantillon qui utilise la procédure de travail **Test de performance d'appareils**.

- Modifier les noms des échantillons et sous-échantillons selon les besoins.
- Sauvegarder la table d'échantillons en cliquant sur  ou en appuyant sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

#### 5 Effectuer un test de performance de l'appareil

- Sélectionner l'échantillon qui effectuera les tests de performance de l'appareil.
- Démarrer les tests en cliquant sur .

Lorsque les tests de performance de l'appareil sont achevés, l'état du sous-échantillon est affiché comme .

#### 6 Vérifier le résultat

- En bas à droite dans la partie, ouvrir **Résultats ► Données brutes**.


Les résultats des tests de longueur d'onde et des tests de bruit de fond sont affichés. Vérifier l'état global pour les deux tests :

État global
Réussie

**i** **Avertissement d'état** : si un test de performance de l'appareil échoue, l'icône du sous-échantillon est indiquée en rouge dans la table d'échantillons :



**i** Des informations sur les derniers tests de performance de l'appareil effectués peuvent être visualisées dans les propriétés de l'appareil :

- Sélectionner l'appareil réservé sous **Matériel** ► **Appareils**.
- Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **Propriétés**.
- **Données spécifiques** ► **Données de calibration et de test**

**i** La variable **OverallStatus.Result** des fonctions **TEST WL** et **TEST NOISE** indique à chaque fois l'état global du test :

- 1** : le test a réussi.
- 2** : le test a échoué.

**i** Suivre les étapes de dépannage en cas d'échec des tests (*voir "Tests de performance de l'appareil", Chapitre 10.1, page 172*).

### 3.3.3 Tests de performance externes de l'appareil (optionnels)

Les tests de performance externes de l'appareil permettent la validation selon les pharmacopées telles que USP <856>, Ph.Eur 2.2.40 et JP 2.27. Des standards de référence externes, traçables métrologiquement sont nécessaires. Le fichier du standard de référence OMNIS (\*.ostd) correspondant pour chaque standard de référence externe doit être importé dans le logiciel OMNIS (voir *Metrohm Knowledge Base*).

Pour pouvoir exécuter les tests de performance internes et externes de l'appareil indépendamment les uns des autres :

- Créer des méthodes, des procédures de travail et des profils d'échantillons séparés.
- Pour les tests de performance externes de l'appareil, procéder de manière analogue aux tests de performance internes, avec les modifications et ajouts suivants.


**i** Les fonctions enregistrent automatiquement un spectre de référence. Par conséquent, la fonction **MEAS REF SPEC** n'est pas nécessaire.

#### TEST WL

- Insérer et sélectionner la fonction **TEST WL** dans la méthode.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .

- Entrer les paramètres de mesure sous **Propriétés** ► **Paramètres** ► **Paramètres de mesure** :
  - Sélectionner le mode de mesure **Externe**.
  - **Liquid Sample Presentation** : sélectionner le standard **WL Standard Transmission OMNIS NIR**.
  - **Solid Sample Presentation** : sélectionner le standard **WL Standard Reflection OMNIS NIR**.


#### **TEST NOISE – Essai à flux faible**

- Insérer et sélectionner la fonction **TEST NOISE** dans la méthode.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Entrer les paramètres de mesure sous **Propriétés** ► **Paramètres** ► **Paramètres de mesure** :
  - Sélectionner le mode de mesure **Essai à flux faible**.
  - **Liquid Sample Presentation** : sélectionner le standard **ND Standard Transmission 4 (OD 1.0) OMNIS NIR**.
  - **Solid Sample Presentation** : sélectionner le standard **ND Standard Reflection 2 (R10) OMNIS NIR**.

#### **TEST NOISE – Essai à flux élevé**

- Insérer et sélectionner une autre fonction **TEST NOISE** dans la méthode.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Entrer les paramètres de mesure sous **Propriétés** ► **Paramètres** ► **Paramètres de mesure** :
  - Sélectionner le mode de mesure **Essai à flux élevé**.
  - **Liquid Sample Presentation** : sélectionner le standard **ND Standard Transmission 0 (OD 0) OMNIS NIR**.
  - **Solid Sample Presentation** : sélectionner le standard **ND Standard Reflection 5 (R99) OMNIS NIR**.

#### **TEST PHOTOMETRIC LINEARITY**

- Insérer et sélectionner la fonction **TEST PHOTOMETRIC LINEARITY** dans la méthode.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .



## 4 Préparer un développement de modèle

Les groupes fonctionnels du type **Liquid Sample Presentation** permettent de développer des modèles pour les échantillons liquides. Les groupes fonctionnels du type **Solid Sample Presentation** permettent de développer des modèles pour les échantillons solides.

Le développement d'un modèle commence par la collecte d'échantillons de calibrage et de validation.

### Collecter des échantillons

Collecter avec soin les échantillons nécessaires à l'élaboration d'un modèle :

- Les échantillons doivent inclure des variations types prévisibles de l'échantillon ainsi que des variations saisonnières ou des conditions environnementales.
- Les échantillons doivent être répartis uniformément sur l'étendue de la variation.
- Prélever de préférence des ensembles d'échantillons séparés pour le calibrage et la validation.
- Manipuler tous les échantillons de la même manière.

### Quantification

Metrohm recommande un minimum d'environ 50 échantillons, ou environ 20 pour un premier modèle. Plus il y a de variations de conditions, de composants chimiques ou de tailles des particules à couvrir, plus il faut d'échantillons.



1. Un spectre est enregistré pour chaque échantillon.
2. Pour chaque échantillon, la valeur de référence du paramètre d'intérêt est mesurée par la méthode de référence, par exemple par titrage. S'il y a plusieurs valeurs de référence par échantillon pour un paramètre d'intérêt défini, il convient de calculer pour chaque échantillon la valeur moyenne arithmétique des valeurs de référence. La valeur moyenne est utilisée comme valeur de référence pour l'échantillon correspondant. Chaque valeur moyenne doit reposer sur le même nombre de valeurs de référence. Dans ce cas, les figures de mérite sont exprimées par rapport à un nombre défini de valeurs de référence.

Si l'échantillon n'est pas modifié ou détruit lors de la mesure de référence, les mesures peuvent également être effectuées dans l'ordre inverse.



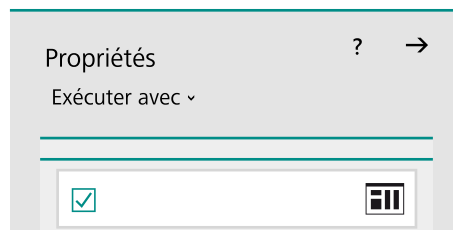
Créer un système de travail adapté (voir "Créer un système de travail", Chapitre 3.1, page 31).

### 1 Créer et nommer une méthode


- Cliquer sur  + dans **Procédure** ► **Méthodes**.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, entrer un nom approprié dans le champ **Nom**.

### 2 Attribuer un système de travail

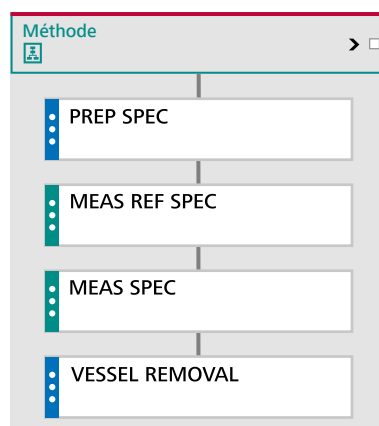
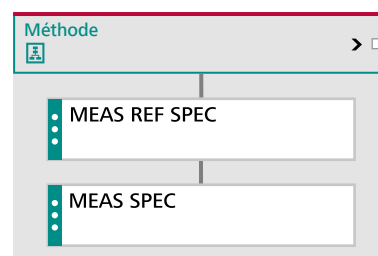
- Sélectionner le système de travail à utiliser sous **Propriétés** ► **Exécuter avec** :
  - Pour les échantillons liquides, sélectionner un système de travail contenant un groupe fonctionnel de type **Liquid Sample Presentation**.
  - Pour les échantillons solides, sélectionner un système de travail contenant un groupe fonctionnel de type **Solid Sample Presentation**.



### 3 Insérer des fonctions

- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Sous **Bibliothèque** ► **Fonctions**, rechercher les fonctions suivantes et les insérer par glisser-déposer dans la méthode :
  - Présentation d'échantillons liquides uniquement : **PREP SPEC** prépare l'analyse d'échantillons liquides.
  - **MEAS REF SPEC** enregistre le spectre de référence.
  - **MEAS SPEC** enregistre le spectre d'un échantillon.
  - Présentation d'échantillons liquides uniquement : **VESSEL REMOVAL** sert à contrôler le retrait du récipient d'échantillon du porte-échantillon de la présentation d'échantillons liquides.

Respecter le bon ordre des fonctions :

**Échantillons liquides****Structure de base****Échantillons solides****Structure de base**


**i** Le spectre d'absorbance de l'échantillon est calculé à l'aide du spectre de référence et du spectre de l'échantillon enregistré.

**i** Il y a 1 seul spectre de référence par groupe fonctionnel. À chaque exécution de la fonction **MEAS REF SPEC**, le spectre de référence précédent est écrasé.

C'est pourquoi la fonction **MEAS SPEC** utilise toujours le dernier spectre de référence enregistré de chaque groupe fonctionnel.

**i** Metrohm recommande de donner un nom descriptif à chaque fonction sous **Propriétés ► Généralités**.


#### 4 Configurer les paramètres de la fonction MEAS SPEC (uniquement pour la présentation d'échantillons solides)

- Sélectionner la fonction **MEAS SPEC**.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Entrer les paramètres de mesure sous **Propriétés ► Paramètres ► Paramètres de mesure** :
  - Sélectionner le support à utiliser pour la mesure de l'échantillon.
  - Sélectionner le mode de mesure selon qu'il faut un ou plusieurs points de mesures. Recommandation :
    - Mesure multipoint** : pour matières solides hétérogènes.
    - Mesure en un point** : pour matières solides homogènes.
  - Sélectionner le récipient d'échantillon qui sera utilisé pour la mesure de l'échantillon.

## 5 Configurer les paramètres de la fonction PREP SPEC (uniquement pour la présentation d'échantillons liquides)

La fonction **PREP SPEC** permet la régulation de température. La température de l'échantillon ou du porte-échantillon peut être réglée à une valeur comprise entre 25 °C et 80 °C (voir "*Régulation de température (Liquid Sample Presentation)*", Chapitre 2.5, page 29).

En outre, la fonction **PREP SPEC** s'assure que le porte-échantillon utilisé est adapté au récipient d'échantillon prédéfini. Sinon, la détermination est annulée. Si aucun récipient d'échantillon n'est utilisé, une invitation à insérer l'échantillon s'affiche.

- Sélectionner la fonction **PREP SPEC**.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur . Ouvrir la sous-partie **Paramètres**.
  - Sélectionner le type utilisé ainsi que la désignation exacte du récipient d'échantillon sous **Récipient d'échantillon**.
  - Mettre en marche ou arrêter la régulation de température sous **Régulation de température**. Au besoin, spécifier le lieu de la régulation et la température de consigne. Pour la régulation de température de l'échantillon, sélectionner l'option **Récipient d'échantillon**.  
**Remarque** : la température de consigne ne doit pas être inférieure de plus de 5,0 K à la température ambiante.
  - Si nécessaire, sélectionner la fonction **VESSEL REMOVAL** correspondante.

### AVIS

#### Endommagement du capteur de température

Si la température est régulée sur le récipient d'échantillon, un capteur de température est en contact direct avec le récipient d'échantillon. Pour ne pas endommager le capteur de température, il faut l'éloigner du récipient d'échantillon avant de le retirer. C'est le rôle de la fonction **VESSEL REMOVAL**.


## 6 Configurer les paramètres de la fonction VESSEL REMOVAL (uniquement pour la présentation d'échantillons liquides)

La fonction **VESSEL REMOVAL** peut assurer le retrait du récipient d'échantillon. Le déroulement du processus est interrompu jusqu'à ce que le récipient d'échantillon soit retiré. Cela permet un déroulement contrôlé lors des déterminations en série.



Si la température est régulée sur le récipient d'échantillon, le capteur de température s'écarte du récipient d'échantillon. Dès que l'invita-

tion à retirer le récipient d'échantillon s'affiche, le récipient d'échantillon peut être retiré sans endommager le capteur de température.

La régulation de température peut être désactivée ou poursuivie sur le porte-échantillon.

- Sélectionner la fonction **VESSEL REMOVAL**.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .  
Ouvrir la sous-partie **Paramètres**.
  - Activer l'option **Garantir le retrait du récipient d'échantillon**. Cela interrompt le déroulement du processus et invite l'utilisateur à retirer le récipient d'échantillon du porte-échantillon. Dès que l'échantillon est retiré, le processus se poursuit.
  - Pour le paramètre **Régulation de température porte-échantillon**, activer l'option **Continuer**. Cela permet de poursuivre la régulation de température existante sur le porte-échantillon, indépendamment de l'endroit où cette régulation s'effectuait jusque-là.

## 7 Sauvegarder une méthode


- Cliquer sur  pour valider la méthode.
- Sauvegarder la méthode en cliquant sur  ou en appuyant sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## Établir une procédure de travail


### 1 Créer une procédure de travail

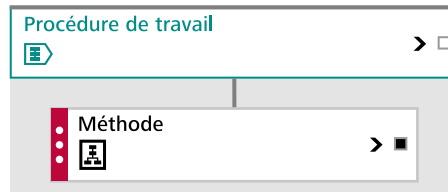
- Cliquer sur + dans **Procédure** ► **Procédures de travail**.

### 2 Nommer une procédure de travail


- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, entrer un nom approprié dans le champ **Nom**.

### 3 Insérer une méthode

- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Insérer la méthode créée par glisser-déposer de **Bibliothèque** ► **Méthodes** dans la procédure de travail.



#### 4 Sauvegarder une procédure de travail

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

### Établir un profil d'échantillon

#### 1 Créer et nommer un profil d'échantillon

- Cliquer sur  dans **Échantillons** ► **Profils d'échantillons**.
- Saisir un nom approprié dans le champ **Nom du profil d'échantillon**.

#### 2 Champ de saisie du nom de l'échantillon

La partie **Données d'échant.** comporte un champ pour saisir le nom de l'échantillon :

**Données d'échant.**

Nom de champ court

Nom de champ long

Type du champ de saisie

Utiliser comme

---


▲ Propriétés champ saisie

Valeur par défaut

- Saisir un **Valeur par défaut** pour le nom de l'échantillon.

### 3 Pour la quantification : ajouter un champ de saisie pour le paramètre de référence

**i** Les données d'échantillon peuvent être utilisées comme paramètres de référence, celles de sous-échantillon ne le peuvent pas.

- Cliquer sur  dans la partie **Données d'échant.** pour ajouter un champ de saisie.  
Un nouveau champ de saisie est ajouté à droite.
- **Nom de champ court** : saisir le nom à utiliser comme intitulé de colonne dans la table d'échantillons.
- **Nom de champ long** : saisir facultativement le nom à utiliser comme désignation dans les rapports.  
**Remarque** : si le champ **Nom de champ long** est vide, les rapports utilisent le nom figurant dans le champ **Nom de champ court**.
- **Type du champ de saisie** : **Nombre**.
- **Utiliser comme** : **Champ de saisie**
- Dans la section **Propriétés champ saisie** :
  - Cocher la case **Autoriser un champ vide**.  
Décocher la case **Forcer l'entrée**.
  - Laisser le champ **Valeur par défaut** vide.
  - Saisir l'**Unité** dans laquelle on exprime le paramètre de référence.
  - Modifier le cas échéant la **Valeur minimale** et la **Valeur maximale** pour le champ de saisie.
  - Afin de modifier le champ de saisie, la case **Champ modifiable** doit être cochée.

Données d'échantillon

Nom de champ, court	Nom de champ, court
Nom	
	Nom du champ long
	Saisir le nom
Type de champ de saisie	Type de champ de saisie
Nombre	Nombre
Utiliser comme	Utiliser comme
Champ de saisie	Champ de saisie
<b>Propriétés du champ de saisie</b>	
Valeur par défaut	Valeur par défaut
Valeur minimale	Valeur minimale
-10000000000	-10000000000
Valeur maximale	Valeur maximale
10000000000	10000000000
Unité	Unité
<input checked="" type="checkbox"/> Champ éditable	<input checked="" type="checkbox"/> Champ éditable
<input checked="" type="checkbox"/> Autoriser un champ vide	<input checked="" type="checkbox"/> Autoriser un champ vide
<input type="checkbox"/> Forcer la saisie	<input type="checkbox"/> Forcer la saisie


### **i** Plusieurs paramètres de référence

Si plusieurs paramètres d'intérêt doivent être prédits, ajouter un champ de saisie distinct pour chaque paramètre de référence (*voir "Plusieurs paramètres d'intérêt (quantification)", Chapitre 9.1.1, page 163*).

**i** Pour supprimer un champ de saisie **Nom de champ court**, faire un clic droit et sélectionner **[Effacer le champ de saisie]** dans le menu contextuel.

## **4** Pour identifier et vérifier : ajouter un champ de saisie pour le paramètre de produit

**i** Les données d'échantillon peuvent être utilisées comme paramètres de produit, celles des sous-échantillons ne le peuvent pas.

- Cliquer sur  dans la partie **Données d'échant.** pour ajouter un champ de saisie.  
Un nouveau champ de saisie est ajouté à droite.
- **Nom de champ court** : saisir le nom à utiliser comme intitulé de colonne dans la table d'échantillons.



## Écrire un nom de produit dans le champ de texte

Données d'échantillon

Nom du champ, court

Nom du champ, long

Saisir le nom

Type de champ de saisie

Texte

Utiliser comme

Produit

Propriétés du champ de saisie

Valeur par défaut

Champ éditable

Autoriser un champ vide

Forcer la saisie

## Sélectionner un nom de produit dans la liste

Données d'échantillon

Nom du champ, court

Nom du champ, long

Saisir le nom

Type de champ de saisie

Liste de sélection

Utiliser comme

Produit

Propriétés du champ de saisie

Sélectionner des éléments

Éléments de la liste

Saisir le nom

Produit A

Produit B

Produit C

Valeur par défaut

Vide

Autoriser le texte libre

Autoriser un champ vide

Forcer la saisie

## 5 Définir une procédure de travail et le nombre de sous-échantillons

- Dans la partie **Procédures de travail / Sous-échantillon**, sélectionner la procédure de travail créée.
- Le Nombre d'analyses détermine combien de sous-échantillons seront automatiquement ajoutés pour chaque échantillon. Saisir **1**.


Procédures de travail / Sous-échantillon

Procédures de travail	Nombre d'analyses
1	1

## 6 Sauvegarder un profil d'échantillon

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

Si plusieurs profils d'échantillons sont nécessaires (par ex., pour différents produits) :

1. Sous **Échantillons** ► **Profils d'échantillons**, sélectionner le profil d'échantillon déjà créé.
2. Dupliquer le profil d'échantillon sélectionné en cliquant sur .
3. Ouvrir le profil d'échantillon dupliqué et faire les ajustements nécessaires.


## Établir une table d'échantillons

### 1 Créer et nommer une table d'échantillons

- Cliquer sur + dans **Échantillons** ► **Tables d'échantillons**. Un nouvel onglet s'ouvre.
- Saisir un nom approprié dans le champ **Nom**.





### 2 Ajouter des échantillons

- Sur la liste de sélection à gauche de l'icône +, sélectionner le profil d'échantillon créé.



Les échantillons ajoutés ensuite sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné.

- Ajouter un nouvel échantillon à la table d'échantillons en cliquant sur +. Ajouter autant d'échantillons que nécessaire.

Chaque ligne de la table d'échantillons contient un échantillon marqué de l'icône . Les données d'échantillon suivent à droite.

Viennent ensuite le sous-échantillon marqué avec  et les données de sous-échantillon.

Les échantillons sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné :

- Quantification : avec le champ de saisie défini pour le paramètre de référence et son unité, si une unité a été définie.
- Identification et vérification : avec le champ de saisie défini pour le paramètre de produit.
- Chaque échantillon contient 1 sous-échantillon qui utilise la procédure de travail définie.





	Nom de l'échantillon	Nom du paramètre de référence	Unité	N°	Nom du sous-échantillon	Procédure de travail
	Échantillon 1		%	1	Sous-échantillon 1	
	Échantillon 2		%	2	Sous-échantillon 2	
	Échantillon 3		%	3	Sous-échantillon 3	


Figure 5 Table d'échantillons (exemple de quantification)


- Modifier les noms des échantillons et sous-échantillons selon les besoins.
- Si les valeurs de référence (quantification) ou les noms des produits (identification, vérification) sont déjà connus, les saisir dans les champs correspondants.

### 3 Sauvegarder une table d'échantillons

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

Si plusieurs tables d'échantillons sont nécessaires (par exemple, pour différents produits) :

1. Sélectionner la table d'échantillons déjà créée sous **Échantillons ► Tables d'échantillons**.
2. Dupliquer la table d'échantillons sélectionnée en cliquant sur .
3. Ouvrir la table d'échantillons dupliquée et effectuer les adaptations nécessaires.

 Les valeurs de référence ou les noms de produits peuvent également être inscrits d'une autre manière dans la table d'échantillons (voir [Metrohm Knowledge Base](#)).

- Manuellement pendant la détermination, par exemple, via une fenêtre d'interrogation.
- Pour la quantification, également automatiquement à partir d'une détermination postérieure ou antérieure avec la méthode de référence.

Les tables d'échantillons et les processus sont prêts pour l'acquisition des spectres (voir "[Enregistrer des spectres](#)", Chapitre 4.2, page 61).

## 4.2 Enregistrer des spectres



### AVERTISSEMENT

#### Matières inflammables sur une surface chaude

Risque d'incendie et de brûlures en cas de renversements de substances inflammables. Les échantillons, flacons d'échantillon, porte-échantillons et présentation de l'échantillon peuvent atteindre une température de 85 °C.

- Éviter les sources d'inflammation.
- Utiliser une mise à la terre.
- Utiliser une hotte aspirante.
- Éliminer immédiatement les liquides et les matières solides renversés.

### **ATTENTION**

#### **Augmentation de volume de l'échantillon due au chauffage**

Blessures et atteintes à la santé en cas de débordement ou de bris du récipient d'échantillon ou d'éjection du bouchon.

- Remplir le récipient d'échantillon seulement jusqu'au niveau minimal de 2 cm. Le liquide peut se dilater dans le volume d'air restant.  
Alternativement, utiliser des bouchons avec perforation capillaire.
- Enfoncer le bouchon doucement pour ne pas endommager le récipient d'échantillon.

### **ATTENTION**

#### **Flacons d'échantillon chauds**

Brûlures de la peau par contact avec des surfaces ou liquides chauds. Les échantillons, flacons d'échantillon, porte-échantillons et présentation de l'échantillon peuvent atteindre une température de 85 °C.

- Porter un équipement de protection individuelle et des gants de protection résistants à la chaleur.
- Éliminer immédiatement les liquides et les matières solides renversés.


## Acquérir des spectres pour le développement du modèle

### Conditions préalables :

- L'enregistrement de spectres est préparé (*voir "Préparer un enregistrement de spectres", Chapitre 4.1, page 50*).
- Le spectromètre est réservé (*voir "Réserver et libérer des appareils", Chapitre 2.4, page 27*).
- Le porte-échantillon correct est mis en place. Le porte-échantillon doit être adapté au récipient d'échantillon à utiliser.

### **1 Ouvrir une table d'échantillons**


- Ouvrir la zone de travail **Échantillons**.
- Si la table d'échantillons a été fermée, sous **Échantillons** ► **Tables d'échantillons** double-cliquer dessus pour l'ouvrir.

 **Quantification** : les champs de saisie pour le paramètre de référence peuvent encore être vides à ce stade. Les valeurs de référence peuvent être déterminées et saisies après l'enregistrement de spectres.

**Identification et vérification** : les noms de produit peuvent être saisis avant ou après l'enregistrement de spectre.



## 2 Ajouter d'autres échantillons (en option)

Si d'autres échantillons sont nécessaires :

- Sur la liste de sélection à gauche de l'icône , sélectionner le profil d'échantillon créé.



Les échantillons ajoutés par la suite sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné.




- Ajouter de nouveaux échantillons à la table d'échantillons en cliquant sur .
- Modifier les noms des échantillons et sous-échantillons selon les besoins.
- Cliquer sur  pour sauvegarder la table d'échantillons.




## 3 Effectuer des déterminations

### AVIS

#### Endommagement du capteur de température lors de la régulation de température sur le récipient d'échantillon

Le retrait du récipient d'échantillon tandis que le capteur est en contact direct avec ce récipient peut endommager le capteur.

- Ne retirer le récipient d'échantillon qu'une fois la mesure terminée et le capteur de température éloigné de ce dernier.
- Sélectionner le sous-échantillon à analyser de l'une des façons suivantes :
  - Sélectionner le sous-échantillon en cliquant sur l'icône .
  - Il suffit de sélectionner une seule cellule du sous-échantillon pour l'analyser.
- Préparer l'échantillon physique correspondant.  
Placer le récipient d'échantillon dans le porte-échantillon.
- Démarrer la détermination en cliquant sur . Un chiffre sur le bouton signale le nombre de sous-échantillons qui seront réalisés.
- La procédure de travail attribuée au sous-échantillon démarre. Suivre les éventuelles instructions dans la partie **Courbes et données ► Données en temps réel**. Si la température est régulée sur le récipient d'échantillon, ne pas le retirer avant d'y avoir été invité.  
Une fois l'analyse terminée correctement, l'état du sous-échantillon s'affiche ainsi .

- Procéder aux déterminations de la même façon pour tous les autres échantillons.
-  La température de consigne ne doit pas être inférieure de plus de 5,0 K à la température ambiante.
-  Si les processus se prêtent à des déterminations en série, on peut sélectionner plusieurs sous-échantillons à la fois. Sinon,  lance tous les sous-échantillons exécutable de la table d'échantillons.
  - Échantillons liquides : la fonction **VESSEL REMOVAL** permet des déterminations en série.
  - Échantillons solides : pour effectuer des déterminations en série, l'utilisateur doit intervenir (par ex. avec la fonction **WAIT**).

### Contrôle visuel des spectres

Un contrôle visuel des spectres permet d'identifier les gammes de longueurs d'ondes bruyantes et les éventuelles mesures erronées.



#### Condition préalable :

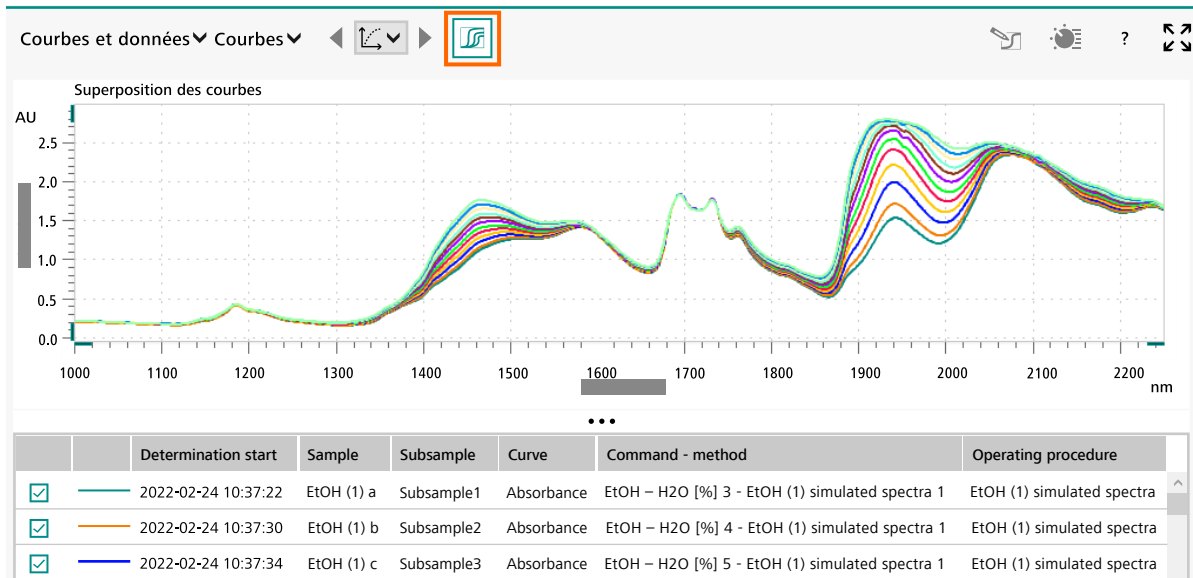
L'analyse des sous-échantillons a été menée à bien.

#### 1 Ouvrir la sous-partie 'Courbes'

- Ouvrir **Courbes et données** ► **Courbes** dans l'onglet de la table d'échantillons.

#### 2 Afficher et vérifier des spectres

- Afficher un spectre donné :
  - Sur la table d'échantillons, sélectionner le sous-échantillon correspondant (identifié par l'icône .
- Afficher plusieurs spectres :
  - Activer la superposition des courbes en cliquant sur .
  - Sélectionner plusieurs sous-échantillons sur la table d'échantillons à l'aide des touches **[Ctrl]** ou **[Maj]**.
- Vérifier des spectres (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*).



## Valeurs de référence (quantification) et noms de produit (identification, vérification)

### 1 Méthode de référence (quantification)



- Mesurer les valeurs de référence des échantillons avec une méthode de référence appropriée, p. ex. le titrage.

### 2 Saisir des valeurs de référence ou des noms de produit

- Inscrire les valeurs de référence ou les noms de produits dans les champs correspondants de la table d'échantillons.

#### Ajouter des données d'échantillon dans la table d'échantillons

Si, au début de la mesure, le paramètre de référence ou le paramètre de produit n'avait pas encore de données d'échantillon, il est possible d'ajouter un champ de saisie comme suit :

- Sélectionner les échantillons nécessitant l'ajout d'un champ de saisie en cliquant sur . Pour sélectionner tous les échantillons, cliquer sur .
- Faire un clic droit sur les échantillons sélectionnés pour ouvrir le menu contextuel et sélectionner **Ajouter des données d'échantillon**.
- Ajouter des données d'échantillon pour le paramètre de référence ou le paramètre de produit (*voir "Préparer un enregistrement de spectres", Chapitre 4.1, page 50*).



## 5 Modèle de quantification

### 5.1 Créer un modèle de quantification

**i** Une illustration des déroulements dans le logiciel OMNIS se trouve en annexe (*voir « Développement d'un modèle », page 194*).

**i** **Plusieurs paramètres d'intérêt**  
 Pour prédire plus d'un paramètre d'intérêt pour chaque échantillon, créer un modèle séparé pour chaque paramètre (*voir "Plusieurs paramètres d'intérêt (quantification)", Chapitre 9.1.1, page 163*).

#### Créer un modèle de quantification

**Condition préalable :**

- Les spectres pour le développement du modèle sont acquis (*voir "Enregistrer des spectres", Chapitre 4.2, page 61*).

#### 1 Créer et nommer le modèle de quantification

- Cliquer sur  dans **Calibrage et évaluation ► Modèles de quantification**.

Un nouveau modèle de quantification apparaît dans un nouvel onglet.

- Saisir un nom approprié dans le champ de saisie **Nom du modèle de quantification**.

#### 2 Sélectionner les échantillons et les paramètres de référence

- Afficher toutes les listes d'échantillons en cliquant sur **Tables d'échantillons**.
- Sélectionner toutes les listes d'échantillons préparées pour le développement du modèle.



### Créer un modèle de quantification

Nom du modèle de quantification

- 

Nom	Enregistré	Paramètres de référence	Unité
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		

**i** Les échantillons peuvent également être sélectionnés via une table d'échantillons filtrés. Si nécessaire, il est également possible d'importer des échantillons provenant d'appareils XDS et d'appareils DS (*voir "Changement d'analyseur XDS/DS (quantification)", Chapitre 11.6, page 187*).

**i** La sélection d'échantillons peut être adaptée ultérieurement.

- La liste **Paramètres de référence** affiche toutes les données d'échantillons utilisables comme paramètres de référence. Sélectionner le paramètre de référence pour lequel le modèle sera développé. Si le paramètre de référence a différentes dénominations, les sélectionner toutes.
- Cliquer sur **[Continuer]**.

### 3 Définir les paramètres de référence

- La liste **Paramètres de référence** affiche pour le paramètre de référence tous les noms sélectionnés à l'étape précédente. Sélectionner dans cette liste toutes les désignations nécessaires.

#### Définir le paramètre de référence

Nom du modèle de quantification

Paramètres de référence	Unité
H2O	%

Nom du paramètre de référence

Unité du paramètre de référence


Décimales

- Saisir le nom que le modèle doit utiliser dans le champ **Nom du paramètre de référence**.
- Sélectionner l'**Unité du paramètre de référence** que le modèle doit utiliser.

- Saisir le nombre de **Nombre de décimales** pour la présentation des résultats.

Tous les spectres qui comportent les désignations sélectionnées du paramètre de référence sont ajoutés au modèle.

#### 4 Développement automatique ou manuel de modèle


 Si le modèle doit être développé automatiquement, mais que la sélection d'échantillons doit être adaptée au préalable, poursuivre avec le développement manuel du modèle.

- **Développement automatique de modèle**

Développement automatique de modèle avec l'**OMD (OMNIS Model Developer)** et les échantillons sélectionnés. Une fois le développement automatique du modèle terminé, ce dernier peut être publié, validé ou son développement peut être poursuivi.

- Cliquer sur **[Démarrer l'OMD]**.  
La durée d'exécution d'OMD dépend du nombre de spectres.
- Passer au [chapitre 5.2, Développement automatique de modèle - OMD, page 69](#).

- **Développement manuel de modèle**

- Cliquer sur **[Créer]**.  
Le nouveau modèle s'ouvre dans un onglet.
- Pour sauvegarder un modèle : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.
- Passer au [chapitre 5.3, Développement manuel de modèle, page 72](#).

## 5.2 Développement automatique de modèle - OMD

L'**OMD (OMNIS Model Developer)** automatise le développement de modèles de quantification, présente une sélection des modèles les mieux adaptés et évalue leur capacité prédictive.

### Condition préalable :

L'OMD a été démarré avec **[Démarrer l'OMD]**.

#### 1 Vérifier les modèles de quantification calculés

Une fois les calculs terminés, l'OMD propose 5 modèles au choix.

### Modèles de quantification calculés

Nom du modèle de quantification

Décimales



N° de modèle	SEC	SECV	SEP	IR <sup>2</sup> P
1	0.0019	0.0020	0.0030	0.990
2	0.0017	0.0018	0.0030	0.990
3	0.0019	0.0020	0.0031	0.990
4	0.0012	0.0014	0.0023	0.994
5	0.0012	0.0015	0.0023	0.994

Les modèles sont classés selon leur capacité prédictive. Des figures de mérite sont présentées pour chaque modèle.

Dans la marge gauche du tableau, les modèles sont identifiés par les couleurs suivantes :

- En **vert**, modèles à bonne capacité prédictive. Si les échantillons sont assez nombreux, le modèle fonctionne bien pour tous les échantillons inconnus de même type. Les figures de mérite fournissent une estimation fiable des erreurs futures.
- En **jaune**, modèles à capacité prédictive moyenne. Si les échantillons sont assez nombreux, on peut s'attendre à une bonne performance du modèle. Les figures de mérite pourraient être trop optimistes pour les futurs échantillons. Une validation séparée est recommandée.
- En **rouge**, modèles à capacité prédictive insuffisante. Le modèle a de graves défauts. Il ne devrait pas être utilisé.



Si un modèle de quantification peut encore être amélioré, des propositions d'amélioration s'affichent dans l'infobulle du modèle.

## 2 Vérifier les figures de mérite

Les erreurs standard suivantes sont présentées pour chaque modèle :

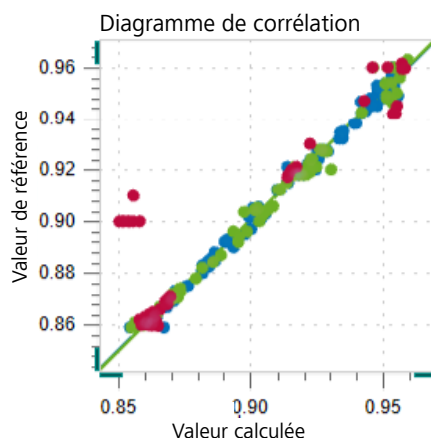
- **SEC** : erreur standard du calibrage.
- **SECV** : erreur standard de la validation croisée.
- **SEP** : erreur standard de prédiction. Ce chiffre est la meilleure valeur estimée de l'erreur de prédiction lors de l'analyse d'échantillons inconnus. Le SEP ne s'affiche que si un ensemble de données validées est disponible.

**Remarque** : l'OMD crée un ensemble de données validées uniquement s'il reste au moins 100 spectres après la détection des valeurs atypiques.

Le modèle 1 a la meilleure capacité prédictive, mais pas nécessairement les plus petites erreurs standard.

### 3 Vérifier le diagramme de corrélation

En cliquant sur un seul modèle, le modèle correspondant s'affiche Diagramme de corrélation.



Le **Diagramme de corrélation** permet d'évaluer les performances du modèle d'un coup d'œil. Le diagramme représente la corrélation entre les valeurs calculées par le modèle (axe x) et les valeurs de référence (axe y).

Chaque point représente un échantillon :

- Dans l'ensemble de données de calibration, les points bleus figurent les échantillons.
- Dans l'ensemble de données validées, les points verts représentent (le cas échéant) les échantillons.
- Dans l'ensemble de données atypiques, les points rouges représentent, le cas échéant, les échantillons.


Une droite de régression est placée à travers les points bleus ou verts de manière à décrire le mieux possible la relation entre les valeurs de référence et les valeurs calculées.

#### Évaluer le diagramme de corrélation


- La pente des droites de régression bleue et verte doit être aussi proche que possible de 1 et l'ordonnée à l'origine (axe y) aussi proche que possible de 0.
- Les points bleus et verts doivent être aussi proches que possible de la droite de régression correspondante.

**i** La droite de régression et les points peuvent se chevaucher.


## 4 Valider, développer ou publier des modèles

-  La publication du modèle est indispensable pour l'utiliser dans des déterminations et des évaluations ultérieures.

### Publier directement l'un des 5 modèles

- Si l'OMD a été lancé lors de la création du modèle :
  - Sélectionner un modèle et cliquer sur **[Sauvegarder et publier]**. Les 4 autres modèles sont rejetés.
  - La dernière version publiée s'affiche sous **Calibrage et évaluation ► Modèles de quantification**. La fonction **PREDICT** peut maintenant accéder à la version publiée du modèle.
- Si l'OMD a été démarré dans un modèle ouvert :
  - Sélectionner un modèle et cliquer sur **[Éditer]**.
  - Pour sauvegarder un modèle : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.
  - Passer au [chapitre 5.4, Publier un modèle de quantification, page 96](#).

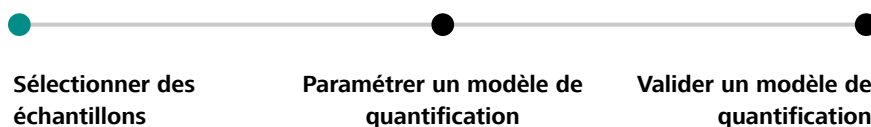
### Valider ou développer un ou plusieurs modèles

- Sélectionner un ou plusieurs modèles. Pour une sélection multiple, utiliser la touche **[Maj]** ou **[Ctrl]**.
- Cliquer sur **[Éditer]**. Chaque modèle sélectionné s'ouvre dans un nouvel onglet.
- Sauvegarder des nouveaux modèles : dans les onglets correspondants, cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.
- Passer au [chapitre 5.3, Développement manuel de modèle, page 72](#).

## 5.3 Développement manuel de modèle

### 5.3.1 Sélectionner des échantillons et répartir un ensemble de données

L'onglet du modèle de quantification affiche tout en haut une barre de navigation horizontale, le **navigateur**. Le navigateur passe par les étapes ultérieures du développement de modèle.



### **i** Représentation de spectres

Dans les 3 étapes du processus, chacun des spectres apparaît sous forme de courbes, de points ou de lignes de tableau.

Les spectres sélectionnés sont mis en évidence simultanément dans toutes les représentations et dans toutes les étapes du processus.

### **i** Tableaux et diagrammes

La manipulation des tableaux et des diagrammes est décrite en annexe :

- Manipuler des tableaux (*voir "Manipuler des tableaux", Chapitre 11.2, page 174*)
- Manipuler des diagrammes (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*)

## Étape du processus Sélectionner des échantillons

La partie **Liste des spectres** affiche les spectres des échantillons sélectionnés :

	Nom de l'échantillon	Nom du sous-échantillon	Source	H2O

Un champ de saisie indique à chaque fois la valeur de référence correspondante (en orange sur l'image).

L'étape du processus **Sélectionner des échantillons** permet ce qui suit :


- **Adapter la sélection d'échantillons**

Ajouter d'autres spectres ou en supprimer.

- **Diviser l'ensemble de données**

Division automatique ou manuelle de l'ensemble de données :

- **Ensemble de données de calibrage** : le modèle est calculé avec les spectres et les valeurs de référence de l'ensemble de données de calibrage.
- **Ensemble de données validées** : les spectres et les valeurs de référence de l'ensemble de données validées servent uniquement à valider le modèle.
- **Ensemble de données atypiques** : l'ensemble de données atypiques n'a pas d'influence sur le modèle ou sa validation. Des valeurs atypiques ne sont représentées qu'à titre informatif sur quelques diagrammes.

-  Un modèle peut être développé sans ensemble de données validées, par exemple lorsque seul un nombre limité d'échantillons est disponible dans une première phase.




### Adapter une sélection d'échantillons (en option)


#### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan (voir "Créer un modèle de quantification", Chapitre 5.1, page 67).
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.


#### 1 Ajouter ou supprimer des spectres

La sélection d'échantillons et les paramètres de référence peuvent être adaptés à tout moment dans la partie **Liste des spectres** :

- Pour sélectionner les échantillons dont les spectres doivent être ajoutés à la liste des spectres, cliquer sur .
- Pour retirer des spectres de la liste des spectres, les sélectionner et cliquer sur .  
Remarque : les échantillons correspondants, spectres compris, sont conservés dans la base de données.
- Cliquer sur  pour modifier les éléments suivants :
  - le nom ou l'unité du paramètre de référence
  - la sélection des désignations du paramètre de référence
  - le nombre de décimales du paramètre de référence et de tous les résultats

-  Si la valeur de référence d'un spectre doit être traitée, ouvrir la table d'échantillons ou la table d'échantillons filtrés correspondante et double-cliquer sur la valeur de référence.

#### 2 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

### Passer au développement automatique de modèle

Les autres paramètres de cet onglet n'ont pas d'influence sur l'**OMD (OMNIS Model Developer)**. On peut donc passer à ce stade au développement automatique de modèle :

- Si nécessaire, vérifier dans l'histogramme la répartition uniforme des valeurs de référence (*voir « Histogramme », page 78*).
- L'OMD recherche de manière autonome les valeurs atypiques et les exclut du développement du modèle.

Toutefois si des valeurs atypiques doivent être exclues manuellement, il faut les retirer de la table d'échantillons. Leur attribution à l'ensemble de données atypiques n'a aucun effet sur l'OMD.

- Cliquer sur **[Démarrer l'OMD]**.


La durée d'exécution d'OMD dépend du nombre de spectres.

## Pertinence de la détection des valeurs atypiques

### Condition préalable

- Le modèle de quantification s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

### 1 Éditer des propriétés du modèle

- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Définir le **Pertinence** de la méthode de détection des valeurs atypiques sous **Propriétés ► Paramètres ► Limites de valeur aberrante**. Plus la pertinence est élevée, plus on détecte de valeurs spectrales atypiques. Les valeurs types sont 5 % ou 1 %. La pertinence est utilisée comme suit :
  - La détection automatique facultative des valeurs atypiques lors du développement du modèle tient compte de la pertinence au moment de la détection des valeurs atypiques (v. ci-après).
  - La détection des valeurs atypiques lors de la prédiction des propriétés de l'échantillon tient compte de la pertinence au moment de la publication du modèle.

### 2 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

## Déterminer un ensemble de données atypiques et un ensemble de données validées

La détection des valeurs atypiques permet de créer automatiquement un ensemble de données atypiques. Les spectres restants peuvent être automatiquement répartis en un ensemble de données de calibrage et un ensemble de données validées.

Si des échantillons distincts ont été collectés pour le calibrage et la validation, ils peuvent être attribués manuellement.

### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

### 1 Appeler une répartition de l'ensemble de données

- Dans la partie **Liste des spectres**, cliquer sur .

Le dialogue **Répartition des jeux de données** s'ouvre.

### 2 Déterminer un ensemble de données atypiques

- Pour attribuer automatiquement des spectres à l'ensemble de données atypiques, activer le bouton à bascule **Déterminer une valeur aberrante**. La détection automatique des valeurs atypiques reconnaît les types suivants :
  - valeurs spectrales atypiques en raison d'écarts dans les spectres
  - valeur de référence atypique en raison d'anomalies dans les valeurs de référence

Au besoin, adapter la **Pertinence**. Plus la pertinence est élevée, plus on détecte de valeurs spectrales atypiques. Les valeurs types sont 5 % ou 1 %.

### 3 Déterminer un ensemble de données validées

La répartition automatique garantit que l'ensemble de données de calibrage et l'ensemble de données validées sont représentatifs de la population et indépendants l'un de l'autre.

- Pour attribuer automatiquement les spectres à l'ensemble de données validées, activer le bouton à bascule **Déterminer un jeu de données validées**.
  - Dans le champ **Pourcentage**, définir le pourcentage de spectres à utiliser pour l'ensemble des données validées, par exemple entre 20 % et 30 %.

#### 4 Définir des options

Définir des options d'attribution des ensembles de données :

- **Appliquer le paramétrage** : appliquer le prétraitement de données et la sélection des longueurs d'onde aux spectres (*voir "Paramétrer un modèle de quantification", Chapitre 5.3.4, page 88*).  
**Remarque** : les modifications ultérieures du paramétrage ou de la pertinence n'ont aucun effet sur l'attribution des ensembles de données. Sauf si l'ensemble de données est à nouveau réparti.
- **Conserver les valeurs aberrantes** : garder les valeurs atypiques déjà existantes et ne pas en tenir compte dans la répartition. Cette option peut augmenter la taille de l'ensemble de données atypiques, même si la **Pertinence** reste inchangée.
- **Conserver un jeu de données validées** : garder l'ensemble de données validées déjà existant et ne pas en tenir compte lors de la répartition. Cette option peut augmenter la taille de l'ensemble de données validées, même si le **Pourcentage** reste inchangé.

#### 5 Démarrer une répartition automatique

- Cliquer sur **[Diviser]**.

L'ensemble de données est réparti en fonction des paramètres retenus.

#### 6 Vérifier une répartition

Dès qu'un spectre au moins est sélectionné sur la liste des spectres, ce ou ces spectres sont mis en évidence dans la partie **Superposition des spectres**.

Dans les parties **Histogramme** et **Superposition des spectres**, les spectres appartenant aux ensembles de données de calibrage, de données validées et de données atypiques s'affichent respectivement en **bleu**, **vert** et **rouge**.

Dans la partie **Liste des spectres**, les attributions sont symbolisées par les icônes suivantes :



Le spectre est attribué à l'ensemble de données de calibrage.

---



Le spectre est attribué à l'ensemble de données validées.



Le spectre est attribué à l'ensemble de données atypiques.



Indique des données manquantes ou non valides. Consulter l'infobulle.

## 7 Répartition manuelle (optionnelle)

La répartition manuelle peut être effectuée avec ou sans répartition automatique préalable.

- Ouvrir le menu contextuel d'un clic droit sur un spectre. Affecter le spectre à l'ensemble de données correspondant :

-  Ensemble des données de calibrage

-  Ensemble des données validées


-  Ensemble des données aberrantes



Affecter plusieurs spectres à la fois :

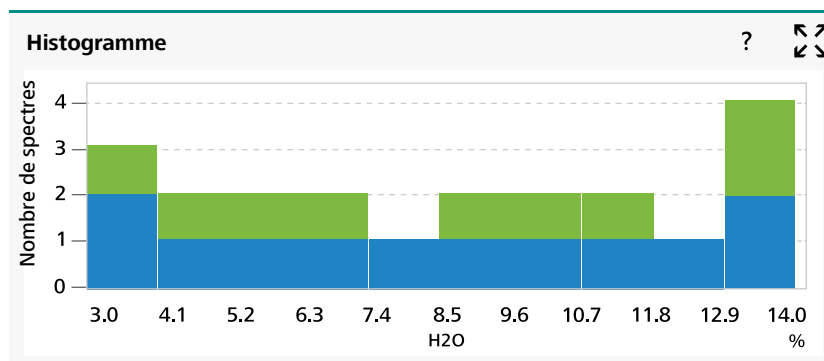
- En option, ranger les spectres selon un ordre approprié. Trier la liste générale en cliquant sur un intitulé de colonne.
- Sélectionner plusieurs spectres à l'aide des touches **[Ctrl]** ou **[Maj]**.
- Ouvrir le menu contextuel d'un clic droit sur la sélection. Attribuer les spectres sélectionnés.

## 8 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

### Histogramme

L'histogramme permet d'apprécier visuellement l'homogénéité de la répartition des valeurs de référence. À cet effet, l'histogramme divise l'intervalle des valeurs de référence en 10 groupes de produits de tailles égales.



Dans l'exemple illustré, 12 valeurs entières de références de 3 % à 14 % sont réparties entre les 10 groupes. Le premier groupe de produits comprend les valeurs de référence 3 % et 4 %, le dernier les valeurs de référence 13 % et 14 %. Les 8 autres groupes comprennent chacun 1 seule valeur de référence.

L'exemple confirme que les spectres à l'ensemble de données de calibrage (bleu) et de l'ensemble de données validées (vert) sont répartis uniformément sur l'étendue des valeurs de référence.

### Valeur atypique

Les spectres attribués à l'ensemble de données atypiques sont affichés en rouge. Il peut s'agir de valeurs spectrales atypiques ou de valeurs de référence atypiques.

Les valeurs atypiques devraient être examinées. Si une valeur atypique s'avère être un spectre valide avec une valeur de référence valide, elle peut être attribuée à l'ensemble de données de calibrage ou à l'ensemble de données validées.

## 5.3.2 Calculer un modèle de quantification

Un premier modèle peut être calculé sans paramétrage. Il en résulte un critère de comparaison pour les figures de mérites. L'influence d'un paramétrage ultérieur peut être mieux évaluée.

**i** Si le bruit de fond ou d'autres artefacts rendent certaines longueurs d'onde inutilisables, celles-ci peuvent être directement exclues (*voir "Paramétrer un modèle de quantification", Chapitre 5.3.4, page 88*).


### Calculer un modèle

**Condition préalable :**

- Le modèle de quantification s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

### 1 Démarrer un calcul

- Calculer le modèle en cliquant sur **[Calculer]**.

-  Si le bouton **[Calculer]** est inactif, l'une des causes peut être :
- Le modèle a déjà été calculé et il n'y a pas eu de changement depuis.
  - Une des étapes du processus contient une entrée erronée. Dans le navigateur, l'étape du processus de la partie concernée est indiquée en **rouge**. Le champ contenant l'entrée incorrecte est entouré de rouge.


## 5.3.3 Valider un modèle de quantification

### Définir une méthode de validation croisée

#### Condition préalable :

- Le modèle de quantification s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

### 1 Éditer des propriétés du modèle

- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Définir la méthode de validation croisée sous **Propriétés ► Paramètres ► Validation croisée** :
  - Le procédé **Leave-One-Out** est recommandé pour les listes de 70 spectres maximum.
  - Le procédé **K-fold** est recommandé pour des listes de spectres supérieures. Plus le **Nombre de blocs** est importante, plus le calcul du modèle est long. 5 est une valeur type pour k.

L'**Algorithme de répartition** détermine la manière dont les spectres de l'ensemble de données de calibrage sont répartis en blocs individuels. L'algorithme de répartition **Random** sélectionne les blocs aléatoirement. L'algorithme de répartition **Fixed Blocks (DUPLEX)** sélectionne des blocs de façon reproductible.

### 2 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

## Valider un modèle de quantification

### Condition préalable :

- Le modèle de quantification s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le modèle de quantification est calculé (voir "*Calculer un modèle de quantification*", Chapitre 5.3.2, page 79).

### 1 Passer à l'étape du processus Validation

- Dans le navigateur, passer à l'étape du processus Validation en cliquant sur **Valider un modèle de quantification**.

Les données du modèle de quantification calculé s'affichent dans les parties **Figures de mérite**, **Diagramme de corrélation** et **Graphique d'influence**.

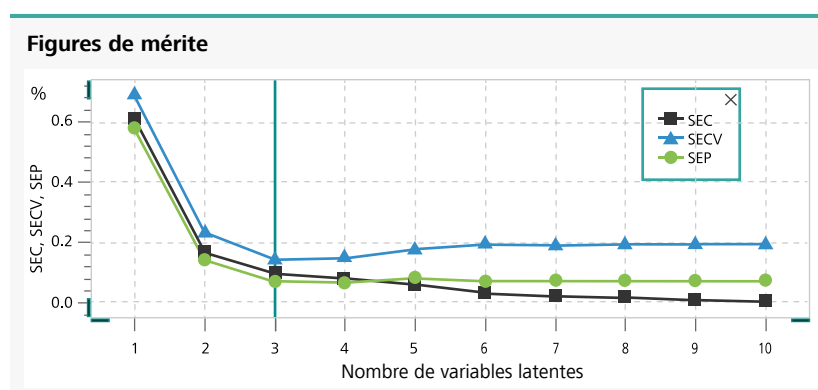
Cliquer sur  pour représenter également les diagrammes **Graphique des poids factoriels** et **Graphique des scores**.

### 2 Vérifier les figures de mérite

Dans la partie **Figures de mérite**, un diagramme est présenté avec les figures de mérite suivantes :

- **SEC** : erreur standard du calibrage.
- **SECV** : erreur standard de la validation croisée.
- **SEP** : erreur standard de prédiction. Ce chiffre est la meilleure valeur estimée de l'erreur de prédiction lors de l'analyse d'échantillons inconnus. Le SEP ne s'affiche que si un ensemble de données validées est disponible.


Les figures de mérite (axe y) s'affichent pour différents nombres de variables latentes (axe x).



La ligne verticale verte indique le nombre de variables latentes actuellement sélectionné. Dans la figure ci-dessus, 3 variables latentes sont

sélectionnées. Pour 3 variables latentes, la SECV a une première valeur minimale de 0,14 %.

### **Nombre de décimales dans le tableau**



Cliquer sur  dans la partie **Liste des spectres** à l'étape du processus **Sélectionner des échantillons** pour modifier le nombre de décimales pour la figure de mérite.

## **3 Définir le nombre de variables latentes**

Le modèle de quantification final utilise un nombre fixe de variables latentes. Pour la performance du modèle de quantification, il est essentiel de trouver le nombre optimal de variables latentes.

Plus de variables latentes expliquent plus de variations spectrales dans l'ensemble de données de calibrage. En revanche, trop de variables latentes sont le signe de variations trop spécifiques ou de bruit de fond, cela réduit la précision des prédictions pour les échantillons inconnus. C'est ce qu'on appelle la **suradaptation**.

Moins de variables latentes peuvent donner un modèle de quantification plus fiable. Toutefois, avec trop peu de variables latentes, des variations spectrales pertinentes ne seront pas détectées. Les prédictions sont alors moins précises. C'est ce que l'on appelle la **sous-ajustement**.

- Sélectionner à priori un nombre raisonnable de variables latentes. À cet effet, double-cliquer sur la ligne correspondante dans le tableau.  
Le nombre de variables latentes sélectionnées est indiqué dans le tableau par .  
En cas de doute, choisir le nombre proposé par le logiciel OMNIS. Si le nombre de variables latentes sélectionnées diffère du nombre suggéré par le système, ce dernier est indiqué par .

## **4 Vérifier le diagramme de corrélation**

Le **Diagramme de corrélation** montre instantanément une évaluation de la performance du modèle de quantification. Le diagramme représente la corrélation entre les valeurs calculées (axe x) et les valeurs de référence (axe y). Chaque point représente un échantillon.

Le diagramme de corrélation et le tableau adjacent indiquent les valeurs suivantes pour chaque échantillon :

---


<b>Valeur de référence</b>	Valeur du paramètre de référence
----------------------------	----------------------------------

---

**Valeur calculée** Résultat du modèle de quantification

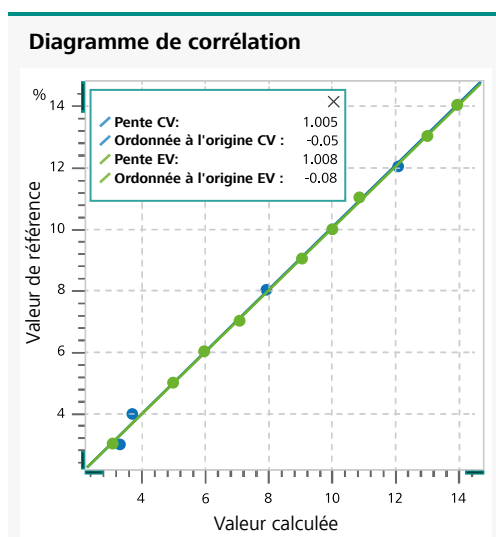
**Résidu** Différence entre la valeur calculée et la valeur de référence

### Nombre de décimales dans le tableau

Cliquer sur  dans la partie **Liste des spectres** dans l'étape du processus **Sélectionner des échantillons** pour modifier le nombre de décimales des valeurs ci-dessus.

Les points bleus donnent une droite de régression bleue. Les points verts donnent une droite de régression verte.

La droite de régression montre la relation systématique entre les valeurs calculées et les valeurs de référence. La droite de régression idéale a une pente de 1 et une ordonnée à l'origine de 0. Tous les échantillons sont idéalement situés exactement sur la droite. Dans ce cas, pour chaque échantillon, la valeur calculée correspond à la valeur de référence.

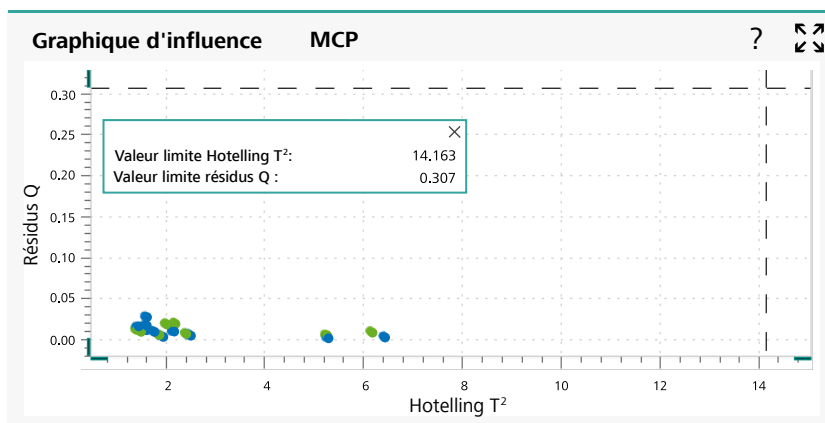


Le diagramme de corrélation met en évidence différents types d'erreurs :

- Les **erreurs systématiques** s'interprètent comme des écarts de la droite de régression par rapport à la droite idéale (pente = 1, ordonnée à l'origine = 0).
- Les **erreurs aléatoires** s'interprètent comme une dispersion proportionnelle des points autour de la droite de régression.

Sur la figure, plusieurs points sont cachés derrière d'autres. La droite de régression bleue est cachée derrière la droite de régression verte.





### Manipuler un diagramme

La représentation du diagramme peut être adaptée et un ou plusieurs points peuvent être sélectionnés (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*).

Chaque point représente un spectre. Des valeurs élevées du  $T^2$  de Hotelling des résidus Q signalent d'éventuelles valeurs atypiques.

Des spectres à valeurs élevées du  $T^2$  de Hotelling indiquent une composition extrême des échantillons concernés. Ces échantillons ont une influence considérable sur le modèle. Si la valeur de référence d'un tel échantillon est erronée, la prédiction d'échantillons similaires peut donner des résultats erronés.

Des spectres à haut résidus Q présentent des particularités qui n'ont pas été modélisées avec succès. Par ex., car des composants chimiques inhabituels sont présents dans les échantillons concernés.


Les lignes en pointillé indiquent les valeurs critiques (limites) pour la pertinence définie.

La figure du haut ne montre pas d'éventuelles valeurs atypiques. Tous les points se trouvent largement à l'intérieur des lignes pointillées.

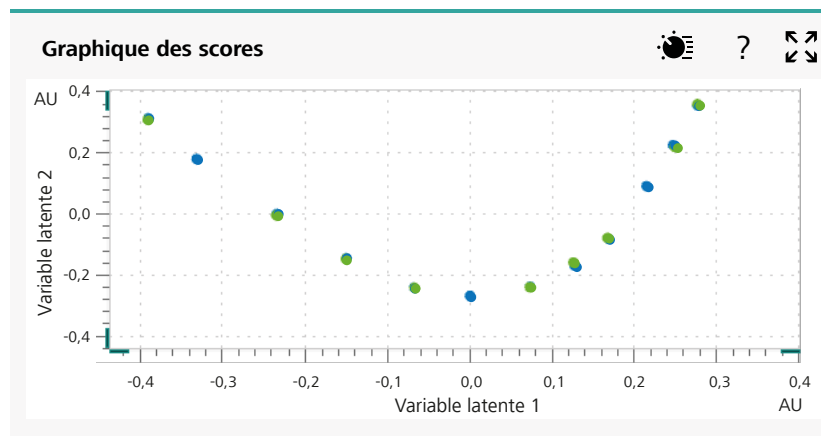
## 6 Vérifier le graphique des scores

Alors que la valeur  $T^2$  de Hotelling d'un spectre ramène les scores de toutes les variables latentes en une seule valeur, le graphique des scores permet une analyse encore plus détaillée des scores.

Le graphique des scores des modèles de quantification s'appuie sur la méthode de calcul **MCP** et prend en compte les prétraitement des données et les gammes de longueur d'onde (*voir "Paramétrer un modèle de quantification", Chapitre 5.3.4, page 88*).

Chaque point représente un spectre. Les scores des deux premières variables latentes peuvent être lus sur l'axe x et l'axe y.  **Propriétés** permet également d'afficher toute autre paire de variables latentes. Les scores sont normalisés, chaque variable latente a le même poids.

**Exemple** : graphique des scores des spectres EtOH pour les variables latentes 1 et 2 :



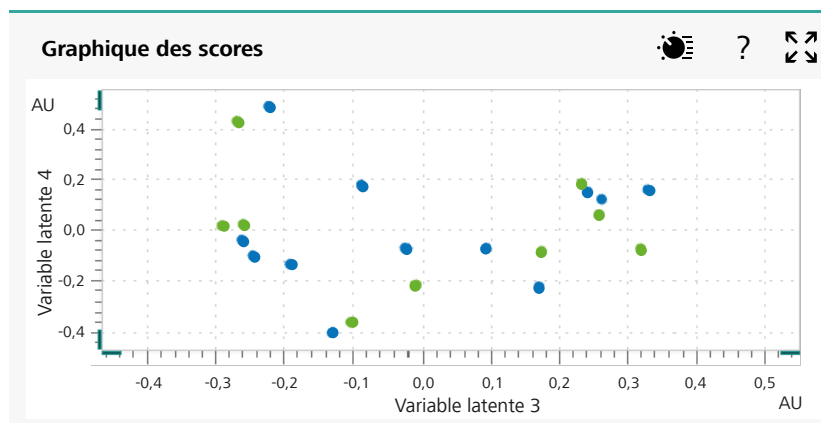
### Manipuler un diagramme

La représentation du diagramme peut être adaptée et un ou plusieurs points peuvent être sélectionnés (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*).

Les points sont alignés comme sur un collier de perles. Cela s'explique par les intervalles réguliers entre les valeurs de référence et par l'absence de variations supplémentaires des échantillons. Dans ce cas, on peut douter de la bonne prise en compte de toutes les futures variations d'échantillons plausibles.

Pour les variables latentes les plus hautes, qui expliquent une part de plus en plus faible de la variance, l'effet n'est plus visible, comme le montre la figure suivante.

**Exemple** : graphique des scores des spectres EtOH pour les variables latentes 3 et 4 :




Sur les deux figures, l'ensemble des données validées (points verts) occupe à peu près la même place que l'ensemble des données de calibration (points bleus) au sein des variables latentes représentées. Il n'y a pas de valeurs potentiellement atypiques.

## 7 Admettre ou exclure les valeurs atypiques


- Vérifier attentivement les éventuelles valeurs atypiques.
- Si des échantillons sont attribués à un autre ensemble de données, les attribuer tous en une seule étape :
  - Sur le graphique d'influence, le diagramme de corrélation ou le graphique des scores, sélectionner tous les points à réaffecter (voir « Sélectionner plusieurs points ou courbes », page 177).
  - Ouvrir le menu contextuel d'un clic droit sur l'un des points sélectionnés. Sélectionner l'ensemble de données approprié.
  - Recalculer le modèle de quantification en cliquant sur **[Calculer]**.
- Après réattribution des spectres, valider à nouveau le modèle de quantification.

## 8 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

### Dupliquer un modèle de quantification

Le modèle de quantification peut être dupliqué pour pouvoir accéder ultérieurement à l'état en cours :

1. Sauvegarder le modèle de quantification.
2. Sélectionner le modèle de quantification sous **Calibrage et évaluation ► Modèles de quantification**.
3. Dupliquer le modèle de quantification sélectionné en cliquant sur .



## Paramétrage manuel

Le paramétrage manuel commence par un examen visuel des spectres à l'étape du processus **Sélectionner des échantillons**.

### Représenter des spectres

#### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

#### 1 Étape du processus 'Sélectionner des échantillons'

- Dans le navigateur, cliquer sur l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

Dans cette étape du processus, les spectres peuvent être examinés à la fois sous forme de tableau et de courbe.

#### 2 Examiner des spectres

- Manipuler des tableaux (*voir "Manipuler des tableaux", Chapitre 11.2, page 174*)
- Manipuler des diagrammes (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*)

#### 3 Étape du processus 'Paramétrer un modèle de quantification'

- Dans le navigateur, cliquer sur l'étape **Paramétrer un modèle de quantification** du processus.
- Dans la partie **Prétraitement des données** développer la liste de sélection avec ▼ et sélectionner la partie **Graphique des poids factoriels**.

Dans cette étape du processus, les spectres peuvent être examinés simultanément sous forme de courbes et de **Graphique des poids factoriels**. Le Graphique des poids factoriels montre comment les variables de longueur d'onde initiales contribuent à la construction de chaque variable latente.

#### Autres étapes

- Sélection manuelle des longueurs d'onde (*voir "Sélection manuelle des longueurs d'onde", Chapitre 5.3.4.1, page 90*)
- Définir le prétraitement des données manuellement (*voir "Définir le prétraitement des données manuellement", Chapitre 5.3.4.2, page 93*)

### 5.3.4.1 Sélection manuelle des longueurs d'onde

Une sélection des longueurs d'onde peut améliorer le modèle de quantification. Exemple : si du bruit de fond est visible à des valeurs d'absorbance élevées, les gammes de longueurs d'ondes concernées peuvent être exclues.

Le modèle utilise les gammes de longueur d'ondes définies. Si aucune gamme de longueurs d'ondes n'est définie, le modèle utilise toutes les longueurs d'onde.

#### Afficher les spectres et les poids factoriels

Conditions préalables :

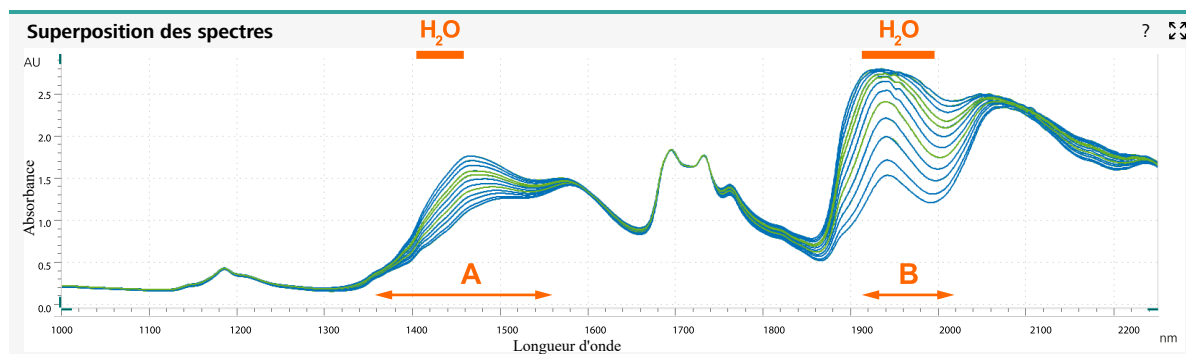
- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

#### 1 Étape du processus 'Paramétrer un modèle de quantification'

- Dans le navigateur, cliquer sur l'étape **Paramétrer un modèle de quantification** du processus.
- Afficher simultanément les parties **Superposition des spectres**, **Graphique des poids factoriels** et **Gamme de longueurs d'onde**.

#### Superposition des spectres

Les bandes d'absorption génériques de H<sub>2</sub>O peuvent être consultées sur un diagramme et servir de point de repère approximatif. Les bandes d'absorption de H<sub>2</sub>O s'étendent de 1400 à 1450 nm et de 1900 à 1980 nm.

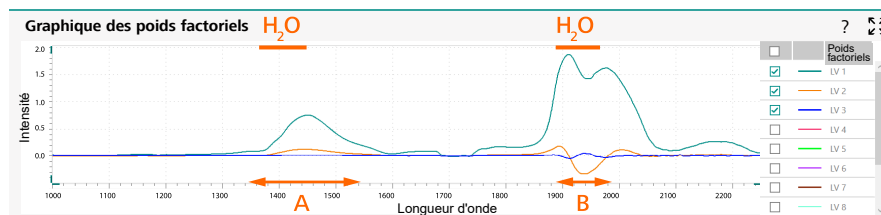


Les spectres d'EtOH présentent des variations clairement visibles correspondant aux différents teneurs en H<sub>2</sub>O des échantillons (parties **A** et **B**).

Il y a cependant une différence entre les 2 parties. Contrairement à la partie **B** (1900 à 2000 nm) la partie **A** (1350 à 1550 nm) présente des distances verticales régulières entre les lignes, correspondant aux distances régulières des valeurs de référence.

## Graphique des poids factoriels

Les poids factoriels montrent comment les variables initiales de longueur d'onde contribuent à la construction de chaque variable latente.



Les parties **A** (1350 à 1550 nm) et **B** (1900 à 2000 nm) déjà identifiées présentent les poids factoriels les plus élevés, en particulier pour la variable latente 1 (vert). Ce sont donc ces parties qui contribuent le plus à la création de la variable latente 1.

**i** Que les poids factoriels soient positifs ou négatifs ne joue aucun rôle.

En raison des artefacts dans la partie **B**, il semble judicieux de tester un modèle basé sur la partie **A** (1350 à 1550 nm).

## Définir des gammes de longueurs d'onde

Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Paramétrer un modèle de quantification** du processus.

### 1 Ajouter une gamme de longueurs d'ondes



- Dans la partie **Gamme de longueurs d'onde**, ajouter une gamme de longueur d'ondes en cliquant sur

Gamme de longueurs d'onde			?	
#	Longueur d'onde initiale	Longueur d'onde finale		
1	<input type="text" value="1000.0 nm"/>	<input type="text" value="2250.0 nm"/>		


Une gamme de longueur d'ondes est ajoutée. La gamme couvre initialement toutes les longueurs d'ondes.

## 2 Définir une gamme de longueurs d'onde

Définir la gamme de longueurs d'ondes de l'une des manières suivantes :

- Pour définir la gamme de longueur d'ondes en saisissant des chiffres, entrer les **Longueur d'onde initiale** et les **Longueur d'onde finale** dans les champs de saisie correspondants.
- Pour définir la gamme de longueur d'ondes dans le diagramme, procéder comme suit :
  - Dans la partie **Superposition des spectres**, cliquer sur **[Activer le décalage]**.
  - Déplacer le curseur vers le bord gauche de la partie en surbrillance jusqu'à ce que le curseur s'affiche ainsi : .
  - En maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé, déplacer le bord gauche vers la position correspondante.
  - Faire de même sur le côté droit de la partie en surbrillance.
  - Pour déplacer une gamme de longueur d'onde, déplacer le curseur sur la gamme jusqu'à ce qu'il s'affiche ainsi : .
  - Déplacer la partie vers la gauche ou la droite en maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé.
  - Cliquer sur **[Désactiver le décalage]**.

## 3 Ajouter d'autres gammes de longueurs d'ondes

D'autres gammes de longueurs d'ondes peuvent être ajoutées en cliquant sur .

### Les gammes de longueurs d'ondes ne doivent pas se chevaucher

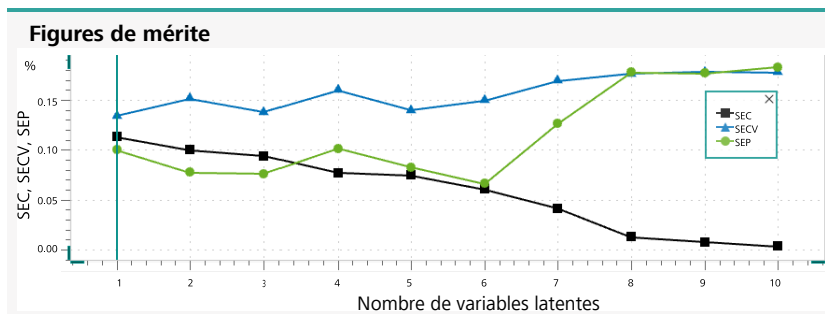
Une nouvelle gamme de longueurs d'ondes chevauche d'abord les gammes de longueurs d'ondes existantes. Adapter la gamme de longueur d'ondes de sorte à éliminer le chevauchement.

## 4 Calculer un modèle

- Calculer le modèle en cliquant sur **[Calculer]**.

## 5 Valider un modèle


- Dans le navigateur, passer à l'étape du processus Validation en cliquant sur **Valider un modèle de quantification**.
- Valider le modèle. Comparer les figures de mérite à celles du modèle créé précédemment.




Pour l'eau dans l'EtOH et une gamme de longueur d'ondes de 1350 à 1550 nm, une seule variable latente semble suffire au lieu de 3 en utilisant toute la gamme de longueur d'ondes. La SECV est similaire dans les deux cas : 0,13 % et 0,14 %.

Une variable au lieu de 3 est une amélioration significative. On a réussi à éliminer la variance non pertinente. Le nouveau modèle avec moins de variables est probablement plus robuste.

## 6 Sauvegarder un modèle

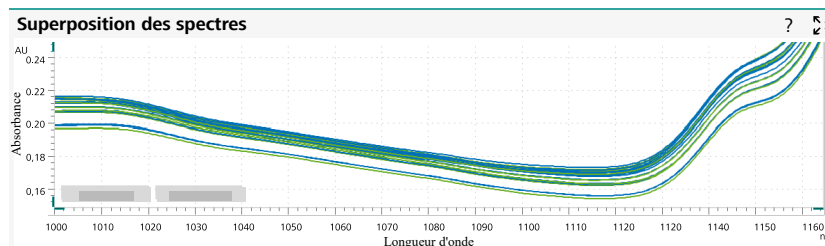
- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

 S'il faut prendre en compte la nouvelle sélection des longueurs d'onde créée lors de la division de l'ensemble de données ou de la détection des données atypiques, il est possible de rediviser l'ensemble de données.

### 5.3.4.2 Définir le prétraitement des données manuellement

Un prétraitement approprié des données peut améliorer le modèle de quantification. Exemple : les décalages de la ligne de base ne contiennent pas d'informations pertinentes pour la plupart des applications et peuvent être supprimés.

#### Spectres d'EtOH



Pour les spectres d'EtOH, de petits décalages de la ligne de base entre les spectres sont visibles lorsque la partie de 1000 à 1200 nm est agrandie. Il s'agit de déplacements constants de la ligne de base (non liés à la longueur d'onde).

- i** Les décalages de la ligne de base sont dus à la formation de bulles de gaz dans un échantillon placé dans une cellule à circulation et non dégazée exprès pour la démonstration. Un liquide clair ne présente normalement pas de déplacement de ligne de base de cette ampleur.

Un prétraitement des données peut corriger ce décalage de la ligne de base.

## Définir le prétraitement des données manuellement

Conditions préalables :

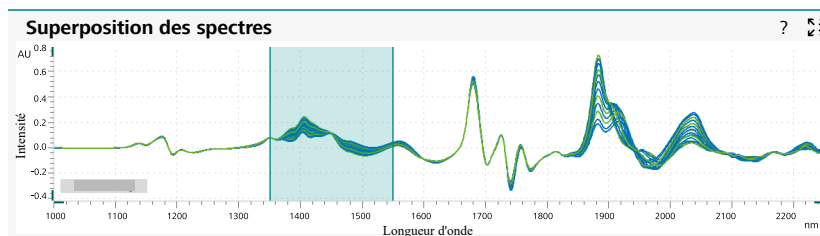
- Le navigateur est à l'étape **Paramétrer un modèle de quantification** du processus.

### 1 Ajouter une étape de prétraitement des données

- Dans la partie **Prétraitement des données**, ajouter une étape de prétraitement des données en cliquant sur .
- Sélectionner le type de prétraitement des données dans le champ **Prétraitement des données** et remplir les champs y afférents. Exemple de Gap-Segment, à l'aide de la dérivée du premier ordre, on supprime les décalages constants (indépendants de la longueur d'onde) de la ligne de base :


Les spectres prétraités sont immédiatement affichés dans la partie **Superposition des spectres**.


Le prétraitement des données a changé l'aspect des spectres.





Pour les spectres d'EtOH, les décalages constants de la ligne ont disparu.

## 2 Ajouter d'autres étapes de prétraitement des données

D'autres étapes de prétraitement des données peuvent être ajoutées en cliquant sur .

 Si on utilise plusieurs étapes de prétraitement des données, l'ordre peut être déterminant. Utiliser Gap-Segment ou Savitzky-Golay de préférence avant SNV (Standard Normal Variate) et SNV avant detrend.

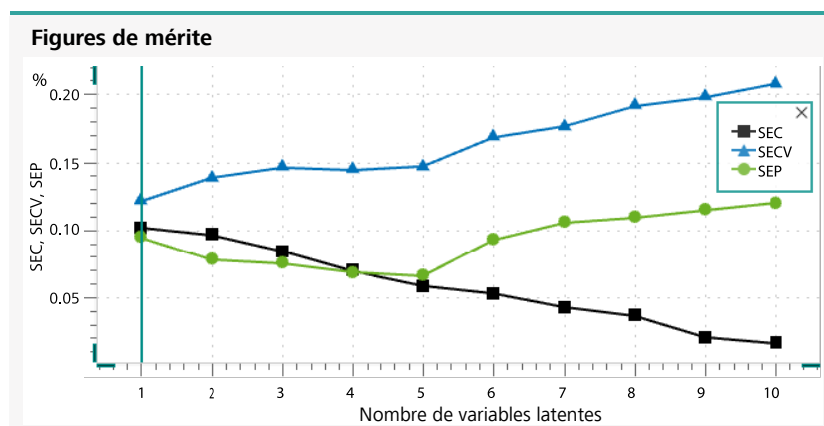
En cliquant sur  et , les lignes peuvent être déplacées vers le haut ou vers le bas, ce qui permet de déterminer l'ordre.

## 3 Calculer un modèle

- Calculer le modèle en cliquant sur **[Calculer]**.

## 4 Valider un modèle

- Dans le navigateur de modèle, passer à l'étape Validation du processus en cliquant sur **Valider un modèle de quantification**.
- Valider le modèle. Comparer les figures de mérite avec les modèles créés précédemment.



Dans le cas de H<sub>2</sub>O dans EtOH à une gamme de longueur d'ondes de 1350 à 1550 nm et d'un Gap-Segment avec ordre de dérivation 1, une seule variable latente semble toujours suffisante. L'amélioration de la SECV est minime avec 0,12 %.

Comme les déplacements de ligne de base ne contiennent pas d'informations pertinentes pour cette application, le prétraitement des données peut être conservé malgré l'amélioration minime.

## 5 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

- i** Si les prétraitements des données nouvellement créés doivent être pris en compte lors de la division de l'ensemble de données ou de la détection des valeurs atypiques, l'ensemble de données peut être divisé à nouveau.

## 5.4 Publier un modèle de quantification


Pour qu'un modèle puisse être utilisé pour des déterminations, il doit être publié. Cela permet de faire évoluer le modèle sans affecter la version publiée ni les déterminations mises en œuvre avec celle-ci.

### Publier un modèle de quantification

**Condition préalable :**

- Le modèle est calculé et sauvegardé.
- Le modèle est ouvert.
- Le nombre souhaité de variables latentes est sélectionné.

#### 1 Ouvrir un dialogue

- Cliquer sur  pour ouvrir la boîte de dialogue **Publier un modèle de quantification**.

- i** Si le modèle a déjà été publié auparavant et utilisé dans des méthodes, celles-ci peuvent être mises à jour automatiquement en cochant la case **Mettre à jour des méthodes**.

**Remarque :** pour ne pas être mis à jour automatiquement :

- Méthodes ouvertes
- Méthodes signées et publiées
- Si le filtrage des accès aux données est activé : méthodes sans accès aux données de l'utilisateur actuellement connecté

#### 2 Nearest Neighbor Distance

Si la case **Calculer la Nearest Neighbor Distance** est cochée, la **Nearest Neighbor Distance (NND)** est disponible. Le modèle calcule la distance par rapport au spectre de l'échantillon de calibrage le plus proche dans l'espace des variables latentes pour chaque spectre de l'échantillon de calibrage. La plus grande des distances déterminées est enregistrée dans la variable de fonction **PREDICT** comme **LimitNearestNeighborDistance** (valeur limite NND) (*voir "Prédiction", Chapitre 2.3.2, page 21*).

Lors de la prédiction, le modèle de quantification calcule de la même manière la distance entre le spectre enregistré et le spectre

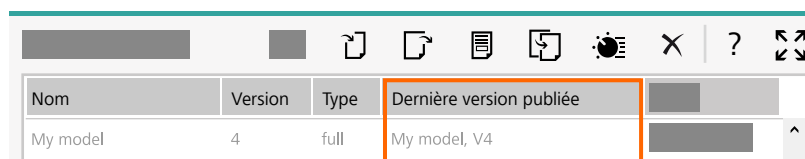
de l'échantillon de calibration. Cette distance est enregistrée dans la variable de fonction **PREDICT** comme **NearestNeighborDistance** (NND) (voir "Prédiction", Chapitre 2.3.2, page 21).

Les deux variables peuvent être comparées et contrôlées à l'aide du contrôle du résultat (voir « Établir une procédure de travail », page 159).

### 3 Publier

- Cliquer sur **[Publier]** pour publier le modèle.

La dernière version publiée s'affiche sous **Calibrage et évaluation ► Modèles de quantification** :



Nom	Version	Type	Dernière version publiée
My model	4	full	My model, V4

La fonction **PREDICT** peut maintenant accéder à la version publiée du modèle.


#### Aperçu du modèle

Si un ou plusieurs modèles de quantification sont sélectionnés, l'aperçu du modèle indique à droite en un coup d'œil les données les plus importantes (maximum 5 modèles différents).

Si la dernière version enregistrée ne correspond pas à la dernière version publiée, l'aperçu du modèle affiche les deux versions.

## 5.5 Correction de pente/d'ordonnée à l'origine

La **Correction de pente/d'ordonnée à l'origine** permet de corriger les erreurs systématiques lors de l'application d'un modèle de quantification. La condition préalable est un modèle de quantification robuste et fiable. Les erreurs doivent être statistiquement significatives, mais pas trop importantes.

 Les erreurs systématiques sont visibles sur le diagramme de corrélation sous la forme d'écarts entre la droite de régression et la droite idéale (pente = 1, ordonnée à l'origine = 0).


Les erreurs aléatoires sont également visibles sur le diagramme de corrélation. Plus les points sont dispersés autour de la droite de régression, plus les erreurs aléatoires sont élevées. Les erreurs aléatoires ne peuvent pas être corrigées avec la correction de pente/d'ordonnée à l'origine.

Une correction de pente/d'ordonnée à l'origine est utilisée dans les cas suivants :

- Si un modèle de quantification est revalidé ou surveillé à l'aide d'échantillons-témoins et qu'il s'avère que les figures de mérite ne répondent plus aux exigences, p. ex. en raison de changements environnementaux.
- Si un modèle de quantification a été créé avec des spectres XDS/DS importés (*voir "Changement d'analyseur XDS/DS (quantification)", Chapitre 11.6, page 187*).

2 corrections sont disponibles :

- **Biais** : corrige le biais – l'écart moyen entre les valeurs de référence et les valeurs prédites des échantillons.  
Après correction, le biais est égal à 0.
- **Correction de pente/d'ordonnée à l'origine** : corrige la pente et l'ordonnée à l'origine de la droite de régression sur le diagramme de corrélation.  
Après correction, la pente est égale à 1 (ce qui correspond à une droite à 45°) et l'ordonnée à l'origine est égale à 0.  
Remarque : après une correction de pente/d'ordonnée à l'origine, le biais est égal à 0.

 La correction de biais et surtout la correction de pente/d'ordonnée à l'origine doivent être utilisées avec précaution.

N'appliquer aucune correction si les erreurs ne sont pas statistiquement significatives. Si les erreurs sont statistiquement significatives, elles doivent faire l'objet d'un examen approfondi. Éliminer la cause des erreurs dans la mesure du possible. Si les erreurs ne peuvent pas être corrigées pour une raison justifiée, une correction de biais ou une correction de pente/d'ordonnée à l'origine peut être appliquée.

Remarque sur le nombre d'échantillons :

- Pour obtenir une valeur estimée fiable du biais, il faut au moins 20 échantillons.
- Pour obtenir une valeur estimée fiable de la pente, il faut au moins 30 échantillons.

### Préparer des échantillons

La correction de pente/d'ordonnée à l'origine est généralement effectuée avec des échantillons utilisés pour la revalidation du modèle

de quantification ou avec des échantillons-témoins utilisés pour le contrôle des performances du modèle de quantification.

- Rassembler les échantillons dans **Tables d'échantillons** ou **Tables d'échantillons filtrés**.
- S'assurer que chaque échantillon contient les éléments suivants :
  - Une valeur de référence pour le paramètre à corriger.
  - Un spectre.
  - Une valeur calculée pour chaque spectre.

## Créer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine

### Plusieurs modèles de quantification (option)

- Si différents modèles de quantification doivent être corrigés, créer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine distincte pour chaque modèle.
- Si plusieurs versions analogues du même modèle de quantification doivent être corrigées, une seule correction de pente/d'ordonnée à l'origine suffit.

Les versions analogues peuvent différer sur les points suivants :

- nom différent du modèle de quantification
- nom différent du paramètre de référence
- ensembles de données atypiques différents pour autant que l'ensemble de données de calibrage n'en soit pas affecté
- ensembles de données validées différents pour autant que l'ensemble de données de calibrage n'en soit pas affecté
- paramètres de validation croisée différents

Les versions analogues ne doivent en revanche présenter aucune différence affectant le résultat de prédiction :

- Les ensembles de données de calibrage doivent être identiques.
- Le paramétrage doit être identique.
- Le nombre de variables latentes doit être identique.

### 1 Créer une nouvelle correction de pente/d'ordonnée à l'origine

- Cliquer sur  dans **Calibrage et évaluation** ► **Corrections de pente/d'ordonnée à l'origine**.

### 2 Nommer la correction de pente/d'ordonnée à l'origine

- Saisir un nom approprié dans le champ **Nom**, par exemple, le nom du modèle de quantification à corriger.

### 3 Sélectionner des échantillons

- Sélectionner une ou plusieurs **Tables d'échantillons** ou **Tables d'échantillons filtrés** à partir desquelles des échantillons doivent être utilisés pour créer la correction de pente/d'ordonnée à l'origine.

## Créer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine

Nom

Table d'échantillons Table d'échantillons filtrés

Nom	Enregistré	Modèle de quantification, version

#### 4 Sélectionner un modèle de quantification

La liste **Modèle de quantification** affiche tous les modèles de quantification qui peuvent être corrigés avec les échantillons sélectionnés.

Nom	Enregistré	Modèle de quantification, version

- Sur la liste **Modèle de quantification**, sélectionner le modèle de quantification à corriger.  
**Remarque** : si les valeurs prédites des échantillons utilisés sont issues de plusieurs versions d'un modèle de quantification, toutes ces versions peuvent être sélectionnées si besoin.
- Cliquer sur **[Continuer]**.

#### 5 Paramètres de référence du modèle de quantification

Le champ **Paramètre de référence / unité du modèle de quantification** indique le nom et l'unité du paramètre de référence du modèle de quantification sélectionné.

- Adapter le nombre de **Nombre de décimales** au besoin.

#### 6 Paramètres de référence des échantillons sélectionnés

La liste **Paramètres de référence** affiche tous les paramètres de référence disponibles pour les échantillons sélectionnés.

Sélectionner les paramètres de référence

Nom

Paramètres de référence / unité du modèle de quantification

Paramètres de référence	Unité



- Sélectionner dans cette liste le paramètre de référence souhaité.

**i** Si le paramètre de référence a plusieurs désignations dans les tables d'échantillons ou les tables d'échantillons filtrés, toutes ces désignations peuvent être sélectionnées.

### 7 Confirmer des saisies

- Créer la nouvelle correction de pente/d'ordonnée à l'origine en cliquant sur **[Créer]**.

La correction est calculée à partir des valeurs de référence et des valeurs prédites des échantillons sélectionnés. Sont pris en compte tous les échantillons répondant aux deux conditions suivantes :

- Les données d'échantillon comportent une valeur de référence pour le paramètre de référence sélectionné.
- L'échantillon possède un résultat de quantification calculé par le modèle de quantification sélectionné.

Un nouvel onglet affiche la correction de pente/d'ordonnée à l'origine. La partie **Échantillons** répertorie les échantillons pris en compte.

Échantillons					
	Nom de l'échantillon	Nom du sous-échantillon	Valeur de référence	Valeur calculée	Valeur corrigée
			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 Type de correction

Sélectionner le type de correction **Biais** ou **Pente/ordonnée à l'origine**.

Type de correction :  Biais  Pente/ordonnée à l'origine


### 9 Indiquer des valeurs atypiques

- Pour indiquer un spectre comme valeur atypique, faire un clic droit sur le spectre dans la partie **Échantillons** et exclure ce spectre du calcul par un clic sur **Ensemble des données aberrantes**.

Le symbole  indique que le spectre est une valeur atypique. Le spectre est retiré de la partie **Diagramme de corrélation** et de tous les calculs.

- Pour retirer le marquage comme valeur atypique, faire à nouveau un clic droit sur le spectre et cliquer sur **Ensemble de données de correction**.

Le spectre est à nouveau indiqué par . Le spectre réapparaît dans la partie **Diagramme de corrélation** et est à nouveau pris en compte dans tous les calculs.

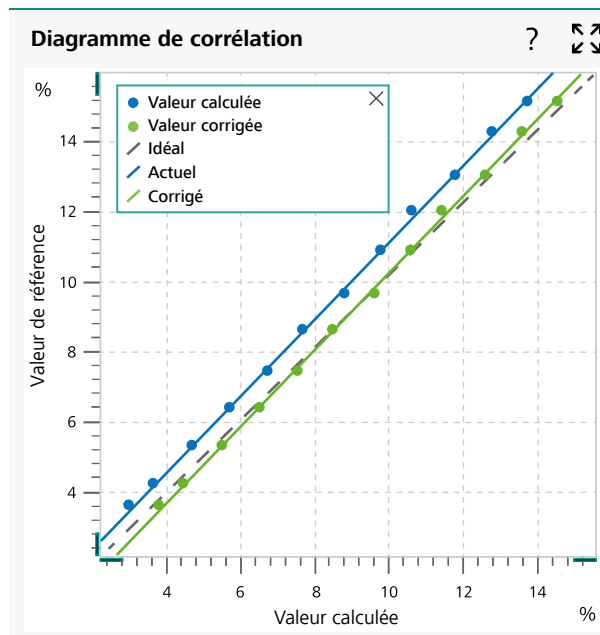
 Les touches **[CTRL]** ou **[SHIFT]** permettent de sélectionner plusieurs spectres à la fois et de les modifier simultanément (*voir "Manipuler des tableaux", Chapitre 11.2, page 174*).

## 10 Diagramme de corrélation

La partie **Diagramme de corrélation** montre pour chaque spectre 2 points avec la même valeur de référence sur l'axe y, mais avec des valeurs différentes sur l'axe x :

- Le point bleu indique sur l'axe x la **valeur calculée** prédite par le modèle de quantification.
  - Positionner le curseur sur un point pour afficher son résidu (différence entre valeur calculée et valeur de référence).
- Le point vert indique la **valeur corrigée** sur l'axe x. La valeur corrigée dépend du type de correction choisi (biais ou pente/ordonnée à l'origine).
  - Positionner le curseur sur un point pour afficher son résidu (différence entre valeur corrigée et valeur de référence).

### Diagramme de corrélation pour une correction de biais

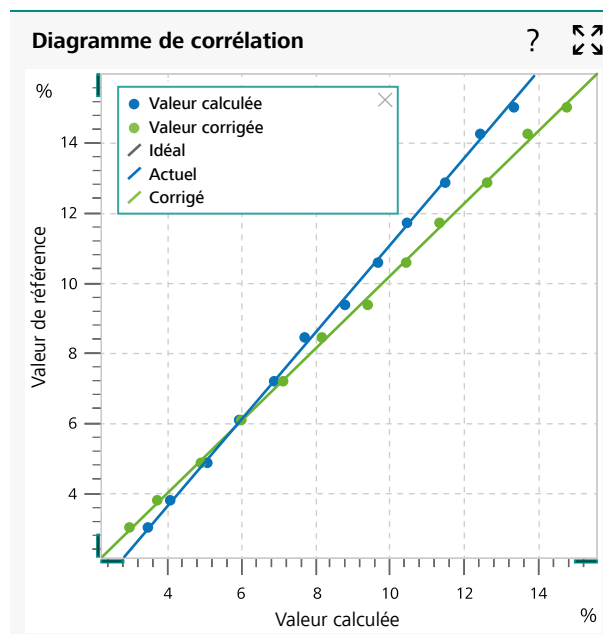


Les valeurs calculées (points bleus) sont corrigées en fonction du biais. La droite de régression corrigée (verte) coupe la droite idéale de 45° en pointillés de manière à obtenir un biais de 0.

L'exemple du diagramme de corrélation ci-dessus donne une amélioration du SEP qui passe de 0,82 à 0,24.

**i** Pour obtenir une valeur estimée fiable du biais, il faut au moins 20 échantillons.

## Diagramme de corrélation pour une correction de pente/ d'ordonnée à l'origine



Les valeurs calculées (points bleus) sont corrigées en fonction de la pente et de l'ordonnée à l'origine. Les valeurs corrigées (points verts) ont une droite de régression idéale (45°, ordonnée à l'origine 0).

L'exemple du diagramme de corrélation ci-dessus donne une amélioration du SEP qui passe de 0,86 à 0,12.

**i** Pour obtenir une valeur estimée fiable de la pente, il faut au moins 30 échantillons.

### 11 Valeurs de correction

Dans la partie **Valeurs de correction**, le SEP et les valeurs de correction de la pente et de l'ordonnée à l'origine sont affichés en fonction du type de correction :

- **SEP** indique l'erreur standard de prédiction, sur la base des échantillons dans l'ensemble de données de correction.  
**Remarque** : les formules des 3 valeurs SEP tiennent compte respectivement des degrés de liberté correspondants. En présence d'un petit nombre d'échantillons, les valeurs avec correction peuvent être supérieures à celles sans correction.
- La valeur de correction multiplicative **Pente** et la valeur de correction additive **Ordonnée à l'origine** convertissent les valeurs calculées (points bleus) en valeurs corrigées (points verts) :  
$$\text{Valeur corrigée} = \text{valeur calculée} \times \text{pente} + \text{ordonnée à l'origine}$$


Valeurs de correction <span style="float: right;">? ↕</span>			
	SEP	Pente	Ordonnée à l'origine
Non corrigé	0.86	1.000	0.00
Correction de biais	0.71	1.000	0.53 <span style="border: 1px solid orange; padding: 2px;">3</span>
Correction de pente/d'ordonnée à l'origine	0.12	1.193 <span style="border: 1px solid orange; padding: 2px;">1</span>	-1.11 <span style="border: 1px solid orange; padding: 2px;">2</span>

**i** Le tableau contient les données suivantes des valeurs calculées (points bleus) :

- La pente de la droite de régression **(1)**.
- L'ordonnée à l'origine de la droite de régression **(2)**.
- Le biais de la droite de régression **(3)**.

## 12 Publier une correction de pente/d'ordonnée à l'origine

**i** Une correction de pente/d'ordonnée à l'origine publiée ne peut plus être ouverte ni modifiée ultérieurement.

- Vérifier que le bon type de correction (biais ou pente/ordonnée à l'origine) est sélectionné.
- Pour ouvrir le dialogue **Publier la correction de pente/d'ordonnée à l'origine**, cliquer sur .
- Publier la correction de pente/d'ordonnée à l'origine en cliquant sur **[Publier et fermer]**.

La correction de pente/d'ordonnée à l'origine est publiée et sauvegardée simultanément. L'onglet se referme et la correction de pente/d'ordonnée à l'origine s'affiche sur la liste générale.

La fonction **PREDICT** peut désormais accéder à la version publiée de la correction de pente/d'ordonnée à l'origine.

## 6 Modèle d'identification

- i** Une illustration des déroulements dans le logiciel OMNIS se trouve en annexe (*voir « Développement d'un modèle », page 194*).

Un modèle d'identification fournit en fonction de l'utilisation :

- Une **identification** d'un échantillon inconnu (p. ex., le fructose). Le résultat est un nom de produit.
- Une **vérification** de l'appartenance d'un échantillon (p. ex. fructose) au produit. Le résultat est oui/non - vérification réussie ou échouée.

### 6.1 Créer un modèle d'identification

#### Créer un modèle d'identification

**Condition préalable :**

- Un ensemble de données avec des spectres et des noms de produits est créé (*voir "Enregistrer des spectres", Chapitre 4.2, page 61*).

#### 1 Créer et nommer un modèle d'identification

- Cliquer sur  dans **Calibrage et évaluation ► Modèle d'identification**.

Un nouveau modèle d'identification apparaît dans un nouvel onglet.

- Saisir un nom approprié dans le champ de saisie **Nom du modèle d'identification**.

#### 2 Sélectionner des échantillons

- Afficher toutes les listes d'échantillons en cliquant sur **Tables d'échantillons**.
- Sélectionner toutes les tables d'échantillons préparées.

## Créer un modèle d'identification

Nom du modèle d'identification

Tables d'échantillons

Tables d'échantillons filtrés

XDS-/DS-Import


Nom	Enregistré	Produit	Nombre de spectres

**i** Les échantillons peuvent également être sélectionnés via une table d'échantillons filtrés. En outre, il est possible d'importer des échantillons provenant d'appareils XDS et DS (*voir "Changement d'analyseur XDS/DS (quantification)", Chapitre 11.6, page 187*).

**i** La sélection d'échantillons peut être adaptée ultérieurement.

La sélection doit inclure des échantillons avec un paramètre de produit. La colonne **Produit** répertorie les produits présents.

### 3 Créer un modèle d'identification

- Cliquer sur **[Créer]**.
- Pour sauvegarder un modèle : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## 6.2 Sélectionner des échantillons et répartir un ensemble de données

L'onglet du modèle d'identification affiche tout en haut une barre de navigation horizontale, le **navigateur**. Le navigateur passe par les étapes ultérieures du développement de modèle.



### **i** Représentation de spectres

Dans les 3 étapes du processus, chacun des spectres apparaît sous forme de courbes, de points ou de lignes de tableau.

Les spectres sélectionnés sont mis en évidence simultanément dans toutes les représentations et dans toutes les étapes du processus.





## Tableaux et diagrammes

La manipulation des tableaux et des diagrammes est décrite en annexe :

- Manipuler des tableaux (voir "*Manipuler des tableaux*", Chapitre 11.2, page 174)
- Manipuler des diagrammes (voir "*Manipuler des diagrammes*", Chapitre 11.3, page 175)














### Étape du processus 'Sélectionner des échantillons'

La partie **Liste de produits** affiche les produits des échantillons sélectionnés :

Liste de produits			?	
	Produit	Nombre de spectres	Groupe de produits	
				
				
				

chaque produit est identifié par une couleur de produit. Il est possible de sélectionner une autre couleur en cliquant sur une couleur de produit.

Dès qu'un produit au moins est sélectionné dans la liste de produits, la partie **Liste des spectres** affiche tous les spectres des produits sélectionnés :

Liste des spectres									?	
		Nom de l'échantillon	Nom du sous-échantillon	Source	Produit					
										
										
										
										

Un champ de saisie signale à chaque fois l'appartenance de l'échantillon au produit (indiqué en orange sur l'image).

Les icônes suivantes symbolisent l'attribution aux ensembles de données :



Le spectre est attribué à l'ensemble de données de calibration.



Le spectre est attribué à l'ensemble de données validées.



Le spectre est attribué à l'ensemble de données atypiques.



Indique des données manquantes ou non valides. Consulter l'infobulle.

Les spectres dans la partie **Liste des spectres** apparaissent également dans la partie **Superposition des spectres** et sont représentés comme suit :

- Spectres de l'ensemble de données de calibrage en **bleu**, ceux de l'ensemble de données validées en **vert** et ceux de l'ensemble de données atypiques en **rouge**.
- Si le bouton à bascule **Afficher les couleurs de produit** est activé, les spectres sont colorés en fonction des couleurs des produits.

L'étape du processus **Sélectionner des échantillons** permet ce qui suit :


- **Adapter la sélection d'échantillons**

Ajouter d'autres spectres ou en supprimer.

- **Diviser l'ensemble de données**

Division automatique ou manuelle de l'ensemble de données :

- **Ensemble de données de calibrage** : le modèle est calculé avec les spectres et les appartenances de l'ensemble de données de calibrage au produit.
- **Ensemble de données validées** : les spectres et les appartenances de l'ensemble de données validées au produit servent uniquement à valider le modèle.
- **Ensemble de données atypiques** : l'ensemble de données atypiques n'a pas d'influence sur le modèle ou sa validation. Des valeurs atypiques ne sont représentées qu'à titre informatif sur quelques tableaux.

 Un modèle peut être développé sans ensemble de données validées, par exemple si seul un nombre limité d'échantillons est disponible dans une première phase ou si la validation est effectuée exclusivement avec un ensemble de données externe.


### Adapter la sélection d'échantillons


**Condition préalable :**

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan (voir "*Créer un modèle d'identification*", Chapitre 6.1, page 107).
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

#### 1 Ajouter ou supprimer des spectres

La sélection d'échantillons et l'appartenance à un produit peuvent être adaptées à tout moment dans la partie **Liste des spectres** :

- Pour sélectionner les échantillons dont les spectres doivent être ajoutés à la liste des spectres, cliquer sur .

- Pour retirer des spectres de la liste des spectres, les sélectionner et cliquer sur .
- Remarque : les échantillons correspondants, spectres compris, sont conservés dans la base de données.


## 2 Modifier l'appartenance à un produit

- Sélectionner tous les spectres auxquels un autre produit doit être attribué.
- Faire un clic droit sur les spectres sélectionnés et sélectionner **Attribuer un produit** dans le menu contextuel.

Une fenêtre de saisie apparaît :

- Cliquer dans le champ **Nouveau produit**. Sélectionner soit un produit existant, soit un nouveau nom de produit.
- Attribuer le produit aux spectres sélectionnés en cliquant sur **[Attribuer]**.

## 3 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

## Répartir automatiquement un ensemble de données

La détection des valeurs atypiques permet de créer automatiquement un ensemble de données atypiques. Les spectres restants peuvent être automatiquement répartis en un ensemble de données de calibrage et un ensemble de données validées.

Si des échantillons distincts ont été collectés pour le calibrage et la validation, ils peuvent être attribués manuellement.

### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

## 1 Appeler une répartition de l'ensemble de données

- Dans la partie **Liste des spectres**, cliquer sur .

Le dialogue **Répartition des jeux de données** s'ouvre.

## 2 Déterminer un ensemble de données atypiques

- Pour attribuer automatiquement des spectres à l'ensemble de données atypiques, activer le bouton à bascule **Déterminer une valeur aberrante**. La détection automatique des valeurs atypiques trouve les valeurs spectrales atypiques sur la base des écarts dans les spectres.
  - Au besoin, adapter la **Pertinence**. Plus la pertinence est élevée, plus on détecte de valeurs spectrales atypiques. Les valeurs types sont 5 % ou 1 %.

## 3 Déterminer un ensemble de données validées

La répartition automatique garantit que l'ensemble de données de calibrage et l'ensemble de données validées sont représentatifs de la population et indépendants l'un de l'autre.

- Pour attribuer automatiquement les spectres à l'ensemble de données validées, activer le bouton à bascule **Déterminer un jeu de données validées**.
  - Dans le champ **Pourcentage**, définir le pourcentage de spectres pour l'ensemble de données validées, p. ex. entre 20 % et 30 %.

## 4 Définir des options

Définir des options pour la répartition de l'ensemble de données :


- **Appliquer le paramétrage** : appliquer le prétraitement de données et la sélection des longueurs d'onde aux spectres (*voir "Paramétrer un modèle d'identification", Chapitre 6.5, page 119*).  
**Remarque** : les modifications ultérieures du paramétrage n'ont aucun effet sur l'attribution des ensembles de données. Sauf si l'ensemble de données est à nouveau réparti.
- **Conserver les valeurs aberrantes** : garder les valeurs atypiques déjà existantes et ne pas en tenir compte dans la répartition. Cette option peut augmenter la taille de l'ensemble de données atypiques, même si la **Pertinence** reste inchangée.
- **Conserver un jeu de données validées** : garder les spectres déjà présents dans l'ensemble de données validées et ne pas en tenir compte lors de la répartition. Cette option peut augmenter la taille de l'ensemble de données validées, même si le **Pourcentage** reste inchangé.

## 5 Démarrer une répartition automatique

- Cliquer sur **[Diviser]**.

L'ensemble de données est réparti en fonction des paramètres retenus.

## 6 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches [CTRL]+[S].

### Graphique d'influence et graphique des scores

Les diagrammes de graphique d'influence et de graphique des scores sont disponibles après la répartition automatique de l'ensemble de données :

- Cliquer sur  dans une des parties dans l'étape du processus **Sélectionner des échantillons** et sélectionner le diagramme **Graphique d'influence** ou **Graphique des scores**.

Le graphique d'influence et le graphique des scores s'appuient sur la méthode de calcul **ACP** (analyse en composantes principales). Le nombre de composants principaux est choisi de manière à ce que la variance expliquée soit d'au moins 95 %.

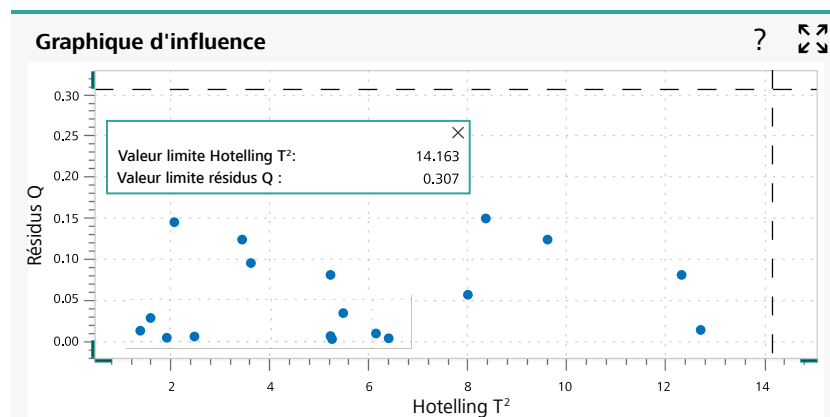
Les spectres sous la forme ci-après servent de point de départ pour l'ACP :

- Spectres sans prétraitement des données et sélection de longueurs d'onde si l'option **Appliquer le paramétrage** a été désactivée lors de la répartition automatique de l'ensemble de données.
- Spectres avec prétraitement des données et sélection de longueurs d'onde si l'option **Appliquer le paramétrage** a été activée lors de la répartition automatique de l'ensemble de données.

Remarque concernant l'option activée : si le paramétrage est modifié, le graphique d'influence et le graphique des scores ne sont disponibles qu'après une nouvelle répartition automatique de l'ensemble de données.

### Graphique d'influence

Le **Graphique d'influence** décrit les propriétés caractéristiques des spectres et aide à déterminer des valeurs atypiques.




### Manipuler un diagramme

La représentation du diagramme peut être adaptée et un ou plusieurs points peuvent être sélectionnés (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*).

Chaque point représente un spectre. Des valeurs élevées du  $T^2$  de Hotelling des résidus Q signalent d'éventuelles valeurs atypiques.


Des spectres à valeurs élevées du  $T^2$  de Hotelling indiquent une composition extrême des échantillons concernés.

Des spectres à hauts résidus Q indiquent la présence de composants chimiques inhabituels dans les échantillons concernés.

 Les lignes en pointillé indiquent les valeurs critiques (limites) pour la pertinence définie. Si aucune valeur atypique n'a été déterminée pendant la répartition automatique de l'ensemble de données, la pertinence s'élève à 5 %.

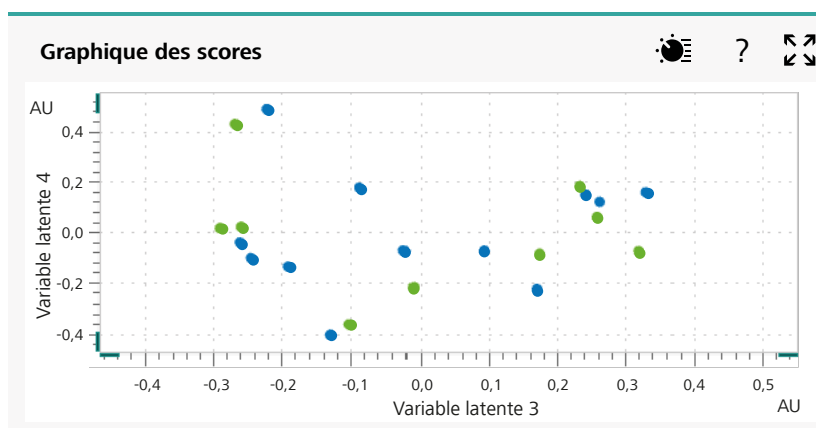
La figure du haut ne montre pas d'éventuelles valeurs atypiques. Tous les points se trouvent à l'intérieur des lignes pointillées.

### Graphique des scores

 Alors que la valeur  $T^2$  de Hotelling d'un spectre ramène les scores de tous les composants principaux à une seule valeur, le graphique des scores permet une analyse encore plus détaillée des scores.

Chaque point dans le graphique des scores représente un spectre. Les scores des deux premiers composants principaux peuvent être lus sur l'axe x et l'axe y. Les scores sont normalisés, chaque composant principal a le même poids.


Avec  **Propriétés**, on peut également afficher toute autre paire de composants principaux.



## Répartir un ensemble de données manuellement (option)

### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

 Si une répartition automatique de l'ensemble de données a été effectuée avant la répartition manuelle, le **Graphique d'influence** et le **Graphique des scores** sont disponibles.

### 1 Réaffecter des spectres

- Sélectionner les spectres dans l'une des parties.  
Exemple de sélection dans le graphique d'influence :
  - Ouvrir la partie **Graphique d'influence**.
  - Sélectionner un ou plusieurs points dans le graphique d'influence (*voir « Sélectionner plusieurs points ou courbes », page 177*).
  - Ouvrir le menu contextuel d'un clic droit sur l'un des points sélectionnés. Affecter les spectres à un ensemble de données :

 **Ensemble des données de calibrage**

 **Ensemble des données validées**

 **Ensemble des données aberrantes**

### 2 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

## 6.3 Calculer un modèle d'identification

Un premier modèle peut être calculé sans paramétrage. Cela donne un critère de comparaison pour les résultats de validation. L'influence d'un paramétrage ultérieur peut être mieux évaluée.

**i** Si le bruit de fond ou d'autres artefacts rendent certaines longueurs d'onde inutilisables, celles-ci peuvent être directement exclues (*voir "Paramétrer un modèle d'identification", Chapitre 6.5, page 119*).

### Calculer un modèle

**Condition préalable :**

- Le modèle d'identification s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

#### 1 Démarrer un calcul

- Calculer le modèle en cliquant sur **[Calculer]**.

**i** Si le bouton **[Calculer]** est inactif, l'une des causes peut être :

- Le modèle a déjà été calculé et il n'y a pas eu de changement depuis.
- Une des étapes du processus contient une entrée erronée. Dans le navigateur, l'étape du processus de la partie concernée est indiquée en **rouge**. Le champ contenant l'entrée incorrecte est entouré de rouge.

## 6.4 Valider un modèle d'identification

L'étape du processus **Valider un modèle d'identification** permet une validation avec les échantillons suivants :

- **Échantillons dans l'ensemble de données de calibrage**  
Ces échantillons ont été utilisés pour créer le modèle. Une classification correcte par le modèle est donc plus facile que pour d'autres échantillons.
- **Échantillons dans l'ensemble de données validées (le cas échéant)**  
Ces échantillons sont indépendants du modèle. Leurs résultats de validation constituent une meilleure référence pour l'identification d'échantillons inconnus.

**i** Dans ce qui suit, le terme de **produit** sera utilisé même s'il pourrait tout aussi bien s'agir d'un **groupe de produits**. Les groupes de produits rassemblent plusieurs produits et sont utilisés dans les hiérarchies des modèles (voir "*Hiérarchie des modèles*", Chapitre 8, page 143).

### Identifier un échantillon

Le modèle affecte une probabilité à l'échantillon pour chaque produit.

**i** Les probabilités sont indépendantes les unes des autres. La somme des valeurs ne correspond pas à 100 %.  
Les valeurs doivent être considérées comme relatives les unes aux autres, ce qui permet une comparaison des différents produits.

L'évaluation s'effectue à l'aide d'un **seuil de probabilité** paramétrable et avec des qualifications pour les différents produits :

1. une qualification de l'échantillon est effectuée avec le modèle de qualification correspondant pour chaque produit dont la probabilité est supérieure au seuil de probabilité. Si la qualification échoue, la probabilité du produit correspondant est mise à zéro.
2. Évaluation avec les probabilités modifiées de l'étape 1 :
  - a. Si aucune probabilité n'est supérieure au seuil de probabilité, l'identification échoue (état de l'identification **Non identifié**).
  - b. Si une seule probabilité est supérieure au seuil de probabilité, l'identification de l'échantillon a réussi et il est attribué au produit correspondant (état de l'identification **Identifié**).
  - c. Si plusieurs probabilités sont supérieures au seuil de probabilité, la prédiction est équivoque et l'identification échoue (état de l'identification **Équivoque**).

### Résultat de validation d'un échantillon

Le logiciel OMNIS compare le produit déterminé par le modèle avec le produit attendu. Il en découle le résultat de la validation :

- **Réussie** : l'identification est réussie et correspond au produit attendu.
- **Échec** : aucune correspondance, ni identification équivoque ou non.

### Partie Aperçu de validation

La partie **Aperçu de validation** résume les résultats pour les échantillons de l'ensemble de données de calibrage et, le cas échéant, de l'ensemble de données validées.

À gauche se trouve un aperçu de tous les échantillons de calibrage et de validation :

Total	
% succès	% d'échantillons correctement classés


Total	
Succès	Nombre d'échantillons correctement classés
Échec	Nombre d'échantillons mal classés
Nombre de spectres	Nombre de spectres dans l'ensemble de données de calibrage et de validation

À droite se trouve un aperçu des produits individuels et des groupes de produits :

Produit / groupe de produits	Échec	Succès	% succès
Produit A	Nombre d'échantillons de produit A qui ne sont pas classés comme produit A	Nombre d'échantillons de produits A correctement classés	% d'échantillons de produits A correctement classés
Produit B	Nombre d'échantillons de produit B qui ne sont pas classés comme produit B	Nombre d'échantillons de produit B correctement classés	% d'échantillons de produits B correctement classés
Groupe de produits C	Nombre d'échantillons du groupe de produits C qui ne sont pas classés dans le groupe de produits C	Nombre d'échantillons du groupe de produits C correctement classés	% d'échantillons du groupe de produits C correctement classés

### Partie Résultats de validation

La partie **Résultats de validation** présente les résultats détaillés de chaque échantillon. Les échantillons de tous les produits sélectionnés dans la partie **Aperçu de validation** sont affichés.

 Les produits dont les probabilités originales sont supérieures au seuil de probabilité sont affichées pour chaque échantillon. Si une probabilité de 0,0 % s'affiche, la qualification du produit correspondant a échoué.


### Manipuler et copier des données

- Manipuler des tableaux (*voir "Manipuler des tableaux", Chapitre 11.2, page 174*)

## Optimiser le modèle d'identification

Les mesures suivantes peuvent aider à améliorer le modèle d'identification.

### 1 Ajuster le seuil de probabilité

- Le seuil de probabilité peut être augmenté si de nombreuses prédictions sont équivoques ou si de nombreuses probabilités de 0,0 % apparaissent.
- Si de nombreux échantillons ne sont pas identifiés parce que le seuil de probabilité n'a pas été atteint, celui-ci peut être abaissé.
- Pour ajuster le Seuil de probabilité, exécuter les étapes suivantes :
  - Cliquer sur  pour ouvrir les propriétés du modèle d'identification.
  - Sélectionner **Paramètres** dans la liste de sélection.
  - Adapter le **Seuil de probabilité**. La valeur par défaut est 80 %.
  - Recalculer et valider le modèle d'identification.

### 2 Adapter le paramétrage

- Adapter le prétraitement des données (*voir "Prétraitement des données", Chapitre 6.5.2, page 123*).
- Adapter les gammes de longueurs d'ondes (*voir "Sélection des longueurs d'onde", Chapitre 6.5.1, page 121*).

### 3 Développer une Hiérarchie des modèles

Une **Hiérarchie des modèles** permet la structuration hiérarchique des modèles d'identification et une analyse quantitative des échantillons identifiés (*voir "Hiérarchie des modèles", Chapitre 8, page 143*).

## 6.5 Paramétrer un modèle d'identification

L'étape **Paramétrer un modèle d'identification** du processus permet d'optimiser les spectres. Les artefacts et les non-linéarités sont corrigés. Effectué correctement, le paramétrage améliore l'exactitude et la robustesse du modèle.

Le paramétrage est appliqué à :

- tous les spectres de l'ensemble de données de calibrage
- tous les spectres des ensembles de données validées et de données atypiques

**i** Pour la prédiction dans la plage de travail **Échantillons**, le spectre d'un échantillon est enregistré et évalué avec un modèle. Le paramétrage défini dans le modèle est également appliqué à ce spectre.

Deux possibilités de paramétrage sont disponibles :

- Définir les gammes de longueurs d'ondes à utiliser.
- Appliquer des prétraitements de données pour donner aux spectres une forme plus appropriée.

L'examen visuel des spectres commence à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

## Représenter des spectres

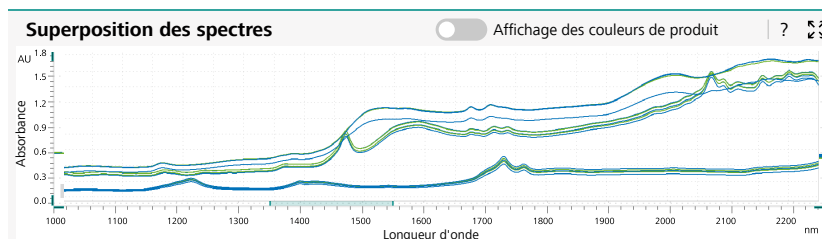
**Condition préalable :**

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

### 1 Sélection des spectres à étudier

- Dans l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus, sélectionner dans la partie **Liste de produits** tous les produits dont les spectres doivent être affichés.

La partie **Superposition des spectres** affiche les spectres des produits sélectionnés.



L'image montre des spectres de 3 produits différents. Les spectres de différents produits peuvent être faciles ou difficiles à distinguer visuellement.

Les spectres sont représentés comme suit :

- Spectres de l'ensemble de données de calibrage en **bleu**, ceux de l'ensemble de données validées en **vert** et ceux de l'ensemble de données atypiques en **rouge**.
- Si le bouton à bascule Afficher les couleurs de produit est activé, les spectres sont colorés en fonction des couleurs des produits.

## 2 Examiner des spectres

- Manipuler des tableaux (voir "Manipuler des tableaux", Chapitre 11.2, page 174)
- Manipuler des diagrammes (voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175)

### Autres étapes

- Sélection des longueurs d'onde (voir "Sélection des longueurs d'onde", Chapitre 6.5.1, page 121)
- Définir le prétraitement des données (voir "Prétraitement des données", Chapitre 6.5.2, page 123)

## 6.5.1 Sélection des longueurs d'onde

Une sélection des longueurs d'onde peut améliorer le modèle d'identification. Exemple : si du bruit de fond est visible à des valeurs d'absorbance élevées, les gammes de longueurs d'ondes concernées peuvent être exclues.

Le modèle utilise les gammes de longueur d'ondes définies. Si aucune gamme de longueurs d'ondes n'est définie, le modèle utilise toutes les longueurs d'onde.

### Définir des gammes de longueurs d'onde

#### Condition préalable :



- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

## 1 Sélection des spectres à afficher

Sélectionner les produits dont les spectres doivent être affichés :

- À l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus, sélectionner les produits dans la partie **Liste de produits**.  
ou
- À l'étape **Paramétrer un modèle d'identification** du processus, sélectionner les produits dans la liste de produits.

## 2 Ajouter une gamme de longueurs d'ondes

- Dans le navigateur, passer à l'étape **Paramétrer un modèle d'identification** du processus.
- Dans la partie **Gamme de longueurs d'onde**, ajouter une gamme de longueur d'ondes en cliquant sur  .

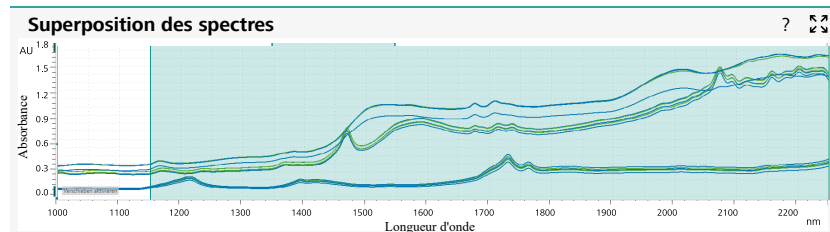
Gamme de longueurs d'onde			?	
#	Longueur d'onde initiale	Longueur d'onde finale		
1	1000.0 nm	2250.0 nm		

Une gamme de longueur d'ondes est ajoutée. La gamme couvre initialement toutes les longueurs d'ondes.

### 3 Définir une gamme de longueurs d'onde

Définir la gamme de longueurs d'ondes de l'une des manières suivantes :

- Pour définir la gamme de longueur d'ondes en saisissant des chiffres, entrer les **Longueur d'onde initiale** et les **Longueur d'onde finale** dans les champs de saisie correspondants.
- Pour définir la gamme de longueur d'ondes dans le diagramme, procéder comme suit :
  - Dans la partie **Superposition des spectres**, cliquer sur **[Activer le décalage]**.
  - Déplacer le curseur vers le bord gauche de la partie en surbrillance jusqu'à ce que le curseur s'affiche ainsi :
  - En maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé, déplacer le bord gauche vers la position correspondante.
  - Faire de même sur le côté droit de la partie en surbrillance.
  - Pour déplacer une gamme de longueur d'onde, déplacer le curseur sur la gamme jusqu'à ce qu'il s'affiche ainsi :
  - Déplacer la partie vers la gauche ou la droite en maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé.
  - Cliquer sur **[Désactiver le décalage]**.



Dans l'image, une gamme de longueur d'ondes de 1150 à 2250 nm est définie. Cette partie est utilisée par le modèle.


### 4 Ajouter d'autres gammes de longueurs d'ondes


D'autres gammes de longueurs d'ondes peuvent être ajoutées en cliquant sur

### **Les gammes de longueurs d'ondes ne doivent pas se chevaucher**

Une nouvelle gamme de longueurs d'ondes chevauche d'abord les gammes de longueurs d'ondes existantes. Adapter la gamme de longueur d'ondes de sorte à éliminer le chevauchement.

## **5 Sauvegarder un modèle**

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

 S'il faut prendre en compte la nouvelle sélection des longueurs d'onde créée lors de la division de l'ensemble de données ou de la détection des données atypiques, il est possible de rediviser l'ensemble de données.

## **6.5.2 Prétraitement des données**

Un prétraitement approprié des données peut améliorer le modèle d'identification. Exemple : les déplacements de la ligne de base ne contiennent pas d'informations pertinentes pour la plupart des applications et peuvent être supprimés.

### **Définir le prétraitement des données**

#### **Condition préalable :**


- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

### **1 Sélection des spectres à afficher**

Sélectionner les produits dont les spectres doivent être affichés :

- À l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus, sélectionner les produits dans la partie **Liste de produits**.  
ou
- À l'étape **Paramétrer un modèle d'identification** du processus, sélectionner les produits dans la liste de produits.

### **2 Ajouter une étape de prétraitement des données**

- Dans le navigateur, passer à l'étape **Paramétrer un modèle d'identification** du processus.
- Dans la partie **Prétraitement des données**, ajouter une étape de prétraitement des données en cliquant sur .

- Sélectionner le type de prétraitement des données dans le champ **Prétraitement des données** et remplir les champs y afférents. Exemple de Gap-Segment avec une dérivée du premier ordre qui annule les décalages constants (indépendants de la longueur d'onde) de la ligne de base :

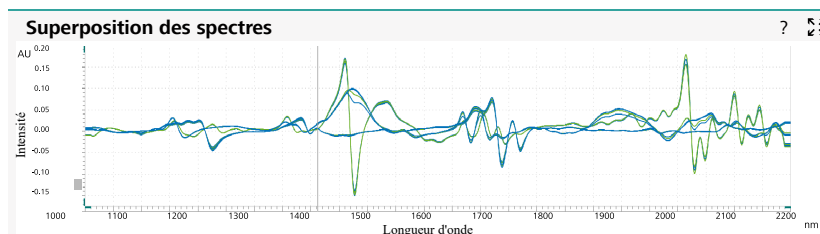
**Prétraitement des données** ? [Fullscreen]

# Prétraitement des données  
1 Gap-Segment

Ordre de dérivation: 1    Taille du segment: 10.0 nm    Espace des segments: 0.0 nm

Les spectres prétraités et sélectionnés à l'étape 1 s'affichent immédiatement dans la partie **Superposition des spectres**.

Après le prétraitement des données, les spectres ont un aspect différent, par exemple :



### 3 Ajouter d'autres étapes de prétraitement des données

D'autres étapes de prétraitement des données peuvent être ajoutées en cliquant sur

Si on utilise plusieurs étapes de prétraitement des données, l'ordre peut être déterminant. Utiliser Gap-Segment ou Savitzky-Golay de préférence avant SNV (Standard Normal Variate) et SNV avant detrend.

En cliquant sur et , les lignes peuvent être déplacées vers le haut ou vers le bas, ce qui permet de déterminer l'ordre.

### 4 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

Si les prétraitements des données nouvellement créés doivent être pris en compte lors de la division de l'ensemble de données ou de la détection des valeurs atypiques, l'ensemble de données peut être divisé à nouveau.

## 6.6 Publier un modèle d'identification


Pour qu'un modèle puisse être utilisé pour des déterminations, il doit être publié. Cela permet de faire évoluer le modèle sans affecter la version publiée ni les déterminations mises en œuvre avec celle-ci.


### Publier un modèle d'identification

#### Condition préalable :

- Le modèle est calculé et sauvegardé.
- Le modèle est ouvert.

#### 1 Ouvrir un dialogue

- Cliquer sur  pour ouvrir la boîte de dialogue **Publier un modèle d'identification**.

 Si le modèle a déjà été publié auparavant et utilisé dans des méthodes, celles-ci peuvent être mises à jour automatiquement en cochant la case **Mettre à jour des méthodes**.

**Remarque** : pour ne pas être mis à jour automatiquement :

- Méthodes ouvertes
- Méthodes signées et publiées
- Si le filtrage des accès aux données est activé : méthodes sans accès aux données de l'utilisateur actuellement connecté

#### 2 Publier

- Cliquer sur **[Publier]** pour publier le modèle.

La dernière version publiée s'affiche sous **Calibrage et évaluation ► Modèle d'identification** :

Nom	Version	Type	Dernière version publiée
My model	4	full	My model, V4

La fonction **PREDICT** peut maintenant accéder à la version publiée du modèle.

## 7 Modèle de qualification

-  Une illustration des déroulements dans le logiciel OMNIS se trouve en annexe (*voir « Développement d'un modèle », page 194*).

Un modèle de qualification permet de différencier un groupe d'échantillons d'autres échantillons. Le modèle de qualification convient, par exemple, pour distinguer les échantillons utilisables (échantillons positifs) des échantillons inutilisables (échantillons négatifs).


### 7.1 Créer un modèle de qualification

#### Créer un modèle de qualification

Condition préalable :

- Un ensemble de données avec des spectres est créé (*voir "Enregistrer des spectres", Chapitre 4.2, page 61*).

#### 1 Créer et nommer un modèle de qualification.

- Cliquer sur  dans **Calibrage et évaluation** ► **Modèles de qualification**.  
Un nouveau modèle de qualification apparaît dans un nouvel onglet.
- Saisir un nom approprié dans le champ de saisie **Nom du modèle de qualification**.

#### 2 Sélectionner des échantillons de calibrage

- Afficher toutes les listes d'échantillons en cliquant sur **Tables d'échantillons**.
- Sélectionner les tables d'échantillons préparées pour l'ensemble de données de calibrage.

## Créer un modèle de qualification

Nom du modèle de qualification

Tables d'échantillons

Tables d'échantillons filtrés

Importation XDS/DS

## Ensemble de données de calibrage

Nom	Enregistré

**i** Les échantillons peuvent également être sélectionnés via une table d'échantillons filtrés. En outre, il est possible d'importer des échantillons provenant d'appareils XDS et DS (*voir "Changement d'analyseur XDS/DS (quantification)", Chapitre 11.6, page 187*).

**i** La sélection d'échantillons peut être adaptée ultérieurement.


### 3 Sélectionner des échantillons de validation (optionnel)

- Cliquer sur **Ajouter des jeux de données validées**.
- Attribuer les tables d'échantillons préparées pour les ensembles de données validées à l'ensemble de données validées positif ou négatif en cochant la case correspondante.

## Ensemble de données validées

Nom	Enregistré	Positif	Négatif
		<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
		<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

### 4 Créer un modèle de qualification

- Cliquer sur **[Créer]**.
- Pour sauvegarder un modèle : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## 7.2 Sélectionner des échantillons et répartir un ensemble de données

L'onglet du modèle de qualification affiche tout en haut une barre de navigation horizontale, le **navigateur**. Le navigateur passe par les étapes ultérieures du développement de modèle.



### Représentation de spectres

Dans les 3 étapes du processus, chacun des spectres apparaît sous forme de courbes, de points ou de lignes de tableau.

Les spectres sélectionnés sont mis en évidence simultanément dans toutes les représentations et dans toutes les étapes du processus.

### Tableaux et diagrammes

La manipulation des tableaux et des diagrammes est décrite en annexe :

- Manipuler des tableaux (*voir "Manipuler des tableaux", Chapitre 11.2, page 174*)
- Manipuler des diagrammes (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*)

### Étape du processus 'Sélectionner des échantillons'

La partie **Ensemble des données de calibrage** répertorie les spectres dans l'ensemble de données de calibrage :

Liste des spectres						◀▶	+ -	?	↔
			Nom de l'échantillon	Nom du sous-échantillon	Source				

si des échantillons ont été sélectionnés pour les ensembles de données validées, leurs spectres apparaissent dans la partie **Ensemble des données validées**.

Les icônes suivantes symbolisent l'attribution aux ensembles de données :

Le spectre est attribué à l'ensemble de données de calibrage.



Le spectre est attribué à l'ensemble de données validées positif.



Le spectre est attribué à l'ensemble de données validées négatif.



Le spectre a été attribué manuellement à l'ensemble de données.



Le spectre a été attribué automatiquement à l'ensemble de données.



Le spectre a été enregistré dans le logiciel OMNIS.



Le spectre est importé depuis un fichier externe.

Dans la partie **Superposition des spectres**, les spectres dans l'ensemble de données de calibrage sont représentés en **bleu**, les spectres dans l'ensemble de données validées positif en **vert** et les spectres dans l'ensemble de données validées négatif en **rouge**.

L'étape du processus **Sélectionner des échantillons** permet ce qui suit :

- **Adapter la sélection d'échantillons**

Ajouter d'autres spectres ou en supprimer.

- **Diviser l'ensemble de données**

Division automatique ou manuelle de l'ensemble de données :

- **Ensemble de données de calibrage** : le modèle est calculé avec les spectres de l'ensemble de données de calibrage.
- **Ensembles de données validées** : les spectres des ensembles de données validées servent exclusivement à valider le modèle.



Un modèle peut être développé sans ensemble de données validées, par exemple si seul un nombre limité d'échantillons est disponible dans une première phase ou si la validation est effectuée exclusivement avec un ensemble de données externe.



### Adapter la sélection d'échantillons

**Condition préalable :**


- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan (voir "Créer un modèle de qualification", Chapitre 7.1, page 126).

- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

### 1 Ajouter ou supprimer des spectres

- Ajouter des spectres : cliquer sur  dans la partie **Ensemble des données de calibrage** ou **Ensemble des données validées**.
- Retirer des spectres : sélectionner les spectres et cliquer sur .  
Remarque : les échantillons correspondants, spectres compris, sont conservés dans la base de données.

### 2 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches [CTRL]+[S].

## Répartir automatiquement un ensemble de données

La division comprend tous les spectres de l'ensemble de données de calibrage et des deux ensembles de données validées. La division offre les possibilités suivantes :

- Création automatique d'un ensemble de données validées négatif (optionnelle)  
Les spectres de l'ensemble de données validées négatif sont déterminés par la détection des valeurs atypiques (valeurs atypiques spectrales).
- Création automatique d'un ensemble de données validées positif (optionnelle)  
Les spectres restants peuvent être automatiquement répartis dans l'ensemble de données de calibrage et dans l'ensemble de données validées positif.

Les échantillons peuvent également être attribués à tout moment manuellement.

### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

### 1 Appeler une répartition de l'ensemble de données

- Dans la partie **Ensemble des données de calibrage**, cliquer sur .

Le dialogue **Répartition des jeux de données** s'ouvre.

## 2 Déterminer un ensemble de données validées négatif (optionnel)

- Pour attribuer automatiquement des valeurs atypiques spectrales à l'ensemble de données validées négatif, activer le bouton à bascule **Déterminer des spectres négatifs**.
  - Au besoin, adapter la **Pertinence**. Plus la pertinence est élevée, plus on détecte de valeurs spectrales atypiques. Les valeurs types sont 5 % ou 1 %.

**i** La détermination de spectres négatifs doit être utilisée avec précaution. Une pertinence élevée peut améliorer la fiabilité des résultats positifs. Cependant, de plus nombreux échantillons positifs peuvent être négligés et classés à tort comme négatifs.

Les spectres dans l'ensemble de données validées négatif déterminé doivent être examinés pour déterminer s'ils sont réellement des valeurs atypiques. Le graphique d'influence et le graphique des scores sont utiles pour cette opération.

## 3 Déterminer un ensemble de données validées (optionnel)

La répartition automatique garantit que l'ensemble de données de calibrage et celui de données validées positif sont représentatifs de l'ensemble des données de base et indépendants l'un de l'autre.

- Pour attribuer automatiquement les spectres à l'ensemble de données validées positif, activer le bouton à bascule **Déterminer des spectres positifs**.
  - Dans le champ **Pourcentage**, définir le pourcentage de spectres pour l'ensemble de données validées positif, p. ex. entre 20 % et 30 %.

## 4 Définir des options

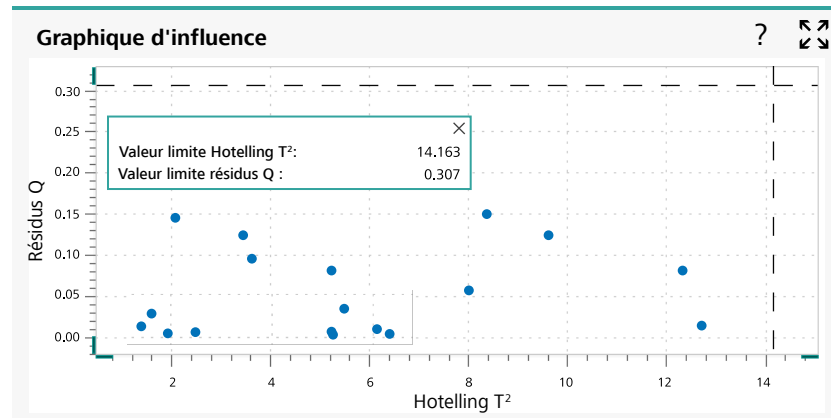
Définir des options pour la répartition de l'ensemble de données :

- **Appliquer le paramétrage** : appliquer le prétraitement de données et la sélection des longueurs d'onde aux spectres (*voir "Paramétrer un modèle de qualification", Chapitre 7.5, page 137*).  
**Remarque** : les modifications ultérieures du paramétrage n'ont aucun effet sur l'attribution des ensembles de données. Sauf si l'ensemble de données est à nouveau réparti.
- **Conserver des spectres négatifs** : garder les spectres déjà présents dans l'ensemble de données validées négatif et ne pas en tenir compte lors de la répartition. Cette option peut conduire à une augmentation de l'ensemble de données validées négatif, même si la **Pertinence** reste inchangée.



## Graphique d'influence

Le **Graphique d'influence** décrit les propriétés caractéristiques des spectres et aide à déterminer les valeurs spectrales atypiques pour l'ensemble de données validées négatif.



### **i** Manipuler un diagramme

La représentation du diagramme peut être adaptée et un ou plusieurs points peuvent être sélectionnés (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*).

Chaque point représente un spectre. Des valeurs élevées du  $T^2$  de Hotelling des résidus Q signalent d'éventuelles valeurs atypiques.

Des spectres à valeurs élevées du  $T^2$  de Hotelling indiquent une composition extrême des échantillons concernés.

Des spectres à hauts résidus Q indiquent la présence de composants chimiques inhabituels dans les échantillons concernés.

**i** Les lignes en pointillé indiquent les valeurs critiques (limites) pour la pertinence définie. Si aucun spectre négatif n'a été déterminé pour la répartition automatique de l'ensemble de données, la pertinence est de 5 %.

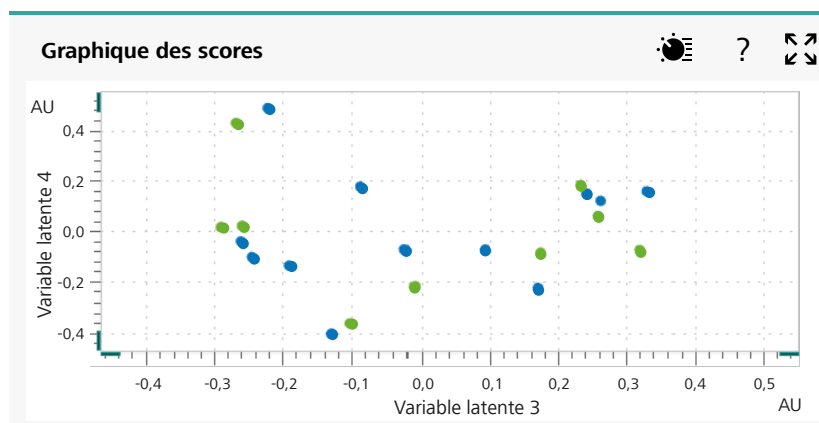
La figure du haut ne montre aucun spectre potentiellement négatif. Tous les points se trouvent à l'intérieur des lignes pointillées.

### Graphique des scores

**i** Alors que la valeur  $T^2$  de Hotelling d'un spectre ramène les scores de tous les composants principaux à une seule valeur, le graphique des scores permet une analyse encore plus détaillée des scores.

Chaque point dans le graphique des scores représente un spectre. Les scores des deux premiers composants principaux peuvent être lus sur l'axe x et l'axe y. Les scores sont normalisés, chaque composant principal a le même poids.


Avec  **Propriétés**, on peut également afficher toute autre paire de composants principaux.



## Répartir un ensemble de données manuellement (option)

### Condition préalable :


- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

 Si une répartition automatique de l'ensemble de données a été effectuée avant la répartition manuelle, le **Graphique d'influence** et le **Graphique des scores** sont disponibles.

### 1 Réaffecter des spectres

- Sélectionner les spectres dans l'une des parties.  
Exemple de sélection dans le graphique d'influence :
  - Ouvrir la partie **Graphique d'influence**.
  - Sélectionner un ou plusieurs points dans le graphique d'influence (*voir « Sélectionner plusieurs points ou courbes », page 177*).
  - Ouvrir le menu contextuel d'un clic droit sur l'un des points sélectionnés. Affecter les spectres à un ensemble de données :
    - Ensemble de données validées positif**
    - Ensemble de données validées négatif**
    - Ensemble des données de calibrage**

### 2 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

## 7.3 Calculer un modèle de qualification

Un premier modèle peut être calculé sans paramétrage. Cela donne un critère de comparaison pour les résultats de validation. L'influence d'un paramétrage ultérieur peut être mieux évaluée.

**i** Si le bruit de fond ou d'autres artefacts rendent certaines longueurs d'onde inutilisables, celles-ci peuvent être directement exclues (*voir "Paramétrer un modèle de qualification", Chapitre 7.5, page 137*).

### Calculer un modèle

#### Condition préalable :

- Dans la plage de travail **Calibrage et évaluation**, le modèle de qualification est ouvert et au premier plan.

#### 1 Démarrer un calcul

- Calculer le modèle en cliquant sur **[Calculer]**.

**i** Si le bouton **[Calculer]** est inactif, l'une des causes peut être :

- Le modèle a déjà été calculé et il n'y a pas eu de changement depuis.
- Une des étapes du processus contient une entrée erronée. Dans le navigateur, l'étape du processus de la partie concernée est indiquée en **rouge**. Le champ contenant l'entrée incorrecte est entouré de rouge.

## 7.4 Valider un modèle de qualification

L'étape du processus **Valider un modèle de qualification** permet une validation avec les échantillons suivants :

- **Échantillons dans l'ensemble de données de calibrage**  
Ces échantillons ont été utilisés pour créer le modèle. Une classification correcte par le modèle est donc plus facile que pour d'autres échantillons.
- **Échantillons dans l'ensemble de données validées positif et négatif (le cas échéant)**  
Ces échantillons sont indépendants du modèle. Leurs résultats de validation constituent une meilleure référence pour la qualification d'échantillons inconnus.

### Résultat de validation d'un échantillon

Le modèle de qualification détermine un résultat (positif ou négatif) pour chaque échantillon. On attend un résultat positif pour les échantillons dans l'ensemble de données de calibrage et dans celui de données validées positif. Pour les échantillons dans l'ensemble de données validées négatif, on attend un résultat négatif. Le logiciel OMNIS compare le résultat déterminé par le modèle avec le résultat attendu. Il en découle le résultat de validation :

- **Réussie** : le résultat déterminé par le modèle correspond au résultat attendu.
- **Échec** : le résultat déterminé par le modèle ne correspond pas au résultat attendu.

### Partie Aperçu de validation

La partie **Aperçu de validation** récapitule les résultats pour les échantillons de l'ensemble de données de calibrage et, le cas échéant, des ensembles de données validées.

À gauche se trouve un aperçu de tous les échantillons de calibrage et de validation :

Total	
% de succès	% d'échantillons correctement prédits
Succès	Nombre d'échantillons correctement prédits
Échec	Nombre d'échantillons non correctement prédits
Nombre de spectres	Nombre de spectres dans l'ensemble de données de calibrage et dans les deux ensembles de données validées.

Sur le côté droit se trouve un aperçu de chacun des ensembles de données.

### Partie Résultats de validation

La partie **Résultats de validation** présente les résultats détaillés de chaque échantillon. Les échantillons de tous les ensembles de données sélectionnés dans la partie **Aperçu de validation** sont affichés.

### Optimiser un modèle de qualification

Les mesures suivantes peuvent aider à améliorer le modèle de qualification :

- Adapter le prétraitement des données (*voir "Prétraitement des données", Chapitre 7.5.2, page 140*).
- Adapter les gammes de longueurs d'ondes (*voir "Sélection des longueurs d'onde", Chapitre 7.5.1, page 138*).

Pour une nouvelle division de l'ensemble de données, le modèle de qualification peut être adapté aux exigences en déterminant des spectres négatifs :

- Une pertinence élevée peut augmenter la fiabilité des résultats positifs. Cela signifie moins de faux positifs, mais davantage d'échantillons positifs sont négligés.
- Une pertinence basse (ou l'abandon de la détermination des spectres négatifs) peut diminuer le nombre d'échantillons positifs négligés. Cela signifie moins de faux négatifs, mais davantage d'échantillons négatifs sont classés à tort comme positifs.

## 7.5 Paramétrer un modèle de qualification

L'étape **Paramétrer un modèle de qualification** du processus permet d'optimiser les spectres. Les artefacts et les non-linéarités sont corrigés. Effectué correctement, le paramétrage améliore l'exactitude et la robustesse du modèle.

Le paramétrage est appliqué à :

- tous les spectres de l'ensemble de données de calibrage
- tous les spectres des deux ensembles de données validées

**i** Pour la prédiction dans la plage de travail **Échantillons**, le spectre d'un échantillon est enregistré et évalué avec un modèle. Le paramétrage défini dans le modèle est également appliqué à ce spectre.

Deux possibilités de paramétrage sont disponibles :

- Définir les gammes de longueurs d'ondes à utiliser.
- Appliquer des prétraitements de données pour donner aux spectres une forme plus appropriée.

L'examen visuel des spectres commence à l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

### Représenter des spectres

**Condition préalable :**

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

#### 1 Étape du processus 'Sélectionner des échantillons'

- Dans le navigateur, cliquer sur l'étape **Sélectionner des échantillons** du processus.

Dans cette étape du processus, les spectres peuvent être examinés à la fois sous forme de tableau et de courbe. Si une répartition

automatique de l'ensemble de données a été effectuée, le graphique d'influence et le graphique des scores restent également disponibles.

## 2 Examiner des spectres

- Manipuler des tableaux (voir "*Manipuler des tableaux*", Chapitre 11.2, page 174)
- Manipuler des diagrammes (voir "*Manipuler des diagrammes*", Chapitre 11.3, page 175)

### Autres étapes

- Sélection des longueurs d'onde (voir "*Sélection des longueurs d'onde*", Chapitre 7.5.1, page 138)
- Définir le prétraitement des données (voir "*Prétraitement des données*", Chapitre 7.5.2, page 140)

### 7.5.1 Sélection des longueurs d'onde

Une sélection des longueurs d'onde peut améliorer le modèle de qualification. Exemple : si du bruit de fond est visible à des valeurs d'absorbance élevées, les gammes de longueurs d'ondes concernées peuvent être exclues.

Le modèle utilise les gammes de longueur d'ondes définies. Si aucune gamme de longueurs d'ondes n'est définie, le modèle utilise toutes les longueurs d'onde.

#### Définir des gammes de longueurs d'onde

##### Condition préalable :

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.

## 1 Étape du processus 'Paramétrer un modèle de qualification'

- Dans le navigateur, cliquer sur **Paramétrer un modèle de qualification**.

## 2 Ajouter une gamme de longueurs d'ondes



- Dans la partie **Gamme de longueurs d'onde**, ajouter une gamme de longueur d'ondes en cliquant sur .

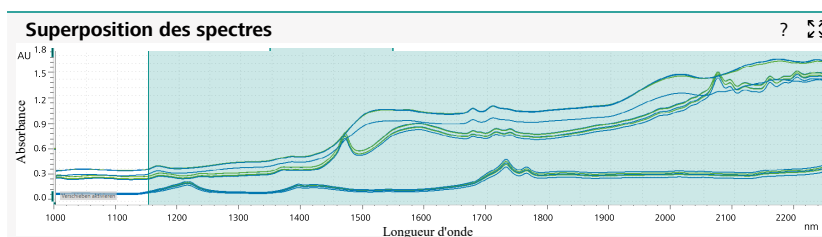
Gamme de longueurs d'onde			?	↔
#	Longueur d'onde initiale	Longueur d'onde finale	☰	
1	1000.0 nm	2250.0 nm	✕	

Une gamme de longueur d'ondes est ajoutée. La gamme couvre initialement toutes les longueurs d'ondes.

### 3 Définir une gamme de longueurs d'onde


Définir la gamme de longueurs d'ondes de l'une des manières suivantes :

- Pour définir la gamme de longueur d'ondes en saisissant des chiffres, entrer les **Longueur d'onde initiale** et les **Longueur d'onde finale** dans les champs de saisie correspondants.
- Pour définir la gamme de longueur d'ondes dans le diagramme, procéder comme suit :
  - Dans la partie **Superposition des spectres**, cliquer sur **[Activer le décalage]**.
  - Déplacer le curseur vers le bord gauche de la partie en surbrillance jusqu'à ce que le curseur s'affiche ainsi : .
  - En maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé, déplacer le bord gauche vers la position correspondante.
  - Faire de même sur le côté droit de la partie en surbrillance.
  - Pour déplacer une gamme de longueur d'onde, déplacer le curseur sur la gamme jusqu'à ce qu'il s'affiche ainsi : .
  - Déplacer la partie vers la gauche ou la droite en maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé.
  - Cliquer sur **[Désactiver le décalage]**.



Dans l'image, une gamme de longueur d'ondes de 1150 à 2250 nm est définie. Cette partie est utilisée par le modèle.


### 4 Ajouter d'autres gammes de longueurs d'ondes

D'autres gammes de longueurs d'ondes peuvent être ajoutées en cliquant sur .

**i Les gammes de longueurs d'ondes ne doivent pas se chevaucher**

Une nouvelle gamme de longueurs d'ondes chevauche d'abord les gammes de longueurs d'ondes existantes. Adapter la gamme de longueur d'ondes de sorte à éliminer le chevauchement.

**5 Sauvegarder un modèle**

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches [CTRL]+[S].

**i** Si la nouvelle sélection des longueurs d'onde créée lors de la division de l'ensemble de données doit être prise en compte, il est possible de rediviser l'ensemble de données.

**7.5.2 Prétraitement des données**

Un prétraitement approprié des données peut améliorer le modèle de qualification. Exemple : les déplacements de la ligne de base ne contiennent pas d'informations pertinentes pour la plupart des applications et peuvent être supprimés.

**Définir le prétraitement des données****Condition préalable :**

- Le modèle s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan.
- Le navigateur est à l'étape **Paramétrer un modèle de qualification** du processus.

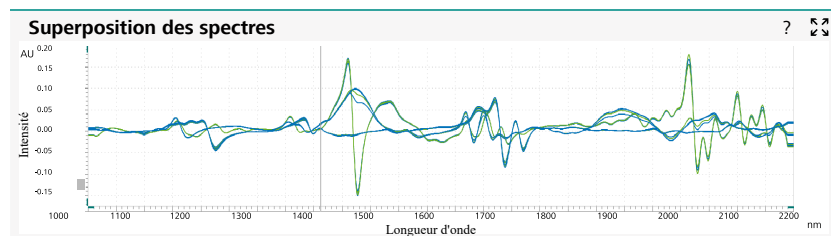
**1 Ajouter une étape de prétraitement des données**

- Dans la partie **Prétraitement des données**, ajouter une étape de prétraitement des données en cliquant sur .


- Sélectionner le type de prétraitement des données dans le champ **Prétraitement des données** et remplir les champs y afférents. Exemple de Gap-Segment avec une dérivée du premier ordre qui annule les décalages constants (indépendants de la longueur d'onde) de la ligne de base :


Les spectres prétraités et sélectionnés à l'étape 1 s'affichent immédiatement dans la partie **Superposition des spectres**.



Après le prétraitement des données, les spectres ont un aspect différent, par exemple :



## 2 Ajouter d'autres étapes de prétraitement des données


D'autres étapes de prétraitement des données peuvent être ajoutées en cliquant sur .

 Si on utilise plusieurs étapes de prétraitement des données, l'ordre peut être déterminant. Utiliser Gap-Segment ou Savitzky-Golay de préférence avant SNV (Standard Normal Variate) et SNV avant detrend.

En cliquant sur  et , les lignes peuvent être déplacées vers le haut ou vers le bas, ce qui permet de déterminer l'ordre.

## 3 Sauvegarder un modèle

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

 Si les prétraitements des données nouvellement créés doivent être pris en compte lors de la division de l'ensemble de données, l'ensemble de données peut être divisé à nouveau.

## 7.6 Publier un modèle de qualification


Pour qu'un modèle puisse être utilisé pour des déterminations, il doit être publié. Cela permet de faire évoluer le modèle sans affecter la version publiée ni les déterminations mises en œuvre avec celle-ci.


### Publier un modèle de qualification

#### Condition préalable :

- Le modèle est calculé et sauvegardé.
- Le modèle est ouvert.

#### 1 Ouvrir un dialogue

- Cliquer sur  pour ouvrir la boîte de dialogue **Publier un modèle de qualification**.

 Si le modèle a déjà été publié auparavant et utilisé dans des méthodes, celles-ci peuvent être mises à jour automatiquement en cochant la case **Mettre à jour des méthodes**.

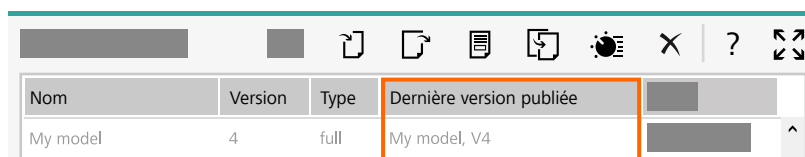
**Remarque** : pour ne pas être mis à jour automatiquement :

- Méthodes ouvertes
- Méthodes signées et publiées
- Si le filtrage des accès aux données est activé : méthodes sans accès aux données de l'utilisateur actuellement connecté

#### 2 Publier

- Cliquer sur **[Publier]** pour publier le modèle.

La dernière version publiée s'affiche sous **Calibrage et évaluation ► Modèles de qualification** :



Nom	Version	Type	Dernière version publiée
My model	4	full	My model, V4

La fonction **PREDICT** peut maintenant accéder à la version publiée du modèle.

## 8 Hiérarchie des modèles

Une hiérarchie des modèles permet ce qui suit :

- **Structuration hiérarchique des modèles d'identification**  
Si un modèle d'identification distingue mal des produits similaires, cette distinction peut être transférée à des sous-modèles spécifiquement optimisés.  
Exemple : un modèle d'identification comportant 4 produits distingue mal les produits similaires que sont le fructose et le glucose. Si le fructose et le glucose sont réunis dans un groupe de produits « sucre », le modèle principal est capable de faire la distinction entre le sucre et les deux autres produits. Si un échantillon est identifié comme étant du sucre, un sous-modèle prend en charge la classification entre le fructose et le glucose.  
Au besoin, d'autres niveaux de hiérarchie peuvent être ajoutés.
- **Liaison des modèles de quantification à des produits**  
Des échantillons identifiés peuvent être analysés de manière quantitative. Pour chaque paramètre d'intérêt, un modèle de quantification est lié avec le produit correspondant. En option, il est possible d'appliquer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine.
- **Structuration hiérarchique des modèles de quantification**  
Dans certains cas, une structure hiérarchique des modèles de quantification permettra d'obtenir une meilleure capacité prédictive que celle d'un modèle de quantification unique. Chaque modèle de quantification secondaire est alors optimisé pour une partie de l'intervalle de valeurs de référence du modèle de niveau supérieur.  
Exemple : si le modèle de quantification de niveau supérieur fournit un résultat  $< 5$ , un modèle de quantification secondaire est utilisé pour des valeurs  $< 5$  et détermine le résultat final. De même pour des résultats  $\geq 5$ .
- **Hiérarchie des modèles à partir de modèles de quantification**  
Un ou plusieurs modèles de quantification avec ou sans modèles de quantification secondaires peuvent être répertoriés dans une hiérarchie des modèles. Il suffit alors dans une méthode d'une seule fonction **PREDICT** pour prédire tous les paramètres d'intérêt.

Une hiérarchie des modèles fournit selon l'utilisation :

- Une **identification** d'un échantillon inconnu (p. ex., le fructose). Le résultat est un nom de produit.
  - En option, selon le produit obtenu, une ou plusieurs **quantifications**.

- Une **vérification** de l'appartenance d'un échantillon (p. ex. fructose) au produit. Le résultat est oui ou non – vérification réussie ou échouée.
  - En option, selon le produit obtenu et indépendamment du résultat de la vérification, une ou plusieurs **quantifications**.
- Une ou plusieurs **quantifications**.

## 8.1 Développer une hiérarchie des modèles

### 8.1.1 Développer des modèles

Il faut d'abord développer les modèles d'identification et/ou de quantification à utiliser dans la hiérarchie des modèles.

#### Développer des modèles d'identification

Si la hiérarchie des modèles doit contenir des modèles d'identification, développer ces modèles de la manière suivante.

##### 1 Modèle principal

- Développer un modèle d'identification pour tous les produits existants (*voir "Modèle d'identification", Chapitre 6, page 107*).
- Si certains produits sont difficiles à distinguer les uns des autres, ceux-ci peuvent être regroupés en un seul groupe de produits :
  - À l'étape du processus **Sélectionner des échantillons** dans la partie **Liste de produits**, définir un nom commun pour les produits à regrouper dans la colonne **Groupe de produits**. Dans l'exemple ci-après, les produits **C1** et **C2** forment ensemble le groupe de produits **C**:

Liste des produits		
Produit	Nombre de spectres	Groupe de produits
A		
B		
C1		C
C2		C


Le modèle traite alors le groupe de produits **C** comme un produit unique. Le modèle ne classe plus entre A/B/C1/C2, mais uniquement entre A/B/C.

 Si nécessaire, d'autres groupes de produits peuvent être créés.

## 2 Sous-modèles

Développer un modèle d'identification pour chaque groupe de produits du modèle principal (*voir "Modèle d'identification", Chapitre 6, page 107*).

Dans l'exemple ci-dessus, un sous-modèle est développé avec tous les échantillons appartenant aux produits **C1** et **C2**. Pour cela il convient d'utiliser les mêmes échantillons que dans le modèle principal pour le groupe de produits **C**.

 Il est possible de créer des sous-modèles pour les groupes de produits définis par un clic droit sur la **Liste de produits**.

## 3 Autres niveaux de hiérarchie

Si un sous-modèle contient plus de 2 produits, il est possible, si nécessaire, de regrouper plusieurs produits en un seul groupe de produits. Un modèle d'identification distinct est à nouveau développé pour ce groupe de produits. Des niveaux de hiérarchie supplémentaires sont créés de cette manière.

### Développer des modèles de quantification

Si la hiérarchie des modèles doit contenir des modèles de quantification, développer ces modèles de la manière suivante.

#### 1 Modèles de quantification pour chaque paramètre d'intérêt

Pour tous les paramètres d'intérêt quantitatifs, développer les modèles de quantification correspondants (*voir "Modèle de quantification", Chapitre 5, page 67*).

#### 2 Modèles de quantification secondaires

Développer des modèles de quantification secondaires si des sous-modèles de quantification sont requis pour un modèle de quantification.

## 8.1.2 Insérer des modèles dans la hiérarchie des modèles

**Condition préalable** : tous les modèles à utiliser dans la hiérarchie des modèles sont créés (*voir "Développer des modèles", Chapitre 8.1.1, page 144*) et publiés.

Les prochaines étapes consistent à créer la hiérarchie des modèles et à y insérer des modèles :

- Insérer un modèle principal publié ou des modèles de quantification publiés.

- Lier des sous-modèles publiés à des groupes de produits.
- Lier des modèles de quantification publiés à des produits.
- Lier des modèles de quantification secondaires publiés à des modèles de quantification de niveau supérieur.


## Créer une hiérarchie des modèles

### 1 Générer une hiérarchie des modèles

- Cliquer sur  dans **Calibrage et évaluation** ► **Hiérarchies des modèles**.

Une nouvelle hiérarchie des modèles apparaît dans un nouvel onglet.


### 2 Nommer une hiérarchie des modèles

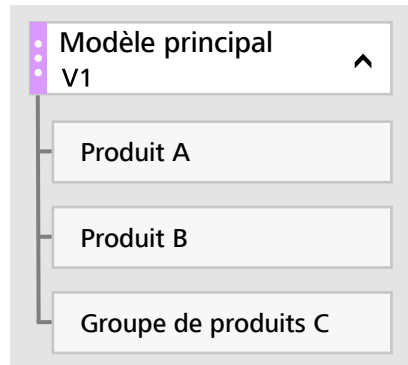
- Cliquer sur  dans la barre d'outils supérieure pour ouvrir la fenêtre **Propriétés**.
- Saisir le nom souhaité dans le champ **Nom** sous **Propriétés** ► **Généralités**.

## Insérer des modèles d'identification dans une hiérarchie des modèles



Si la hiérarchie des modèles doit contenir des modèles d'identification, insérer ces modèles de la manière suivante.

### 1 Ajouter un modèle principal

- L'étape **Éditer la hiérarchie des modèles** du processus comporte l'éditeur de hiérarchie des modèles. Au départ, l'éditeur de hiérarchie des modèles est encore vide.
- Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **Bibliothèque**.
- Sous **Bibliothèque** ► **Modèle d'identification**, glisser le modèle principal vers la droite et l'insérer dans l'éditeur de hiérarchie des modèles par glisser-déposer.



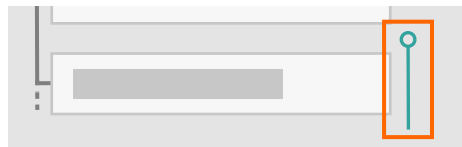
 La flèche verte sert à déployer et refermer les produits.

-  Si un modèle est introuvable dans la bibliothèque :
- S'assurer que le modèle est publié.
  - Mettre à jour la vue en cliquant sur  dans la bibliothèque.

## 2 Lier des sous-modèles à des groupes de produits

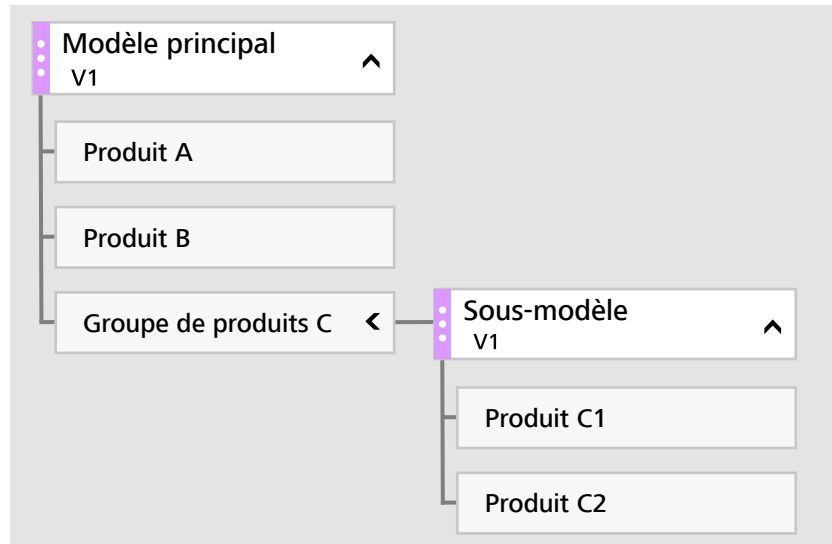
Si des groupes de produits ont été définis dans le modèle principal :

- Sous **Bibliothèque** ► **Modèle d'identification**, insérer le sous-modèle à côté du groupe de produits associé par glisser-déposer. Une ligne verticale verte indique la position d'insertion :



- **Autres sous-modèles et niveaux de hiérarchie**  
De la même façon, lier d'autres sous-modèles au groupe de produits correspondant.

**Exemple** : un sous-modèle est lié à un groupe de produits.




**i** La flèche horizontale sert à déployer et refermer le sous-modèle.

**i** Des sous-modèles peuvent être liés à des groupes de produits ou à des produits.

### 3 Créer des versions de modèles

Les modèles contenus dans la hiérarchie des modèles restent inchangés, même si une nouvelle version est publiée pour un modèle. Si nécessaire, retirer le modèle correspondant de la hiérarchie des modèles et insérer une version plus récente.

### 4 Sauvegarder une hiérarchie des modèles

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches [CTRL]+[S].

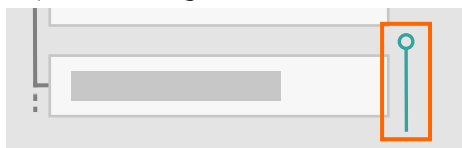
## Insérer des modèles de quantification dans une hiérarchie des modèles

Si la hiérarchie des modèles doit contenir des modèles de quantification, insérer ces modèles de la manière suivante.

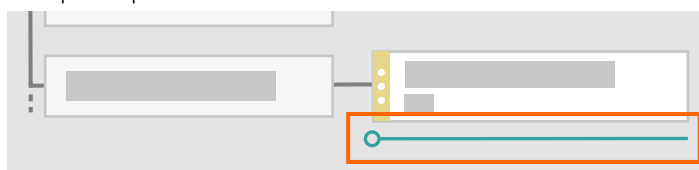
### 1 Hiérarchie des modèles avec modèles d'identification

Si la hiérarchie des modèles contient également des modèles d'identification, les modèles de quantification doivent être liés à des produits :

- Sous **Bibliothèque** ► **Modèles de quantification**, insérer le modèle de quantification à côté du produit associé par glisser-déposer. Une ligne verticale verte indique la position d'insertion :

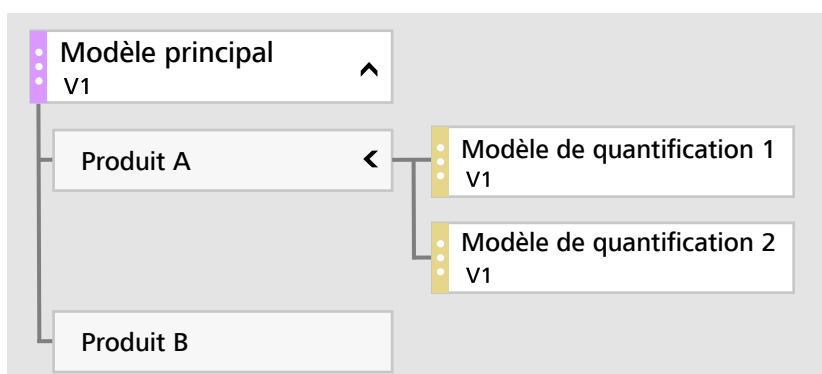


- Si plusieurs paramètres d'intérêt quantitatifs doivent être prédits pour le même produit :
  - Insérer les autres modèles de quantification les uns sous les autres par glisser-déposer. Une ligne horizontale verte indique la position d'insertion :



- Si des analyses quantitatives sont prévues pour d'autres produits, lier les modèles de quantification correspondants de la même manière.


**Exemple** : 2 modèles de quantifications sont liés avec un produit.



**i** Des modèles de quantification peuvent être liés à des produits ou à des groupes de produits.

## 2 Hiérarchie des modèles sans modèles d'identification

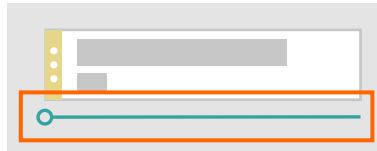
Si la hiérarchie des modèles ne doit contenir que des modèles de quantification :


- L'étape **Éditer la hiérarchie des modèles** du processus comporte l'éditeur de hiérarchie des modèles. Au départ, l'éditeur de hiérarchie des modèles est encore vide.
- Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **Bibliothèque**.

- Sous **Bibliothèque** ► **Modèles de quantification**, glisser le premier modèle de quantification vers la droite et l'insérer dans l'éditeur de hiérarchie des modèles par glisser-déposer.



- Si la hiérarchie des modèles doit prédire plusieurs paramètres d'intérêt, insérer les autres modèles de quantification les uns sous les autres par glisser-déposer. Une ligne horizontale verte indique la position d'insertion :

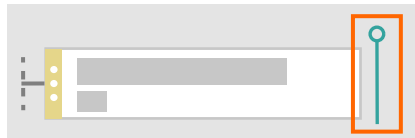


- **i** Si un modèle est introuvable dans la bibliothèque :
  - S'assurer que le modèle est publié.
  - Mettre à jour la vue en cliquant sur  dans la bibliothèque.

### 3 Modèles de quantification secondaires

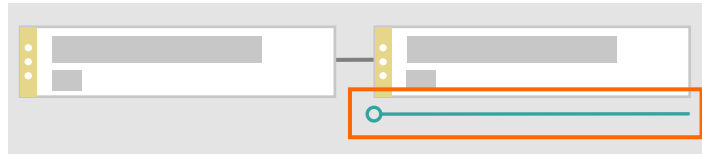
Procéder de la manière suivante pour insérer des modèles de quantification secondaires dans la hiérarchie des modèles :

- Sous **Bibliothèque** ► **Modèles de quantification**, insérer le modèle de quantification secondaire à côté du modèle de quantification de niveau supérieur par glisser-déposer. Une ligne verticale verte indique la position d'insertion :



- Dans le dialogue **Ajouter une condition**, définir la condition selon laquelle le modèle de quantification secondaire doit être appliqué. La condition doit comprendre une partie des valeurs prédites du modèle de quantification de niveau supérieur, par ex.  $< 5$ .  
Dès l'ajout de la condition, le modèle de quantification secondaire est lié au modèle de quantification de niveau supérieur.

- Insérer les autres modèles de quantification secondaires les uns sous les autres par glisser-déposer. Une ligne horizontale verte indique la position d'insertion :



**Remarque** : si aucun modèle de quantification secondaire n'est requis pour un intervalle numérique, il est possible d'utiliser le modèle de niveau supérieur en remplacement et de le relier à lui-même.

**Conditions préalables** : les conditions des modèles de quantification secondaires doivent répondre aux conditions préalables suivantes :

- Les conditions doivent englober l'ensemble des nombres rationnels au complet.
- Les conditions ne doivent pas se chevaucher.

Exemple utilisant des conditions correctes :


- Condition pour le modèle A1 (valeur unique) :  $< 5$
- Condition pour le modèle A2 (intervalle) :  $\geq 5$  et  $< 10$
- Condition pour le modèle A3 (valeur unique) :  $\geq 10$

Si les conditions préalables ne sont pas remplies, la hiérarchie des modèles peut toutefois être enregistrée, mais ne peut pas être publiée.

**Vérifier des conditions** :


- Cliquer sur **Validation interne**.
- Les conditions préalables sont respectées si aucun message d'erreur ne s'affiche.
- Par contre, un message d'erreur indique où et pourquoi les conditions préalables ne sont pas respectées.

**Consulter ou modifier des conditions** :


- Sélectionner un modèle de quantification secondaire.
  - Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
  - Ouvrir la sous-partie Condition.
  - Sélectionner les modèles de quantification secondaires successivement pour que la condition respective s'affiche. Au besoin, adapter la condition.
- Si des modèles de quantification secondaires sont prévus pour d'autres modèles de quantification, les lier de la même manière.

#### 4 Corrections de pente/d'ordonnée à l'origine

Modifier tous les modèles de quantification nécessitant une correction de pente/d'ordonnée à l'origine de la manière suivante :

- Sélectionner un modèle de quantification.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Paramètres**, définir la correction de pente/d'ordonnée à l'origine.




Le symbole  indique que le modèle de quantification est lié à une correction de pente/d'ordonnée à l'origine. Le résultat corrigé est utilisé lors de la vérification des conditions concernant d'éventuels modèles de quantification secondaires.

### 5 Créer des versions de modèles et de corrections de pente/d'ordonnée à l'origine

Les modèles contenus dans la hiérarchie des modèles et des corrections de pente/d'ordonnée à l'origine restent inchangés, même si une nouvelle version est publiée pour le modèle ou la correction de pente/d'ordonnée à l'origine. Si nécessaire, retirer le modèle correspondant ou la correction de pente/d'ordonnée à l'origine de la hiérarchie des modèles et insérer une version plus récente.

### 6 Sauvegarder une hiérarchie des modèles

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches [CTRL]+[S].

## 8.2 Valider une hiérarchie des modèles

### Hiérarchies des modèles avec modèles de quantification

Aucun modèle de quantification n'est évalué lors de la validation des hiérarchies des modèles. Il est toutefois vérifié que les conditions sont remplies dans le cas de modèles de quantification avec modèles de quantification secondaires :

- Les conditions doivent englober l'ensemble des nombres rationnels au complet.
- Les conditions ne doivent pas se chevaucher.

#### Vérifier des conditions

- Cliquer sur **Validation interne**.
- Les conditions préalables sont respectées si aucun message d'erreur ne s'affiche.
- Par contre, un message d'erreur indique où et pourquoi les conditions préalables ne sont pas respectées.

## Validations interne et externe

L'étape **Valider une hiérarchie des modèles** du processus propose 2 validations différentes pour les hiérarchies des modèles comportant des modèles d'identification :

- **Validation interne**  
La validation interne utilise l'ensemble de données de calibrage et, s'il existe, l'ensemble de données validées du modèle principal.
- **Validation externe**  
La validation externe utilise un ensemble de données externe distinct. Des échantillons sont recueillis et mesurés un autre jour pour l'ensemble de données externe, le cas échéant par une autre personne et avec un autre appareil.

### Valider une hiérarchie des modèles

#### Condition préalable :

- La hiérarchie des modèles est créée et s'ouvre dans la zone de travail **Calibrage et évaluation**, au premier plan (voir "*Développer une hiérarchie des modèles*", Chapitre 8.1, page 144).
- En cas de validation externe, un ensemble de données correspondant avec spectres et noms de produits est disponible (voir "*Enregistrer des spectres*", Chapitre 4.2, page 61).


#### 1 Passer à l'étape du processus 'Validation'

- Dans le navigateur, passer à l'étape du processus Validation en cliquant sur **Valider une hiérarchie des modèles**.

#### 2 Exécuter une validation interne ou externe

##### Validation interne

- Cliquer sur **Validation interne**.

 La validation interne n'utilise que les spectres du modèle principal (ensemble de données de calibrage et, le cas échéant, ensemble de données validées). Dans les sous-modèles, les valeurs atypiques et les spectres supplémentaires ne sont pas inclus.

##### Validation externe

- Cliquer sur **Validation externe**.
- Sélectionner des échantillons des Tables d'échantillons ou des Tables d'échantillons filtrés.  
La sélection doit inclure des échantillons avec un paramètre de produit. La colonne **Produit** répertorie les produits présents.



**i** Si la hiérarchie des modèles a déjà été publiée auparavant et utilisée dans des méthodes, ces méthodes peuvent être mises à jour automatiquement en cochant la case **Mettre à jour des méthodes**.

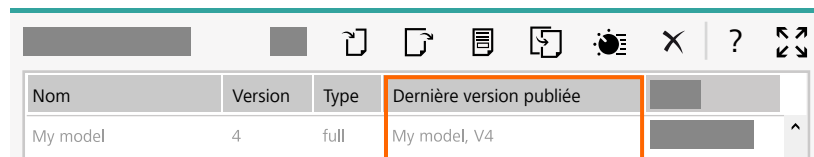
**Remarque** : pour ne pas être mis à jour automatiquement :

- Méthodes ouvertes
- Méthodes signées et publiées
- Si le filtrage des accès aux données est activé : méthodes sans accès aux données de l'utilisateur actuellement connecté

## 2 Publier

- Cliquer sur **[Publier]** pour publier la hiérarchie des modèles.

La dernière version publiée s'affiche sous **Calibrage et évaluation ► Hiérarchies des modèles** :




Nom	Version	Type	Dernière version publiée
My model	4	full	My model, V4


La fonction **PREDICT** peut maintenant accéder à la version publiée de la hiérarchie des modèles.

## 9 Prédiction

Lors de la prédiction, un modèle est appliqué au spectre d'un échantillon inconnu. Selon le modèle, il est possible de prédire :

- les paramètres d'intérêt (quantification)
- l'appartenance du produit ou le résultat de vérification (identification)
- le résultat de qualification (qualification)

 Les échantillons utilisés pour la prédiction doivent être traités et mesurés comme les échantillons utilisés pour créer le modèle.

 Une illustration des déroulements dans le logiciel OMNIS se trouve en annexe (*voir « Prédiction », page 195*).



### 9.1 Préparer une prédiction

Pour préparer la prédiction, établir une méthode, une procédure de travail, un profil d'échantillon et une table d'échantillons comme suit. La méthode contient une fonction **PREDICT**, qui établit une liaison avec le modèle.

#### Créer une méthode

##### 1 Adopter et nommer une méthode

Les spectres doivent être enregistrés avec les mêmes paramètres que les spectres utilisés pour le développement du modèle. Le plus simple est de reprendre la méthode utilisée pour le développement du modèle (*voir "Préparer un enregistrement de spectres", Chapitre 4.1, page 50*).

- Sélectionner la méthode utilisée pour le développement du modèle sous **Procédure ► Méthodes**.
- Dupliquer la méthode sélectionnée en cliquant sur .
- Ouvrir la méthode dupliquée en double-cliquant sur son nom.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés ► Généralités**, entrer un nom approprié dans le champ **Nom**.

##### 2 Insérer une fonction PREDICT

**PREDICT** établit une prédiction pour le spectre enregistré.

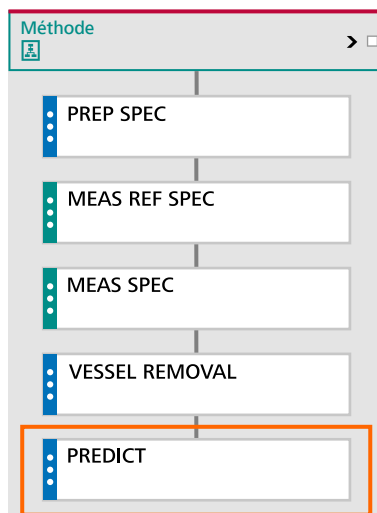
- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .

- Chercher la fonction **PREDICT** sous **Bibliothèque ► Fonctions** et l'insérer par glisser-déposer dans la méthode.

Respecter le bon ordre des fonctions :

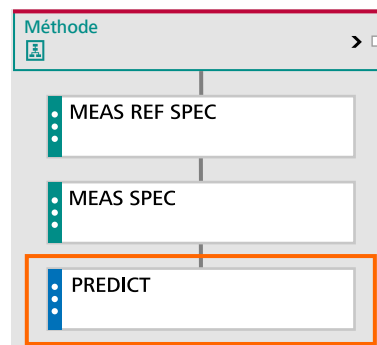
### Échantillons liquides

#### Structure de base



### Échantillons solides

#### Structure de base



La fonction **PREDICT** peut être également placée avant ou à côté de la fonction **VESSEL REMOVAL**.

### 3 Configurer les paramètres de fonction PREDICT

- Sélectionner la fonction PREDICT.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .



- Définir les paramètres de fonction sous **Propriétés** ► **Paramètres** :
  - **Référencer un spectre**  
Développer la liste **Nom de la fonction de mesure**. Sélectionner le nom de la fonction **MEAS SPEC** qui enregistre le spectre à évaluer.
  - **Référencer un modèle**  
Sélectionner la **Structure** du modèle : **Modèle unique** ou **Hierarchie des modèles**.
  - Si la structure **Modèle unique** a été sélectionné, sélectionner le **Type de modèle** : modèle de quantification, modèle d'identification ou modèle de qualification.
  - Sélectionner le modèle ou la hiérarchie des modèles publiés.  
**Quantification** : si nécessaire, sélectionner une correction de pente/d'ordonnée à l'origine.  
**Vérification** : si le modèle d'identification ou la hiérarchie des modèles doit être utilisé pour la vérification, activer l'option **Utiliser pour la vérification**.

#### 4 Plusieurs paramètres d'intérêt (quantification)

Si plus d'un paramètre d'intérêt doit être prédit pour chaque échantillon (voir "*Plusieurs paramètres d'intérêt (quantification)*", Chapitre 9.1.1, page 163), procéder comme suit :



- Insérer une fonction **PREDICT** pour chaque paramètre d'intérêt.  
**Remarque** : une hiérarchie des modèles nécessite une seule fonction **PREDICT**, indépendamment du nombre de modèles de quantification qu'elle contient.
- Pour chaque fonction **PREDICT** définir les paramètres de celle-ci comme ci-dessus. Toutes les fonctions **PREDICT** référencent le même spectre, mais un modèle de quantification différent pour chaque paramètre d'intérêt.

#### 5 Sauvegarder une méthode


- Cliquer sur  pour valider la méthode.
- Sauvegarder la méthode en cliquant sur  ou en appuyant sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## Établir une procédure de travail

### 1 Créer et nommer une procédure de travail


- Cliquer sur  dans **Procédure** ► **Procédures de travail**. La nouvelle procédure de travail apparaît dans un nouvel onglet.
- Ouvrir la fenêtre **Propriétés** en cliquant sur .
- Sous **Propriétés** ► **Généralités**, entrer un nom approprié dans le champ **Nom**.

### 2 Insérer une méthode



- Ouvrir la fenêtre **Bibliothèque** en cliquant sur .
- Insérer la méthode créée par glisser-déposer de **Bibliothèque** ► **Méthodes** dans la procédure de travail.



### 3 Définir un contrôle du résultat (en option)

-  Un contrôle du résultat peut être mis en place pour une **quantification**. Exemple : contrôler que le résultat de l'analyse se situe dans certaines limites, par exemple, dans l'intervalle de valeurs de référence des échantillons de calibrage. Pour l'**identification**, en général, on n'utilise pas de contrôle du résultat. Toutefois, si nécessaire, la variable de fonction '**IdentificationProbability.Final.nom de fonction**' peut être contrôlée de la même façon.

- Cliquer sur  dans **Procédure de travail**.
- Cliquer sur  pour ouvrir la fenêtre **Propriétés**.
- Sélectionner la sous-partie **Propriétés** ► **Contrôle du résultat**.
- Cliquer sur **[Contrôler les résultats]**.

- Ajouter un nouveau contrôle du résultat en cliquant sur   :
  - Ouvrir la boîte de dialogue pour la variable en cliquant sur **(x)**.
  - Sélectionner la variable de la fonction **PREDICT** pour la valeur prédite. Par exemple, pour la quantification : '**Predicted.Quantification.Result.Nom de fonction**'
  - Si une variable de la hiérarchie des modèles a été sélectionnée avec index, ajuster le cas échéant l'index dans le champ de saisie le plus haut, par ex. : '**Predicted.Quantification{2}.Result.Nom de fonction**' (voir "*Hiérarchie des modèles – Index pour modèles de quantification*", Chapitre 11.4.1, page 185)
  - Cliquer sur **[Appliquer]** pour prendre en compte la variable sélectionnée.
  - Définir les limites du modèle de quantification dans les champs **Limite inf. d'alerte**, **Limite sup. d'alerte**, **Limite inf. de contrôle** et **Limite sup. de contrôle**. Les limites ne doivent pas sortir de l'intervalle de valeurs de référence des échantillons de calibrage.  
**Remarque** : choisir pour les limites d'alerte une amplitude plus petite, située dans les limites de contrôle.  
 Identification : si la variable de fonction '**Identification-Probability.Final.nom de fonction**' est contrôlée, choisir la valeur 100 pour les deux limites supérieures.
  - En option, on peut définir des actions qui seront déclenchées si les limites ne sont pas respectées. Pour qu'une action puisse être sélectionnée, il faut qu'au moins une **séquence optionnelle Exécute on limit** soit définie dans la procédure de travail.
  - Fermer la partie en cliquant sur **→**.

#### 4 Afficher des résultats directement dans la table d'échantillons (en option)

Si les résultats de prédiction doivent être affichés directement dans la table d'échantillons, il est possible de définir un champ pour les données de sous-échantillons (voir "*Variables de fonctions PREDICT*", Chapitre 11.4, page 179).

#### 5 Sauvegarder une procédure de travail


- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

## Établir un profil d'échantillon

Un profil d'échantillon simplifie la création de plusieurs échantillons similaires.

### 1 Reprendre et nommer un profil d'échantillon

Reprendre le profil d'échantillon utilisé pour le développement du modèle (voir "Préparer un enregistrement de spectres", Chapitre 4.1, page 50).

- Sélectionner le profil d'échantillon utilisé pour le développement du modèle sous **Échantillons** ► **Profils d'échantillons**.
- Dupliquer le profil d'échantillon sélectionné en cliquant sur .
- Ouvrir le profil d'échantillon dupliqué en double-cliquant sur le nom du profil d'échantillon.
- Saisir un nom approprié dans le champ **Nom du profil d'échantillon**.

### 2 Champ de saisie du nom de l'échantillon

Si nécessaire, adapter la valeur par défaut de l'échantillon.

**Données d'échant.**

Nom de champ court

Nom de champ long

Type du champ de saisie

Utiliser comme

---

▲ Propriétés champ saisie

Valeur par défaut

### 3 Paramètre de référence / Paramètre de produit

Le profil d'échantillon contient des données d'échantillon pour le paramètre de référence (quantification) ou le paramètre de produit (identification, vérification).

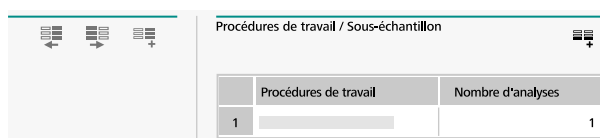
- **Quantification et identification** : les données d'échantillon ne sont pas absolument nécessaires pour la prédiction. Le champ de saisie peut être supprimé ou utilisé pour les échantillons-témoins. Les échantillons-témoins servent à contrôler le modèle et l'appareil et à confirmer que le système est adapté à une analyse plus approfondie.
- **Vérification** : le produit sur lequel l'échantillon est vérifié est défini dans les données d'échantillon :
  - **Type du champ de saisie: Liste de sélection**
  - Le champ de saisie du produit doit être défini comme produit pour être utilisé : **Utiliser comme : Produit**
  - Les éléments de liste avec les noms de produits doivent déjà être présents.
  - **Valeur par défaut: Vide**
  - Cocher les cases **Autoriser un champ vide** et **Forcer l'entrée**.
- **Qualification** : aucune donnée d'échantillon spécifique n'est nécessaire pour la prédiction.

#### 4 Ajouter d'autres données d'échantillon (optionnel)

- Le cas échéant, ajouter un champ de saisie dans la partie **Données d'échant.** en cliquant sur .

#### 5 Définir une procédure de travail et le nombre de sous-échantillons

- Dans la partie **Procédures de travail / Sous-échantillon**, sélectionner la procédure de travail créée.
- Définir le nombre de sous-échantillons : **1**



#### 6 Sauvegarder un profil d'échantillon

- Cliquer sur ou appuyer sur les touches [CTRL]+[S].

### Établir une table d'échantillons


#### 1 Créer et nommer une table d'échantillons





- Cliquer sur dans **Échantillons** ► **Tables d'échantillons**. Un nouvel onglet s'ouvre.

- Saisir un nom approprié dans le champ **Nom**.


Table d'échantillons



## 2 Ajouter des échantillons

- Sur la liste de sélection à gauche de l'icône , sélectionner le profil d'échantillon créé.

Les échantillons ajoutés par la suite sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné.

- Ajouter un nouvel échantillon à la table d'échantillons en cliquant sur . Ajouter autant d'échantillons que nécessaire.

Chaque ligne de la table d'échantillons contient un échantillon marqué de l'icône . Les données d'échantillon suivent à droite. Viennent ensuite le sous-échantillon marqué avec  et les données de sous-échantillon.

Les échantillons sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné. Chaque échantillon contient 1 sous-échantillon qui utilise la procédure de travail définie.










	Nom de l'échantillon	Nom du paramètre de référence		N°	Nom du sous-échantillon	Procédure de travail
	Échantillon 1	%		1	Sous-échantillon 1	
	Échantillon 2	%		2	Sous-échantillon 2	
	Échantillon 3	%		3	Sous-échantillon 3	

Figure 6 Table d'échantillons (exemple de quantification)

- Modifier les noms des échantillons et sous-échantillons selon les besoins.
- Vérification : dans le cas où le produit sur lequel les échantillons sont vérifiés est déjà connu :
  - Sélectionner le produit dans le champ de saisie du produit.

## 3 Sauvegarder une table d'échantillons

- Cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[CTRL]+[S]**.

### 9.1.1 Plusieurs paramètres d'intérêt (quantification)

Pour prédire plusieurs paramètres d'intérêt quantitatifs pour chaque échantillon, le développement du modèle et la préparation de la prédiction nécessitent les modifications ci-après.

## Échantillons pour le développement de modèles de quantification

### Préparer un enregistrement de spectres

Dans le profil d'échantillon, ajouter un champ de saisie distinct pour chaque paramètre de référence.

**Données d'échantillon**

Nom du champ, court	Nom du champ, court	Nom du champ, court
H2O	Methyl acetate	Methanol
Nom du champ, long	Nom du champ, long	Nom du champ, long
Type de champ de saisie Nombre	Type de champ de saisie Nombre	Type de champ de saisie Nombre
Utiliser comme Champ de saisie	Utiliser comme Champ de saisie	Utiliser comme Champ de saisie
<b>Propriétés du champ de saisie</b>		
Valeur par défaut	Valeur par défaut	Valeur par défaut
Valeur minimale 0	Valeur minimale 0	Valeur minimale 49
Valeur maximale 5	Valeur maximale 50	Valeur maximale 99,7
Unité %	Unité %	Unité %
<input checked="" type="checkbox"/> Champ éditable <input checked="" type="checkbox"/> Autoriser un champ vide <input type="checkbox"/> Forcer la saisie	<input checked="" type="checkbox"/> Champ éditable <input checked="" type="checkbox"/> Autoriser un champ vide <input type="checkbox"/> Forcer la saisie	<input checked="" type="checkbox"/> Champ éditable <input checked="" type="checkbox"/> Autoriser un champ vide <input type="checkbox"/> Forcer la saisie

La table d'échantillons contient un champ de saisie pour chaque paramètre de référence.

Nom de l'échantillon	H2O	Methyl acetate	Methanol
	%	%	%
	%	%	%
	%	%	%
	%	%	%

### Enregistrer des spectres

Enregistrer les spectres comme d'habitude.

## Développer des modèles de quantification

- Créer un modèle de quantification distinct pour chaque paramètre d'intérêt.

### Préparer une prédiction

#### Variante 1 : avec une hiérarchie des modèles

Cette variante nécessite la création d'une hiérarchie des modèles comprenant tous les modèles de quantification. Au besoin, la hiérarchie des modèles offre la possibilité supplémentaire d'obtenir une meilleure capacité prédictive à l'aide de modèles de quantification secondaires.

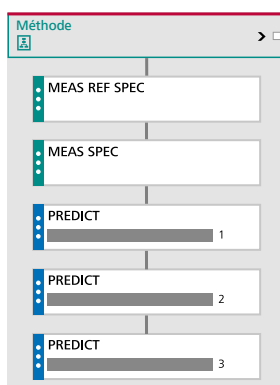
Une seule fonction **PREDICT** est nécessaire dans la méthode :

- Créer une hiérarchie des modèles (voir "*Insérer des modèles dans la hiérarchie des modèles*", Chapitre 8.1.2, page 145).
- Insérer des modèles de quantification dans la hiérarchie des modèles (voir "*Insérer des modèles dans la hiérarchie des modèles*", Chapitre 8.1.2, page 145).
- Référencer la hiérarchie des modèles dans la fonction PREDICT de la méthode.

### Variante 2 : plusieurs fonctions PREDICT

Cette variante nécessite plusieurs fonctions **PREDICT** dans la méthode. Chaque fonction référence un modèle de quantification :

- Insérer une fonction **PREDICT** pour chaque paramètre d'intérêt dans la méthode :



- Nommer chaque fonction **PREDICT** d'après un des paramètres d'intérêt.
- Référencer le modèle de quantification approprié dans chaque fonction **PREDICT**.
- Dans chaque fonctions **PREDICT**, référencer le même spectre (c.-à-d. la même fonction **MEAS SPEC**).

## 9.2 Démarrer une prédiction



### AVERTISSEMENT

#### Matières inflammables sur une surface chaude

Risque d'incendie et de brûlures en cas de renversements de substances inflammables. Les échantillons, flacons d'échantillon, porte-échantillons et présentation de l'échantillon peuvent atteindre une température de 85 °C.

- Éviter les sources d'inflammation.
- Utiliser une mise à la terre.
- Utiliser une hotte aspirante.
- Éliminer immédiatement les liquides et les matières solides renversés.

 **ATTENTION****Augmentation de volume de l'échantillon due au chauffage**

Blessures et atteintes à la santé en cas de débordement ou de bris du récipient d'échantillon ou d'éjection du bouchon.

- Remplir le récipient d'échantillon seulement jusqu'au niveau minimal de 2 cm. Le liquide peut se dilater dans le volume d'air restant.  
Alternativement, utiliser des bouchons avec perforation capillaire.
- Enfoncer le bouchon doucement pour ne pas endommager le récipient d'échantillon.

 **ATTENTION****Flacons d'échantillon chauds**

Brûlures de la peau par contact avec des surfaces ou liquides chauds. Les échantillons, flacons d'échantillon, porte-échantillons et présentation de l'échantillon peuvent atteindre une température de 85 °C.

- Porter un équipement de protection individuelle et des gants de protection résistants à la chaleur.
- Éliminer immédiatement les liquides et les matières solides renversés.

**Démarrer une prédiction****Conditions préalables :**

- La prédiction est préparée (voir "[Préparer une prédiction](#)", Chapitre 9.1, page 156).
- Le spectromètre est réservé (voir "[Réserver et libérer des appareils](#)", Chapitre 2.4, page 27).
- Le porte-échantillon correct est mis en place. Le porte-échantillon doit être adapté au récipient d'échantillon à utiliser.

**1 Ouvrir une table d'échantillons**

- Si la table d'échantillons a été fermée, sous **Échantillons** ► **Tables d'échantillons** double-cliquer dessus pour l'ouvrir.


### Vérification

Pour une vérification, le produit sur lequel l'échantillon est vérifié doit être défini dans les données d'échantillon. Le champ de saisie du produit doit être défini comme produit pour être utilisé. Les majuscules/minuscules sont sans importance.

La vérification échoue toujours si, dans un champ de saisie de produit, le nom d'un groupe de produits lié à un autre modèle d'identification est saisi. Ceci est également valable pour un produit lié à un autre modèle d'identification.



## 2 Ajouter d'autres échantillons (en option)

Si d'autres échantillons sont nécessaires :

- Sur la liste de sélection à gauche de l'icône , sélectionner le profil d'échantillon créé.



Les échantillons ajoutés dernièrement sont créés selon les spécifications du profil d'échantillon sélectionné.


- Ajouter de nouveaux échantillons à la table d'échantillons en cliquant sur .
- Modifier les noms des échantillons et sous-échantillons selon les besoins.
- Vérification : sélectionner le produit dans le champ de saisie du produit sur lequel l'échantillon est vérifié.
- Sauvegarder la table d'échantillons : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

## 3 Effectuer des déterminations

### AVIS

#### Endommagement du capteur de température lors de la régulation de température sur le récipient d'échantillon

Le retrait du récipient d'échantillon tandis que le capteur est en contact direct avec ce récipient peut endommager le capteur.

- Ne retirer le récipient d'échantillon qu'une fois la mesure terminée et le capteur de température éloigné de ce dernier.
- Sélectionner le sous-échantillon à analyser de l'une des façons suivantes :
  - Sélectionner le sous-échantillon en cliquant sur l'icône .
  - Il suffit de sélectionner une seule cellule du sous-échantillon pour l'analyser.



## 9.3 Résultats de prédiction

Afficher des résultats de prédiction :

- Sélectionner un ou plusieurs sous-échantillons.
- Les résultats de prédiction de tous les sous-échantillons sélectionnés et déjà analysés sont disponibles sous **Échantillons** ► **Table d'échantillons** ► **Résultats** ► **Prédictions**.

Exemple de quantification, sous-partie **Aperçu** :

Résultats		Prédictions		Aperçu		?	↔
Information échantillons			Résultats de quantification				
N°	Nom de l'échantillon	Nom du sous-échantillon	H2O / %				
1	██████████	██████████	4.7				
2	██████████	██████████	6.1				
3	██████████	██████████	8.0				

Plusieurs sous-parties sont disponibles :

- La sous-partie **Aperçu** affiche les résultats finaux de chaque sous-échantillon.
- La sous-partie **Vue détaillée** affiche des résultats de prédiction détaillés pour chaque sous-échantillon. Si différents modèles ou hiérarchies des modèles ont été utilisés, leurs résultats sont présentés dans des tableaux distincts. Un sous-échantillon peut apparaître dans plusieurs tableaux. Au besoin, les propriétés du modèle correspondant peuvent être affichées.
- Quantification : des sous-échantillons évalués avec d'autres modèles de quantification peuvent être évalués dans la sous-partie **Retraitement**.
- Hiérarchie des modèles : des sous-échantillons évalués avec une autre hiérarchie des modèles peuvent être évalués dans la sous-partie **Retraitement**.

**i** Au besoin, des résultats de prédiction peuvent s'afficher dans les données de sous-échantillon également (*voir "Variables de fonctions PREDICT", Chapitre 11.4, page 179*).


Selon le modèle, les résultats sont affichés comme suit :

Résultats dans <b>Échantillons</b> ▶ <b>Table d'échantillons</b> ▶ <b>Résultats</b> ▶ <b>Prédic-tions</b>		
	Sous-partie <b>Aperçu</b>	Sous-partie <b>Vue détaillée</b>
<b>Quantifi-cation</b>	Résultat de quantification (Correction de pente/d'ordonnée à l'origine comprise)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>Valeur calculée</b> : résultat de prédiction sans Correction de pente/d'ordonnée à l'origine</li> <li>▪ <b>Valeur corrigée</b> : résultat de prédiction avec Correction de pente/d'ordonnée à l'origine</li> </ul> <p><b>Remarque</b> : si aucune correction de pente/d'ordonnée à l'origine n'a été appliquée, la valeur corrigée est identique à la valeur calculée.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>T<sup>2</sup> de Hotelling</b> et <b>Résidus Q</b> s'affichent si la valeur limite correspondante est dépassée.</li> </ul>
<b>Identifica-tion</b>	Résultat d'identification: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ En cas d'identification réussie : nom du produit déterminé.</li> <li>▪ En cas d'échec de l'identification : état de l'identification (<b>Non identifié</b> ou <b>Équivoque</b>).</li> </ul>	De plus : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Probabilité du produit déterminé</li> </ul>
<b>Vérifica-tion</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Résultat d'identification</li> <li>▪ Résultat de vérification : <b>Réussie</b> ou <b>Échec</b></li> </ul>	De plus : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Produit attendu</li> <li>▪ Probabilité du produit déterminé</li> </ul>
<b>Qualifica-tion</b>	Résultat de qualification : <b>Réussie</b> ou <b>Échec</b>	De plus : <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Regroupement selon les modèles</li> <li>▪ Propriétés du modèle</li> </ul>
<b>Hiérarchie des modèles</b>	<p>Les résultats finaux de l'identification, la quantification et la vérification sont listés côte à côte.</p> <p>Remarque : en cas d'échec de l'identification, aucune quantification ne peut être exécutée.</p>	<p>Les résultats de prédiction détaillés de tous les modèles utilisés sont listés côte à côte avec, dans chaque cas, indication du niveau de hiérarchie.</p> <p>Concernant les modèles de quantification secondaires, la condition définie pour l'exécution du modèle est également indiquée.</p>

#### **Avertissement d'état relatifs aux sous-échantillons**

- Vérifier les sous-échantillons dans la table d'échantillons. Les erreurs ou les avertissements déclenchent un avertissement d'état :



- Les résultats de prédiction concernés sont marqués de l'icône d'état .

Maintenir le curseur au-dessus d'une des icônes pour afficher les raisons. Les causes peuvent être les suivantes :




- Erreur lors du contrôle du système avant détermination du sous-échantillon.
- Identification : l'identification de l'échantillon a échoué (Non identifié ou Équivoque).
- Vérification : la vérification de l'échantillon a échoué.
- Qualification : la qualification de l'échantillon a échoué.
- Quantification : le spectre acquis est une valeur spectrale atypique ( $T^2$  de Hotelling ou valeur atypique résidus Q).
- Quantification : dépassement des limites définies pour le contrôle du résultat (voir point suivant).

### Quantification : limite d'alerte et limite de contrôle



Si un contrôle du résultat est défini dans la procédure de travail (*voir « Établir une procédure de travail », page 159*), l'état du contrôle peut être vérifié comme suit :

- Ouvrir la partie **Résultats** ► **Prédictions** ► **Contrôle**.
- Sélectionner le sous-échantillon dont l'état de contrôle doit être vérifié.  
**Remarque** : si plusieurs échantillons sont sélectionnés, l'état du dernier échantillon cliqué s'affiche.

Selon la valeur du résultat, l'une des icônes d'état suivantes apparaît :

	La valeur se situe dans les <b>limites d'alerte</b> définies.
	La valeur se situe en dehors des <b>limites d'alerte</b> définies, mais dans les <b>limites de contrôle</b> définies.
	La valeur se situe en dehors des <b>limites de contrôle</b> définies.

### Contrôle visuel des spectres (option)

- Ouvrir la partie **Courbes et données** ► **Courbes**.
- Afficher un spectre donné :
  - Sur la table d'échantillons, sélectionner le sous-échantillon correspondant (identifié par l'icône ).
- Afficher plusieurs spectres :
  - Activer la superposition des courbes en cliquant sur .
  - Sélectionner plusieurs sous-échantillons sur la table d'échantillons à l'aide des touches **[Ctrl]** ou **[Maj]**.
- Vérifier des spectres (*voir "Manipuler des diagrammes", Chapitre 11.3, page 175*).



- Répéter les tests de performance de l'appareil.
  - Si le test de longueur d'onde échoue, répéter le calibrage de la longueur d'onde. Si, après cela, le test de longueur d'onde échoue à nouveau, contacter le technicien service Metrohm local.
  - Si le test du bruit de fond échoue, contacter le technicien service Metrohm local.
  - Si le test de la linéarité photométrique échoue, contacter le technicien service Metrohm local.

## 10.2 Calibrage de la longueur d'onde

Après certaines actions, il faut effectuer un calibrage de la longueur d'onde pour l'appareil dans le logiciel OMNIS. (voir "Démarrer le calibrage de la longueur d'onde", Chapitre 3.2.2, page 37)

Tâche	Fonction OMNIS	Intervalle d'exécution recommandé	Résultat
Calibrage de la longueur d'onde	<b>CAL WL</b> et <b>VAL WL</b>	Après le remplacement de composants matériels.  Après un transport prolongé de l'appareil.	L'axe x du spectre est calibré.

## 10.3 Maintenance des appareils

L'appareil doit faire l'objet d'une maintenance régulière.

Tâche	Intervalle d'exécution	Résultat
Maintenance par le technicien service Metrohm local	Annuelle.  Au besoin, plus souvent.	L'appareil reste conforme aux spécifications techniques.  Les tapis des filtres sont vérifiés et remplacés si nécessaire.  L'étalon de longueur d'onde interne est recertifié.

### Recertifier des standards de référence externes

Si des standards de référence sont utilisés pour des tests de performance externes de l'appareil, ces standards doivent être recertifiés périodiquement.

- Respecter la prochaine date de calibrage recommandée sur le certificat.



Modifier une sélection :

- Cliquer sur une seule ligne en appuyant sur la touche **[Ctrl]**.  
La sélection de la ligne est inversée. La sélection des autres lignes ne change pas.  
ou
- Cliquer sur une ligne en appuyant sur la touche **[Maj]**.  
Toutes les lignes depuis la dernière ligne cliquée sans la touche **[Maj]** jusqu'à la ligne actuelle sont sélectionnées. Les lignes restantes sont désélectionnées.  
ou
- Cliquer sur une ligne en appuyant sur la combinaison de touches **[Ctrl]+[Maj]**.  
Toutes les lignes depuis la dernière ligne cliquée jusqu'à la ligne actuelle sont sélectionnées. La sélection des autres lignes ne change pas.  
ou
- Sélectionner toutes les lignes avec **[Ctrl]+[A]**.

### **Copier un tableau dans le presse-papiers Windows**

Copier l'intégralité du tableau :

1. Faire un clic droit dans le tableau.
2. Sélectionner **[Copier le tableau]** dans le menu contextuel.

Copier une ou plusieurs lignes du tableau :



1. Sélectionner les lignes souhaitées.
2. Copier les lignes sélectionnées avec la combinaison de touches **[Ctrl]+[C]**.

Le tableau ou les lignes du tableau peuvent désormais être insérés dans un fichier quelconque.

## **11.3 Manipuler des diagrammes**

Les diagrammes dans les modèles et les hiérarchies de modèles peuvent être manipulés de la manière décrite ci-dessous. Les techniques décrites peuvent être utilisées en partie pour d'autres diagrammes, par exemple pour les spectres dans la table d'échantillons.

### **Agrandir et réduire une partie**

- Agrandir la sous-partie qui contient le diagramme en cliquant sur .
- Réduire la sous-partie en cliquant sur .

### **Afficher et masquer la vue détaillée**

La plupart des diagrammes contiennent une vue détaillée ou une légende. La fenêtre peut être affichée ou masquée :



1. Placer le curseur sur la zone numérique de l'axe x ou de l'axe y.
2. Déplacer la partie représentée à l'aide d'une des méthodes suivantes :
  - a. Tourner la molette de la souris.
  - a. Se déplacer le long de l'axe en maintenant la touche gauche de la souris enfoncée.

### **Réinitialiser la vue standard du diagramme**

- Faire un clic droit de la souris sur le diagramme. Sélectionner **Réinitialiser la vue** dans le menu contextuel.  
ou
- En maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé, étendre une partie de droite à gauche.

### **Sélectionner plusieurs points ou courbes**

- Tout en maintenant la touche **[Ctrl]** enfoncée, cliquer sur les points ou les courbes les uns après les autres.  
La sélection du point ou de la courbe est respectivement inversée. La sélection des autres points ou courbes ne change pas.

Il existe un mode supplémentaire de sélection multiple pour les diagrammes **Graphique d'influence**, **Graphique des scores** et **Diagramme de corrélation** :



- **Activer une sélection multiple**

Cliquer sur **Activer une sélection multiple**.

Une partie des fonctions d'ajustement du graphique ci-dessus est remplacée par les fonctions suivantes.

- **Nouvelle sélection**

En maintenant le bouton gauche de la souris enfoncé, étendre une partie.

Tous les points à l'intérieur de la partie sont sélectionnés. Les points à l'extérieur de la partie ne sont pas sélectionnés.

- **Élargir une sélection**

Avec la touche **[Maj]** enfoncée, cliquer sur des points particuliers ou étendre une partie.

Les points correspondants sont sélectionnés. La sélection des autres points ne change pas.

- **Réduire une sélection**

Avec la touche **[Alt]** enfoncée, cliquer sur des points particuliers ou étendre une partie.

Les points correspondants sont désélectionnés. La sélection des autres points ne change pas.

- **Inverser une sélection**

Avec la touche **[Ctrl]** enfoncée, cliquer sur des points particuliers ou étendre une partie.

La sélection des points correspondants est inversée. La sélection des autres points ne change pas.

- **Annuler une sélection**

Cliquer dans la surface vide du diagramme.

- **Désactiver une sélection multiple**

Cliquer sur **Désactiver une sélection multiple** pour pouvoir réutiliser les fonctions standard d'adaptation du graphique.

### **Copier un diagramme dans le presse-papiers Windows**


1. Faire un clic droit de la souris sur le diagramme.
2. Sélectionner **[Copier le diagramme]** dans le menu contextuel.



Le diagramme peut désormais être inséré dans un fichier quelconque.

## Diagramme sur une table d'échantillons

### Superposition des courbes

Afficher plusieurs spectres ensemble sur une table d'échantillons :

- Ouvrir **Courbes et données** ► **Courbes** dans la table d'échantillons.
- Activer la superposition des courbes en cliquant sur . Si l'icône n'est pas visible, agrandir la partie en faisant glisser la barre de séparation.
- Sélectionner plusieurs sous-échantillons sur la table d'échantillons à l'aide des touches **[Ctrl]** ou **[Maj]**.

Pour afficher tous les spectres de la table d'échantillons cliquer sur  ou .

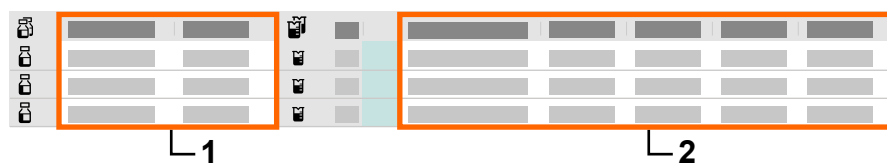
## 11.4 Variables de fonctions PREDICT

Le logiciel OMNIS propose différentes catégories de variables, p. ex. données d'échantillon, données de sous-échantillon, variables de méthode, variables de fonctions ou variables système.

Le logiciel crée certaines variables automatiquement. Au besoin, des variables supplémentaires peuvent être créées. Lors de l'utilisation de variables, prendre en compte leur type de données (**Nombre**, **Texte** ou **Date/heure**).

Les variables peuvent être utilisées pour effectuer d'autres calculs, être éditées dans des rapports sous forme de résultat ou, par exemple, saisies comme condition dans la fonction **IF**.

Dans la plage de travail **Échantillons**, les données d'échantillon **(1)** et de sous-échantillons **(2)** apparaissent dans la table d'échantillons :



 Pour créer des **données d'échantillon** modifier le profil d'échantillon.

Pour créer des **données de sous-échantillon** modifier la procédure de travail.

### Afficher des résultats de prédiction sous forme de données de sous-échantillons



À titre d'exemple, les variables de fonctions **PREDICT** s'afficheront dans les données de sous-échantillon (voir "Enregistrement de spectre", Chapitre 2.3.1, page 19) :

- Quantification : **Predicted.Quantification.Result.Nom de fonction**  
Valeur prédite pour le paramètre d'intérêt.
- Identification : **Product.Identification.Result.Nom de fonction**  
Produit ou groupe de produits déterminé de l'échantillon identifié. Si l'identification a échoué, la variable reste vide.

#### Condition préalable :


Une méthode et une procédure de travail ont été élaborés pour préparer la prédiction (voir "Préparer une prédiction", Chapitre 9.1, page 156).


#### 1 Créer des données de sous-échantillon


- Ouvrir la procédure de travail correspondante.
- Cliquer sur .
- Ouvrir **Propriétés** ► **Paramètres**.
- Créer un champ de données de sous-échantillon en cliquant sur .
  - Entrer un nom **Nom de champ court** approprié pour le résultat prédit ou le produit déterminé.
  - **Quantification** : pour créer un champ de données numériques comme **Type du champ de saisie**, sélectionner l'option **Nombre**.  
**Identification** : pour créer un champ de données alphanumérique comme **Type du champ de saisie**, sélectionner l'option **Texte**.
  - Le champ de données doit être rempli avec le résultat d'une fonction **CALC**. De là, sélectionner l'option **Résultat** sous **Utiliser comme**.  
Remarque : pour un **Résultat**, les champs de saisie ne peuvent pas être modifiés manuellement.

Exemple de quantification (1) et d'identification (2) :

Données de sous-échantillons	
Nom du champ, court	Nom du champ, court
H2O	Produit
Nom du champ, long	Nom du champ, long
Type de champ de saisie	Type de champ de saisie
Texte	Texte
Utiliser comme	Utiliser comme
Résultat	Résultat
1	2

- Sauvegarder la procédure de travail : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

 Le nom de variable afférent aux données de sous-échantillon créées dépend du **Nom de champ court** choisi :  
'*Nom du champ court*.**CurrentSubsampleData**'

 Quantification : si plusieurs paramètres d'intérêt sont prédits pour chaque échantillon, créer plusieurs données de sous-échantillon pour les résultats prédits.

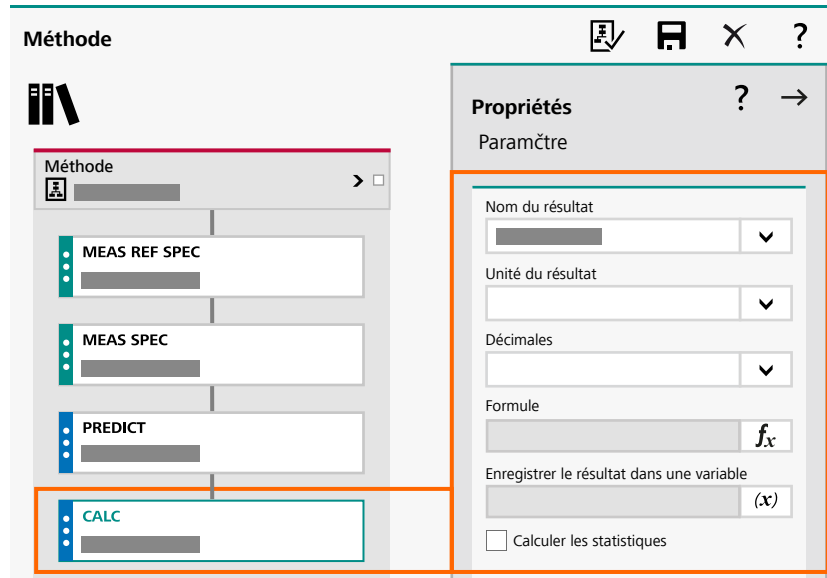
## 2 Insérer une fonction CALC pour le résultat prédit

Remplir les données de sous-échantillon créées avec le résultat d'une fonction **CALC** :

- Ouvrir la méthode correspondante.
- Insérer une fonction **CALC**.  
Placer la fonction **CALC** en dessous de la fonction **PREDICT**.

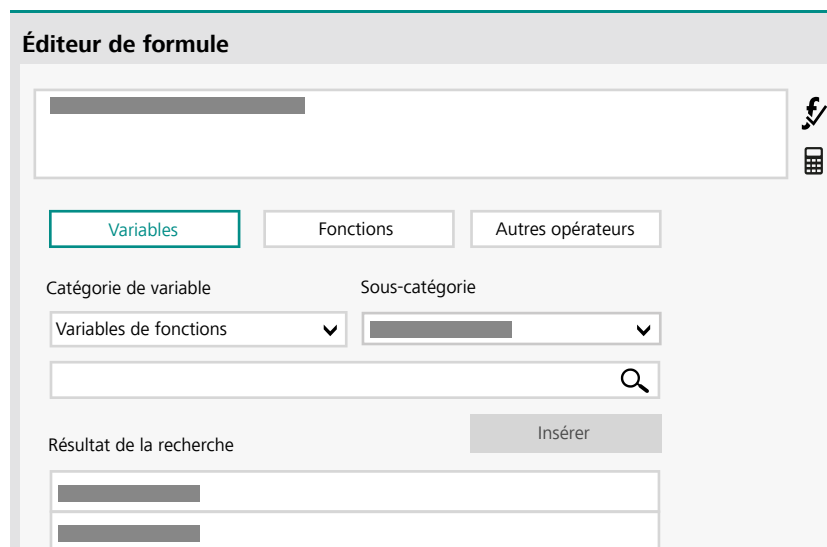
### Calculer la valeur à afficher




- Sélectionner la fonction **CALC** et ouvrir **Propriétés ► Paramètres**.
  - Entrer un nom **Nom du résultat** approprié pour le résultat prédit ou le produit déterminé.
  - Quantification : saisir l'**Unité du résultat** et le nombre de **Nombre de décimales** requis.



**i** Le **Calcul statistique** est appliqué à plusieurs sous-échantillons dans un échantillon. Désactiver le **Calcul statistique**.

- Pour ouvrir l'éditeur de formule, dans le champ **Formule**, cliquer sur **fx**.



- Créer une formule en utilisant la catégorie de variable **Variables de fonctions**. Pour l'affichage des résultats, la formule ne comporte qu'une seule variable de fonction **PREDICT** :
  - Identification :  
**Product.Identification.Result.Nom de fonction**
  - Quantification :  
**Predicted.Quantification.Result.Nom de fonction**  
Si une variable de la hiérarchie des modèles a été sélectionnée avec index, ajuster le cas échéant l'index dans le champ de saisie le plus haut, par ex. : '**Predicted.Quantification{2}.Result.nom de fonction**' (voir "*Hiérarchie des modèles – Index pour modèles de quantification*", Chapitre 11.4.1, page 185)
- Vérifier la validité de la formule saisie en cliquant sur .
- **Remarque** : le résultat de la prédiction n'est généré qu'en cours d'exécution d'une détermination. Le résultat **Non valide** s'affiche donc lors du calcul de la formule en cliquant sur .
- Fermer l'éditeur de formules en cliquant sur .

#### **Sauvegarder la valeur calculée dans les données de sous-échantillon**

- Dans le champ **Sauvegarder le résultat dans une variable**, cliquer sur **(x)**.
- Sélectionner la catégorie de variables **Données sous-échantillons**.
- Comme sous-catégorie sélectionner la procédure de travail correspondante.  
Le Résultat de recherche affiche les données de sous-échantillon définies dans la procédure de travail sélectionnée.
- Sélectionner la variable nouvellement créée.  
La variable sélectionnée est insérée dans le champ **Variables**.

Variables ?

Catégorie de variable Sous-catégorie

Données de sous-échantillons .....


Saisir un terme recherché 🔍

Résultat de la recherche

.....CurrentSubsampleDate

.....CurrentSubsampleData

Reprendre
Annuler

- Cliquer sur **Appliquer**.
- Sauvegarder la méthode : cliquer sur  ou appuyer sur les touches **[Ctrl]+[S]**.

Quantification : si plusieurs paramètres d'intérêt sont prédits pour chaque échantillon, insérer une fonction **CALC** pour chaque résultat prédit.

## Analyser des échantillons

### 1 Ouvrir une table d'échantillons

- Si la table d'échantillons a été fermée, sous **Échantillons** ► **Tables d'échantillons** double-cliquer dessus pour l'ouvrir.

- 2 Un champ pour les données de sous-échantillon créées apparaît dans la table d'échantillons pour tous les échantillons qui n'ont pas encore été analysés :

Nom de l'échantillon	Nom du sous-échantillon	
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input style="border: 2px solid orange;" type="text"/>

Après la prédiction, le champ affiche le résultat.

Identification : si l'identification a échoué, le champ de résultat reste vide.

### **i** Autres variables

Comme vu ci-dessus, d'autres variables peuvent s'afficher dans les données de sous-échantillon (voir "Prédiction", Chapitre 2.3.2, page 21).

#### 11.4.1 Hiérarchie des modèles – Index pour modèles de quantification

Une hiérarchie des modèles peut contenir plusieurs modèles de quantification. Des numéros d'index sont utilisés pour que les variables de fonctions **PREDICT** puissent distinguer les modèles de quantification.

Le premier modèle de quantification lié à un produit ou à un groupe de produits spécifique obtient l'index 1. Si des modèles de quantification supplémentaires sont liés au même produit ou groupe de produits, l'index est incrémenté. L'incrémentation s'effectue en fonction de l'ordre des modèles de quantification dans la hiérarchie des modèles.

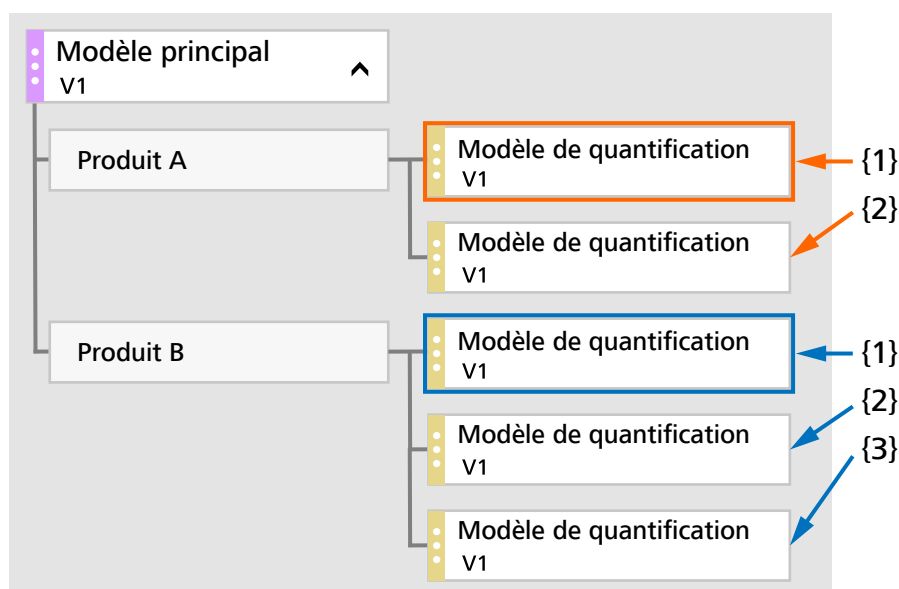


Figure 7 Numéros d'index pour des modèles de quantification dans une hiérarchie des modèles

Les variables de fonctions **PREDICT** réfèrent au modèle de quantification au moyen du numéro d'index.

Exemple : '**Predicted.Quantification{1}.Result.Nom de fonction**'

Si lors de la prédiction, un échantillon est identifié comme produit A, tous les modèles de quantification liés au produit A sont utilisés. Dans ce cas, la variable de fonction ci-dessus fait référence au modèle de quantification lié au produit A d'index 1 (encadré en orange dans l'image).

Si un échantillon est identifié comme produit B, la variable de fonction ci-dessus fait référence au modèle de quantification lié au produit B avec l'index 1 (encadré en bleu dans l'image).

Si la variable de fonction pour le modèle de quantification encadré en bleu doit être utilisée d'une manière différente de celle du modèle de quantification encadré en orange, une fonction **IF** peut limiter le traitement à une appartenance au produit spécifique.

**i** Dans le cas d'une hiérarchie des modèles sans modèles d'identification, le modèle de quantification le plus haut obtient l'index 1. L'index est incrémenté successivement pour les autres modèles d'identification.

### Modèles de quantification secondaires


Aucun numéro d'index n'est attribué aux modèles de quantification secondaires. La variable de fonction **PREDICT** doit référencer le modèle de quantification de niveau supérieur. La variable fournit en revanche les valeurs du modèle secondaire utilisé pour chaque sous-échantillon.

## 11.5 Exporter et importer des modèles

Les modèles peuvent être exportés et importés pour être utilisés dans une autre installation OMNIS.

### Exporter des modèles

#### 1 Ouvrir la boîte de dialogue d'exportation

- Ouvrir l'une des sous-parties suivantes dans la zone de travail
  - Calibrage et évaluation :**
    - Modèles de quantification
    - Corrections de pente/d'ordonnée à l'origine
    - Modèle d'identification
    - Modèles de qualification
    - Hiérarchies des modèles
- Cliquer sur .

Une boîte de dialogue d'exportation s'ouvre.


#### 2 Générer des fichiers d'exportation

- Sélectionner tous les modèles à exporter.
- Si seuls des modèles publiés de **type full** sont sélectionnés, le **Type d'exportation** peut être défini :
  - Un modèle **type full** est entièrement fonctionnel. Après importation, le modèle peut être édité et enregistré.
  - Si un modèle a été publié, la dernière version publiée peut être exportée comme **type light**. Ce modèle peut être utilisé exclusivement pour des prédictions.

- Personnaliser au besoin le répertoire cible.
- i Les caractères spéciaux ou chaînes de caractères suivants ne doivent pas être utilisés : > < : " / \ | \* ? et CON, PRN, AUX, NUL, COM1–COM9, LPT1–LPT9.
- Générer les fichiers d'exportation par un clic sur **[Exporter]**.  
Les modèles sont exportés dans le répertoire indiqué.

## Importer des modèles

### 1 Ouvrir la boîte de dialogue d'importation

- Ouvrir l'une des sous-parties suivantes dans la zone de travail **Calibrage et évaluation** :
  - **Modèles de quantification**
  - **Corrections de pente/d'ordonnée à l'origine**
  - **Modèle d'identification**
  - **Modèles de qualification**
  - **Hierarchies des modèles**
- Cliquer sur .

### 2 Ouvrir des fichiers

- Sélectionner le dossier et tous les fichiers \*.opmo ou \*.osic à importer.
- Cliquer sur **[Ouvrir]**.

Les modèles sont importés dans le logiciel OMNIS.

## 11.6 Changement d'analyseur XDS/DS (quantification)

Lors du changement d'un analyseur DS2500 ou XDS, les spectres et les paramètres de référence utilisés pour créer un modèle de quantification pour les analyseurs XDS/DS peuvent être importés dans le logiciel OMNIS. Ces données permettent de développer un modèle de quantification.

Dans un deuxième temps, une correction de pente/d'ordonnée à l'origine est créée. Pour cela, on utilise des spectres enregistrés avec le logiciel OMNIS. Les valeurs de référence de ces spectres doivent être connues.

Moins d'échantillons sont utilisés pour la correction de pente/d'ordonnée à l'origine que pour le développement d'un modèle de quantification :


- Pour obtenir une valeur estimée fiable du biais, il faut au moins 20 échantillons.
- Pour obtenir une valeur estimée fiable de la pente, il faut au moins 30 échantillons.

## Développer un modèle de quantification

### Condition préalable :

- Le fichier de spectres (.da), dans lequel les spectres XDS/DS sont inclus, est disponible.
- Le fichier des paramètres de référence (.cn), contenant les paramètres de référence, est disponible dans le même dossier.

### 1 Créer et nommer le modèle de quantification

- Cliquer sur  dans **Calibrage et évaluation** ► **Modèles de quantification**.
- Saisir un nom approprié dans le champ de saisie **Nom du modèle de quantification**.


### 2 Importer des spectres

- Cliquer sur **Importation de XDS/DS**.

Créer un modèle de quantification

Nom du modèle de quantification

Tables d'échantillons	Tables d'échantillons filtrés	XDS-/DS-Import
-----------------------	-------------------------------	----------------

- Cliquer sur .
- Sélectionner le fichier de spectres (.da) à importer.
- Cliquer sur **[Ouvrir]** pour confirmer la sélection.
- Cliquer sur **[Continuer]**.

### 3 Sélectionner le paramètre de référence

- Sélectionner le paramètre de référence dans la liste **Paramètre de référence / unité**.
- Sélectionner l'unité du paramètre de référence dans le champ de saisie **Unité du paramètre de référence**.


Tous les spectres possédant les désignations sélectionnées du paramètre de référence sont ajoutés au modèle de quantification.

### 4 Développement automatique ou manuel de modèle

Plusieurs possibilités sont offertes pour le développement de modèles :

- Développement automatique de modèle avec **OMNIS Model Developer (OMD)** : cliquer sur **[Démarrer l'OMD]**.  
Passer au [chapitre 5.2, Développement automatique de modèle - OMD, page 69](#).
- Développement manuel de modèle : cliquer sur **[Créer]**.  
Passer au [chapitre 5.3, Développement manuel de modèle, page 72](#).

## 5 Développement automatique ou manuel de modèle

 Si la sélection d'échantillons doit d'abord être ajustée manuellement et que le modèle doit ensuite être développé automatiquement, poursuivre avec le développement manuel du modèle.

- **Développement automatique de modèle** : cliquer sur **[Démarrer l'OMD]**.  
Passer au [chapitre 5.2, Développement automatique de modèle - OMD, page 69](#).
- **Développement manuel de modèle** : cliquer sur **[Créer]**.  
Passer au [chapitre 5.3, Développement manuel de modèle, page 72](#).

## 6 Publier un modèle

- Publier le modèle de quantification ([voir "Publier un modèle de quantification", Chapitre 5.4, page 96](#)).

### Échantillons pour la correction de pente/d'ordonnée à l'origine

Chaque échantillon est nécessaire pour la correction de pente/d'ordonnée à l'origine :

- Une valeur de référence pour le paramètre à corriger.
- Un spectre.
- Une valeur calculée pour chaque spectre.

## 1 Collecter des échantillons

- Collecter les échantillons physiques pour la correction de pente/d'ordonnée à l'origine comme s'il s'agissait d'échantillons pour le développement d'un modèle de quantification ([voir "Préparer un développement de modèle", Chapitre 4, page 49](#)). Un nombre plus restreint d'échantillons est toutefois suffisant.



## Créer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine

- Créer une correction de pente/d'ordonnée à l'origine. Pour cela, on utilise des spectres enregistrés avec le logiciel OMNIS. Les valeurs de référence de ces spectres doivent être connues.  
*(voir "Correction de pente/d'ordonnée à l'origine", Chapitre 5.5, page 97)*

## Prédiction

### 1 Préparer une prédiction

- Préparer les processus nécessaires à la prédiction *(voir "Préparer une prédiction", Chapitre 9.1, page 156)*. Pour ce faire, indiquer dans la fonction **PREDICT** le modèle de quantification et la correction de pente/d'ordonnée à l'origine correspondante.

### 2 Effectuer une prédiction

- Effectuer la prédiction *(voir "Démarrer une prédiction", Chapitre 9.2, page 165)*.

**i** La réalisation de l'analyse doit être surveillée à l'aide d'échantillons-témoins. Les échantillons-témoins sont analysés à la fois par la méthode spectroscopique et par la méthode de référence. Les résultats des deux méthodes peuvent être comparés.

## 11.7 Flux de travail pour l'OMNIS NIR Analyzer

Pour analyser des échantillons avec un OMNIS NIR Analyzer, le logiciel OMNIS exécute les tâches suivantes :

1. Préparer l'appareil :
  - a. Configuration de l'appareil
  - b. Calibrage de la longueur d'onde et validation
  - c. Tests de performance d'appareils
2. Acquérir les spectres des échantillons de calibrage
3. Enregistrer les valeurs de référence des échantillons de calibrage
4. Développer des modèles
5. Prédire des paramètres d'intérêt
6. Test de performance d'appareil : répétition selon les besoins.

Les sections suivantes illustrent les flux de travail correspondants dans le logiciel OMNIS.

### Préparation de l'appareil

Avant de pouvoir acquérir des spectres, il faut préparer l'appareil. Il faut notamment procéder à un calibrage de la longueur d'onde.

La *figure 8* suivante illustre un exemple de calibrage de la longueur d'onde. La méthode est illustrée par une seule fonction.

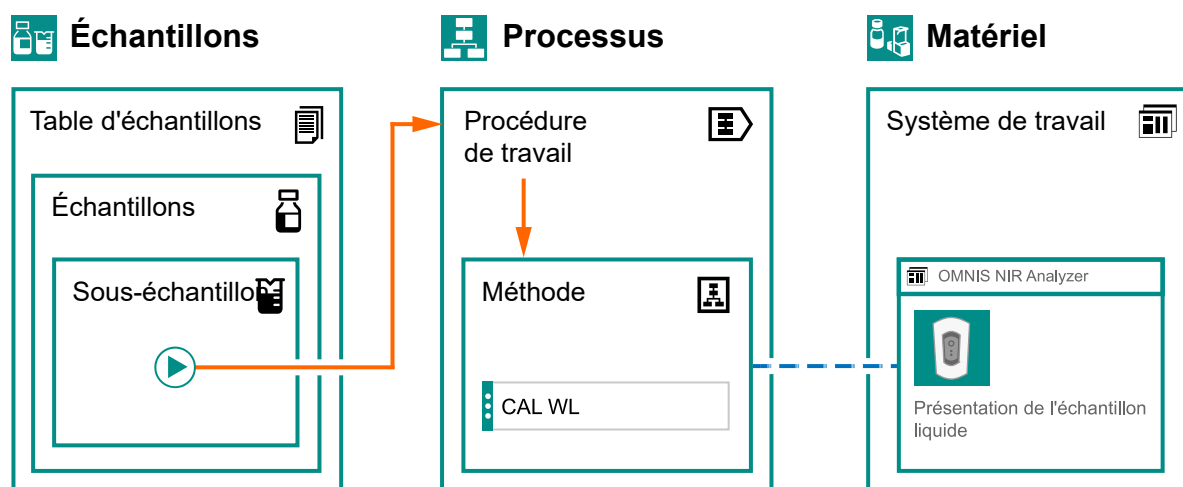


Figure 8 Configuration de l'appareil



Liaisons dans le logiciel OMNIS.



Un système de travail est attribué à la méthode.

La zone de travail **Échantillons** contient une table d'échantillons avec un échantillon. L'échantillon contient un sous-échantillon. Une procédure de travail est attribuée au sous-échantillon.

Normalement, les échantillons sont des échantillons réels à analyser. Cependant, dans ce cas, l'échantillon sert à effectuer un calibrage de la longueur d'onde. Dès que le sous-échantillon correspondant est lancé, les étapes suivantes sont effectuées :

1. Le sous-échantillon démarre la procédure de travail attribuée.
2. La procédure de travail met en œuvre la méthode qu'elle contient.
3. La méthode exécute la fonction **CAL WL**. La fonction est exécutée avec le système de travail affecté à la méthode.

Le système de travail contient un groupe fonctionnel de l'appareil OMNIS NIR Analyzer. Cet appareil effectue un calibrage de la longueur d'onde. Les données de calibrage sont enregistrées sur l'appareil.

### Saisir des valeurs de référence ou des noms de produits

Pour créer un modèle, il faut saisir une valeur de référence (quantification) ou un nom de produit (identification) pour chaque échantillon de calibrage et chaque échantillon de validation. Pour la qualification, il faut savoir si les différents échantillons doivent être classés comme positifs ou négatifs.

### Exemple de quantification

La figure 9 suivante indique l'enregistrement d'une valeur de référence pour le paramètre d'intérêt, p. ex. la teneur en eau d'un échantillon.

#### Échantillons

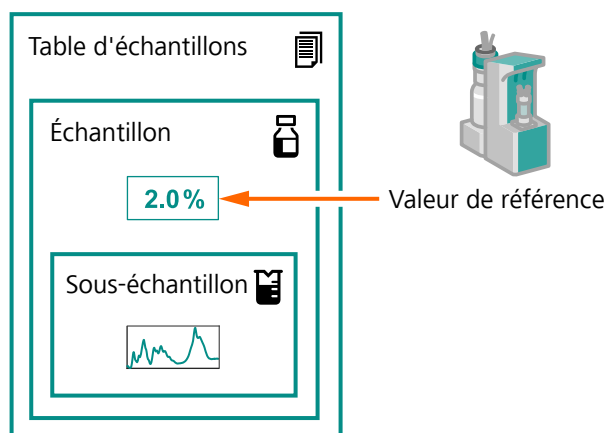


Figure 9 Enregistrer une valeur de référence

Le paramètre d'intérêt est mesuré à l'aide d'une méthode de référence, p. ex. par titrage. La mesure sert de valeur de référence.

La valeur de référence de chaque échantillon de la table d'échantillons est inscrite dans le champ de saisie correspondant.

## Acquérir les spectres des échantillons de calibrage

Pour créer un modèle, il faut enregistrer un spectre pour chaque échantillon de calibrage et de validation.

La figure 10 suivante montre une représentation schématique de l'acquisition d'un spectre.

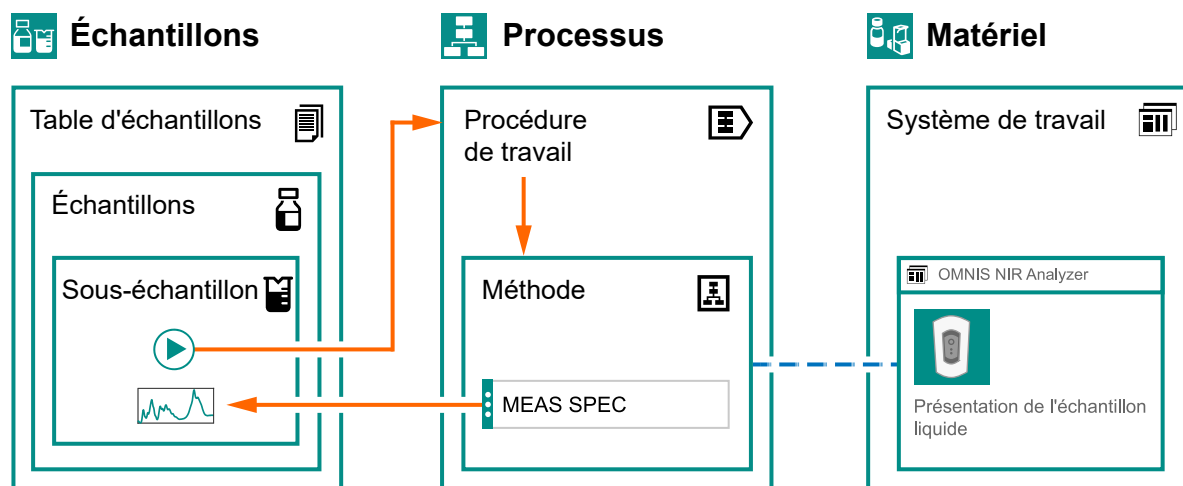


Figure 10 Acquérir un spectre d'échantillon de calibrage



Liaisons dans le logiciel OMNIS.



Un système de travail est attribué à la méthode.

La zone de travail **Échantillons** contient une table d'échantillons de calibrage. Chaque échantillon contient un sous-échantillon. Une procédure de travail est attribuée à chacun des sous-échantillons.

Dès qu'un sous-échantillon est lancé, les étapes ci-après sont effectuées :

1. Le sous-échantillon démarre la procédure de travail attribuée.
2. La procédure de travail met en œuvre la méthode qu'elle contient. La méthode exécute la fonction **MEAS SPEC**. La fonction est exécutée avec le système de travail affecté à la méthode.

Le système de travail comprend un groupe fonctionnel (p. ex **Liquid Sample Presentation**). Le groupe fonctionnel acquiert un spectre et le transmet au logiciel OMNIS. Le logiciel OMNIS enregistre le spectre dans les données de sous-échantillons.

## Développement d'un modèle

Quantification : un modèle de quantification est créé à partir des spectres et des valeurs de référence des échantillons de calibrage, automatiquement avec **OMD** (OMNIS Model Developer) ou manuellement.

Identification : un modèle d'identification est créé à partir des spectres et des noms de produits des échantillons de calibrage.

Qualification : un modèle de qualification est créé à partir des spectres des échantillons de calibrage.

### Exemple de quantification

La figure 11 suivante montre les étapes du développement manuel d'un modèle de quantification.

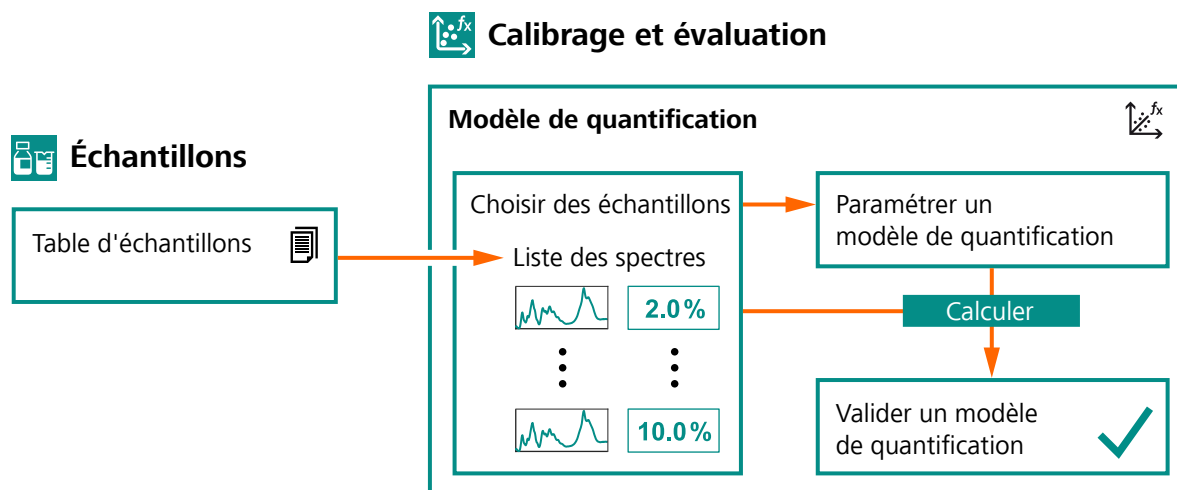


Figure 11 Développer un modèle (exemple pour la quantification)

Tout d'abord, les échantillons, y compris les valeurs de référence, sont transférés dans une liste de spectres. Ensuite, le développement du modèle se fait en 3 étapes de processus :

1. L'étape du processus **Sélectionner des échantillons** permet d'identifier les valeurs atypiques, de définir des spectres de validation et d'indiquer une méthode de validation croisée.
2. À l'étape **Paramétrer le modèle de quantification** du processus, des prétraitements des données peuvent être appliqués aux spectres et des gammes de longueurs d'ondes peuvent être définies.
3. Après le calcul d'un modèle, l'étape **Valider le modèle de quantification** du processus évalue si le modèle répond aux exigences. Les étapes précédentes peuvent être adaptées pour optimiser le modèle. Si un modèle approprié a été identifié, il peut être **publié**. Le modèle publié peut ensuite être utilisé pour prédire les résultats d'échantillons inconnus.

### Prédiction

Lors de la prédiction, un modèle est appliqué au spectre d'un échantillon inconnu. Selon le modèle il est possible de prédire :

- les paramètres d'intérêt (quantification)
- l'appartenance du produit ou le résultat de vérification (identification)
- le résultat de qualification (qualification)

Exemple pour la quantification : la *figure 12* suivante présente la prédiction d'un paramètre d'intérêt.

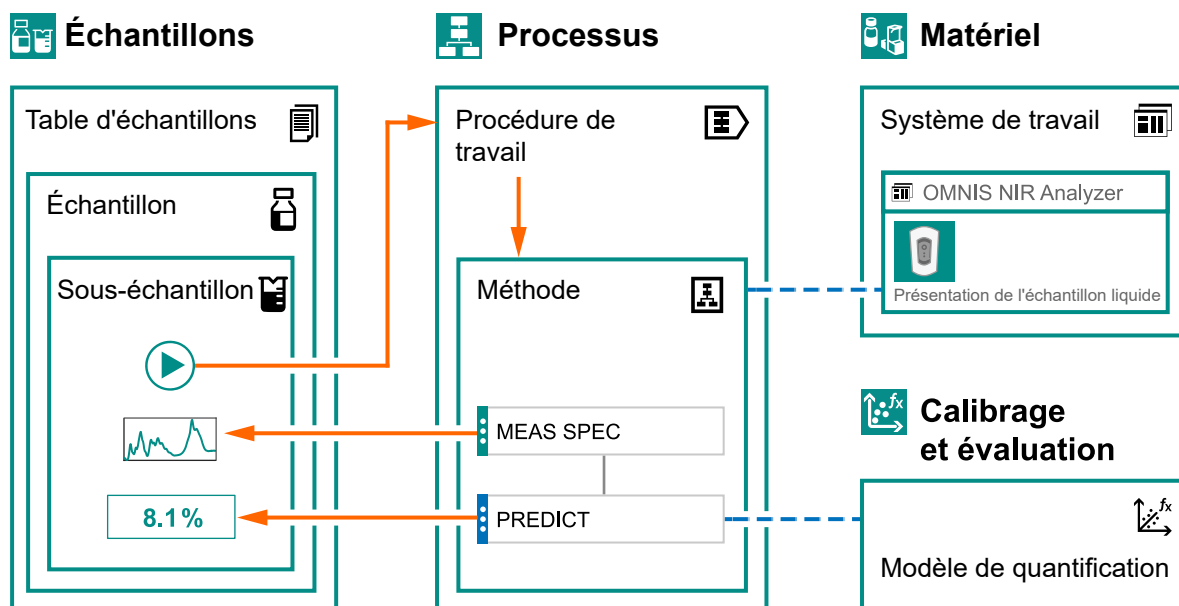


Figure 12 Prédire des paramètres d'intérêt (exemple de quantification)



Liaisons dans le logiciel OMNIS.



Un système de travail est attribué à la méthode.

La fonction **PREDICT** spécifie un modèle.

La zone de travail **Échantillons** contient une table d'échantillons prêts à être analysés. Chaque échantillon contient un sous-échantillon. Une procédure de travail est attribuée à chacun des sous-échantillons.

Dès qu'un sous-échantillon est lancé, les étapes ci-après sont effectuées :

1. Le sous-échantillon démarre la procédure de travail attribuée.
2. La procédure de travail met en œuvre la méthode qu'elle contient. La méthode contient au moins 2 fonctions :
  - a. **Fonction de mesure**  
La fonction **MEAS SPEC** acquiert un spectre de l'échantillon. La fonction est exécutée avec le système de travail affecté à la méthode. Le système de travail comprend un groupe fonctionnel (p. ex. **Liquid Sample Presentation**). L'appareil acquiert ainsi un spectre et le transmet au logiciel OMNIS.
  - b. **Prédiction**  
Dans la fonction **PREDICT**, une fonction de mesure et un modèle sont sélectionnés. Le modèle évalue le spectre acquis avec la fonction de mesure. Il en résulte une prédiction, p. ex. une teneur en eau de 8,1 %.