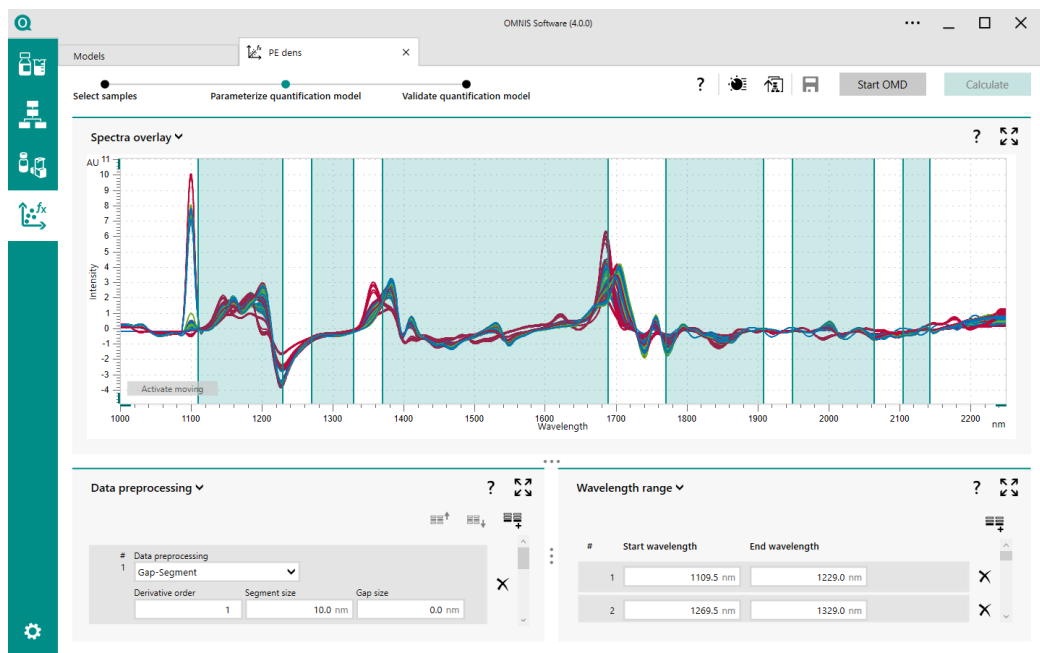


OMNIS NIR (Lab)



OMNIS 分光法ステップバイステップ

チュートリアル

8.0600.8202JA / v7 / 2026-02-17



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

OMNIS NIR (Lab)

OMNIS Software のバージョン 4.7

チュートリアル

8.0600.8202JA / v7 /
2026-02-17

本文書は、著作権法で保護されています。本文書の無断複写・転載を禁じます。

この文書はオリジナル文書です。

本文書は細心の注意を払い作成されていますが、それでも、誤りが含まれている場合があります。お気づきの点がございましたら、上記の宛先までご連絡ください。

免責条項

不適切な保管または使用などに起因する故障に対し、Metrohm は一切の保証の責任を負わないものとします。独断による製品の変更(改造または拡張など)の場合も、それに起因する損傷およびその結果に対し、メーカーはいかなる責任も負いません。Metrohm の製品文書の取扱説明書および注意には厳密に従ってください。そうでない場合、Metrohm はいかなる責任も負わないものとします。

目次

1	概要	1
1.1	導入	1
1.2	本文書について	1
1.3	OMNIS ライセンス	1
1.4	ユーザー権限	2
1.5	より詳しい情報	2
2	OMNIS Software に関する概要	4
2.1	構成および機能	4
2.1.1	ワークエリア	4
2.1.2	タブとサブエリア	4
2.1.3	ワークエリア サンプル	6
2.1.4	ワークエリア プロセス	7
2.1.5	ワークエリア 装置	8
2.1.6	ワークエリア キャリブレーションと評価	9
2.2	実践導入	11
2.3	OMNIS コマンド	18
2.3.1	スペクトル記録	19
2.3.2	予測	21
2.3.3	計算と統計	25
2.3.4	波長のキャリブレーション	26
2.3.5	装置の性能テスト	26
2.4	装置の予約および共有	27
2.5	温度調節 (Liquid Sample Presentation)	29
3	装置の準備	31
3.1	ワークシステムの作成	31
3.2	波長のキャリブレーション	33
3.2.1	波長のキャリブレーションの準備	33
3.2.2	波長のキャリブレーションの開始	37
3.3	装置の性能テスト	39
3.3.1	内部の装置の性能テストの準備	39
3.3.2	内部の装置の性能テストの実行	43
3.3.3	外部の装置の性能テスト (オプション)	45
4	モデル開発の準備	48
4.1	スペクトル記録の準備	49
4.2	スペクトルの記録	59

5	定量化モデル	65
5.1	定量化モデルの作成	65
5.2	自動モデル開発 - OMD	67
5.3	手動モデル開発	70
5.3.1	サンプル選択とデータセット分割	70
5.3.2	定量化モデルの計算	76
5.3.3	定量化モデルの検証	76
5.3.4	定量化モデルのパラメータ化	83
5.4	定量化モデルの発行	91
5.5	スロープ/γ インターセプト補正	92
6	識別モデル	100
6.1	識別モデルの作成	100
6.2	サンプル選択とデータセット分割	101
6.3	識別モデルの計算	108
6.4	識別モデルの検証	108
6.5	識別モデルのパラメータ化	111
6.5.1	波長の選択	112
6.5.2	データ前処理	114
6.6	識別モデルの発行	116
7	適格性確認モデル	117
7.1	適格性確認モデルの作成	117
7.2	サンプル選択とデータセット分割	118
7.3	適格性確認モデルの計算	125
7.4	適格性確認モデルの検証	125
7.5	適格性確認モデルのパラメータ化	127
7.5.1	波長の選択	128
7.5.2	データ前処理	129
7.6	適格性確認モデルの発行	131
8	モデル階層	133
8.1	モデル階層の開発	134
8.1.1	モデルの開発	134
8.1.2	モデル階層へのモデルの挿入	135
8.2	モデル階層の検証	141
8.3	モデル階層の発行	143

9 予測	145
9.1 予測の準備	145
9.1.1 複数の対象パラメータ (定量化)	152
9.2 予測の開始	154
9.3 予測結果	157
10 テストとメンテナンスの間隔	161
10.1 装置の性能テスト	161
10.2 波長のキャリブレーション	162
10.3 装置のメンテナンス	162
11 補遺	163
11.1 レポート	163
11.2 テーブルの処理	163
11.3 グラフの処理	164
11.4 PREDICT コマンド変数	167
11.4.1 モデル階層 - 定量化モデルの索引	172
11.5 モデルのエクスポートとインポート	173
11.6 XDS/DS アナライザの変更 (定量化)	174
11.7 OMNIS NIR Analyzer 用ワークフロー	178

1 概要


1.1 導入

このチュートリアルでは、製品ファミリー **OMNIS NIR Analyzer**、OMNIS Software のバージョン 4.7 に基づいた装置の操作に関して説明しています。

このチュートリアルでは、OMNIS Software に関する概要、装置のセットアップ、モデル開発、予測について説明しています。

1.2 本文書について

文書内で考えられる表現:

(1)	図中のポジション番号への参照
1	実行手順
メソッド	パラメータ、メニュー項目、タブおよびダイアログ
プロセス ▶ 作業手順	メニューパス
[次へ]	コマンドボタンまたはキー
	説明テキストに関する追加情報

1.3 OMNIS ライセンス

OMNIS はモジュラー型のプラットフォームです。装置機能、およびソフトウェアモジュールを自由に組み合わせることができます:

- 装置機能はライセンスパッケージとしてご利用いただけます ([Metrohm Knowledge Base](#) 参照)。
本チュートリアルには次のファンクションライセンスが必要となります:
 - Lab NIR Spectroscopy のファンクションライセンス

- ソフトウェアモジュールは個別にライセンス供与および有効化ができます ([Metrohm Knowledge Base](#) 参照)。本チュートリアルには次のソフトウェアライセンスが必要となります (OMNIS Stand-Alone など):
 - OMNIS Stand-Alone のソフトウェアライセンス
 - 定量化モデルの開発用: Quant Development のソフトウェアライセンス
 - 識別モデルと適格性確認モデルの開発用: Ident Development のソフトウェアライセンス

i ライセンスに関する詳細情報は [Metrohm Knowledge Base](#) をご覧いただくか、地域の Metrohm 販売元にお問い合わせください。

1.4 ユーザー権限

ユーザー管理が有効である場合、管理者は別のユーザーを作成し、ユーザー権限を割り当てることができます。ユーザー役割は多数の個々の権利を組み合わせているため、権限管理が容易になります ([Metrohm Knowledge Base](#) を参照)。

ユーザー管理が有効になっている場合、このチュートリアルを完全に実行するためには、ユーザー役割 **メソッドデベロッパー** または **ラボマネージャー** が必要となります。

あるいは、OMNIS Software は有効なユーザー管理なしで使用することも可能です。

1.5 より詳しい情報

OMNIS ヘルプは、OMNIS Software から、またはブラウザで呼び出せます。

OMNIS Software からヘルプを呼び出す

- **オンラインまたはオフラインアクセスの設定**
 - オンラインアクセス (インターネット接続が必要です): タイトルバーの...でオプション **Metrohm Knowledge Base** を有効にします。
 - オフラインアクセス: タイトルバーの...でオプション **Metrohm Knowledge Base** を無効にします。
- **ヘルプのトップページを呼び出す**
 - タイトルバーの...で**ヘルプ**をクリックします。
 - または、[F1] キーを押します。
- **コンテキスト依存のヘルプを呼び出す**
 - 該当する範囲またはウィンドウで **?** をクリックします。
注記: オフラインアクセスの場合は、トップページが表示されます。

ブラウザでヘルプを呼び出す

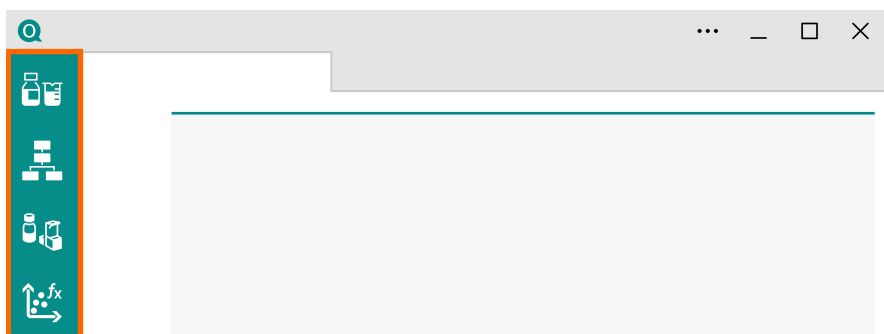
- <https://guide.metrohm.com/> を呼び出します。
- **OMNIS Software** をクリックします。
- フィルター **Release** で、OMNIS Software の希望するバージョンを選択します。
- OMNIS Software の最新バージョン、および長期サポートバージョンの場合、PDF 形式でもヘルプをご利用いただけます: **フィルター情報 ▶ 発行物 ▶ ハンドブック** をご使用ください。

2 OMNIS Software に関する概要

2.1 構成および機能

2.1.1 ワークエリア

OMNIS Software は、ユーザーインターフェースを複数の動作範囲に分けています。画面左側にあるアイコンは、それぞれ特定のワークエリアを開きます。



ワークエリア



ワークエリア **サンプル** ではサンプルを整理し、サブサンプルを分析できます。



ワークエリア **プロセス** では、サンプルを分析するための作業手順およびメソッドを定めることができます。



ワークエリア **装置** では、装置および付属品を管理することができます。



ワークエリア **キャリブレーションと評価** では分光モデルを開発できます。モデルにより、サンプル特性を予測できるようになります。

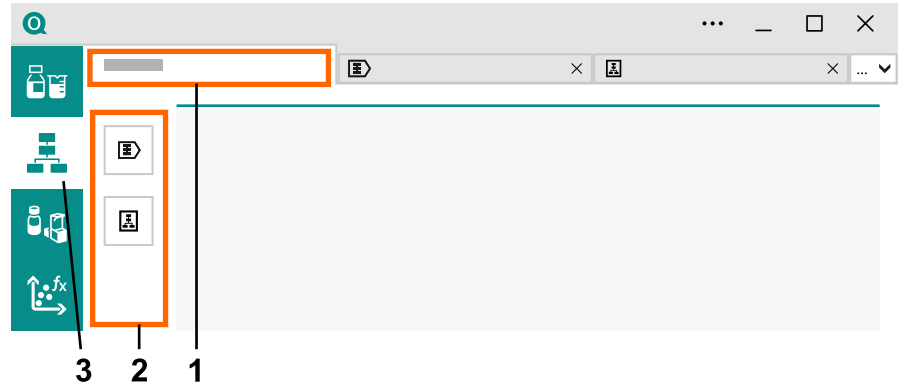
さらにワークエリア **設定** もあります。

システムに応じて、ワークエリア **ユーザー管理** および **Audit Trail** もあります。

2.1.2 タブとサブエリア

ワークエリアには1つ以上の**タブ**が含まれています。各タブは特定の目的を果たします。ワークエリア **プロセス** には、作業手順の編集などのタブを含めることができます。

各ワークエリアには独自のタブがあります。一番左のタブ (**1**) は、選択したワークエリアを整理するためのものです。ここから、特定のタスクを実行するためのその他タブを開くことができます。



ワークエリアは、さらにサブエリアに分けられています。一番左のタブ(1)は、選択したワークエリア(3)のサブエリア(2)を示します。

関連のサブエリア

次の図1は概略図です。ワークエリア サンプルには1つのサンプルリストが含まれています。サンプルリストにはサンプルとサブサンプルが含まれています。各サブサンプルには作業手順が割り当てられています。

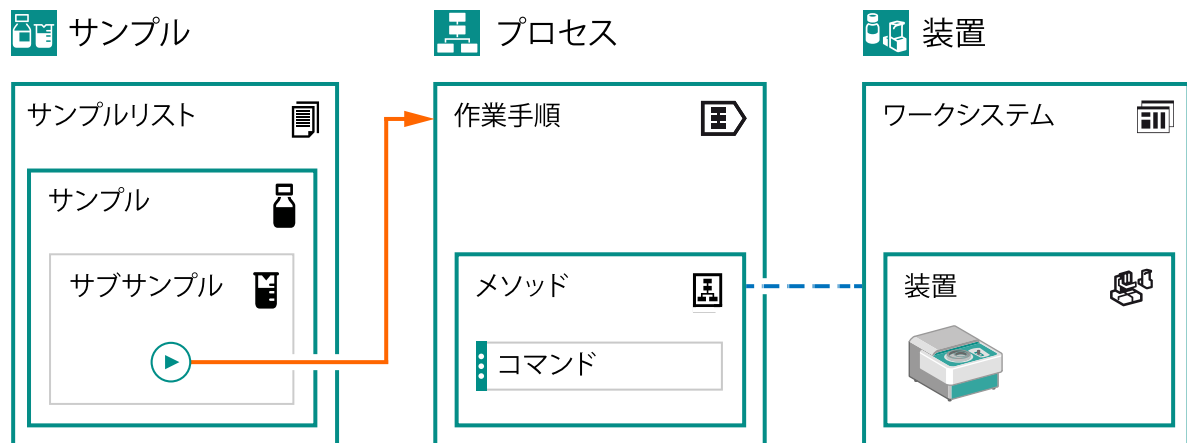


図 1 関連するサブエリアを含む3つのワークエリア



サブサンプルは作業手順を呼び出します。



メソッドにワークシステムが割り当てられています。

サブサンプルを分析する場合、OMNIS Software は作業手順を開始し、含まれているメソッドとコマンドを実行します。

メソッドにワークシステムが割り当てられています。これにより、コマンドはワークシステムと、それに含まれているファンクションユニットにアクセスできるようになります。

2.1.3 ワークエリア サンプル

サンプルは分析対象となる物質です。1つのサンプルは1つ以上のサブサンプルに分けられます。

サブサンプルには作業手順が割り当てられています。サブサンプルを分析する場合、割り当てられた作業手順が実行されます。

サンプルリストはサンプルとサブサンプルを整理します。1つのサンプルまたはサブサンプルは1つ以上のサンプルリストに含むことができます。

サンプルプロファイルはサンプル作成のためのテンプレートです。

サンプル - 概要



ワークエリア **サンプル** ではサンプルを整理し、サブサンプルを分析できます。

次の [図2](#) はサブサンプルも含むサンプルがある、簡単なサンプルリストの例を示しています。

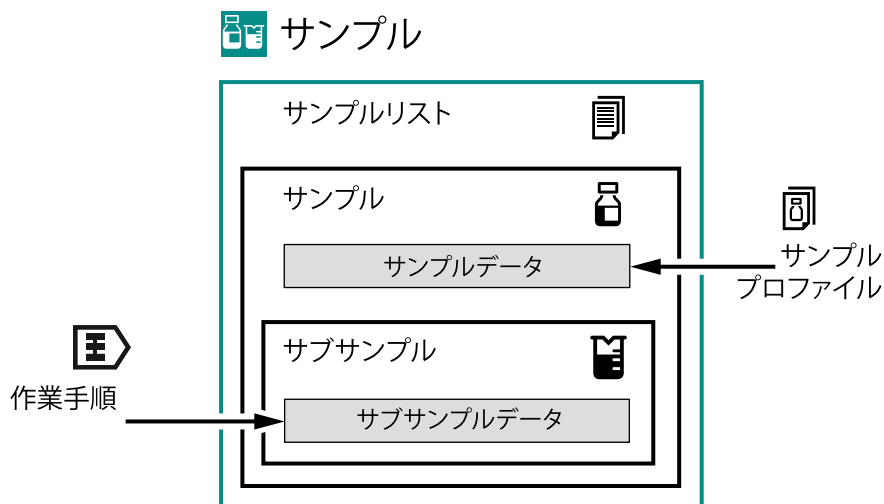


図2 ワークエリア サンプル

→ データフィールドの仕様。


サンプルとサブサンプルに対してデータフィールドを作成できます。例えば、基準値のサンプルデータまたは分析結果のサブサンプルデータのサンプルデータです。


[図2](#) はデータフィールドの作成方法も示しています:


- サンプルプロファイルにより、サンプルデータのフィールドを指定できます。
- 作業手順により、サブサンプルデータのフィールドを指定できません。

データフィールドは、手動または自動（コマンドなどにより）でデータを入力できます。

サンプル - サブエリア


-  サブエリア **サンプルリスト** は次の機能を提供します。
- サンプルリストの作成と管理を行います。
 - サンプルリストには：
 - 新しいサンプルまたはサブサンプルを追加します。
 - サブサンプルを編集し、それによって各サブサンプルについて割り当てられた作業手順が実行されます。
作業手順は、サンプル分析や波長のキャリブレーションなどを実行できます。

 サブエリア **検索リクエスト** では、検索リクエストを用いて、データベース内のすべてのサンプルとサブサンプルを、それぞれの基準に応じてフィルタリングできます。フィルタ基準は検索リクエストとして保存できます。見つかったサンプルをサンプルリストとして保存できます。

-  サブエリア **サンプルプロファイル** では、サンプルプロファイルは類似のサンプルのセットに対して次のことを指定します。
- サンプルデータの構造、つまりサンプルデータのフィールドの数とタイプ。
 - サンプルデータのフィールドの標準値。
 - それぞれが標準数のサブサンプルに適用される 1 つ以上の標準作業手順。

2.1.4 ワークエリア プロセス

プロセス - 概要

 ワークエリア **プロセス** では、サンプルを分析するための作業手順およびメソッドを定めることができます。

次の [図3](#) はプロセスの構成要素を示しています：

- **作業手順**
- **メソッド**
- **コマンド** (例えば **MEAS SPEC**)

プロセス

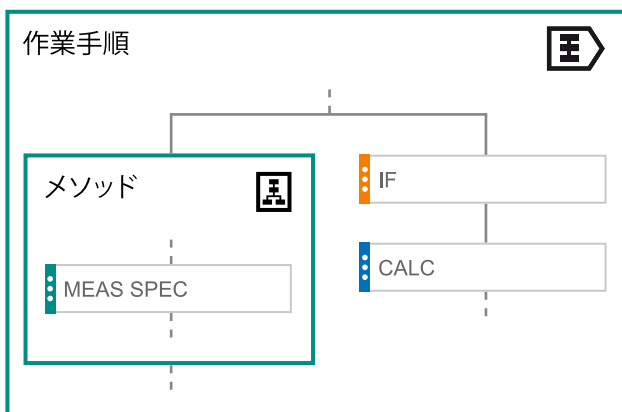




図 3 ワークエリア プロセス

プロセス - サブエリア


 サブエリア**作業手順**では、作業手順をメソッドやコマンドとして作成できます。メソッドとコマンドは順次実行または同時実行できるように配置できます。


 サブエリア**メソッド**では、コマンドからメソッドを作成できます。コマンドは順次実行または同時実行できるように配置できます。

1つのメソッドは、ワークシステムのアクションを制御するためのコマンドを含むことができます。コマンドはメソッドに割り当てられているワークシステムで実行されます。

2.1.5 ワークエリア 装置

装置 - 概要

 ワークエリア**装置**では、装置および付属品を管理することができます。

次の  4 は装置のアクセス方法を示しています:

1. サブエリア**装置**では、インベントリーに利用可能なすべてのネットワークと USB 装置が表示されます。
2. **インベントリー**により装置を予約できます。これにより、装置のファンクションユニットをユーザーは使用できます。
3. サブエリア**ワークシステム**では、測定に必要なすべてのファンクションユニットを含むワークシステムを作成できます。

装置

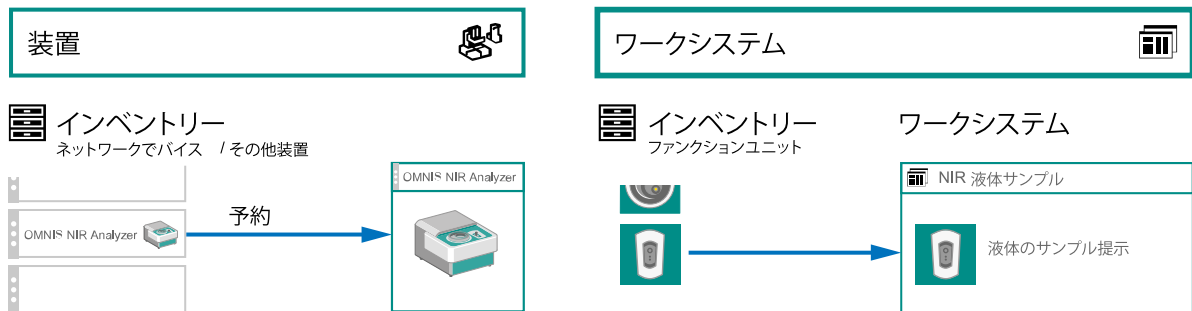


図 4 ワークエリア 装置

装置 - サブエリア



サブエリア**装置**では、装置を予約し、アクセスできます。1つの装置で予約されている場合、ユーザーはそのファンクションユニットを使用できます。

分析後、装置にアクセスできるようになり、別のユーザーは共有することもできます。



サブエリア**ワークシステム**では、1つ以上のファンクションユニットからなるワークシステムを作成できます。同じファンクションユニットを複数のワークシステムに含めることができます。

サンプルを分析するため、メソッドはワークシステムにアクセスし、そこに含まれているファンクションユニットを使用します。ワークシステムは複数のメソッドに割り当てることができます。

注記：ワークシステム内のファンクションユニットは、必要に応じて簡単に交換することができます。この方法で分析をそれぞれの装置で実行し、メソッドを変更する必要はありません。

2.1.6 ワークエリア キャリブレーションと評価

ワークエリア**キャリブレーションと評価**では分光モデルを開発できます。モデルにより、記録したスペクトルを基にしてサンプルの分析を行うことができます：

- **定量化モデル:** 定量対象パラメータ (例えば水分 5.1% など) の予測
- **識別モデル:** サンプル (例えば フルクトースなど) の識別または検証
- **適格性確認モデル:** サンプルの適格性評価 (例えば: サンプルが仕様と一致しているなど)

キャリブレーションと評価 - 概要



ワークエリア**キャリブレーションと評価**ではモデルとモデル階層を開発できます。

ワークエリアはサブエリアに分割されています。

キャリブレーションと評価 – サブエリア



サブエリア **定量化モデル** で定量化モデルを開発できます。

定量化モデルは、記録したサンプルのスペクトルの定量対象パラメータの依存性を説明します。



サブエリア **スロープ/インターセプト補正** では、スロープ/インターセプト補正を作成できます。これにより、特定の定量化モデルを適用する場合のシステムエラーを修正できます。システムエラーは、例えばサンプルまたはサンプル処理に変更があった場合などに発生することがあります。



サブエリア **識別モデル** では、サンプルの識別および検証のモデルを開発できます。

識別モデルは、様々な製品（フルクトース、グルコース、ラクトースなど）で記録されたスペクトルをもとにサンプルを分類します。



サブエリア **適格性確認モデル** では、サンプルの適格性評価用のモデルを開発できます。

適格性確認モデルは、記録したスペクトルに基づいてサンプルを正（使用可）と負（使用不可）に分類します。



サブエリア **モデル階層** ではモデル階層を開発できます：

- サンプルを単一の識別モデルだけで区別できない場合、モデル階層で複数の識別モデルを階層的に結び付けることができます。
- 識別されたサンプルのために定量分析を実行する必要がある場合、モデル階層で定量化モデルを製品と結びつけることができます。
- 定量化モデルのために正確な結果が必要な場合、下位の定量化モデルを作成し、結び付けることができます。これらの下位モデルはそれぞれ、上位モデルの基準値範囲の一部に対して最適化されます。

2.2 実践導入

次の導入では、OMNIS Software の最初の洞察を提供します。

ワークエリア

OMNIS Software は、ユーザーインターフェースを複数の動作範囲に分けています。ワークエリアはさまざまなサブエリアを持つことができます。

このチュートリアルでは、サブエリアはメニューパスにより示されます。例：ワークエリア **プロセス** のサブエリア **メソッド** は、**プロセス ▶ メソッド** により示されます。

以下では、そのようなワークエリアのサブエリアを開く方法が示されています。

1 ワークエリアを開く

画面の左側にあるアイコンをクリックして、さまざまなワークスペースに切り替えます。

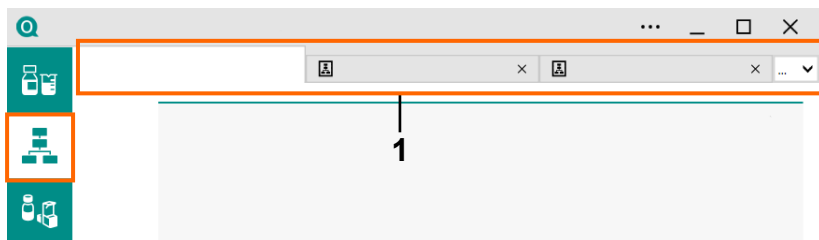


上の例では、ワークエリア **プロセス** を該当するアイコン  をクリックして開きます。

ツールチップ

カーソルをアイコンの上に置くと、ワークエリアの名前、短い説明、詳細情報のリンクを示すツールチップが表示されます。ユーザーインターフェースの他の要素でも、同様の方法でツールチップを表示させることができます。

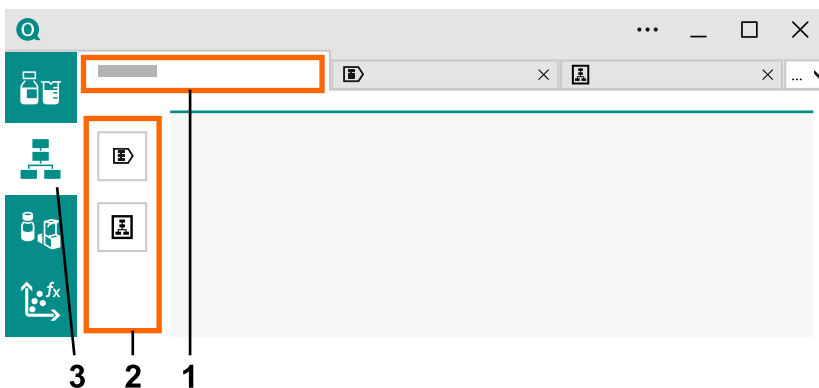
タッチスクリーンでツールチップを表示させるには、要素を長押しします。



ワークエリアには1つ以上のタブ(1)が含まれています。

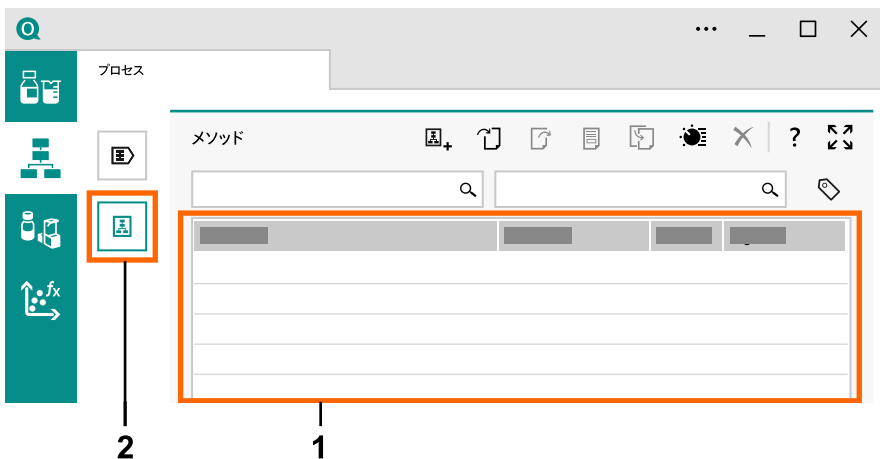
2 サブエリアのタブを開く

一番左のタブ(1)をクリックすると、選択したワークエリア(3)のサブエリア(2)が表示されます。



3 サブエリアを開く

サブエリアメソッドを(2)をクリックして開きます。



サブエリアメソッドには、データベース(1)のすべてのメソッドを含む概要リストが含まれています。

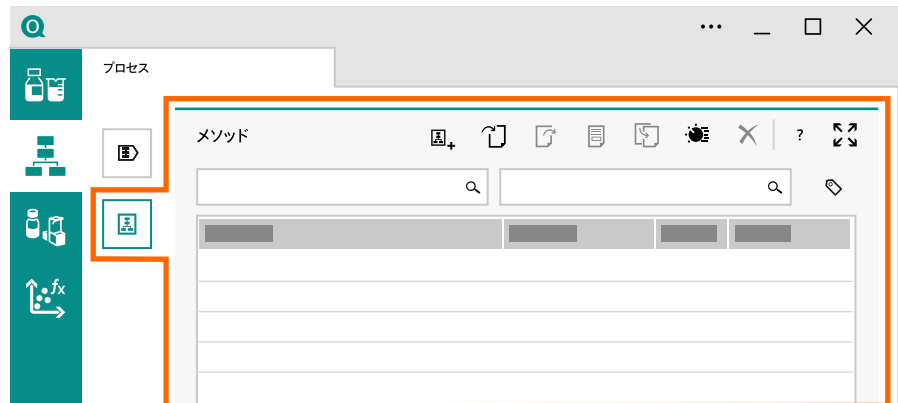
タブ

上記手順3で示されているように、ワークエリアのサブエリアには1つの概要リストが含まれています。リストでエントリを開くか、新規エントリを作成する場合、それは独自のタブで示されます。


次に、新規メソッドを作成する例を説明します。

1 メソッドのサブエリアを開く

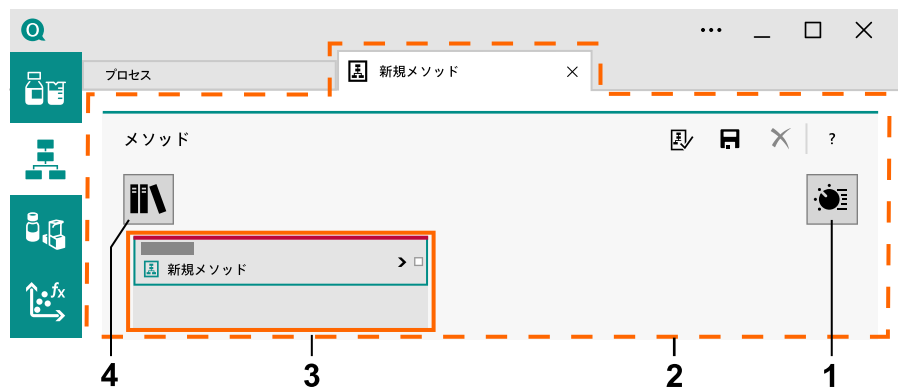
プロセス ▶ メソッドを上記に説明されているように開きます。



2 メソッドの作成

- + をクリックします。

新規メソッド(2)という名称の新規タブが表示され、メソッドを作成できます(3)。



アイコン(1)および(4)により、次に説明するように、現在非表示になっているウィンドウにアクセスできます。

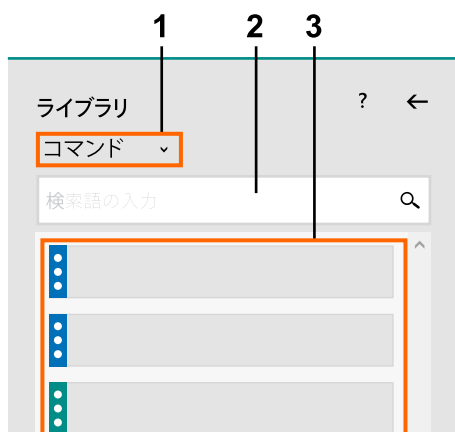
ウィンドウ

ウィンドウはタブの一部であるか、タブ内の範囲の一部です。一部のウィンドウは表示され、その他は非表示になっており、アイコンによって開く必要があります。

1 ライブラリウィンドウ

ライブラリには、プロセスに追加できる要素が含まれています。

- ウィンドウ **ライブラリ** を  をクリックして開きます。ライブラリウィンドウが開きます。

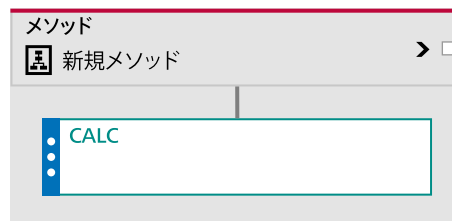


ライブラリウィンドウはそれぞれの**サブエリア**を備えており、選択リスト(1)から選択できます。例えば**ライブラリ ▶ コマンド**などです。
 検索フィールド(2)により、サブエリアの要素、例えば(3)を検索することができます。

- 例としてコマンド **CALC** をメソッドに追加します。
 - **ライブラリ ▶ コマンド**では、コマンド **CALC** を検索します。
 - コマンド **CALC** をドラッグアンドドロップでメソッドに追加します。



メソッドは1つのコマンドのみを含んでいます。





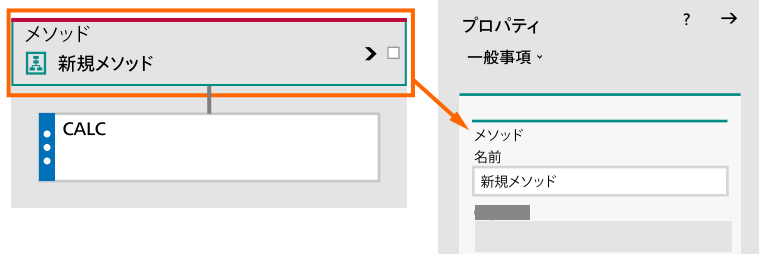
必要に応じてその他コマンドを追加できます。上下に配列されたコマンドは、連続的に実行されます。横に配列されたコマンドは、平行に実行されます。


- ライブラリウィンドウを閉じるには、←をクリックします。




2 プロパティウィンドウ

- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。プロパティウィンドウの内容は選択した要素によります。
 -  をクリックして、メソッドプロパティにアクセスします。




-  をクリックして、コマンドプロパティにアクセスします。

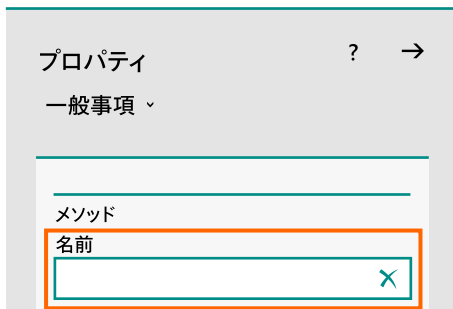


- 要素の一つをダブルクリックすると、サブエリア**プロパティ ▶ パラメータ**が開きます。
- プロパティウィンドウを閉じるには、をクリックします。


導入の完了

1 メソッドに名前を付ける

-  をクリックします。
- **プロパティ ▶ 一般事項**を開きます。
- メソッドの名前を入力します。



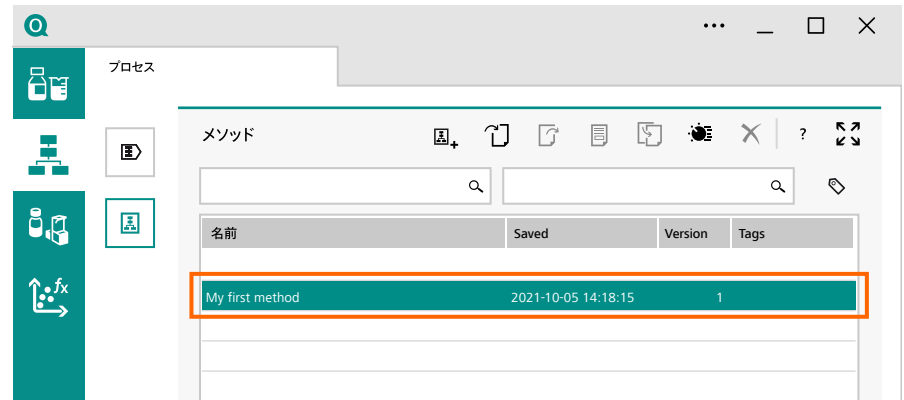
2 メソッドの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押してメソッドを保存します。


3 概要リストを開く

- タブを閉じて、サブエリアのタブ（一番左のタブ） **プロセス** ▶ **メソッド** に戻ります。

作成したメソッドは概要リストにのみ表示されます。



4 メソッドの消去

- 作成したメソッドを選択します。
- 選択したメソッドを  をクリックして消去します。
 注記：メソッドがタブで開かれている間は消去できません。
- 確認メッセージが表示されます。
 消去するメソッドの名前を確認します。
- 消去** を押します。

メソッドはデータベースと概要リストから消去されます。

2.3 OMNIS コマンド

コマンドは特定のタスクを実行します。コマンド **MEAS SPEC** により、例えばスペクトルを記録します。コマンド **MEAS SPEC** はメソッドで使用され、メソッドに割り当てられたワークシステムにアクセスできます。

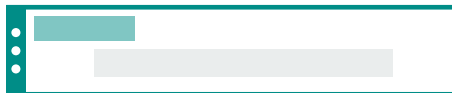
例えば **IF**-コマンドなど、いくつかのコマンドは作業手順に挿入できません。

コマンドは 2 行に渡って表示されます。1 行目にはコマンドタイプの名前 (例えば **MEAS SPEC** など)、2 行目にはユーザー固有のコマンド名が表示されます。

i 標準コマンド名 (スペクトル 1 を記録、など) を特定の名称に変更することをお勧めします。コマンドへの相互参照は自動的に調整されます。

コマンド要素の左端は、コマンドの種類に応じて他の色になっています:

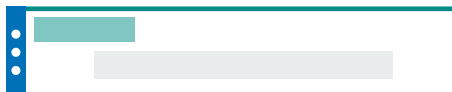
- 測定コマンド、校正コマンドおよび滴定コマンド



- メソッドを制御する構造コマンド (例えば分岐およびループなど)



- ドーピングコマンド、オートメーションコマンド、およびその他のコマンド



コマンド変数

各コマンドは少なくとも一つ以上のコマンド変数を有し、プロセスシーケンスにおいて作成され、計算式にて「**変数名.コマンド名**」の名称で用いることができます。

以下の変数はすべてのコマンドに使用可能です:

「Finished. コマンド名」

コマンドのステータス。

- **無効**: コマンドは (まだ) 開始されていません。
 - **0**: コマンドは実行中です。
 - **1**: コマンドは正しく終了しました。
 - **2**: コマンドは正しく終了しませんでした。エラーまたは警告が生じました。
 - **3**: コマンドは **SKIP** コマンド、もしくはマニュアルで**ライブデータ**にスキップしました。
 - **4**: コマンドはユーザーによるマニュアルの介入 (停止または非常停止)、**STOP** コマンドによって、または並行して進行中のコマンドにおけるエラーが原因で停止しました。
-

2.3.1 スペクトル記録

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数(その後に. コマンド名が続く)
PREP SPEC タイプ Liquid Sample Presentation のファンクションユニット用	<p>液体サンプルの分析を提供します。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 使用するサンプルホルダーが指定されたサンプル容器に適合していることを確認します。そうでない場合、測定を中断します。 ▪ サンプル容器が挿入されていることを確認します。そうでない場合、サンプル挿入のメッセージが表示されます。 ▪ サンプル容器またはサンプルホルダーでの温度調節を行うことができます (29 ページ, 2.5 章を参照)。 	

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数(その後に.コマンド名が続く)
MEAS REF SPEC	<p>割り当てられたファンクションユニットで標準スペクトルを記録します。標準スペクトルは装置に保存されます。</p> <p>ファンクションユニットあたり1つの標準スペクトルがあります。MEAS REF SPEC コマンドを実行するごとに、前の標準スペクトルが上書きされます。</p> <p>保存された標準スペクトルは、各ファンクションユニットで実行されるすべての MEAS SPEC コマンドで使用されます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 標準スペクトルが取得された時刻。さらにタイプ Liquid Sample Presentation のファンクションユニット用： ▪ TemperatureControlMode.Result 温度調節の場所 <ul style="list-style-type: none"> - Inactive: 温度調節なし。 - Sample holder: 温度はサンプルホルダーで調節されました。 - Sample vessel: 温度はサンプル容器で調節されました。 ▪ CurrentTemperature.Result コマンド実行中の現在の温度。 単位: °C
MEAS SPEC	<p>割り当てられたファンクションユニットにサンプルのスペクトルを記録します。</p> <p>該当するファンクションユニットのスペクトルと、そうち装置に保存される標準スペクトルに応じて、サンプルの吸収スペクトルが計算されます。</p>	<p>タイプ Liquid Sample Presentation のファンクションユニット用：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ TemperatureControlMode.Result 温度調節の場所 <ul style="list-style-type: none"> - Inactive: 温度調節なし。 - Sample holder: 温度はサンプルホルダーで調節されました。 - Sample vessel: 温度はサンプル容器で調節されました。 ▪ CurrentTemperature.Result コマンド実行中の現在の温度。 単位: °C

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数(その後に、コマンド名が続く)
VESSEL REMOVAL タイプ Liquid Sample Presentation のファンク ションユニ ャット用	<ul style="list-style-type: none"> サンプル容器の容器の取り外しを確実に行うことができます。プロセスシーケンスは、サンプル容器が取り外されるまで中断します。これにより、シリーズ測定において制御されたシーケンスが可能になります。 サンプル容器の温度が制御されている場合、温度センサーをサンプル容器から外します。サンプル容器を取り外す要求が表示された場合、温度センサーを損傷させることなく、サンプル容器を取り外してください。 温度調節は無効にする、あるいはサンプルホルダーで継続することもできます。 	

2.3.2 予測

PREDICT – 定量化

PREDICT-コマンドは、**MEAS SPEC**-コマンドで記録された吸収スペクトルにモデルを適用します。

定量化モデルは定量対象パラメータの予測を提供します。オプションで、スロープ/γ インターセプト補正を適用できます。

生成されたコマンド変数 (その後に **コマンド名** が続く)

- **Predicted.Quantification.Result**
対象パラメータの予測結果。
- **Uncorrected.Quantification.Result**
スロープ/γ インターセプト補正を適用しない、対象パラメータの予想値。
- **Unit.Quantification.Result**
対象パラメータの単位。
- **IsOutlier.OutlierDetection.Result**
スペクトルがアウトライヤーであるかどうかを示す評価。
0: スペクトルはアウトライヤーとしてみなされ**ません**。
1: スペクトルはアウトライヤーとみなされます (ホテリングの T^2 または Q 残差)。
- **HotellingsT2.OutlierDetection.Result**
スペクトルのホテリングの T^2 。

- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection.Result**
アウトライヤーとしてのマーキングのためのホテルリングの T^2 限界値。限界値はモデルで設定された有意水準に依存します。
- **QResiduals.OutlierDetection.Result**
スペクトルの Q 残差。
- **LimitQResiduals.OutlierDetection.Result**
アウトライヤーとしてのマーキングのための Q 残差限界値。限界値はモデルで設定された有意水準に依存します。
- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
スペクトルの Nearest Neighbor Distance (NND) ([91 ページ](#), 「[定量化モデルの発行](#)」を参照)。
モデルが NND なしで発行されている場合: **無効**
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
NND 限界値。
モデルが NND なしで発行されている場合: **無効**

PREDICT – 識別および検証

PREDICT コマンドは、**MEAS SPEC** コマンドで記録された吸収スペクトルにモデルを適用します。

識別モデルは、用途に応じて、不明なサンプル (例えば フルクトースなど) の識別、またはサンプルの製品属性の検証を行います。

生成されたコマンド変数 (その後に **コマンド名** が続く)

- **Product.Identification.Result**
識別されたサンプルの、特定された製品または特定された製品グループ。
識別に失敗した場合、結果は表示されません。
- **Status.Identification.Result**
 - **Identified**: 識別に成功しました。製品または製品グループを特定できました。
 - **Ambiguous**: 識別に失敗しました。複数の製品の確率値が確率しきい値を超えています。
 - **Unidentified**: 識別に失敗しました。確率しきい値を超えている製品の確率値はありません。
- **Probability.Identification.Result**
 - **0.01 ~ 100**: 確率(%)は、サンプルが製品または製品グループに属する妥当性を示します。
 - **無効**: 識別に失敗しました。

検証にモデルが使用された場合:

- **Status.Verification.Result**
 - **1**: 検証に成功しました。
 - **0**: 検証に失敗しました。

PREDICT – 適格性評価

PREDICT コマンドは、**MEAS SPEC** コマンドで記録された吸収スペクトルにモデルを適用します。

適格性確認モデルはサンプルを正 (使用可) のサンプルとして認証します。

生成されたコマンド変数 (その後に **コマンド名** が続く)

- **Status.Qualification.Result**
 - 1: 適格性評価に成功しました。
 - 0: 適格性評価に失敗しました。

PREDICT – モデル階層

PREDICT コマンドは、**MEAS SPEC** コマンドで記録された吸収スペクトルにモデル階層を適用します。

モデル階層は、用途に応じて、不明なサンプル (例えば フルクトースなど) の識別、サンプルの製品属性の検証、またはサンプルの対象パラメータの定量化を提供します。

生成されたコマンド変数 (その後に **コマンド名** が続く)

- **モデル階層 (識別)**
 - **Product.Identification.Result**
識別されたサンプルの、特定された製品または特定された製品グループ。
識別に失敗した場合、結果は表示されません。
 - **Status.Identification.Result**
Identified: 識別に成功しました。製品または製品グループを識別できました。
Ambiguous: 識別に失敗しました。複数の製品の確率値が確率しきい値を超えています。
Unidentified: 識別に失敗しました。確率しきい値を超えている製品の確率値はありません。
 - **Probability.Identification.Result**
0.01 ~ 100: 確率(%)は、サンプルが製品または製品グループに属する妥当性を示します。
無効: 識別に失敗しました。
- **モデル階層 (検証)**
 - **Status.Verification.Result**
0: 検証に失敗しました。
1: 検証に成功しました。

- **モデル階層 (定量化)**

注記: **x = 定量化モデルの索引** (172 ページ, 11.4.1 章を参照)

定量化モデルに関係性を確立できない場合、次の変数が **無効**の値を出します。

- **Predicted.Quantification{x}.Result**
対象パラメータの予測最終値。
- **Uncorrected.Quantification{x}.Result**
スロープ/γ インターセプト補正を適用しない、対象パラメータの予想値。
- **Unit.Quantification{x}.Result**
対象パラメータの単位。
- **ParameterName.Quantification{x}.Result**
参照パラメータの名前。
- **IsOutlier.OutlierDetection{x}.Result**
スペクトルがアウトライヤーであるかどうかを示す評価。
0: スペクトルはアウトライヤーとみなされ**ません**。
1: スペクトルはアウトライヤーとみなされます (ホテルリングの T^2 または Q 残差)。
- **AnyOutlier.OutlierDetection.Result**
0: 定量化モデルのいずれも、スペクトルをアウトライヤーにランク付けしません。
1: 少なくとも 1 つの定量化モデルがスペクトルをアウトライヤーとしてランク付けしました (ホテルリングの T^2 または Q 残差)。
- **HotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
スペクトルのホテルリングの T^2 。
- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
アウトライヤーとしてのマーキングのためのホテルリングの T^2 限界値。限界値はモデルで設定された有意水準に依存します。
- **QResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
スペクトルの Q 残差。
- **LimitQResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
アウトライヤーとしてのマーキングのための Q 残差限界値。限界値はモデルで設定された有意水準に依存します。
- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
スペクトルの Nearest Neighbor Distance (NND) (91 ページ, 「定量化モデルの発行」を参照)。
モデルが NND なしで発行されている場合: **無効**
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
NND 限界値。
モデルが NND なしで発行されている場合: **無効**

2.3.3 計算と統計

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数（その後に、コマンド名が続く）
CALC	例えば予測結果をさらに処理するために計算を実行します。計算式は計算式エディターを使用して作成できます。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ '結果名' 計算の結果値。 注記：'結果名' は定義、またはコマンドパラメータで計算できます。デフォルト名は '結果1' です。 ▪ 'MeanValue.結果名' 作業手順の同じバージョンおよびメソッドの同じバージョンを用いて以前に測定された、すべての結果の平均値。 ▪ 'StandardDeviation.結果名' 絶対標準偏差。計算に関しては、現在のサブサンプルの値と、作業手順の同じバージョンおよびメソッドの同じバージョンを用いて以前に測定されたすべてのサブサンプルが使用されます。
EVAL BASE STATISTICS	スペクトルの基本的な統計値を決定します。使用するデータ前処理と波長範囲を定義できます。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Mean.Result 吸光度値の平均値。 ▪ StandardDeviation.Result 吸光度値の標準偏差。 ▪ Minimum.Result 吸光度値の最小値。 ▪ Maximum.Result 吸光度値の最大値。 ▪ First.Result 最初の吸光度値 ▪ Last.Result 最後の吸光度値 ▪ Integral.Result スペクトルの積分値。

これにより **IF, LOOP, SKIP, STOP, SYNC** または **WAIT** などの構造コマンドを使用できます。

EXPORT コマンドまたは **REPORT** コマンドは、測定データの出力を作成するために使用できます。

2.3.4 波長のキャリブレーション

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数(その後に.コマンド名が続く)
CAL WL	装置の波長のキャリブレーションを実行します。 波長のキャリブレーションは波長値、つまりスペクトルの x 軸を正規化します。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 波長キャリブレーションが実施された時刻。
VAL WL	波長のキャリブレーションを検証します。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 波長キャリブレーションが検証された時刻。 ▪ OverallStatus.Result 1: 検証に成功しました。 2: 検証に失敗しました。 ▪ ExpectedWavelength.Peak{X} ピーク X の予想される波長(nm)。 ▪ MeasuredWavelength.Peak{X} ピーク X の測定された波長(nm)。 ▪ ExpectedBandwidth.Peak{X} ピーク X の予想される帯域(nm) ▪ MeasuredBandwidth.Peak{X} ピーク X の測定された帯域(nm)。 ▪ Index.Peak{X} ピーク X のピーク番号 例: 'Index.Peak{2}' は結果 2 をもたらします。 X に対するピークが存在しない場合、上記コマンド変数は結果: 無効をもたらします

2.3.5 装置の性能テスト

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数(その後に.コマンド名が続く)
TEST WL	波長テストは、波長正確性と波長精度をテストします。 内部 (必須): 内部波長基準を使用します。 外部 (オプション): 外部波長基準を使用します。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 波長テストが実施された時刻。 ▪ OverallStatus.Result 1: テストは成功しました。 2: テストは失敗しました。

コマンド名	説明	生成されたコマンド変数(その後に、コマンド名が続く)
TEST NOISE	ノイズテストは信号ノイズをテストします。 内部 (必須): 使用サンプル提示の基準光路を使用します。 低フラックステストと高フラックステスト (オプション): 外部参照標準を使用します。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 信号ノイズがテストされた時刻。 ▪ OverallStatus.Result 1: テストは成功しました。 2: テストは失敗しました。
TEST PHOTOMETRIC LINEARITY	外部のオプションテストは、外部参照標準を使用して測光直線性をテストします。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 測光直線性を試験した時刻。 ▪ OverallStatus.Result 1: テストは成功しました。 2: テストは失敗しました。


2.4 装置の予約および共有

特定の装置は、OMNIS システムでのみ使用することができます。

装置を使用できるようにするには、予約する必要があります。装置が予約されている間は、別の OMNIS システムにアクセスできません。

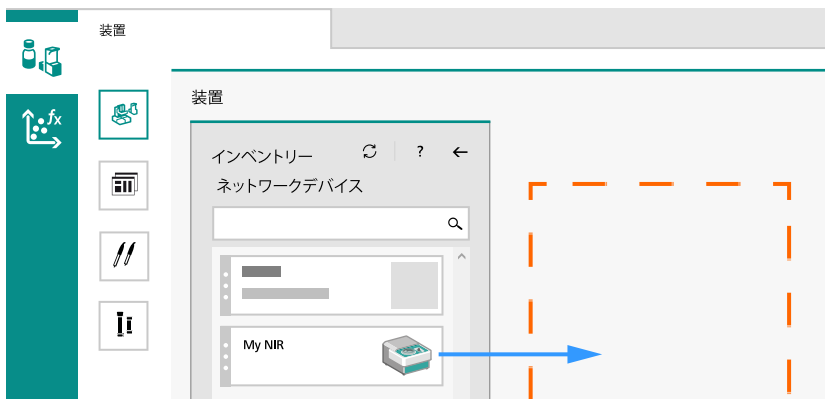
装置の予約

1 利用可能な装置の検索

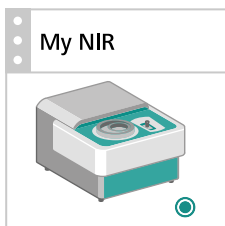
- **装置** ▶ **装置**を開きます。
- ウィンドウ**インベントリ**ををクリックして開きます。
- 必要な装置を検索します。
注記：グレー表示されているアイコンの装置は利用できません。

2 装置の予約

ドラッグアンドドロップで、装置を隣接するワークスペースに移動します。



装置は予約されています：



装置の横にある緑色のステータスライトは、装置が使用可能なことを表示します。

i 必要に応じてその他装置を予約できます。

i 装置は OMNIS Software 終了時も予約されたままです。装置は終了時に Windows により解除されます。コンピューターを再起動すると、装置は再度予約されます。同じユーザーまたは別のユーザーがログインするかどうかについての違いはありません。

装置の共有

予約した装置を恒久的に解除するには、次の手順を実行します。

- 1 サブエリア装置を開く
 - **装置** ▶ **装置**を開きます。

- 2 装置の共有
 - 許可された装置を選択します。
 - **X**をクリックして選択された装置を削除します。

装置が共有され、他のユーザーが利用できるようになります。

2.5 温度調節 (Liquid Sample Presentation)

温度調節は、選択的にサンプルホルダーまたはサンプル内の温度を制御します。


サンプルホルダー内の温度調節

- 使い捨てバイアル、キュベット、フローセルのサンプルホルダーをサポートしています。
- サンプルホルダーの目標温度：25 °C～80 °C（環境温度では 5.0K 以上）。
- 温度センサーの精度: < 0.5 K


サンプル内の温度調節

- 使い捨てバイアルをサポートしています。
- サンプルの目標温度：25 °C～80 °C（環境温度では 5.0K 以上）。
- 温度センサーの精度: < 0.5 K
- 制御アルゴリズム:
 - 制御アルゴリズムでは、サンプルの所定目標温度と、センサーで測定した温度が考慮されています。サンプルのモデル化された温度が十分に安定し、差異が目標温度から 0.5 K 未満に達したら、分光測定を開始できます。必要に応じて、使い捨てバイアルを挿入した直後に分光測定を開始します。
 - 典型的な精度: 1.0 K (環境温度 23 °C、サンプル温度は 25 °C から 80 °C の水サンプルでテスト)。

温度調節をオンにする

- **PREP SPEC** コマンドによる（コマンドパラメータ **温度調節**）。
- マニュアル操作にて（サンプルホルダーの温度調節に対してのみ）:
 - **装置 ▶ 装置** で予約した装置をダブルクリックして**マニュアル操作**を開きます。
 - 範囲**温度を調節**の入力フィールド**目標温度 サンプルホルダー**では必要な温度を入力し、をクリックします。

温度調節をオフにする

- **VESSEL REMOVAL** コマンドによる（オプション**無効化**）。
- マニュアル操作にて:
 - **装置 ▶ 装置** で予約した装置をダブルクリックして**マニュアル操作**を開きます。
 - エリア **温度を調節** にて  をクリックします。温度調節は、サンプルホルダー内またはサンプル内で温度が測定されるかどうかに関係なく終了します。



- 温度調節は一般的に 2 時間後に無効になるか、装置をオフにすることで終了します。



3 装置の準備

装置がスペクトルを記録できるようになるまでに、次の準備が必要です。

- **ワークシステム**をオンにする必要があります。

次に、次のタスクによりスペクトルが互いに比較可能であることを確認します。

- **波長のキャリブレーション**はスペクトルの x 軸をキャリブレーションします。
- **装置の性能テスト**は、装置の性能が要件に適しているかを確認します。
装置の性能テストは定期的実施する必要があります (161 ページ, 10.1 章を参照)。

i さらに、スペクトルの y 軸の吸光度値を標準化する必要があります。その際、スペクトルを記録する前に、それぞれ **MEAS REF SPEC** コマンドを使用します。


i OMNIS Software のシーケンスの図は補遺にあります (178 ページ, 「装置の準備」を参照)。

3.1 ワークシステムの作成


前提条件:

- スペクトロメーターが予約されていること (27 ページ, 「装置の予約および共有」を参照)。


1 ワークシステムの作成

- **装置** ▶ **ワークシステム** で  をクリックします。
新規タブが開きます。

2 ワークシステムに名前を付ける


- サブエリア **新規ワークシステム** を選択します。
サブエリアのフレームが緑になります。
- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- **プロパティ** ▶ **一般事項** 対応する名前をフィールド **名前** に入力します。

3 ファンクションユニットの追加

- ウィンドウ**インベントリ**ををクリックして開きます。
- ファンクションユニット **Liquid Sample Presentation** または **Solid Sample Presentation** をドラッグアンドドロップによってワークシステムに追加します。

i タイプ **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** の装置は2つのファンクションユニットを利用できます。Metrohm 推奨、個別のワークシステムを2つのファンクションユニットのうちの1つで作成することをお勧めします。

i ファンクションユニットはワークシステムから削除できません。

- 消去するファンクションユニットを選択します。
- をクリックして、ボタン[Entf]を押します。

i 必要に応じてファンクションユニットの名称を変更できません。

- 名前を変更したいファンクションユニットを選択します。
- **プロパティ ▶ 一般事項 ▶ 名前**で対応する名前を入力します。

4 ワークシステムの保存

- をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

i 1つのファンクションユニットを複数のワークシステムに割り当てることができます。

i ワークシステムが作成されると、装置は承認され、必要に応じて改めて予約できます。

3.2 波長のキャリブレーション

波長のキャリブレーションはスペクトルの波長値の比較可能性を保証します。内部の計量学的に追跡可能な波長基準を使用します。

波長のキャリブレーションには2つの手順があります。

1. コマンド **CAL WL** は波長値、つまりスペクトルの x 軸を規格化します。
2. コマンド **VAL WL** は波長のキャリブレーションを検証します。ファンクションユニットでスペクトルを記録する前に、検証が成功している必要があります。

i タイプ **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** の装置は2つのファンクションユニットを利用できます。波長のキャリブレーションと検証は、2つのファンクションユニットに対して個別に実行する必要があります。

3.2.1 波長のキャリブレーションの準備

i OMNIS Software を初めて使用する場合、続ける前に導入を読んでください (11 ページ、「実践導入」を参照)。

コマンド **CAL WL** および **VAL WL** でメソッドを作成するためには、以下の手順に従ってください。続いて、作業手順、サンプルプロファイル、サンプルリストを作成します。これにより、波長のキャリブレーションはサンプル測定と同じ方法で開始できます。


メソッドの作成

1 メソッドの作成

- **プロセス ▶ メソッド** で  をクリックします。

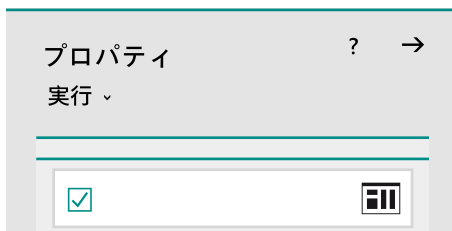
新規作成されたメソッドとタイトル **新規メソッド** を有するタブが開きます。

2 メソッドに名前を付ける

- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- **プロパティ ▶ 一般事項** で、次の名前をフィールド **名前** に入力します: **Wavelength Cal/Val**。

3 ワークシステムをメソッドに割り当てる

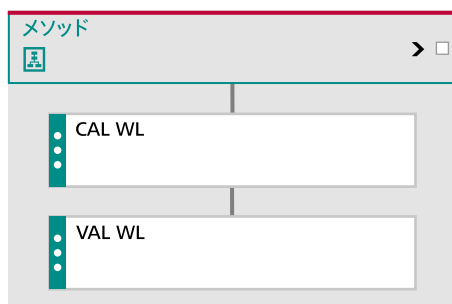
- **プロパティ ▶ 実行** で使用するワークシステムを選択します。



- 本文書のすべてのメソッドについて、同じワークシステムを使用します。

4 コマンドの挿入

- ウィンドウ **ライブラリ** を  をクリックして開きます。
- **ライブラリ ▶ コマンド** で **CAL WL** コマンドを検索します。
- **CAL WL** コマンドをドラッグアンドドロップでメソッドに挿入します。
- **VAL WL** コマンドを検索し、**CAL WL** コマンドに配置します。



- コマンドの順序は重要です。上下に配列されたコマンドは、連続的に実行されます。まず、**CAL WL** コマンドを、次に **VAL WL** コマンドを実行します。

- コマンドは標準スペクトルを自動的に記録します。そのため、**MEAS REF SPEC** コマンドは不要です。

5 メソッドの保存

-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

作業手順の作成

1 作業手順の作成

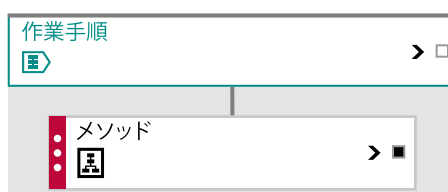
- **プロセス ▶ 作業手順** を、 をクリックし、 を開きます。
- 新規作業手順を  をクリックして作成します。

2 作業手順に名前を付ける

- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- **プロパティ** ▶ **一般事項** で、次の名前をフィールド **名前** に入力します: **Wavelength Cal/Val**

3 メソッドの挿入

- ウィンドウ **ライブラリ** を  をクリックして開きます。
- 作成したメソッド **w** を **ライブラリ** ▶ **メソッド** をドラッグアンドドロップして作業手順に追加します。



4 作業手順の保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

サンプルプロファイルの作成

1 サンプルプロファイルの作成

- **サンプル** ▶ **サンプルプロファイル** で  をクリックします。

2 サンプルプロファイルに名前を付ける

- 次の名前をフィールド **サンプルプロファイル名** に入力します: **Wavelength Cal/Val**



3 サンプル名の入力フィールド

- 範囲 **サンプルデータ** にはサンプル名のためのフィールドが含まれます:

サンプルデータ

フィールド名 (短)
名前

フィールド名 (長)
名前

入力フィールドのタイプ
テキスト

用途
入力フィールド

プロパティ 入力フィールド

標準値
My Sample name

- サンプル名に対して **標準値** を入力します。

4 作業手順およびサブサンプル数の決定

- 範囲 **作業手順 / サブサンプル** で作業手順 **Wavelength Cal/Val** を選択します。
- サブサンプルの数** は、各サンプルに自動的に追加されるサブサンプルの数を決定します。 **1** を入力します。

作業手順 / サブサンプル	
作業手順	サブサンプルの数
1	1

5 サンプルプロファイルの保存

-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

サンプルリストの作成

1 サンプルリストの作成

- サンプル ▶ サンプルリスト** で  をクリックします。


2 サンプルリストに名前を付ける

- 次の名前をフィールド **名前** に入力します: **Wavelength Cal/Val**
[Enter] を押します。


サンプルリスト


3 サンプルリストの保存

- ・  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

 サンプルは後で追加されます。

3.2.2 波長のキャリブレーションの開始

 実行間隔に注意してください (162 ページ, 10.2 章を参照)。

 Metrohm は、波長のキャリブレーションを開始する前に、装置をオンにしてから 1 時間待つことを推奨します。

波長のキャリブレーションの開始

前提条件:

波長のキャリブレーションの準備が完了している (33 ページ, 「波長のキャリブレーションの準備」を参照)。


1 装置の予約

スペクトロメーターを予約します (27 ページ, 「装置の予約および共有」を参照)。


2 サンプルリスト 'Wavelength Cal/Val' を開きます。

- ・ ワークエリア **サンプル** を開きます。
- ・ サンプルリスト **Wavelength Cal/Val** を閉じると、タブ **サンプル** にサブエリア **サンプルリスト** が開き、サンプルリスト **Wavelength Cal/Val** をダブルクリックします。


3 サンプルプロファイル 'Wavelength Cal/Val' の選択



- ・ アイコン  の左にある選択リストで、サンプルプロファイル **Wavelength Cal/Val** を選択します。







 続いて、追加されたサンプルは仕様に従って選択されたサンプルプロファイルで作成されます。


4 サンプルの追加

-  をクリックして、新規サンプルをサンプルリストに追加します。



サンプルリストに新規エントリが表示されます。これには  でマークされたサンプルと、その後の  でマークされたサブサンプルが含まれています。

	サンプル名		番号	サブサンプル名		
	サンプル 1		1	サブサンプル 1		

サンプルプロファイルに従って、新規サンプルは、作業手順 **Wavelength Cal/Val** が使用する 1 つのサブサンプルを含みます。

- サンプル名とサブサンプル名を必要に応じて編集します。
-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押してサンプルリストを保存します。

5 波長のキャリブレーションの実施


- 追加したサンプルを選択します。
 - 波長のキャリブレーションを  をクリックして開始します。
- キャリブレーション完了後、サブサンプルのステータスが  として表示されます。

6 結果のチェック

- 右下範囲の **結果 ▶ 生データ** を開きます。


キャリブレーションと検証の結果が表示されます。検証の総ステータスを確認します：

総ステータス
成功

-  **ステータス警告:** 検証に失敗した場合、サンプルリスト内のサブサンプルアイコンが赤でマークされます：



i 最後に実行された波長のキャリブレーションと波長の検証は、デバイスプロパティで見ることができます:

- **装置 ▶ 装置** で予約された装置を選択します。
-  をクリックすると、ウィンドウ **プロパティ** が開きます。
- **固有データ ▶ 校正データおよびテストデータ**

i **VAL WL** コマンド変数 **OverallStatus.Result** は、検証の総ステータスを表示します:

- 1: 検証に成功しました。
- 2: 検証に失敗しました。

3.3 装置の性能テスト

内部装置および外部装置の性能テストを使用できます:

- **内部の装置の性能テスト (必須)**
 対応するファンクションユニットでスペクトルを記録する前に、内部装置の性能テストを完了している必要があります。
 - 波長テストは、**TEST WL** コマンドで波長正確性と波長精度をテストします。波長テストは、内部の計量学的に追跡可能な波長基準を使用します。
 - ノイズテストでは、**TEST NOISE** コマンドを使って、測光ノイズ、ピーク ツー ピークノイズ、ノイズのベースラインバイアスを確認します。
- **外部の装置の性能テスト (オプション)**
 外部の装置の性能テストは、USP <856> や Ph.Eur 2.2.40、JP 2.27などに準じた検証をサポートします。次のコマンドを使用します: **TEST WL** (波長正確性と波長精度)、**TEST NOISE** (低い光強度および高い光強度での測光ノイズ、ピークツープークノイズ、ベースラインバイアス)、**TEST PHOTOMETRIC LINEARITY** (測光直線性)。
 外部の装置の性能テストでは、外部の計量的に追跡可能な参照基準が必要となります ([45 ページ, 3.3.3 章を参照](#))。

3.3.1 内部の装置の性能テストの準備


コマンド **TEST WL** および **TEST NOISE** でメソッドを作成するためには、以下の手順に従ってください。続いて、作業手順、サンプルプロファイル、サンプルリストを作成します。これにより、装置の性能テストはサンプル測定と同じ方法で開始できます。

メソッドの作成

1 メソッドの作成

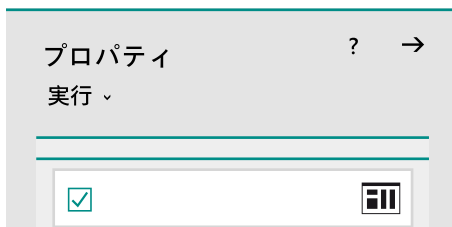
- プロセス ▶ メソッド で  をクリックします。

2 メソッドに名前を付ける

- ウィンドウ プロパティ を  をクリックして開きます。
- プロパティ ▶ 一般事項 で、次の名前をフィールド 名前 に入力します: 装置の性能テスト。

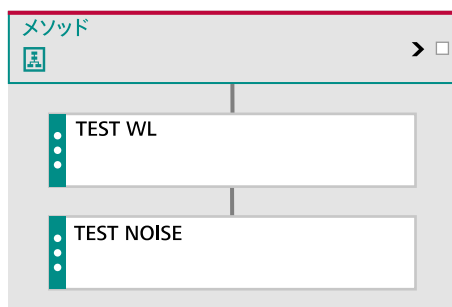
3 ワークシステムをメソッドに割り当てる


- プロパティ ▶ 実行 で使用するワークシステムを選択します。




4 コマンドの挿入

- ウィンドウ ライブラリ を  をクリックして開きます。
- ライブラリ ▶ コマンド で TEST WL コマンドを検索します。
- TEST WL コマンドをドラッグアンドドロップでメソッドに挿入します。
- TEST NOISE コマンドを検索し、TEST WL コマンドに配置します。



-  コマンドは標準スペクトルを自動的に記録します。そのため、MEAS REF SPEC コマンドは不要です。

-  装置の性能テストでは、サンプル提示に応じてそれぞれ基準光路を使用します。波長テストは、内部の計量学的に追跡可能な波長基準を使用します。
 外部の性能テスト(オプション)では、外部の参照基準が必要となります (45 ページ, 3.3.3 章を参照)。

5 メソッドの保存


-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

作業手順の作成

1 作業手順の作成

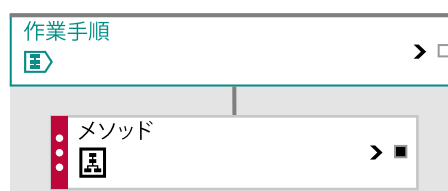
- プロセス ▶ 作業手順で  をクリックします。

2 作業手順に名前を付ける

- ウィンドウプロパティを  をクリックして開きます。
- プロパティ ▶ 一般事項で、次の名前をフィールド名前に入力します: 装置の性能テスト

3 メソッドの挿入

- ウィンドウライブラリを  をクリックして開きます。
- 作成したメソッドwをライブラリ ▶ メソッドをドラッグアンドドロップして作業手順に追加します。



4 作業手順の保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

サンプルプロファイルの作成

1 サンプルプロファイルの作成

- サンプル ▶ サンプルプロファイルで  をクリックします。

2 サンプルプロファイルに名前を付ける

- 次の名前をフィールド **サンプルプロファイル名** に入力します: **装置の性能テスト**。

サンプルプロファイル
サンプルプロファイル名

3 サンプル名の入力フィールド

範囲 **サンプルデータ** にはサンプル名のためのフィールドが含まれます:

サンプルデータ

フィールド名 (短)
名前

フィールド名 (長)
名前

入力フィールドのタイプ
テキスト

用途
入力フィールド

▼ プロパティ入力フィールド

標準値
My Sample name

- サンプル名に対して **標準値** を入力します。

4 作業手順およびサブサンプル数の決定

- 範囲 **作業手順 / サブサンプル** で作成した作業手順 **装置の性能テスト** を選択します。
- サブサンプルの数** は、各サンプルに自動的に追加されるサブサンプルの数を決定します。 **1** を入力します。

作業手順 / サブサンプル	
作業手順	サブサンプルの数
1	1

5 サンプルプロファイルの保存

- 保存** をクリックするか、 **[CTRL]+[S]** キーを押します。

サンプルリストの作成

1 サンプルリストの作成

- **サンプル ▶ サンプルリスト** で  をクリックします。

2 サンプルリストに名前を付ける


- 次の名前をフィールド **名前** に入力します: **装置の性能テスト**。

サンプルリスト


[Enter]を押します。

3 サンプルリストの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

 サンプルは後で追加されます。

3.3.2 内部の装置の性能テストの実行

 推奨実行間隔に注意してください (161 ページ, 10.1 章を参照)。

装置の性能テストの実施

前提条件:

装置の性能テストの準備ができていないこと (39 ページ, 「内部の装置の性能テストの準備」を参照)。


1 装置の予約

スペクトロメーターを予約します (27 ページ, 「装置の予約および共有」を参照)。

2 サンプルリスト「装置の性能テスト」を開く

- ワークエリア **サンプル** を開きます。
- サンプルリスト **装置の性能テスト** を閉じると、タブ **サンプル** にサブエリア **サンプルリスト** が開き、サンプルリスト **装置の性能テスト** をダブルクリックします。


3 サンプルプロファイル'装置の性能テスト'の選択



- アイコンの左にある選択リストで、サンプルプロファイル**装置の性能テスト**を選択します。







- i** 続いて、追加されたサンプルは仕様に従って選択されたサンプルプロファイルで作成されます。


4 サンプルの追加

- をクリックして、新規サンプルをサンプルリストに追加します。


サンプルリストに新規エントリが表示されます。これにはでマークされたサンプルと、その後のでマークされたサブサンプルが含まれています。


	サンプル名		番号	サブサンプル名
	サンプル 1		1	サブサンプル 1

サンプルプロファイルに従って、新規サンプルは、作業手順**装置の性能テスト**が使用する1つのサブサンプルを含みます。

- サンプル名とサブサンプル名を必要に応じて編集します。
- をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押してサンプルリストを保存します。

5 装置の性能テストの実施

- 装置の性能テストを実施するサンプルを選択します。
- をクリックしてテストを開始します。

装置の性能テスト完了後、サブサンプルのステータスがとして表示されます。

6 結果のチェック

- 右下範囲の**結果 ▶ 生データ**を開きます。


波長テストとノイズテストの結果が表示されます。2つのテストに対して総ステータスを確認します:



i ステータス警告: 装置の性能テストに失敗した場合、サンプルリスト内のサブサンプルアイコンが赤でマークされます:



i 最後に実行された装置の性能テストは、デバイスプロパティで見ることができます:

- **装置 ▶ 装置**で予約された装置を選択します。
- をクリックすると、ウィンドウ**プロパティ**が開きます。
- **固有データ ▶ 校正データおよびテストデータ**

i コマンド **TEST WL** と **TEST NOISE** の変数 **OverallStatus.Result** はそれぞれテストの総ステータスを表示します:

- 1: テストは成功しました。
- 2: テストは失敗しました。

i テストが失敗した場合のエラー除去の手順に注意してください ([161 ページ, 10.1 章を参照](#))。

3.3.3 外部の装置の性能テスト (オプション)

外部の装置の性能テストは、USP <856> や Ph.Eur 2.2.40、JP 2.27 などに準じた検証をサポートします。外部の計量的に追跡可能な参照基準が必要となります。各外部参照基準に対し、対応する OMNIS 標準サンプルファイル (*.ostd) を OMNIS Software にインポートする必要があります ([Metrohm Knowledge Base](#) を参照してください)。

内部の装置の性能テストと外部の装置の性能テストを相互に独立して実行できるようにするため、以下が必要です:

- 個別のメソッド、作業手順およびサンプルプロファイルを作成します。
- 外部の装置の性能テストに対し、以下の修正と補足とともに、内部の装置の性能テストと同様の手順を実行します。

i コマンドは標準スペクトルを自動的に記録します。そのため、**MEAS REF SPEC** コマンドは不要です。

TEST WL


- メソッドで **TEST WL** コマンドを挿入し、選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**を をクリックして開きます。

- **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 測定パラメータ**で測定パラメータを入力します:
 - 測定モード**外部**を選択します。
 - **Liquid Sample Presentation**: 標準
WL Standard Transmission OMNIS NIRを選択します。
 - **Solid Sample Presentation**: 標準
WL Standard Reflection OMNIS NIRを選択します。


TEST NOISE – 低フラックステスト

- メソッドで**TEST NOISE** コマンドを挿入し、選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。
- **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 測定パラメータ**で測定パラメータを入力します:
 - 測定モード**低フラックステスト**を選択します。
 - **Liquid Sample Presentation**: 標準
ND Standard Transmission 4 (OD 1.0) OMNIS NIRを選択します。
 - **Solid Sample Presentation**: 標準
ND Standard Reflection 2 (R10) OMNIS NIRを選択します。

TEST NOISE – 高フラックステスト

- メソッドで他の**TEST NOISE** コマンドを挿入し、選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。
- **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 測定パラメータ**で測定パラメータを入力します:
 - 測定モード**高フラックステスト**を選択します。
 - **Liquid Sample Presentation**: 標準
ND Standard Transmission 0 (OD 0) OMNIS NIRを選択します。
 - **Solid Sample Presentation**: 標準
ND Standard Reflection 5 (R99) OMNIS NIRを選択します。

TEST PHOTOMETRIC LINEARITY

- メソッドで**TEST PHOTOMETRIC LINEARITY** コマンドを挿入し、選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。

- **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 測定パラメータ**で参照基準を入力します:
 - **Liquid Sample Presentation:**
 - ND Standard Transmission 1 (OD 0.1) OMNIS NIR
 - ND Standard Transmission 2 (OD 0.3) OMNIS NIR
 - ND Standard Transmission 3 (OD 0.6) OMNIS NIR
 - ND Standard Transmission 4 (OD 1.0) OMNIS NIR
 - ND Standard Transmission 5 (OD 1.7) OMNIS NIR
 - **Solid Sample Presentation:**
 - ND Standard Reflection 1 (R05) OMNIS NIR
 - ND Standard Reflection 2 (R10) OMNIS NIR
 - ND Standard Reflection 3 (R40) OMNIS NIR
 - ND Standard Reflection 4 (R80) OMNIS NIR
 - ND Standard Reflection 5 (R99) OMNIS NIR

外部の装置の性能テストの実行

i 推奨実行間隔に注意してください (161 ページ, 10.1 章を参照)。

内部の装置の性能テストと同様にテストを実行します。参照基準を配置する場合は、範囲**曲線とデータ ▶ ライブデータ**の指示に従ってください。

注記

誤った標準

配置された標準と、対応するコマンド絵選択された標準が一致しない場合、テストの結果は誤ったものになります。

- 配置した標準の製造番号は、範囲**曲線とデータ ▶ ライブデータ**で表示される製造番号と一致する必要があります。

4 モデル開発の準備

タイプ **Liquid Sample Presentation** のファンクションユニットにより、液体サンプルのモデルを開発できます。タイプ **Solid Sample Presentation** のファンクションユニットにより、固形物のサンプルのモデルを開発できます。

モデル開発は校正サンプルと検証サンプルの収集で始まります。

サンプルの収集

モデル開発のためにサンプルを慎重に収集します：

- サンプルには、一般的に将来予想されるサンプルバリエーションや、季節変動、環境条件を含める必要があります。
- サンプルは、バリエーション範囲全体にわたって均一に分割される必要があります。
- できれば、キャリブレーションと検証のサンプルセットを個別に収集します。
- すべてのサンプルは同じ方法で取り扱う必要があります。

定量化

Metrohm は、サンプルの最低数約 50、あるいは最初のモデルに対しては約 20 のサンプル数を推奨します。条件、化学成分、粒径のより多くの変動をカバーする必要があるほど、より多くのサンプルが必要です。

1. 各サンプルについて、1つのスペクトルが記録されます。
2. 各サンプルについて、例えば滴定などにより、対象パラメータの基準値は基準メソッドを介して、測定されます。
特定の対象パラメータに対し、サンプルごとに複数の基準値がある場合、それぞれのサンプルに対する基準値の相加平均値を計算する必要があります。平均値は、各サンプルに対する基準値として使用されます。各平均値は、基準値の同じ数から生成する必要があります。この場合、性能指数は特定数の基準値に比例して表されます。

基準測定時にサンプルが変化または破損していない場合、測定を逆の手順でも実行できます。

識別

各製品について、サンプルは予想されるバリエーションをカバーしている必要があります。製品は様々な数のサンプルを有することができます、最低数は 3 です。

- 各サンプルについて、1つのスペクトルが記録されます。
- サンプルの同一性が識別されている必要があります。

適格性評価

校正サンプルは予想されるバリエーションをカバーしている必要があります。校正セットのサンプルの最小数は3です。

オプションで、正の検証セットまたは負の検証セットにそれぞれ検証サンプルを割り当てることができます。

- 各サンプルについて、1つのスペクトルが記録されます。

ワークフロー

i OMNIS Software のシーケンスの図は補遺にあります:

- 校正サンプルのスペクトルの記録 (180 ページ, 「[校正サンプルのスペクトルの記録](#)」を参照)
- 基準値または製品名の登録 (179 ページ, 「[基準値または製品名の登録](#)」を参照)

4.1 スペクトル記録の準備

各キャリブレーションサンプルと検証サンプルに対して、スペクトルを記録する必要があります。

i 各サンプルについて1つのスペクトルのみを記録します。不均質な固形物について、オプション**多点測定**を使用します (s. u.)。



スペクトル記録を準備するため、メソッド、作業手順、サンプルプロファイル、サンプルリストを次のように作成します。

メソッドの作成

前提条件:

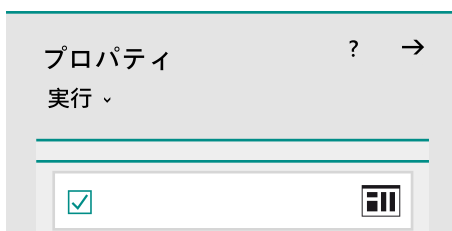
適切なワークシステムが作成されている (31 ページ, 「[ワークシステムの作成](#)」を参照)。

1 メソッドの作成と名前付け


- プロセス ▶ **メソッド** で  をクリックします。
- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- プロパティ** ▶ **一般事項** で適切な名前をフィールド **名前** に入力します。

2 ワークシステムを割り当てる

- **プロパティ ▶ 実行**で使用するワークシステムを選択します。
 - 液体サンプルについて、タイプ **Liquid Sample Presentation** のファンクションユニットを含むワークシステムを選択します。
 - 固形物サンプルについて、タイプ **Solid Sample Presentation** のファンクションユニットを含むワークシステムを選択します。



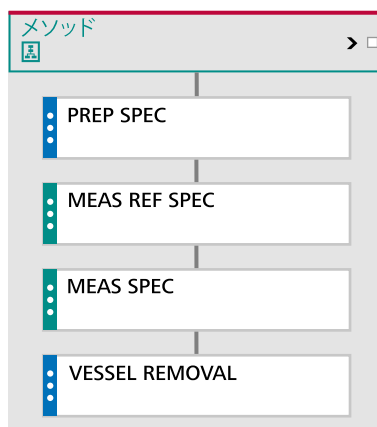
3 コマンドの挿入

- ウィンドウ **ライブラリ** を  をクリックして開きます。
- **ライブラリ ▶ コマンド** で次のコマンドを検索し、ドラッグアンドドロップでメソッドに追加します。
 - 液体のサンプル提示のみ: **PREP SPEC** は液体サンプルの分析を提供します。
 - **MEAS REF SPEC** は標準スペクトルを記録します。
 - **MEAS SPEC** はサンプルのスペクトルを記録します。
 - 液体のサンプル提示のみ: **VESSEL REMOVAL** は、液体のサンプル提示のサンプルホルダーからサンプル容器を管理して取り外すためのものです。

コマンドの正しい順序に注意してください：

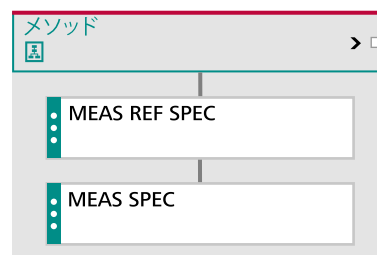
液体サンプル

基本構造



固形物のサンプル

基本構造




i 標準スペクトルと記録したサンプルのスペクトルに従って、サンプルの吸収スペクトルを計算します。

i ファンクションユニットあたり 1 つの標準スペクトルのみあります。コマンド **MEAS REF SPEC** を実行するごとに、前の標準スペクトルが上書きされます。

そのため、**MEAS SPEC** コマンドは各ファンクションユニットの最後に記録された標準スペクトルを常に使用します。

i Metrohm は、各コマンドに対して**プロパティ ▶ 一般事項**で意味のある名前を与えることを推奨します。

4 MEAS SPEC コマンドパラメータの設定 (固形物のサンプル提示の場合のみ)

- **MEAS SPEC** コマンドを選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。
- **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 測定パラメータ**で測定パラメータを乳 r y 丸します。
 - サンプルの測定に使用するホルダーを選択します。
 - サンプル測定に使用するサンプル容器を選択します。
 - 測定モードを選択します:
 - 一点測定**、均質な固形物用。装置は 1 つのポジションで測定を実行します。サンプルホルダーは回りません。
 - 多点測定**、不均質な固形物用。以下のいずれのモードも使用できます:
 - (a) **5 点測定**: 装置は異なる 5 つのポジションで測定を実行します。各測定後、サンプルホルダーは次のポジションに回転します。
 - (b) **連続測定**: サンプルホルダーが回転している間、装置は連続測定します。


5 PREP SPEC コマンドパラメータの設定 (液体のサンプル提示の場合のみ)

PREP SPEC コマンドは温度調節をできるようにします。サンプル (使い捨てバイアルの場合のみ) またはサンプルホルダーの温度を 25 °C ~ 80 °C の値の間で制御できます ([29 ページ, 2.5 章を参照](#))。

PREP SPEC コマンドは、使用するサンプルホルダーが指定されたサンプル容器に適合していることを確認します。そうでない場合、測定を中断します。

サンプル容器検出が、サンプル容器が装着されていないことを検出した場合、サンプル装着を要求するメッセージが表示されます。

i **フローセル** のサンプル容器タイプでは、サンプル容器検出は有効になっていません。

- **PREP SPEC** コマンドを選択します。
- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。サブエリア **パラメータ** を開きます。
 - **サンプル容器** で使用するタイプと正確なサンプル容器の名称を選択します。
 - **温度調節** で温度調節をオンまたはオフにします。必要に応じて温度調節の場所と目標温度を指定します。サンプルの温度調節については、オプション **サンプル容器** を選択します。
注記: 目標温度は環境温度の最大 5.0 K を下回ることができます。
 - 要求された場合、付属する **VESSEL REMOVAL** コマンドを選択します。

i **注記**

温度センサーの損傷

温度がサンプル容器で制御されている間は、温度センサーはサンプル容器と直接接触するようにしてください。温度センサーを損傷させないために、サンプル容器を取り外す前に、温度センサをサンプル容器から外してください。それには **VESSEL REMOVAL** コマンドを使用します。


6 VESSEL REMOVAL コマンドパラメータの設定 (液体のサンプル提示の場合のみ)

VESSEL REMOVAL コマンドによりサンプル容器を取り外すことができます。プロセスシーケンスは、サンプル容器が取り外されるまで中断します。これにより、シリーズ測定において制御されたシーケンスが可能になります。



サンプル容器の温度が制御されている場合、温度センサーをサンプル容器から外します。サンプル容器を取り外す要求が表示された場合、温度センサーを損傷させることなく、サンプル容器を取り外してください。

温度調節は無効にする、あるいはサンプルホルダーで継続することもできます。

- **VESSEL REMOVAL** コマンドを選択します。

- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。サブエリア **パラメータ** を開きます。
 - オプション **サンプル容器の確実な取り外し** を有効にします。これによりプロセスフローが中断し、ユーザーはサンプル容器をサンプルホルダーから取り外すように求められます。サンプルが取り外されると、プロセスフローは続行されます。
 - パラメータ **温度調節サンプルホルダー** に対して、オプション **続行** を有効にします。これにより、温度調節の位置に関係なくサンプルホルダー上の既存の温度制御が続行されます。

7 メソッドの保存


- メソッドを、 をクリックして検証します。
-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押してメソッドを保存します。

作業手順の作成

1 作業手順の作成

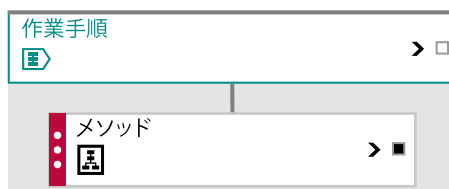
- **プロセス ▶ 作業手順** で  をクリックします。

2 作業手順に名前を付ける

- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- **プロパティ ▶ 一般事項** で適切な名前をフィールド **名前** に入力します。

3 メソッドの挿入

- ウィンドウ **ライブラリ** を  をクリックして開きます。
- 作成したメソッドをドラッグアンドドロップで **ライブラリ ▶ メソッド** から作業手順に挿入します。



4 作業手順の保存

-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

サンプルプロファイルの作成

1 サンプルプロファイルの作成と名前付け

- サンプル ▶ サンプルプロファイル で  をクリックします。
- 適切な名前をフィールド **サンプルプロファイルの名前** **サンプルプロファイルの名前** に入力します。

2 サンプル名の入力フィールド

範囲 **サンプルデータ** にはサンプル名のためのフィールドが含まれます:

サンプルデータ

フィールド名 (短)

名前

フィールド名 (長)

名前

入力フィールドのタイプ

テキスト ▼

用途

入力フィールド ▼


▲ プロパティ 入力フィールド


標準値

My Sample name

- サンプル名に対して **標準値** を入力します。

3 定量化用：参照パラメータ用に入力フィールドを追加する


 サブサンプルデータではなく、サンプルデータのみを参照パラメータとして使用できます。

- 範囲 **サンプルデータ** で  をクリックして、入力フィールドを追加します。
新規入力フィールドが右に追加されます。
- **フィールド名 (短)**: サンプルリストで列ヘッダーとして使用される名前を入力します。

- i** 入力フィールド **フィールド名 (短)** を消去するには右クリックし、コンテキストメニューで **[入力フィールドの削除]** を選択します。

4 識別と検証のため: 製品パラメータ用入力フィールドを追加する

- i** サブサンプルデータではなく、サンプルデータのみを製品パラメータとして使用できます。

- 範囲 **サンプルデータ** で  をクリックして、入力フィールドを追加します。
新規入力フィールドが右に追加されます。
- **フィールド名 (短)**: サンプルリストで列ヘッダーとして使用される名前を入力します。
- **フィールド名 (長)**: オプションで、レポートに名称として使用される名前を入力します。
注記 フィールド **フィールド名 (長)** が空である場合、レポートにおいてフィールド **フィールド名 (短)** の名前を使用します。

製品名はサンプルリストにおいてテキストまたはリスト選択として入力できます。後で検証を実施する場合、リスト選択を使用します。

製品名をテキストフィールドに書き込む:

- **入力フィールドのタイプ**: テキスト
- **用途**: 製品
- 必要に応じてセクション **プロパティ 入力フィールド** に入力します。

リストから製品名を選択する:

- **入力フィールドのタイプ**: 選択リスト
- **用途**: 製品
- セクション **プロパティ 入力フィールド** でモデルから製品名を選択するか、手動で追加します:
 - **要素を選択する**: **要素の選択** をクリックします。識別モデルまたはモデル階層を選択します。 **選択** をクリックして、モデルから製品名を適用します。
 - **要素を手動で追加する**: **リストの要素** で希望する製品名を入力し、 **+** をクリックして入力したそれぞれの製品名に追加します。
- 事前定義されたリスト要素に加えてフリーテキストの入力が必要な場合は、チェックボックス **フリーテキストを許可** を有効にします。
- 必要に応じてその他設定を行います。

製品名をテキストフィールドに書き込む

サンプルデータ

フィールド名 ショート

フィールド名 ロング

名前を入力

入力フィールドタイプ

テキスト

使用

製品

プロパティ入力フィールド

標準値

編集可能フィールド

空のフィールドを作成

強制入力

リストから製品名を選択する

サンプルデータ

フィールド名 ショート

フィールド名 ロング

名前を入力

入力フィールドタイプ

選択リスト

使用

製品

プロパティ入力フィールド

要素の選択

リスト要素

名前を入力 +

製品 A X

製品 B X

製品 C X

標準値

空

フリーテキストを許可

空のフィールドを作成

強制入力

5 作業手順およびサブサンプル数の定義

- 範囲**作業手順 / サブサンプル**で、作成した作業手順を選択します。
- サブサンプルの数は、各サンプルに自動的に追加されるサブサンプルの数を決定します。**1**を入力します。


作業手順 / サブサンプル	
作業手順	サブサンプルの数
1	1

6 サンプルプロファイルの保存

- をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

複数のサンプルプロファイルが必要である場合（例えばそれぞれ異なる製品に対して）：

- サンプル ▶ サンプルプロファイル**で既に作成したサンプルプロファイルを選択します。

2.  をクリックして選択したサンプルプロファイルを複製します。
3. 複製したサンプルプロファイルを開き、必要な調整を行います。


サンプルリストの作成

1 サンプルリストの作成と命名

- **サンプル ▶ サンプルリスト** で  をクリックします。
新規タブが開きます。
- 適切な名前をフィールド **名前** に入力します。


サンプルリスト・



2 サンプルの追加

- アイコン  の左にある選択リストで、作成したサンプルプロファイルを選択します。



続いて、追加されたサンプルは仕様に従って選択されたサンプルプロファイルで作成されます。

-  をクリックして、新規サンプルをサンプルリストに追加します。必要なだけサンプルを追加します。

サンプルリストの各行には、アイコン  で表示されたサンプルが含まれています。その右にはサンプルデータが続きます。その後、 で表示されたサブサンプルとサブサンプルデータが続きます。

サンプルは仕様に従って選択されたサンプルプロファイルで作成されます:

- 定量化: 単位が定義されている場合には、参照パラメータとその単位に対して定義された入力フィールドを使用します。
識別と検証: 製品パラメータ用に定義された入力フィールドを使用します。
- 各サンプルには、指定された作業手順を使用する 1 つのサブサンプルが含まれています。

	サンプル名	参照パラメータの名前		番号	サブサンプル名	作業手順
	サンプル 1	%		1	サブサンプル 1	
	サンプル 2	%		2	サブサンプル 2	
	サンプル 3	%		3	サブサンプル 3	

図 5 サンプルリスト (定量化の例)


- サンプル名とサブサンプル名を必要に応じて編集します。


- 基準値 (定量化) または製品名 (識別) が既にわかっている場合、これらを該当するフィールドに入力します。

3 サンプルリストの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

複数のサンプルリストが必要である場合 (例えばそれぞれ異なる製品に対して) :

1. **サンプル ▶ サンプルリスト** で、既に作成したサンプルリストを選択します。
2. 選択したサンプルリストを  をクリックして複製します。
3. 複製したサンプルリストを開き、必要な調整を行います。

-  **基準値または製品名は別の方法でサンプルリストに入力することができます (Metrohm Knowledge Base を参照)。**
- 測定中に例えばクエリウィンドウに手動で入力します。
 - 定量化については、基準メソッドで次の測定または前の測定から自動的に入力できます。

サンプルリストとプロセスは、スペクトルの記録の準備が完了しています (59 ページ, 「[スペクトルの記録](#)」を参照)。

4.2 スペクトルの記録

警告

高温表面の可燃性物質

可燃性物質がこぼれることによる火事や火傷の危険。サンプル、サンプルバイアル、サンプルホルダー、サンプル提示は、温度が最高 85 °C まで達することがあります。

- 着火源を避ける。
- 保護接地を使用する。
- 吸引装置を使用する。
- 液体がこぼれたり固形物が落下したりした場合は、早急に除去してください。

⚠ 注意

加熱によるサンプルの堆積膨張

サンプル容器からあふれたり破損したり、ストッパーが吹き飛ぶことによる負傷や健康被害。

- サンプル容器は 2 cm の最低高さまでのみ充填します。液体は、残った空気中で膨張する可能性があります。あるいは、毛細血管のあるストッパーを使用します。
- サンプル容器が損傷しないようにストッパーを軽く押し込みます。

⚠ 注意

熱いサンプルバイアル

高温の表面や液体と接触することによる火傷。サンプル、サンプルバイアル、サンプルホルダー、サンプル提示は、温度が最高 85 °C まで達することがあります。

- 個人用保護具と耐熱性の保護手袋を着用します。
- 液体がこぼれたり固形物が落下したりした場合は、早急に除去してください。

モデル開発用にスペクトルを記録

前提条件:

- スペクトルの記録準備が完了していること (49 ページ, 「[スペクトル記録の準備](#)」を参照)。
- スペクトロメーターが予約されていること (27 ページ, 「[装置の予約および共有](#)」を参照)。
- 正しいサンプルホルダーが挿入されていること。サンプルホルダーは使用するサンプル容器に適合している必要があります。


1 サンプルリストを開く

- ワークエリア **サンプル** を開きます。
- サンプルリストが閉じている場合、**サンプル ▶ サンプルリスト** でサンプルリストをダブルクリックして開きます。

i **定量化:** 参照パラメータの入力フィールドは、この時点ではまだ空欄にしておくことができます。基準値はスペクトル記録に従って決定し、入力することができます。
識別と検証: 製品名はスペクトル記録の前、または後に入力できます。



2 さらなるサンプルの追加 (オプション)

さらなるサンプルが必要である場合：

- アイコン  の左にある選択リストで、作成したサンプルプロファイルを選択します。



続いて、追加されたサンプルは選択されたサンプルプロファイルの仕様に従って作成されます。





-  をクリックして新規サンプルをサンプルリストに追加します。
- サンプル名とサブサンプル名を必要に応じて編集します。
-  をクリックしてサンプルリストを保存します。


3 測定の実行

注記

サンプル容器の温度調節時の温度センサーの損傷

センサーがサンプル容器と直接接触している間にサンプル容器を取り外す場合、センサーが損傷するおそれがあります。

- 測定が完了し、温度センサーをサンプル容器から取り外してから、サンプル容器を取り外します。
 - 分析するサブサンプルを次の方法から一つ選択します：
 - サブサンプルをアイコン  をクリックして選択します。
 - 分析目的として、サブサンプルから単一のセルを選択すれば十分です。
 - 対応する物理的サンプルを準備します。サンプル容器をサンプルホルダーに挿入します。
 -  をクリックして測定を開始します。コマンドボタンの数字は、サブサンプルの実行数を表示します。
 - サブサンプルに割り当てられた作業手順を開始します。範囲 **曲線とデータ ▶ ライブデータ** で、指示がある場合は指示に従います。サンプル容器の温度が制御されている場合、サンプル容器は要請が出てから取り外します。
- 分析完了後、サブサンプルステータスは  として表示されます。
- その他すべてのサンプルの測定を同じ方法で実行します。
-  目標温度は環境温度の最大 5.0 K まで下回ることができません。

- i** プロセスがシリーズ測定に適している場合、複数のサブサンプルを一度に選択できます。あるいは、がサンプルリストのすべての実行可能なサブサンプルを開始します。
 - 液体サンプル: **VESSEL REMOVAL** コマンドによりシリーズ測定が可能となります。
 - 固形物のサンプル: シリーズ測定を実施するには、ユーザーアクションがあらかじめ必要です (例えば **WAIT** コマンドを使用)。

スペクトルの目視確認

スペクトルの目視確認により、ノイズの多い波長範囲と誤った測定の可能性を識別することができます。



前提条件:

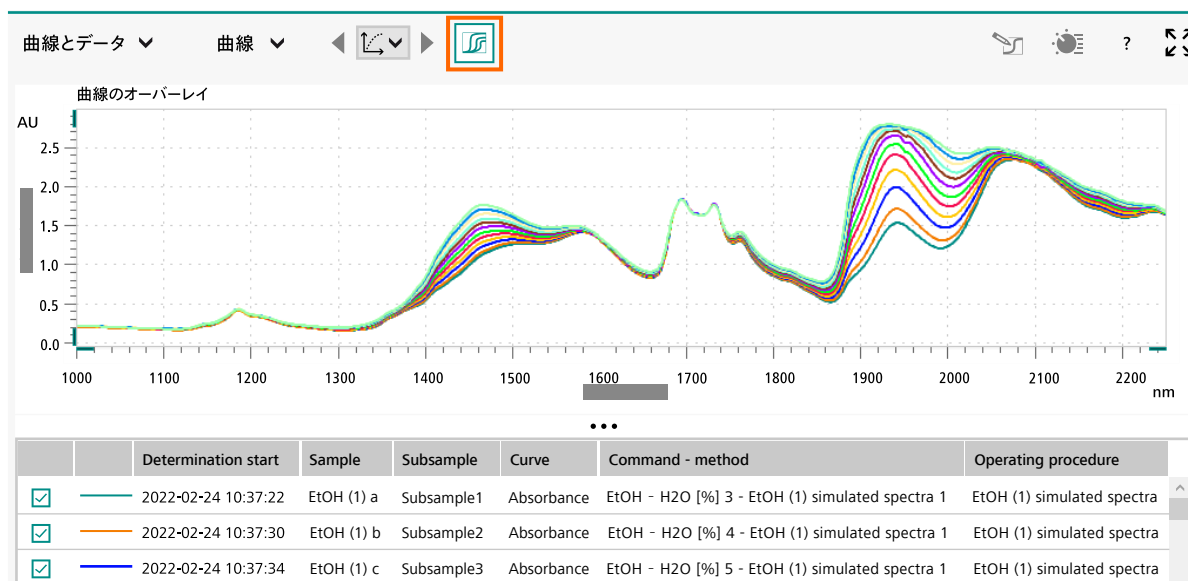
サブサンプルの分析が正常に完了していること。

1 サブエリア「曲線」を開く

- サンプルリストのタブで**曲線とデータ ▶ 曲線**を開きます。

2 スペクトルの表示および確認

- 個々のスペクトルの表示:
 - サンプルリストで該当するサブサンプルを選択します (アイコンで表示)。
- 複数のスペクトルの表示:
 - をクリックしてカーブのオーバーレイを有効にします。
 - **[CTRL]** または **[SHIFT]** キーを使って、サンプルリストで複数のサブサンプルを選択します。
- スペクトルを確認します ([164 ページ](#), [11.3 章を参照](#))。



基準値 (定量化) と製品名 (識別、検証)

1 基準メソッド (定量化)



- サンプルの基準値を、適切な基準メソッド、例えば滴定などにより測定します。

2 基準値または製品名の入力

- 基準値または製品名をサンプルリストの対応するフィールドに登録します。

サンプルデータをサンプルリストに追加

測定開始時に、参照パラメータまたは製品パラメータのサンプルデータがまだない場合、次のように入力フィールドを追加できます:

-  をクリックして、追加する入力フィールドの対象となるサンプルを選択します。すべてのサンプルを選択するには  をクリックします。
- 選択されたサブサンプルを右クリックしてコンテキストメニューを開き、**サンプルデータの追加**を選択します。
- 参照パラメータまたは製品パラメータに対してサンプルデータを追加します ([49 ページ](#), 「[スペクトル記録の準備](#)」を参照)。

3 サンプルリストの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

5 定量化モデル

5.1 定量化モデルの作成

i OMNIS Software のシーケンスの図は補遺にあります (180 ページ、「モデル開発」を参照)。

i 複数の対象パラメータ
 1 つより多い対象パラメータを各サンプルに対して予測するには、個々のモデルを各パラメータに対して作成します (152 ページ、「複数の対象パラメータ (定量化)」を参照)。

定量化モデルの作成

前提条件:

- モデル開発用のスペクトルが記録されている (59 ページ、「スペクトルの記録」を参照)。

1 定量化モデルの作成と名前付け

- キャリブレーションと評価 ▶ 定量化モデルで f_x をクリックします。
 新規定量化モデルが新規タブに表示されます。
- 適切な名前を入力フィールド **定量化モデルの名前** に入力します。

2 サンプルおよび参照パラメータの選択

- すべてのサンプルリストは **サンプルリスト** をクリックして表示します。
- モデル開発に対して準備されたすべてのサンプルリストを選択します。

定量化モデルの作成

定量化モデル名

名前	保存済み	参照パラメータ	単位
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 サンプルは検索リクエストによっても選択できます。
 必要に応じて、サンプルを XDS 装置や DS 装置からインポートできます (174 ページ, 「XDS/DS アナライザの変更 (定量化)」を参照)。

i サンプル選択は後で調整できます。

- リスト **参照パラメータ** は、参照パラメータとして適切なすべてのサンプルデータを示します。
 モデルを開発する参照パラメータを選択します。参照パラメータがそれぞれの名称を有している場合、すべての名称を選択します。
- [次へ] をクリックします。

3 参照パラメータの定義

- リスト **参照パラメータ** は、前の手順で選択された参照パラメータのすべての名称を表示します。
 このリストで必要なすべての名称を選択します。

参照パラメータの定義

定量化モデル名

参照パラメータ	単位
H2O	%

参照パラメータ名

参照パラメータの単位

小数点以下の桁

- フィールド **参照パラメータの名前** には、モデルが使用する名称を入力します。
- モデルが使用する **参照パラメータの単位** を選択します。
- 結果表示のために **小数点以下の桁** の数を入力します。

選択された参照パラメータの名称を持つ、全てのスペクトルが、モデルに追加されます。

4 自動または手動のモデル開発

i モデルを自動で開発する際に、最初にサンプル選択を調整する必要がある場合、手動モデル開発で続行します。

- **自動モデル開発**
 自動モデル開発は、**OMD (OMNIS Model Developer)** を使い、サンプルを選択します。自動モデル開発に続き、モデルを発行、検証し、さらに開発できます。
 - **[OMD の開始]** をクリックします。
 OMD 実行時間はスペクトル数によります。
 - [章5.2、自動モデル開発- OMD、ページ67](#) で続行します。
- **手動モデル開発**
 - **[作成]** をクリックします。
 新規モデルをタブで開きます。
 - モデルの保存:  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。
 - [章5.3、手動モデル開発、ページ70](#) で続行します。

5.2 自動モデル開発 - OMD

OMD (OMNIS Model Developer) は定量化モデルの開発を自動化し、最も適したモデルの選択を提示し、その予測力を評価します。

前提条件:

OMD を**[OMD の開始]**で開始した。

1 計算した定量化モデルの確認

計算が終了すると、OMD は 5 つのモデルから選択できます。

計算した定量化モデル

定量化モデル名 小数点以下の桁

モデル#	SEC	SECV	SEP	IR ² P
1	0.0019	0.0020	0.0030	0.990
2	0.0017	0.0018	0.0030	0.990
3	0.0019	0.0020	0.0031	0.990
4	0.0012	0.0014	0.0023	0.994
5	0.0012	0.0015	0.0023	0.994

モデルは予測力に従って整理されています。各モデルに対して性能指数が示されます。

表の左端には次の色のモデルが示されます。

- **緑色**マークのモデルは高い予想力を備えています。サンプル数が十分に大きい場合、モデルは同じタイプの未知のすべてのサンプルについて適切に機能します。性能指数は、将来のエラーの信頼できる評価を提供します。

- **黄色**マークのモデルは、中間の予測力を備えています。サンプル数が十分に大きい場合、モデルの性能は優れていると予測されます。性能指数は将来のサンプルに対して楽観的過ぎる可能性があります。個別の評価をお勧めします。
- **赤色**マークのモデルは十分な予測力を備えていません。モデルには重大な欠陥があります。使用しないでください。

i 定量化モデルをまだ改善できる場合、モデルのツールチップで改善提案が表示されます。

2 性能指数の確認

各モデルに対して次の標準エラーが示されます。

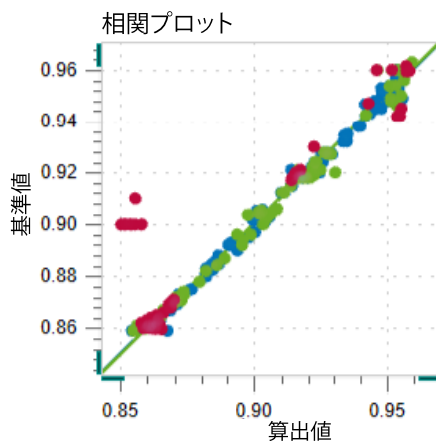
- **SEC**: 校正の標準エラー。
- **SECV**: 交差検証の標準エラー。
- **SEP**: 予測の標準エラー。この数字は、未知のサンプルを分析する場合に、予測エラーのための最適な評価値です。検証セットを利用できる場合、SEPのみが表示されます。

注記: アウト라이어検出後にスペクトルがまだ 100 以上残っている場合のみ、OMD は検証セットを作成します。

モデル 1 は最適な予測力を備えていますが、必ずしも標準偏差が一番小さいわけではありません。

3 相関プロットの確認

個々のモデルをクリックすると、関連する相関図が表示されます。



相関図により、モデル性能の評価を一目で見られます。グラフは、モデルで計算した値 (x 軸) と基準値との間の相関を示します。

各点はサンプルを示します。

- 青色の点は校正セットのサンプルを示します。

- 緑色の点は検証セットの点を示します（ある場合）。
- 赤色の点はアウトライヤーデータセットの点を示します（ある場合）。

回帰直線は、基準値と計算値ができる限り明確に示されるように、青色または緑色の点を通るように配置されます。

相関プロットの評価

- 青色と緑色の回帰直線はできる限り 1 に近い傾きであり、y インターセプトはできる限り 0 に近づける必要があります。
- 青色と緑色の点はできる限り対応する回帰直線に近づける必要があります。

i 回帰曲線と点は重なる場合があります。

4 モデルの評価、さらなる開発、発行

i 測定と再評価でモデルを使用できるようにするには、発行されなければなりません。

5 つのモデルの一つを直接発行

- OMD がモデル作成時に開始した場合：
 - モデルを選択し、**[保存と発行]**をクリックします。残りの 4 つのモデルは破棄されます。
 - **キャリブレーションと評価 ▶ 定量化モデル**では、最後に発行されたバージョンが表示されます。**PREDICT** コマンドは、発行されたモデルバージョンにアクセスできます。
- OMD が開いたモデルで開始された場合：
 - モデルを選択し、**[編集]**をクリックします。
 - モデルの保存: **A** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。
 - [章 5.4、定量化モデルの発行、ページ 91](#) で続行します。

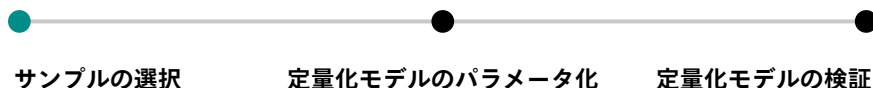
1 つ以上のモデルを検証またはさらなる開発

- 1 つ以上のモデルを選択します。複数選択については、**[SHIFT]** キーまたは **[CTRL]** キーを使用します。
- **[編集]** をクリックします。選択した各モデルは新規タブで開きます。
- 新規モデルの保存: 対応するタブで **A** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。
- [章 5.3、手動モデル開発、ページ 70](#) で続行します。

5.3 手動モデル開発

5.3.1 サンプル選択とデータセット分割

定量化モデルのタブには、上部に水平ナビゲーションバーナビゲーターが表示されます。ナビゲーターは、モデル開発のその後の手順をガイドします。



i スペクトルの表示

3つのプロセス工程では、個々のスペクトルがカーブ、点、またはテーブルの行の形で表示されます。

選択されたスペクトルは、すべての表示とすべてのプロセス工程で同時に強調表示されます。

i テーブルおよびグラフ

テーブルとグラフの処理については補遺に記載されています：

- テーブルの処理 (163 ページ, 11.2 章を参照)
- グラフの処理 (164 ページ, 11.3 章を参照)

プロセス工程 サンプルの選択

範囲 **スペクトルのリスト** は選択したサンプルのスペクトルを表示します：

スペクトルのリスト					🔍	⏪	⏩	⏴	⏵	?	🔄
	📄	サンプル名	サブサンプル名	ソース	H2O						
📄	📄										
📄	📄										
📄	📄										
📄	📄										
📄	📄										

入力フィールドは、それぞれ関連する基準値を表示します (図ではオレンジ色でマークされています)。

プロセス工程により **サンプルの選択** 次のことができます：

▪ サンプル選択の調整

さらにスペクトルを追加したり、スペクトルを消去したりします。

■ データセットの分割

自動または手動のデータセットの分割：

- **校正セット**：スペクトルと校正セットの基準値によりモデルを計算します。
- **検証セット**：スペクトルと検証セットの基準値はモデルの検証のみに使用します。
- **アウト라이어データセット**：アウト라이어データセットはモデルやその検証に影響を及ぼしません。アウト라이어は、一部のグラフでは情報提供のみを目的として表示されます。

i モデルは、例えば最初のフェーズにおいて制限された数のサンプルのみを利用できる場合、検証セットなしで開発できます。

サンプル選択の調整 (オプション)

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価**においてモデルが開いており、前面にあること (65 ページ, 「定量化モデルの作成」を参照)。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択**に含まれていること。

1 スペクトルの追加または消去

サンプル選択と参照パラメータは、いつでも範囲 **スペクトルのリスト** で調整できます。

- サンプルを選択するために、**+** をクリックして、スペクトルのリストのスペクトルを追加する必要があります。
- スペクトルのリストからスペクトルを削除するには、スペクトルを選択して、**-** をクリックします。
注記：関連するサンプルは、スペクトルを含めてデータベースに残ります。
- 次の事項を変更するには、**⚙️** をクリックします：
 - 参照パラメータの名前または単位
 - 参照パラメータの名称の選択
 - 参照パラメータおよびすべての結果の小数点以下の桁数

i スペクトルの基準値の編集が必要な場合、各サンプルリストまたは検索リクエストを開き、基準値をダブルクリックします。

2 モデルの保存

- ・  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

自動モデル開発に切り替え

このタブのさらなる設定は、OMD (OMNIS Model Developer) に影響を及ぼしません。この場所から自動モデル開発に切り替えることができます。


- ・ 必要に応じて、ヒストグラムにおいて均一な基準値の分割を確認します (75 ページ、「ヒストグラム」を参照)。
- ・ OMD は独自に外れ値を検索し、モデル開発から除外します。しかしながら、アウトライヤーを手動で除外する場合、サンプルリストから削除する必要があります。アウトライヤーデータセットへの割当は、OMD には影響を及ぼしません。
- ・ [OMD の開始] をクリックします。
OMD 実行時間はスペクトル数によります。

アウトライヤー検出の有意水準

前提条件

- ・ ワークエリア **キャリブレーションと評価** において定量化モデルが開いており、前面にある。

1 モデルのプロパティの編集

- ・ ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- ・ **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 外れ値限界** において **有意水準** を外れ値検出のために決定します。有意水準が高いほど、より多数のスペクトルのアウトライヤーが検出されます。典型的な値は 5% または 1% です。
有意水準は次のように使用されます。
 - オプションのモデル開発中の自動外れ値検出は、外れ値検出の時間の優位水準を考慮します (s.u.)。
 - サンプル特性の予測時の外れ値検出は、モデルの発行時間の有意水準を考慮します。

2 モデルの保存

- ・  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

アウト라이어データセットと検証セットの算出


アウト라이어検出は、アウト라이어データセットの自動作成を可能にします。残ったスペクトルは、校正セットと検証セットにおいて自動的に分割することができます。

キャリブレーションと検証について、個別のサンプルを収集する場合、サンプルを手動で割り当てることができます。

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択** に含まれていること。

1 データセット分割の呼び出し

- 範囲 **スペクトルのリスト** にて  をクリックします。
ダイアログ **データセット分割** が開きます。

2 アウト라이어データセットの算出

- スペクトルを自動でアウト라이어データセットに割り当てるため、トグルボタン **アウト라이어を算出** を有効にします。自動外れ値検出は、次の種類のアウト라이어を検出します。
 - スペクトルの偏差に基づくスペクトルのアウト라이어
 - 基準値の異常に基づく基準値アウト라이어
- 必要に応じて **有意水準** を調整します。有意水準が高いほど、より多数のスペクトルのアウト라이어が検出されます。典型的な値は 5% または 1% です。

3 検証セットの算出

自動分割により、校正セットと検証セットが母集団を示し、互いに独立していることを保証します。

- スペクトルを自動で検証セットに割り当てるため、トグルボタン **検証セットを算出** を有効にします。
 - フィールド **割合** で、検証セットに称されるスペクトルのパーセンテージを定義し、検証セットの場合には、例えば 20% ~ 30% を使用します。

4 オプションの設定

データセット割り当てのオプションを決定します:

- **パラメータ設定の適用**: データ前処理と波長の選択をスペクトルに適用します (83 ページ, 「[定量化モデルのパラメータ化](#)」を参照)。
注記: パラメータ設定や有意水準を後で変更しても、データセット割り当てには影響を及ぼしません。ただし、データセットが再度分割される場合を除きます。
- **アウトライヤーを保持する**: 既存のアウトライヤーはそのまま残り、分割時には考慮されません。このオプションにより、**有意水準**が変更されない場合であってもアウトライヤーデータセットが大きくなる可能性があります。
- **検証セットを保持する**: 既存の検証セットは含まれ、分割時には考慮されません。このオプションにより、**割合**が変更されない場合であっても検証セットが大きくなる可能性があります。

5 自動分割の開始

- **[分割]** をクリックします。


データセットは事前の設定に従って分割されます。


6 分割の確認


スペクトルのリストにて少なくとも一つのスペクトルが選択されると、選択されたスペクトルは、範囲**スペクトルオーバーレイ**において強調表示されます。


エリア**ヒストグラム**および**スペクトルオーバーレイ**では、スペクトルが校正セットにあると**青**で、スペクトルが検証セットにあると**緑**で、スペクトルがアウトライヤーデータセットにあると**赤**で表示されます。

エリア **スペクトルのリスト** では、割り当ては次のアイコンで表されます：

 スペクトルは校正セットに割り当てられています。




 スペクトルは検証セットに割り当てられています。

 スペクトルはアウトライヤーデータセットに割り当てられています。

 欠陥データまたは無効データを表示します。ツールチップを参照してください。

7 手動分割 (オプション)

手動分割は、既存の自動分割の有無に関係なく実行できます。

- スペクトルを右クリックしてコンテキストメニューを開きます。スペクトルを対応するデータセットに割り当てる：
 -  **校正セット**
 -  **検証セット**
 -  **アウトライヤーデータセット**

i 複数のスペクトルを一度に割り当てる：

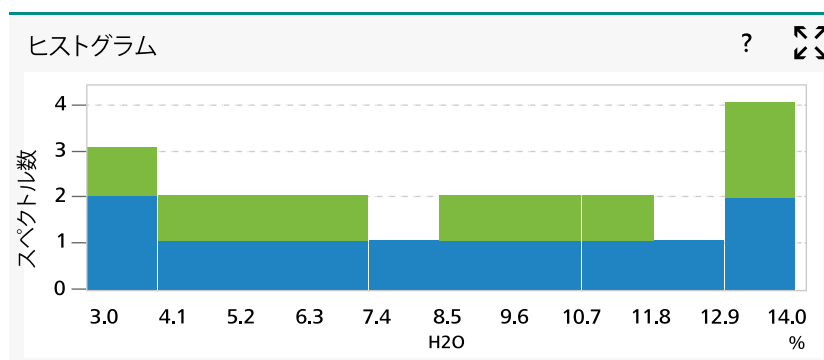
- オプションで、スペクトルを適切な順序に並べます。概要リストを列見出しをクリックして並び替えます。
- 複数のスペクトルを、[CTRL] または [SHIFT] キーで選択します。
- 選択を右クリックしてコンテキストメニューを開きます。選択したスペクトルを割り当てます。

8 モデルの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

ヒストグラム

ヒストグラムは、基準値がどれだけ均質に分割されているかを視覚化します。このために、ヒストグラムは基準値範囲を 10 の同じ大きさのクラスに分割します。



示されている例では、3%から14%の12の整数基準値が10のクラスに分割されています。最初のクラスは3%と4%の基準値を含み、最後のクラスは13%と14%のクラスを含みます。その他の8つのクラスは、それぞれ1つの基準値のみを含みます。

この例は、校正セットのスペクトル（青）と検証セットのスペクトル（緑）が基準値の範囲にわたって均一に分割されていることを示しています。

アウトライヤー

アウトライヤーデータセットに割り当てられたスペクトルは赤で示されます。これは、スペクトルのアウトライヤーまたは基準値アウトライヤーである可能性があります。

アウトライヤーを確認する必要があります。アウトライヤーが有効な基準値を含む有効なスペクトルであることが判明した場合、それを校正セットまたは検証セットに割り当てることができます。

5.3.2 定量化モデルの計算

最初のモデルはパラメータ設定なしで計算できます。それにより、性能指数のベンチマークが生成されます。後のパラメータ設定の影響を好ましく評価できます。

i ノイズやその他アーチファクトにより、いくつかの波長を使用できなくなった場合、この波長を直接除外できます (83 ページ、「定量化モデルのパラメータ化」を参照)。

モデルの計算

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** において定量化モデルが開いており、前面にある。

1 計算の開始

- [計算] をクリックしてモデルを計算します。

i コマンドボタン [計算] が非アクティブの場合、次の原因が考えられます:

- モデルはすでに計算されており、それ以降に何も変更が行われていない。
- プロセス工程の一つに誤った入力が含まれています。ナビゲーターでは、該当する範囲のプロセス工程が赤く表示されます。誤った入力のなされたフィールドは赤く枠で囲まれます。

5.3.3 定量化モデルの検証

交差検証方法の定義

前提条件:


- ワークエリア **キャリブレーションと評価** において定量化モデルが開いており、前面にある。

1 モデルのプロパティの編集

- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。

- **プロパティ ▶ パラメータ ▶ 交差検証** で交差検証方法を定義します:
 - スペクトルが 70 以下のスペクトルのリストでは、方法 **一個抜き (Leave-One-Out)** が推奨されます。
 - 大きいスペクトルリストでは、方法 **K-fold** が推奨されます。**ブロックの数**が大きいほど、モデルの計算に時間が長くなります。k の典型的な値は 5 です。**分配アルゴリズム**は、校正セットのスペクトルを個々のブロックに分割する方法を決定します。分配アルゴリズム **Random** ブロックをランダムに選択します。分配アルゴリズム **Fixed Blocks (DUPLEX)** はブロックを再現可能な方法で選択します。

2 モデルの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

定量化モデルの検証

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** において定量化モデルが開いており、前面にある。
- 定量化モデルは計算されている (76 ページ, 「定量化モデルの計算」を参照)。

1 プロセス工程検証への切替

- ナビゲーションで **定量化モデルの検証** をクリックしてプロセス工程検証に切り替えます。

計算された定量化モデルのデータは、範囲 **性能特性**、**相関図** および **影響プロット** に表示されます。

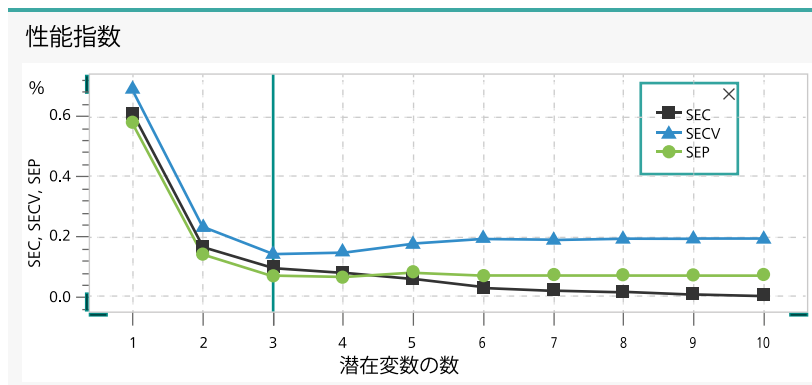
▼ をクリックすることで、グラフ **ローディングプロット** および **スコアプロット** も表示できます。

2 性能指数の確認

範囲 **性能特性** には次の性能指数を含むグラフが示されます。


- **SEC**: 校正の標準エラー。
- **SECV**: 交差検証の標準エラー。
- **SEP**: 予測の標準エラー。この数字は、未知のサンプルを分析する場合に、予測エラーのための最適な評価値です。検証セットを利用できる場合、SEP のみが表示されます。

性能指数 (y 軸) は、それぞれの数の潜在変数 (x 軸) に対して示されます。



緑の垂直線は、現在選択されている潜在変数の数を表示します。上の図では、3つの潜在変数が選択されています。3つの潜在変数では、0.14%のSECVが一番目の最少値です。

テーブルの小数点以下の桁数

性能指数の小数点以下の桁数を変更するには、範囲 **スペクトルのリスト** のプロセス工程 **サンプルの選択** で  をクリックします。

3 潜在変数の数の決定

最終的な定量化モデルは固定された潜在変数の数を使用します。定量化モデルの性能について、最適な潜在変数の数を見つけることは重要です。

より多くの潜在変数は、校正セットにおけるより多くのスペクトルの変数を説明します。一方で潜在変数が多すぎると、特定の変数やノイズが多くなり、未知のサンプルの場合の予測の精度が低くなります。これは**過大調整**と呼ばれます。

潜在変数が少ないほど、信頼性の高い定量化モデルを得られます。ただし、潜在変数の数が少なすぎると、関連のスペクトルの変数を得られません。予測の精度は低くなります。これは**過少調整**と呼ばれます。

- 事前に適切な数の潜在変数を選択します。そのためには、表中で該当する列をダブルクリックします。

選択した潜在変数の数は、テーブルにおいて✓で示されます。

疑わしい場合には、OMNIS Software が提案する数を選択します。選択した潜在変数の数がシステムの提示した数と異なる場合、提示された数は→で標示されます。


4 相関プロットの確認

相関図は、定量化モデルの性能の評価の概要を表示します。グラフは、算出値 (x 軸) と基準値 (y 軸) との間の相関を表示します。各点はサンプルを示します。

相関プロットと表は各サンプルに対して次の値を示します。

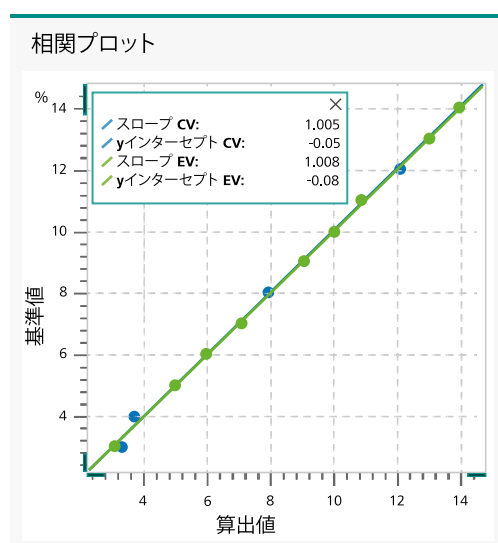
基準値	参照パラメータの値
算出値	定量化モデルの結果
残り	算出値と基準値の差

i テーブルの小数点以下の桁数

上の値の小数点以下の桁数を変更するには、**範囲スペクトルのリスト**のプロセス工程 **サンプルの選択** で  をクリックします。

青色の点からは青色の回帰直線が生成されます。緑色の点からは緑色の回帰直線が生成されます。

回帰直線は、算出値と基準値との間の系統的關係を示します。回帰直線は、理想的には 1 のスロープと 0 のインターセプトを有します。すべてのサンプルが直線上にあることが理想的です。この場合、各サンプルでは算出値は基準値に対応します。



相関プロットはそれぞれのエラーの種類を示します。

- **システムエラー**はかいk 回帰直線の理想直線からの偏差 (スロープ=1、y インターセプト=0) とみなすことができます。
- **ランダム誤差**: 回帰直線の周りに点が散在しているほど、ランダム誤差が大きくなります。

図では、複数の点が他の点の後に隠れています。青色の回帰直線は緑色の回帰直線の後に隠れています。

- 範囲**性能特性**で別の潜在変数の数を選択します。相関プロットの変化を観察します。

i グラフの処理

グラフの表示は調整可能で、個々または複数の点を選択することができます (164 ページ, 11.3 章を参照)。

5 影響プロットの確認

影響プロットはスペクトルの特徴的なプロパティを記述し、スペクトルのアウトライヤーを特定するのに役立ちます。

影響プロットは計算メソッド PLS または PCA に対して表示することができます。計算メソッドをリストから選択します。

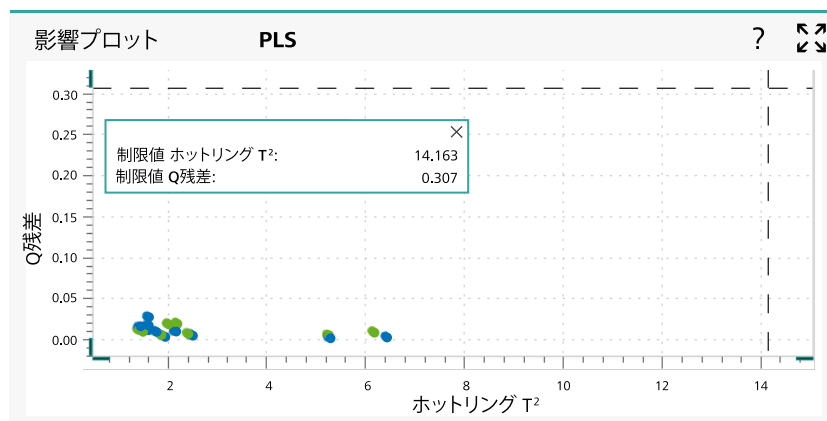
- **PLS** (部分最小二乗回帰)
PLS はスペクトルおよび基準値の関連情報を使用します。
PLS は定量化モデルに基づいています。
- **PCA** (主成分分析)
PCA は、スペクトルから関連情報を抽出します。

i 両方の影響プロット、PLS、PCA は、定義されたデータ前処理と波長範囲を考慮します (83 ページ, 「定量化モデルのパラメータ化」を参照)。

基準値は PLS 影響プロットに影響を及ぼしますが、PCA 影響プロットには影響を及ぼしません。唯一の例外は、各点は外部基準値に応じて考えられるアウトライヤーとしてマークすることができるということです。

選択した潜在変数の数は PLS 影響プロットに影響を及ぼしますが、PCA 影響プロットには影響を及ぼしません。PCA について、主成分の数は、説明された分散が少なくとも 95 % となるように選択されます。

例: EtOH スペクトルの PLS 影響プロットは 3 つの潜在変数に基づいています



1 グラフの処理

グラフの表示は調整可能で、個々または複数の点を選択することができます (164 ページ, 11.3 章を参照)。

各点はスペクトルを示します。高いホテリングの T^2 および Q 残差の値は、アウトライヤーの可能性を示します。

ホテリングの T^2 値が高いスペクトルは、該当するサンプルの極端な組成を示しています。これらのサンプルはモデルに大きな影響を与えます。そのようなサンプルの基準値が誤っている場合、類似したサンプルの予測が誤った結果をもたらす可能性があります。

Q 残差が高いスペクトルは、うまくモデル化されていない特異性を示しています。例えば、該当するサンプルに異常な化学成分が含まれているためです。

1 破線は、指定された有意水準の臨界値（限界値）を示します。

上図は考えられるアウトライヤーがないことを示します。すべての点は破線内にあります。

6 スコアプロットの確認

1 スペクトルのホテリングの T^2 値がすべての潜在変数のスコアを 1 つの値にまとめるのに対し、スコアプロットはスコアのさらに詳細な分析を可能にします。

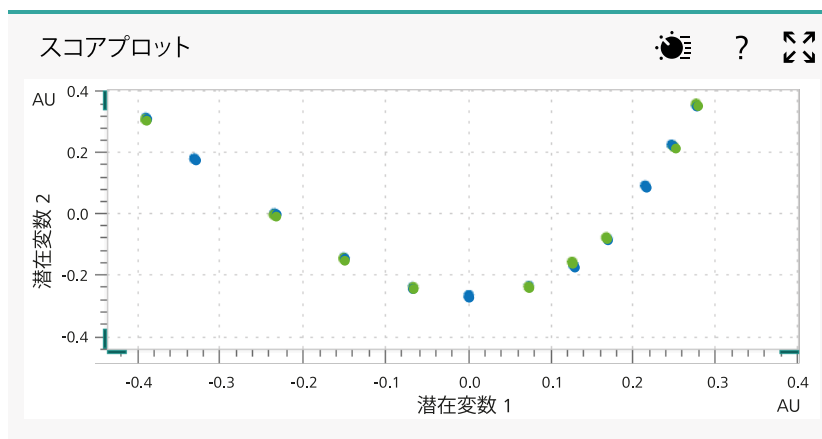
定量化モデルのスコアプロットは計算方法 **PLS** に基づいており、定義されたデータ前処理と波長範囲 (83 ページ, 「定量化モデルのパラメータ化」を参照) を考慮しています。

各点はスペクトルを示します。最初の 2 つの潜在変数のスコアは、x 軸と y 軸で読み取ることができます。🔍 プロパティで、



別の各ペアの潜在変数も表示することができます。スコアは正規化され、各潜在変数は同じ重みを受け取ります。

例: 潜在変数 1 と 2 の EtOH スペクトルのスコアプロット :



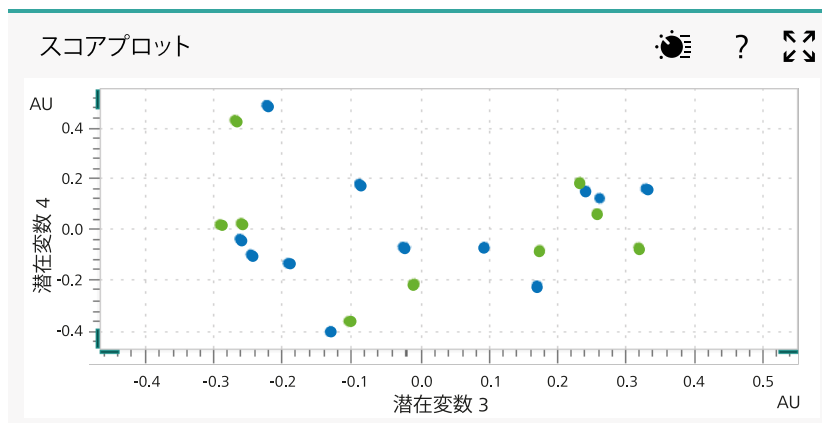
📘 グラフの処理

グラフの表示は調整可能で、個々または複数の点を選択することができます (164 ページ, 11.3 章を参照)。

点は真珠のひものようにつながっています。これは、基準値の間に一定の距離があり、追加のサンプル変数がないからです。この場合、将来予想されるサンプル変数がすべて考慮されているかどうか疑問になります。

次の図が示すように、潜在変数が大きくなるほど、分散の割合が小さくなり、その効果は見えなくなります。

例: 潜在変数 3 と 4 の EtOH スペクトルのスコアプロット :



検証セット (緑色の点) は、両方の図において校正セット (青色の点) として示されている潜在変数内でほぼ同じスペースを占めています。潜在的アウト라이어は特定できません。

7 アウトライヤーの含めるか除外する


- 考えられるアウトライヤーを慎重に確認します。
- サンプルが別のデータセットに割り当てられる倍、すべてを1つの手順で割り当てます。
 - 影響プロット、相関プロットまたはスコアプロットにおいて、新しく割り当てられたすべての点を選択します (166 ページ, 「複数の点またはカーブの選択」を参照)。
 - 選択した点の一つを右クリックして、コンテキストメニューを開きます。対応するデータセットを選択します。
 - **[計算]**をクリックして定量化モデルを再計算します。
- スペクトルを再割り当てしたあと、定量化モデルを再検証します。

8 モデルの保存

-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

定量化モデルの複製

定量化モデルは、必要に応じて現在の状態にアクセスするために複製できます:


1. 定量化モデルを保存します。
2. **キャリブレーションと評価 ▶ 定量化モデル**で定量化モデルを選択します。
3. 選択した定量化モデルを  をクリックして複製します。
4. 複製した定量化モデルを開き、最適化を続行します。

5.3.4 定量化モデルのパラメータ化

プロセス工程 **定量化モデルのパラメータ化** でスペクトルを自動または手動で最適化できます。アーチファクトおよび非線形性を修正します。正確に実施すると、パラメータ設定はモデルの精度とロバスト性を改善します。

パラメータ設定は以下に適用されます:

- 校正セットのすべてのスペクトル
- 検証セットとアウトライヤーデータセットのすべてのスペクトル

 **ワークエリアサンプル**の予測では、サンプルのスペクトルが記録され、モデルによって評価されます。このスペクトルにも、モデルで定義されたパラメータ設定が適用されます。

2つのパラメータ設定オプションを利用できます:

- 使用する波長範囲を定義します。
- データ前処理を適用し、スペクトルを適切な形式にします。

自動のパラメータ設定

パラメータ設定の最適化

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。

1 プロセス工程 「定量化モデルのパラメータ化」

- ナビゲーターでプロセス工程 **定量化モデルのパラメータ化** をクリックします。

2 データ前処理と波長範囲の自動定義

- 範囲 **スペクトルオーバーレイ** でコマンドボタン [**パラメータ設定の最適化**] をクリックします。

注記: 既に存在するデータ前処理と波長範囲は上書きされません。

3 手動のパラメータ設定 (オプション)

- データ前処理と波長範囲は、必要に応じて手動で再編集できます。

手動のパラメータ設定

手動のパラメータ設定はプロセス工程 **サンプルの選択** でのスペクトルの目視検査で開始します。

スペクトルの表示

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。

1 プロセス工程 「サンプルの選択」

- ナビゲーターでプロセス工程 **サンプルの選択** をクリックします。

このプロセス工程では、スペクトルはテーブル形式とカーブ形式で同時に検査することができます。

2 スペクトルの検査

- テーブルの処理 (163 ページ, 11.2 章を参照)
- グラフの処理 (164 ページ, 11.3 章を参照)

3 プロセス工程 「定量化モデルのパラメータ化」

- ナビゲーターでプロセス工程 **定量化モデルのパラメータ化** をクリックします。
- 範囲 **データ前処理** で▼により選択リストを展開し、範囲 **ローディングプロット** を選択します。

このプロセス工程では、スペクトルは曲線形式と **ローディングプロット** で同時に確認できます。ローディングプロットは、元の波長変数が各潜在変数の構築にどのように寄与するかを示しています。

その他の手順

- 手動の波長選択 (85 ページ, 「手動の波長選択」を参照)
- データ前処理の手動定義 (88 ページ, 「データ前処理の手動定義」を参照)

5.3.4.1 手動の波長選択

波長選択は定量化モデルを改善できます。例：吸光度値が高くてノイズが確認できる場合、該当する波長範囲を除外できます。

モデルは定義された波長範囲を使用します。波長範囲が定義されていない場合、モデルは全ての波長を使用します。

スペクトルとローディングの表示

前提条件:

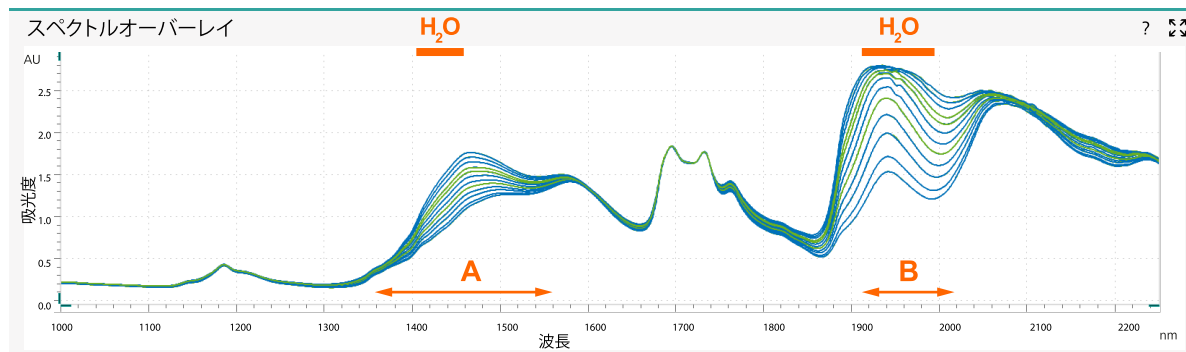
- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。

1 プロセス工程 「定量化モデルのパラメータ化」

- ナビゲーターでプロセス工程 **定量化モデルのパラメータ化** をクリックします。
- 範囲 **スペクトルオーバーレイ**、**ローディングプロット** および **波長範囲** を同時に表示します。

スペクトルオーバーレイ

一般的な H₂O 吸収帯域はグラフでさがし、大まかなガイドとして使用します。H₂O 吸収帯域は、1400 から 1450 nm に、1900 から 1980 nm に伸びます。

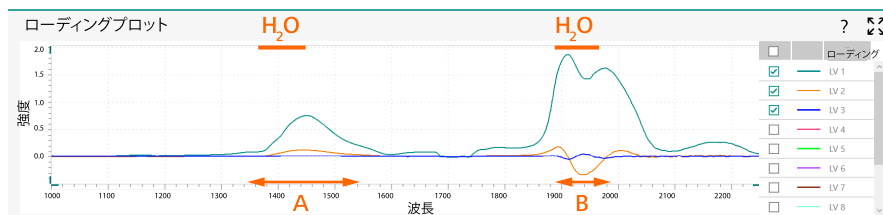


EtOH スペクトルは、サンプルの異なる H₂O 含有量に対応する明らかに目に見える変化を示しています (範囲 A および B)。

しかしながら 2 つの範囲の間には相違があります。範囲 B (1900 ~ 2000 nm)とは対照的に、範囲 A (1350 ~ 1550 nm)は基準値の均一な間隔に対応するライン間の均一な垂直距離を示しています。

ローディングプロット

ローディングは、元の波長変数が各潜在変数の構築にどのように寄与するかを示しています。



すでに識別された範囲 A (1350 ~ 1550 nm)および B (1900 ~ 2000 nm)は、特に潜在変数 1 (緑色) に対して一番高いローディングを示しています。そのため、この範囲は潜在変数 1 の形成に最も貢献しています。

i ローディングが正か負かは関係ありません。

範囲 B のアーチファクトに基づき、範囲 A (1350 から 1550 nm)に基づくモデルを検査することは合理的です。


波長範囲の定義

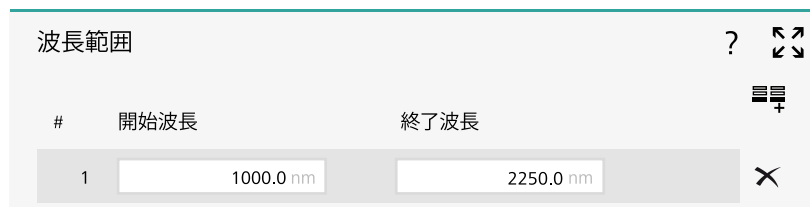
前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価**においてモデルが開いており、前面にあること。

- ナビゲーターがプロセス工程 **定量化モデルのパラメータ化** に含まれていること。

1 波長範囲の追加



- 範囲 **波長範囲** で  をクリックして波長範囲を追加します。




波長範囲を追加します。範囲はまずすべての波長範囲をカバーします。

2 波長範囲の設定

波長範囲を次の方法で設定します:

- 数字を入力して波長範囲を設定するため、**開始波長** および **終了波長** を対応する入力フィールドに入力します。
- 波長範囲をグラフで設定するため、次の手順を実行します:
 - 範囲 **スペクトルオーバーレイ** にて **[移動を有効化]** をクリックします。
 - カーソルが  で表示されるまで、強調表示された範囲の左の縁にカーソルを移動させます。
 - マウスの左ボタンを押したまま、左の縁を該当するポジションに移動します。
 - 強調表示された範囲の右の縁も同様の方法で実施します。
 - 波長範囲を移動させるには、カーソルが  で表示されるまで、範囲内でカーソルを移動させます。マウスの左ボタンを押したまま、範囲を左または右に動かします。
 - [移動を無効化]** をクリックします。

3 さらに波長範囲を追加

さらなる波長範囲は  をクリックして追加できます。

波長範囲は重複してはなりません

新しい波長範囲は、はじめは既存の波長範囲と重複します。重複がなくなるように波長範囲を調整します。

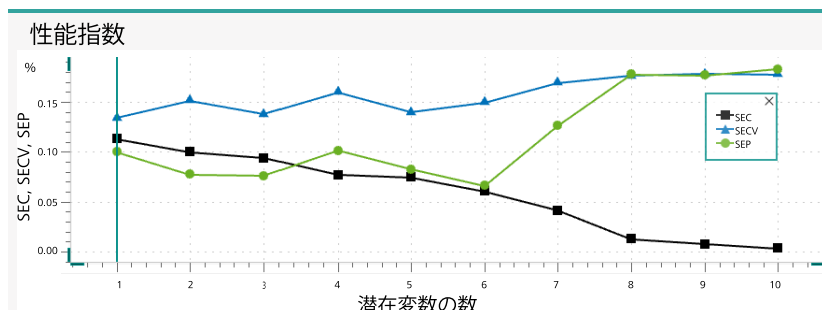
4 モデルの計算

- [計算]** をクリックしてモデルを計算します。



5 モデルの検証

- ナビゲーションで**定量化モデルの検証**をクリックしてプロセス工程検証に切り替えます。
- モデルを検証します。性能指数を以前作成したモデルと比較します。



EtOH 中の水と 1350 から 1550 nm の波長範囲の場合、波長範囲全体を使用する際に、3つの潜在変数の代わりに1つの潜在変数で十分であると思われます。SECV は両方の場合で類似しています: 0.13 %と 0.14 %。

3つの変数の代わりに1つの変数というのは大幅な改善です。無関係な分散は取り除かれました。変数が少ない新しいモデルは、おそらく堅牢でしょう。

6 モデルの保存

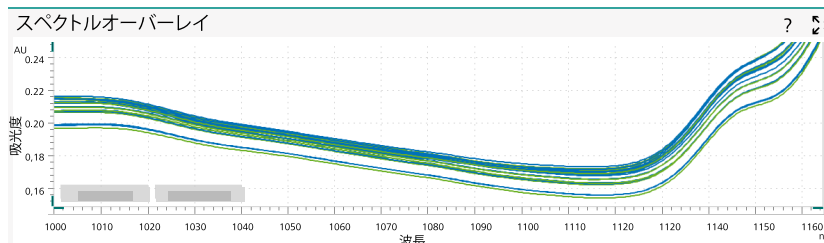
- をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

データセットの分割またはアウトライヤー検出で新しく作成された波長選択を考慮する場合、データセットを新たに分割できます。

5.3.4.2 データ前処理の手動定義

適切なデータ前処理は定量化モデルを改善できます。例：ベースラインのシフトには、ほとんどのアプリケーションに関連する情報がないため、削除することができます。

EtOH スペクトル



EtOH では、範囲を 1000 から 1200 nm に拡大する場合に、スペクトル間の小さなベースラインシフトが確認されます。これは一定（波長依存ではない）のベースラインシフトです。

i ベースラインシフトは、デモンストレーションの目的で意図的に脱気されなかったフローキュベットのサンプル内の気泡の形成によるものです。

透明な液体は通常、この規模のベースラインシフトを示しません。


ベースラインシフトは、データ前処理で修正できます。

データ前処理の手動定義

前提条件:

- ナビゲーターがプロセス工程 **定量化モデルのパラメータ化** に含まれていること。

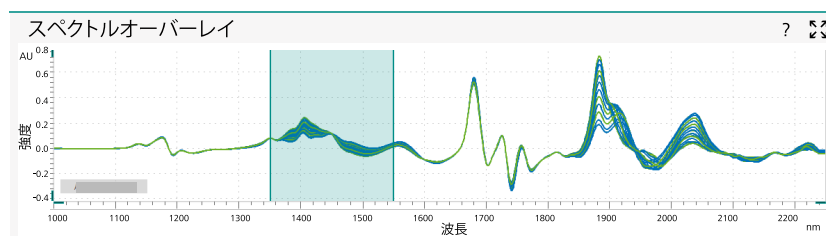
1 データ前処理手順の追加

- 範囲 **データ前処理** でデータ前処理手順を  をクリックして追加します。
- フィールド **データ前処理** でデータ前処理の種類を選択し、それに属するフィールドに入力します。
一定の（波長依存ではない）ベースラインシフトを削除する一次導関数を使用したギャップセグメントの例：




前処理されるスペクトルは、エリア **スペクトルオーバーレイ** に直ちに表示されます。



データ前処理後、スペクトルは異なって見えます。



EtOH スペクトルの場合、一定のベースラインシフトを削除します。

2 さらなるデータ前処理手順の追加

さらなるデータ前処理手順は、をクリックして追加できます。

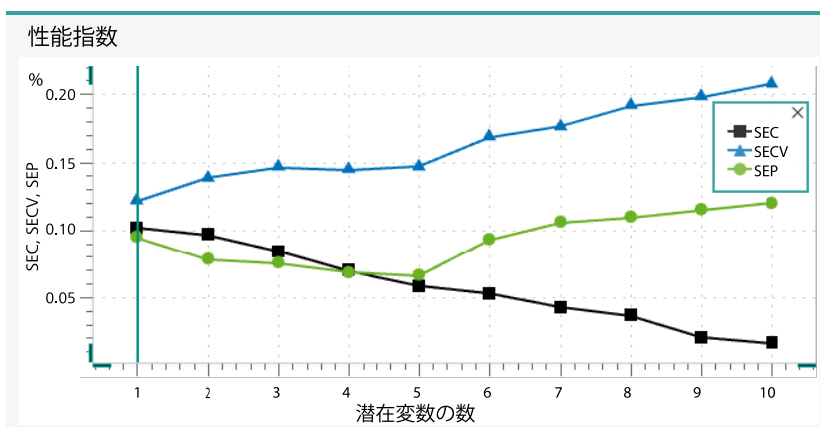
- i** 複数のデータ処理手順を使用する場合、順序が重要になる場合があります。Gap-Segment または Savitzky-Golay は SNV の前に使用し、SNV は detrend の前に使用することが好ましいです。
とをクリックすると、行を上か下に移動することができ、これによって順序を決定することができます。

3 モデルの計算

- **[計算]**をクリックしてモデルを計算します。

4 モデルの検証

- モデルナビゲータで、**定量化モデルの検証**をクリックしてプロセス手順検証に切り替えます。
- モデルを検証します。性能指数を以前作成したモデルと比較します。



EtOH 中の H₂O で、波長範囲が 1350 から 1550 nm で、微分階数 1 の Gap-Segment の場合、単一の潜在変数はまだ十分であるように思われます。SECV はわずかに 0.12 % 改善しました。

このアプリケーションのベースラインシフトには関連情報が含まれていないので、最小の改善にもかかわらずデータ前処理を維持できます。

5 モデルの保存

- をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

- i** データセットの分割またはアウトライヤー検出により新しく作成されたデータ前処理を考慮する場合、データセットを新たに分割できます。

5.4 定量化モデルの発行


測定のためにモデルを使用できるようにするには、モデルを発行する必要があります。これにより、発行されたバージョン、およびそれによって実行された測定に影響を与えずにモデルを更に開発することが可能となります。

定量化モデルの発行

前提条件:

- モデルが計算、および保存されていること。
- モデルが開いていること。
- 必要な数の潜在変数が選択されていること。

1 ダイアログを開く

-  をクリックして、ダイアログ **定量化モデルの発行** を開きます。

i モデルが既に発行されており、メソッドで使用されている場合、このメソッドはチェックボックス**メソッドの更新**を有効にすることによって自動的に更新できます。

注記: 以下は自動的に更新されません:

- 開いているメソッド
- 署名されて発行されているメソッド
- データアクセス権のフィルタリングが有効になっている場合: 現在ログインしているユーザーのデータアクセス権がないメソッド

2 Nearest Neighbor Distance

チェックボックス **Nearest Neighbor Distance の計算** が有効になっている場合、**Nearest Neighbor Distance (NND)** を使用できます。このモデルは、潜在変数の空間内でそれぞれの校正サンプルスペクトルに対し、最も近くにある校正サンプルスペクトルまでの距離を計算します。算出されたすべての距離の中から最も大きい数値が **PREDICT** コマンド変数

LimitNearestNeighborDistance (NND-Grenzwert) に保存されます ([21 ページ](#), [2.3.2 章を参照](#))。

予測時に定量化モデルが同様の方法で、記録されたスペクトルから最も近くにある校正サンプルスペクトルまでの距離を計算

します。この距離は **PREDICT** コマンド変数 **NearestNeighborDistance** (NND) に保存されます (21 ページ、2.3.2 章を参照)。

両方の変数を互いに比較し、結果のモニタリングを使ってモニタリングすることができます (148 ページ、「作業手順の作成」を参照)。

3 発行

- **[発行]**をクリックして、モデルを発行します。

キャリブレーションと評価 ▶ 定量化モデルでは、最後に発行されたバージョンが表示されます:

名前	バージョン	タイプ	最後に発行されたバージョン
My model	4	full	My model, V4

PREDICT コマンドは、発行されたモデルバージョンにアクセスできます。

i モデル概要

1 つ以上の定量化モデルを選択すると、右側のモデル概要に最も重要なデータが一目で表示されます (最大 5 つの異なるモデル)。

最後に保存したバージョンが最後に発行されたバージョンに対応していない場合、モデル概要では両方のバージョンが表示されます。

5.5 スロープ/y インターセプト補正

スロープ/y インターセプト補正により、定量化モデルを適用する場合に、システムエラーを修正できます。前提条件は、堅牢で信頼性がある定量化モデルです。エラーは統計的に有意である必要がありますが、大きすぎてもなりません。

i システムエラーは、回帰曲線の理想直線からの偏差 (スロープ =1、y インターセプト=0) と確認できます。

ランダムエラーも相関プロットで確認できます。回帰直線の周りに点が散在しているほど、ランダム誤差が大きくなります。ランダムエラーはスロープ/y インターセプト補正では修正できません。

スロープ/y インターセプト補正は次の場合に使用されます。

- 定量化モデル再検証されるか、対照サンプルで監視され、性能指数が環境の変化などにより要件を満たさないことが判明した場合。
- 定量化モデルがインポートした XDS/DS スペクトルで作成された場合 (174 ページ、[「XDS/DS アナライザの変更 \(定量化\)」](#)を参照)。

2 つの補正を利用できます:

- **バイアス:** バイアス、つまり基準値とサンプルの算出値と間の平均偏差を補正します。
修正後、バイアスは 0 になります。
- **スロープ/y インターセプト補正:** 相関プロットにおける回帰直線のスロープおよび y インターセプトを補正します。
修正後、スロープは 1 (45°-度に対応)、y インターセプトは 0 に等しくなります。
注記: スロープ/y インターセプト補正後、バイアスは 0 になります。

i バイアス補正、とりわけスロープ/y インターセプト補正は注意して適用してください。

エラーが統計的に有意でない場合、補正を適用しないでください。エラーが統計的に有意である場合、徹底的に調べてください。可能であればエラーの原因を取り除きます。正当な理由でエラーを取り除けない場合、バイアス補正またはスロープ/y インターセプト補正を適用できます。

サンプル数に関する注意:

- 信頼できるバイアス推定値を得るためには、20 以上のサンプルが必要です。
- スロープの信頼できる推定値を得るには、30 以上のサンプルが必要です。

サンプルの準備

スロープ/y インターセプト補正は通常、定量化モデルの再検証に用いるサンプルか、定量化モデルの性能モニタリングに用いる対照サンプルを用いて実行します。

- サンプルを **サンプルリスト** または **検索リクエスト** にまとめます。
- 各サンプルが次のものを含んでいることを確認してください。
 - 補正するパラメータの基準値。
 - スペクトル。
 - 各スペクトルの算出値。

スロープ/γ インターセプト補正の作成

i 複数の定量化モデル (オプション)

- 異なる定量化モデルを補正する場合、各モデルに対して個別のスロープ/γ インターセプト補正を作成します。
- 同一の定量化モデルの複数の同タイプのバージョンを補正する場合、スロープ/γ インターセプト補正は1つで十分です。

同種のバージョンは、以下の点で相違が許容されます:

- 異なる定量化モデルの名前
- 異なる参照パラメータの名前
- 異なるアウトライヤーデータセット (校正セットが影響を受けない限り)
- 異なる検証セット (校正セットが影響を受けない限り)
- 異なる交差検証パラメータ

反対に、同タイプのバージョンには、予測結果に影響を与える相違は許容されません:

- 校正セットは同一である必要があります。
- パラメータは同一である必要があります。
- 潜在変数の数は同一である必要があります。

1 新規スロープ/γ インターセプト補正の作成

- キャリブレーションと評価 ▶ スロープ/γ インターセプト補正で  をクリックします。

2 スロープ/γ インターセプト補正の名前付け

- 補正する定量化モデルの名前など、適切な名前をフィールド **名前** に入力します。

3 サンプルの選択

- スロープ/γ インターセプト補正を作成するために使用する 1 つ以上の **サンプルリスト** または **検索リクエスト** を選択します。

スロープ/yインターセプト補正の作成

名前

名前	保存済み
<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="text"/>	<input type="text"/>

定量化モデル、バージョン
<input type="text"/>

4 定量化モデルの選択

リスト **定量化モデル** は、選択したサンプルで修正できるすべての定量化モデルを示します。

名前	保存済み	定量化モデル、バージョン
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

- リスト **定量化モデル** で補正する定量化モデルを選択します。
注記: 使用サンプルの予想値が1つの定量化モデルの複数のバージョンに由来する場合、必要に応じてすべてこのバージョンを選択することができます。
- [次へ] をクリックします。

5 定量化モデルの参照パラメータ

フィールド **参照パラメータ / 定量化モデルの単位** は、選択した定量化モデルの参照パラメータの名前と単位を表示します。

- 必要に応じて **小数点以下の桁** の数を調整します。

6 選択したサンプルの参照パラメータ

リスト **参照パラメータ** は、選択されたサンプルの使用可能なすべての参照パラメータを表示します。

参照パラメータの選択

名前

参照パラメータ / 定量化モデルの単位

参照パラメータ	単位
<input type="text"/>	<input type="text"/>

- このリストで、希望する参照パラメータを選択します。



i サンプルリストまたは検索リクエストの参照パラメータに複数の名称がある場合は、これらの名称を全て選択できます。

7 入力内容の確定

- **[作成]**をクリックして新規スロープ/γ インターセプト補正を作成します。

補正は、基準値と、選択したサンプルの算出値に基づいて計算されます。以下のいずれの条件も満たす、すべてのサンプルが考慮されます：

- サンプルデータに選択した参照パラメータの基準値が含まれていること。
- サンプルに、選択した定量化モデルによって計算された定量化結果があること。

新しいタブは、スロープ/γ インターセプト補正を表示します。範囲**サンプル**は考慮されるサンプルを一覧表示します。

サンプル ? ↗					
	サンプル名	サブサンプル名	基準値	算出値	補正済みの値
	██████████	██████████	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 補正のタイプ

補正のタイプ**バイアス**または**スロープ/γ インターセプト**を選択します。

補正のタイプ: バイアス スロープ/γ インターセプト

9 アウトライヤーのマーキング

- スペクトルをアウトライヤーとしてマークするために、範囲**サンプル**でスペクトルを右クリックして、**アウトライヤーデータセット**をクリックし、スペクトルを計算から除外します。

記号 はアウトライヤーとしてスペクトルをマークします。スペクトルは、範囲**相関図**およびすべての計算から削除されます。

- アウトライヤーのマーキングを削除するために、もう一度スペクトルを右クリックして、**補正データセット**をクリックします。

スペクトルは再度[↑]でマークされます。スペクトルは範囲**相関図**に再度表示され、すべての計算に再び含まれます。

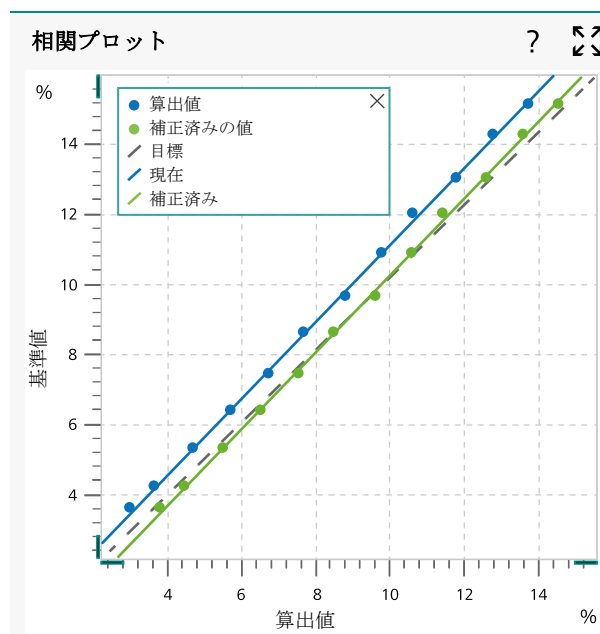
i [CTRL] または [SHIFT] キーを使って、複数のスペクトルを同時に選択し、一度に変更できます (163 ページ, 11.2 章を参照)。

10 相関図

範囲**相関図**は、各スペクトルに対し、y 軸上では同じ基準値、x 軸上では異なる値を持つ 2 つの点を表示します：

- 青色の点は、x 軸において定量化モデルによって予測された**算出値**を示します。
 - カーソルを点の上に配置し、その残差を表示します (算出値と基準値の間の差)。
- 緑色の点は x 軸の**補正済みの値**を示します。補正済みの値は、選択した補正のタイプによります (バイアスまたはスロープ/ y インターセプト)。
 - カーソルを点の上に配置し、その残差を表示します (補正済みの値と基準値の間の差)。

バイアス補正の相関プロット



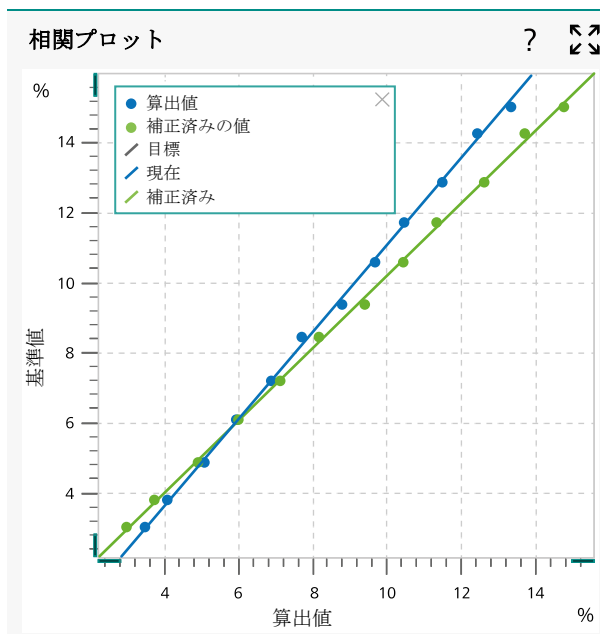


算出値（青色の点）はバイアスで補正されます。補正された回帰直線（緑色）は破線の 45°理想直線と交差しているため、バイアスは 0 になります。

上の相関プロットの例では、SEP が 0.82 から 0.24 に改善されます。

i 信頼できるバイアス推定値を得るためには、20 以上のサンプルが必要です。

スロープ/y インターセプト補正の相関プロット



算出値（青色の点）はスロープと y インターセプトで補正されます。補正済みの値（緑色の点）は理想的な回帰直線（45°、y インターセプト）を有しています。

上の相関プロットの例では、SEP が 0.86 から 0.12 に改善されます。

i スロープの信頼できる推定値を得るには、30 以上のサンプルが必要です。

11 補正值

範囲**補正值**では、スロープと y インターセプトに対する SEP と補正值が表示され、次の補正のタイプによって異なります：

- SEP は、補正データセットのサンプルに基づいた、予測の標準エラーを示します。

注記: 3 SEP 値に対する計算式は、それぞれ対応する自由度を考慮します。サンプルの数が少ない場合、補正のある値は補正なしの値より大きくなる場合があります。

- 乗法の補正值 **スロープ** および加算補正值 **y インターセプト** は、計算された値 (青い点) を補正済みの値 (緑色の点) に変換します:

$$\text{補正済みの値} = \text{算出値} \times \text{スロープ} + y \text{ インターセプト}$$

補正值	SEP	スロープ	y インターセプト
未補正	0.86	1.000	0.00
バイアス補正	0.71	1.000	0.53
スロープ/y インターセプト補正	0.12	1.193	-1.11


1 2 3

i 表は算出値 (青色の点) の次のデータを含んでいます。

- 回帰直線のスロープ (1)
- 回帰直線の y インターセプト (2)。
- 回帰直線のバイアス (3)。

12 スロープ/y インターセプト補正の発行

i 発行されたスロープ/y インターセプト補正は、後から開いたり編集したりすることはできません。

- 正しい補正のタイプ (バイアスまたはスロープ/y インターセプト) が選択されているかを確認します。
- ダイアログ **スロープ/y インターセプト補正の発行** を開くには  をクリックします。
- [発行して閉じる]** をクリックしてスロープ/y インターセプト補正を発行します。

スロープ/y インターセプト補正が発行され、同時に保存されます。タブは閉じられ、スロープ/y インターセプト補正は概要リストに表示されます。

PREDICT コマンドは、発行されたスロープ/y インターセプト補正バージョンにのみアクセスできます。

6 識別モデル

i OMNIS Software のシーケンスの図は補遺にあります (180 ページ, 「モデル開発」を参照)。

識別モデルは用途によって次のものを提供します:

- 不明なサンプル (例えば フルクトースなど) の **識別**。結果は製品名です。
- サンプルの製品属性 (例えば フルクトースなど) の **検証**。結果は、はいいいえ - 検証に成功または失敗として出ます。


6.1 識別モデルの作成

識別モデルの作成

前提条件:

- スペクトルおよび製品名を含むデータセットが作成されている (59 ページ, 「スペクトルの記録」を参照)。

1 識別モデルの作成と名前付け

- **キャリブレーションと評価** ▶ **識別モデル** で  をクリックします。
新規識別モデルが新規タブで表示されます。
- 適切な名前を入力フィールド **識別モデル名** に入力します。

2 サンプルの選択

- すべてのサンプルリストは **サンプルリスト** をクリックして表示します。
- 準備されたすべてのサンプルリストを選択します。

識別モデルの作成

識別モデル名


なまえ名前	保存済み	製品	スペクトル数

i サンプルは検索リクエストによっても選択できます。加えて、XDS 装置および DS 装置のサンプルもインポートできます (174 ページ, 「XDS/DS アナライザの変更 (定量化)」を参照)。

i サンプル選択は後で調整できます。

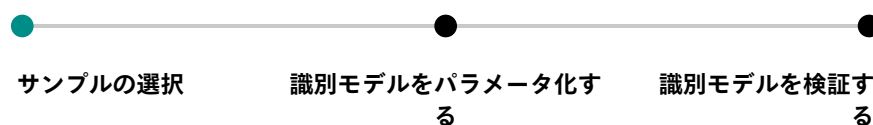
選択には製品パラメータを持つサンプルが含まれている必要があります。列**製品**は含まれている製品を一覧表示します。

3 識別モデルの作成

- [作成] をクリックします。
- モデルの保存:  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

6.2 サンプル選択とデータセット分割

識別モデルのタブで、上部に水平ナビゲーションバーナビゲーターが表示されます。ナビゲーターは、モデル開発のその後の手順をガイドします。



i スペクトルの表示

3つのプロセス工程では、個々のスペクトルがカーブ、点、またはテーブルの行の形で表示されます。

選択されたスペクトルは、すべての表示とすべてのプロセス工程で同時に強調表示されます。

i テーブルおよびグラフ

テーブルとグラフの処理については補遺に記載されています：

- テーブルの処理 (163 ページ, 11.2 章を参照)
- グラフの処理 (164 ページ, 11.3 章を参照)

プロセス工程 「サンプルの選択」

範囲**製品リスト**は選択したサンプルの製品を表示します：

製品リスト ? [拡大]

製品	スペクトル数	製品グループ
■ [製品名]	[数]	[グループ]
■ [製品名]	[数]	[グループ]
■ [製品名]	[数]	[グループ]

各製品は製品色により識別されます。製品色をクリックすると、別の色を選択できます。

製品リストで少なくとも1つの製品を選択すると、選択された製品のすべてのスペクトルを範囲**スペクトルのリスト**が表示します:

スペクトルのリスト ◀▶ [拡大] [縮小] ? [拡大]

	サンプル名	サブサンプル名	ソース	製品
↑ [アイコン]	[名前]	[サブ名]	[ソース]	[製品名]
↑ [アイコン]	[名前]	[サブ名]	[ソース]	[製品名]
↑ [アイコン]	[名前]	[サブ名]	[ソース]	[製品名]
↑ [アイコン]	[名前]	[サブ名]	[ソース]	[製品名]

入力フィールドは、サンプルのそれぞれの製品属性を表示します (図ではオレンジ色でマークされています)。

以下のアイコンは、データセットに対する割り当てを記号で表示します:

- ↑ → スペクトルは校正セットに割り当てられています。
- ↑ ✓ スペクトルは検証セットに割り当てられています。
- ↑ → ⋮ スペクトルはアウトライヤーデータセットに割り当てられています。
- ! 欠陥データまたは無効データを表示します。ツールチップを参照してください。

範囲**スペクトルのリスト**のスペクトルは範囲**スペクトルオーバーレイ**にも表示され、以下のように図示されます:

- 校正セットのスペクトルは**青色**、検証セットのスペクトルは**緑色**、アウトライヤーデータセットのスペクトルは**赤色**です。
- トグルボタン**製品カラーを表示**が有効である場合、スペクトルは製品色に応じてカラー表示されます。

プロセス工程により **サンプルの選択** 次のことができます:

- **サンプル選択の調整**
さらにスペクトルを追加したり、スペクトルを消去したりします。

■ データセットの分割

自動または手動のデータセットの分割：

- **校正セット**：校正セットのスペクトルおよび製品属性でモデルを計算します。
- **検証セット**：検証セットのスペクトルと製品属性は、モデルの検証のみに使用されます。
- **アウトライヤーデータセット**：アウトライヤーデータセットはモデルやその検証に影響を及ぼしません。アウトライヤーは、一部のテーブルでのみ情報提供のために表示されます。

i モデルは、例えば最初のフェーズにおいて制限された数のサンプルのみを利用できる、あるいは検証が外部データセットでのみ行われる場合、検証セットなしで開発できます。

サンプル選択の調整

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価**においてモデルが開いており、前面にあること (100 ページ, 「識別モデルの作成」を参照)。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択**に含まれていること。

1 スペクトルの追加または消去

サンプル選択と製品所属は、いつでも範囲**スペクトルのリスト**で調整できます:

- サンプルを選択するために、**+**をクリックして、スペクトルのリストのスペクトルを追加する必要があります。
- スペクトルのリストからスペクトルを削除するには、スペクトルを選択して、**-**をクリックします。

注記：関連するサンプルは、スペクトルを含めてデータベースに残ります。

2 製品所属の変更

- 別の製品が割り当てられているすべてのスペクトルを選択します。
- 選択されたスペクトルを右クリックし、コンテキストメニュー **製品の割り当て**で選択します。
入力ウィンドウが表示されます。
 - フィールド**新しい製品**をクリックします。既存の製品を選択するか、新規製品名を入力します。
 - **[割り当て]**をクリックすると、製品を選択されたスペクトルに割り当てます。

3 モデルの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

データセットの自動分割


アウト라이어検出は、アウト라이어データセットの自動作成を可能にします。残ったスペクトルは、校正セットと検証セットにおいて自動的に分割することができます。

キャリブレーションと検証について、個別のサンプルを収集する場合、サンプルを手動で割り当てることができます。

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択** に含まれていること。

1 データセット分割の呼び出し

- 範囲 **スペクトルのリスト** にて  をクリックします。
ダイアログ **データセット分割** が開きます。

2 アウト라이어データセットの算出

- スペクトルを自動でアウト라이어データセットに割り当てるため、トグルボタン **アウト라이어を算出** を有効にします。自動アウト라이어検出は、スペクトルの偏差に基づいてスペクトルのアウト라이어を検出します。
 - 必要に応じて **有意水準** を調整します。有意水準が高いほど、より多数のスペクトルのアウト라이어が検出されます。典型的な値は 5% または 1% です。

3 検証セットの算出

自動分割により、校正セットと検証セットが母集団を示し、互いに独立していることを保証します。

- スペクトルを自動で検証セットに割り当てるため、トグルボタン **検証セットを算出** を有効にします。
 - フィールド **割合** で、例えば 20% ~ 30% など、検証セットに対するスペクトルの割合を定義します。

4 オプションの設定

データセット分割に対するオプションの設定:


- **パラメータ設定の適用**: データ前処理と波長の選択をスペクトルに適用します (111 ページ、「識別モデルのパラメータ化」を参照)。
注記: パラメータ設定を後で変更しても、データセット割り当てには影響を及ぼしません。ただし、データセットが再度分割される場合を除きます。
- **アウトライヤーを保持する**: 既存のアウトライヤーはそのまま残り、分割時には考慮されません。このオプションにより、**有意水準**が変更されない場合であってもアウトライヤーデータセットが大きくなる可能性があります。
- **検証セットを保持する**: 検証セットにある既存のスペクトルは維持され、分割時には考慮されません。このオプションにより、**割合**が変更されない場合であっても検証セットが大きくなる可能性があります。

5 自動分割の開始

- **[分割]** をクリックします。

データセットは事前の設定に従って分割されます。

6 モデルの保存

-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

影響プロットおよびスコアプロット

自動データセット分割後、影響プロットとスコアプロットのグラフが利用可能になります:

- プロセス工程 **サンプルの選択** でいずれかの範囲で  をクリックし、グラフ **影響プロット** または **スコアプロット** を選択します。

影響プロットとスコアプロットは計算方法 **PCA** (主成分分析) に基づいています。主成分の数は、説明された分散が少なくとも 95% となるように選択されます。

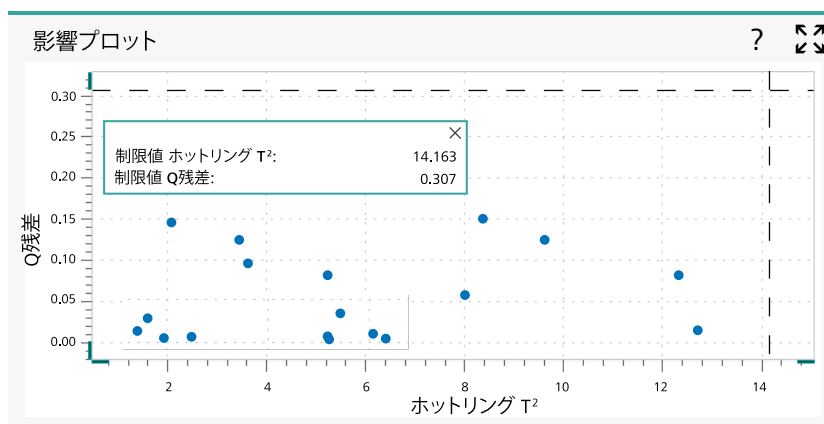
PCA の出発点は、次の形式のスペクトルです:

- 自動データセット分割でオプション **パラメータ設定の適用** が無効化されている場合、データ前処理や波長の選択を伴わないスペクトル。
- 自動データセット分割でオプション **パラメータ設定の適用** が有効化されている場合、データ前処理や波長の選択を伴うスペクトル。

オプションが有効になっている場合の注記: パラメータ設定が変更される場合、影響プロットとスコアプロットは再度自動データセット分割を行った後のみ利用可能です。

影響プロット

影響プロットはスペクトルの特徴的なプロパティを記述し、アウトライヤーを特定するのに役立ちます。



i グラフの処理

グラフの表示は調整可能で、個々または複数の点を選択することができます (164 ページ, 11.3 章を参照)。

各点はスペクトルを示します。高いホテリングの T^2 および Q 残差の値は、アウトライヤーの可能性を示します。

ホテリングの T^2 値が高いスペクトルは、該当するサンプルの極端な組成を示しています。

Q 残差が高いスペクトルは、該当のサンプルに異常な化学成分が含まれていることを示します。

i 破線は、指定された有意水準の臨界値 (限界値) を示します。自動データセット分割でアウトライヤー検出が行われなかった場合、有意水準は 5% です。

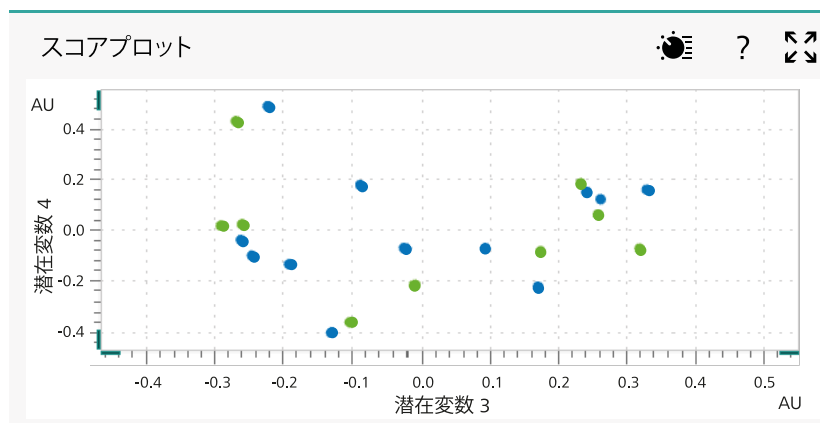
上図は考えられるアウトライヤーがないことを示します。すべての点は破線内にあります。

スコアプロット

i スペクトルのホテリングの T^2 値がすべての主成分のスコアを 1 つの値にまとめるのに対し、スコアプロットはスコアのさらに詳細な分析を可能にします。

スコアプロット内の各点はスペクトルを示します。最初の 2 つの主成分のスコアは、x 軸と y 軸で読み取ることができます。スコアは正規化され、各主成分は同じ重みを受け取ります。

プロパティでは、別の各ペアの主成分も表示することができます。



データセットの手動分割 (オプション)

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択** に含まれていること。

i 手動分割の前に自動データセット分割を実行すると、**影響プロット**および**スコアプロット**が使用可能になります。

1 スペクトルの再割り当て

- いずれかの範囲でスペクトルを選択します。
影響プロットでの選択の例:
 - 範囲**影響プロット**を開きます。
 - 影響プロットで1つ以上の点を選択します (166 ページ、「複数の点またはカーブの選択」を参照)。
 - 選択した点の1つを右クリックして、コンテキストメニューを開きます。スペクトルをデータセットに割り当てます:
 - ↑ **校正セット**
 - ↑ **検証セット**
 - ↑ **アウトライヤーデータセット**

2 モデルの保存

- **保存** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

6.3 識別モデルの計算

最初のモデルはパラメータ設定なしで計算できます。それにより、検証結果のベンチマークが生成されます。後のパラメータ設定の影響を好ましく評価できます。

i ノイズやその他アーチファクトにより、いくつかの波長を使用できなくなった場合、この波長を直接除外できます (111 ページ「識別モデルのパラメータ化」を参照)。

モデルの計算

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** において識別モデルが開いており、前面にある。

1 計算の開始

- [計算] をクリックしてモデルを計算します。

i コマンドボタン[計算]が非アクティブの場合、次の原因が考えられます:

- モデルはすでに計算されており、それ以降に何も変更が行われていない。
- プロセス工程の一つに誤った入力が含まれています。ナビゲーターでは、該当する範囲のプロセス工程が赤く表示されます。誤った入力のなされたフィールドは赤く枠で囲まれます。

6.4 識別モデルの検証

プロセス工程 **識別モデルを検証する** により、次のサンプルの検証が可能になります:

- 校正セットのサンプル**
このサンプルはモデル作成用に使用されました。そのため、モデルによる正しい分類は別のサンプルの場合よりも簡単です。
- 検証セットのサンプル (ある場合)**
このサンプルはモデルに依存していません。その検証結果は不明なサンプルの識別に対し、より優れた基準となります。

i 以下では、製品について説明しますが、製品グループである場合もあります。製品グループは複数の製品をまとめたもので、モデル階層に使用されます (133 ページ, 8 章を参照)。

サンプルの識別

モデルは各製品のサンプルに確率を割り当てます。

- i** 確率は互いに独立しています。値の合計は 100% になりません。値は相対的なため、異なる製品を比較することができます。

評価は、調整可能な**確率しきい値**と個々の製品の適格性評価を使用して行われます:

1. 確率が確率しきい値を超える各製品に対し、対応する適格性確認モデルによるサンプルの適格性評価が実行されます。適格性評価に失敗した場合は、対応する製品の確率がゼロに設定されます。
2. 手順 1 の、修正された確率による評価:
 - a. 確率が確率しきい値より上にない場合、識別は失敗します (識別ステータス**未識別**)。
 - b. 確率が 1 つだけ確率しきい値より上にある場合、サンプルは正常に識別され、対応する製品に割り当てられます (識別ステータス**識別済**)。
 - c. 複数の確率が確率しきい値より上にある場合、予測は多義的であり、識別は失敗します (識別ステータス**多義的**)。

サンプルの検証結果

OMNIS Software はモデルで算出された製品と予想される製品を比較します。そこから検証結果が生成されます:

- **成功**: 識別は完了し、予想される製品と一致します。
- **失敗**: 一致、識別または多義的識別がありません。

範囲検証概要

範囲 **検証概要** には校正セットと検証セット (ある場合) のサンプルの結果が要約されます。

リンクはすべての校正サンプルおよび検証サンプルの概要です:

合計	
成功 %	正しく分類されたサンプル(%)
成功	正しく分類されたサンプル数
失敗	間違って分類されたサンプル数
スペクトルの数	校正セットおよび検証セットのスペクトルの数

右は、個々の製品および製品グループの概要です:

製品/製品グループ	失敗	成功	成功 %
製品 A	製品 A として分類されていない製品 A のサンプル数	正しく分類された製品 A のサンプル数	正しく分類された製品 A のサンプル(%)
製品 B	製品 B として分類されていない製品 B のサンプル数	正しく分類された製品 B のサンプル数	正しく分類された製品 B のサンプル(%)
製品グループ C	製品グループ C として分類されていない製品グループ C のサンプル数	正しく分類された製品グループ C のサンプル数	正しく分類された製品グループ C のサンプル(%)

範囲検証結果

範囲**検証結果**は個々のサンプルの詳細結果を示します。示されているのは、範囲**検証概要**で選択されているすべての製品のサンプルです。

- i** 各サンプルに対し、当初の確率が**確率しきい値**の上にある製品が表示されます。確率 0.0% が表示される場合、対応する製品の適格性評価に失敗しています。


データの処理とコピー

- ・ テーブルの処理 (163 ページ, 11.2 章を参照)

識別モデルの最適化

次の対策は、識別モデルを改善することに役立ちます。

1 確率しきい値の調整

- ・ 多数の予測が多義的であったり、多数の 0.0% 確率が生じる場合、確率しきい値を上げることができます。
- ・ 確率しきい値に達していないために多数のサンプルが識別されない場合、確率しきい値を下げるすることができます。
- ・ 確率しきい値を調整するため、次の手順を実行します：
 -  をクリックして、識別モデルのプロパティを開きます。
 - 選択リストで**パラメータ**を選択します。
 - **確率しきい値**を調整します。標準値は 80% です。
 - 識別モデルを再計算し、検証します。

2 パラメータ設定の調整

- ・ データ前処理を調整します (114 ページ, 「[データ前処理](#)」を参照)。

- 波長範囲を調整します (112 ページ「波長の選択」を参照)。

3 モデル階層の開発

モデル階層により、識別モデルの階層構造化と識別されたサンプルの定量分析を可能にします (133 ページ 8 章を参照)。

6.5 識別モデルのパラメータ化

プロセス工程**識別モデルをパラメータ化する**はスペクトルの最適化を可能にします。アーチファクトおよび非線形性を修正します。正確に実施すると、パラメータ設定はモデルの精度とロバスト性を改善します。

パラメータ設定は以下に適用されます:

- 校正セットのすべてのスペクトル
- 検証セットとアウトライヤーデータセットのすべてのスペクトル

i ワークエリア**サンプル**の予測では、サンプルのスペクトルが記録され、モデルによって評価されます。このスペクトルにも、モデルで定義されたパラメータ設定が適用されます。

2つのパラメータ設定オプションを利用できます:

- 使用する波長範囲を定義します。
- データ前処理を適用し、スペクトルを適切な形式にします。

スペクトルの目視検査はプロセス工程 **サンプルの選択** から始まります。

スペクトルの表示

前提条件:

- ワークエリア**キャリブレーションと評価**においてモデルが開いており、前面にあること。


1 確認するスペクトルの選択




- 範囲**製品リスト**のプロセス工程**サンプルの選択**では、すべての製品を選択し、そのスペクトルは表示されます。

範囲**スペクトルオーバーレイ**は選択した製品のスペクトルを表示します。

- プロセス工程**識別モデルをパラメータ化する**の製品リストで製品を選択します。

2 波長範囲の追加



- ナビゲーターでプロセス工程**識別モデルをパラメータ化する**に切り替えます。
- 範囲**波長範囲**でをクリックして波長範囲を追加します。

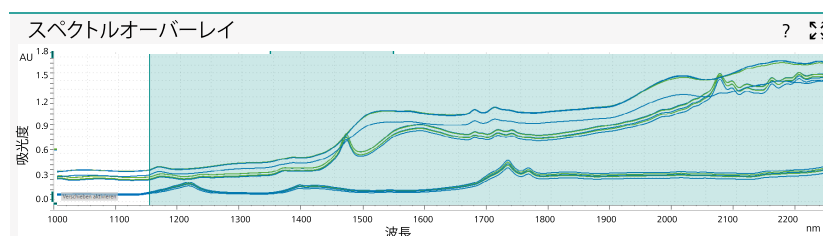
波長範囲			?	
#	開始波長	終了波長		
1	<input type="text" value="1000.0 nm"/>	<input type="text" value="2250.0 nm"/>		

波長範囲を追加します。範囲はまずすべての波長範囲をカバーします。

3 波長範囲の設定


波長範囲を次の方法で設定します:

- 数字を入力して波長範囲を設定するため、**開始波長**および**終了波長**を対応する入力フィールドに入力します。
- 波長範囲をグラフで設定するため、次の手順を実行します:
 - 範囲**スペクトルオーバーレイ**にて**[移動を有効化]**をクリックします。
 - カーソルがで表示されるまで、強調表示された範囲の左の縁にカーソルを移動させます。
 - マウスの左ボタンを押したまま、左の縁を該当するポジションに移動します。
 - 強調表示された範囲の右の縁も同様の方法で実施します。
 - 波長範囲を移動させるには、カーソルがで表示されるまで、範囲内でカーソルを移動させます。マウスの左ボタンを押したまま、範囲を左または右に動かします。
 - **[移動を無効化]** をクリックします。



図では波長範囲 1150 から 2250 nm までが定義されています。この範囲はモデルにより使用されます。

4 さらに波長範囲を追加

さらなる波長範囲はをクリックして追加できます。

i 波長範囲は重複してはなりません

新しい波長範囲は、はじめは既存の波長範囲と重複します。重複がなくなるように波長範囲を調整します。

5 モデルの保存

- をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

i データセットの分割またはアウトライヤー検出で新しく作成された波長選択を考慮する場合、データセットを新たに分割できます。

6.5.2 データ前処理

適切なデータ前処理は識別モデルを改善できます。例：ベースラインのシフトには、ほとんどのアプリケーションに関連する情報がないため、削除することができます。

データ前処理の定義

前提条件:


- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。

1 表示するスペクトルの選択

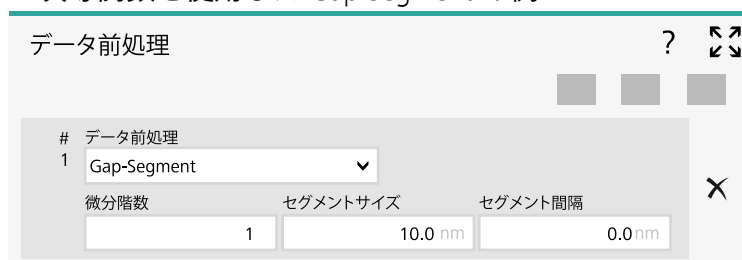
スペクトルを表示する製品を選択してください:

- プロセス工程 **サンプルの選択** の範囲 **製品リスト** で製品を選択します。
または
- プロセス工程 **識別モデルをパラメータ化する** の製品リストで製品を選択します。

2 データ前処理手順の追加

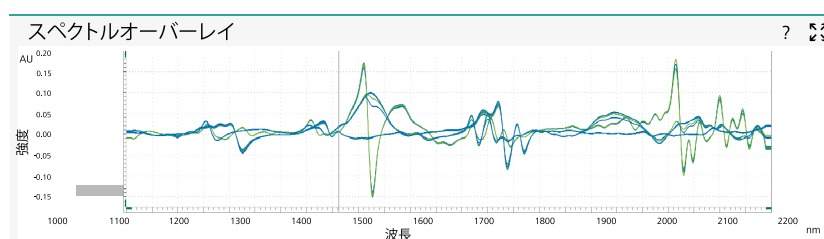
- ナビゲーターでプロセス工程 **識別モデルをパラメータ化する** に切り替えます。
- 範囲 **データ前処理** で  をクリックしてデータ前処理手順を追加します。

- フィールド **データ前処理** でデータ前処理の種類を選択し、それに属するフィールドに入力します。
一定の（波長依存ではない）ベースラインシフトを削除する一次導関数を使用した Gap-Segment の例：




手順 1 で選択された製品の、前処理されたスペクトルは、範囲 **スペクトルオーバーレイ** に直ちに表示されます。



データ前処理後、スペクトルは異なって見えます。例：



3 さらにデータ前処理手順の追加

さらなるデータ前処理手順は、 をクリックして追加できます。

i 複数のデータ前処理手順を使用する場合、順序が重要になる場合があります。Gap-Segment または Savitzky-Golay は SNV よりも優先的に適用され、SNV は detrend より優先的に適用されます。

 と  をクリックすると、行を上か下に移動することができ、これによって順序を決定することができます。

4 モデルの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

i データセットの分割またはアウト라이어検出により新しく作成されたデータ前処理を考慮する場合、データセットを新たに分割できます。

6.6 識別モデルの発行


測定のためにモデルを使用できるようにするには、モデルを発行する必要があります。これにより、発行されたバージョン、およびそれによって実行された測定に影響を与えずにモデルを更に開発することが可能となります。

識別モデルを発行します

前提条件:

- モデルが計算、および保存されていること。
- モデルが開いていること。

1 ダイアログを開く

-  をクリックして、ダイアログ **識別モデルを発行します** を開きます。

i モデルが既に発行されており、メソッドで使用されている場合、このメソッドはチェックボックス**メソッドの更新**を有効にすることによって自動的に更新できます。

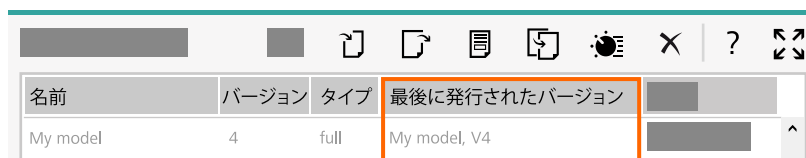
注記: 以下は自動的に更新されません:

- 開いているメソッド
- 署名されて発行されているメソッド
- データアクセス権のフィルタリングが有効になっている場合: 現在ログインしているユーザーのデータアクセス権がないメソッド

2 発行

- **[発行]** をクリックして、モデルを発行します。

キャリブレーションと評価 ▶ 識別モデルでは、最後に発行されたバージョンが表示されます:



名前	バージョン	タイプ	最後に発行されたバージョン
My model	4	full	My model, V4

PREDICT コマンドは、発行されたモデルバージョンにアクセスできます。

7 適格性確認モデル

i OMNIS Software のシーケンスの図は補遺にあります (180 ページ、「モデル開発」を参照)。

適格性確認モデルを用いてサンプルグループを他のサンプルから識別することができます。適格性確認モデルは、例えば使用できるサンプル (正のサンプル) と使用できないサンプル (負のサンプル) の識別に適しています。


7.1 適格性確認モデルの作成

適格性確認モデルの作成

前提条件:

- スペクトルを含むデータセットが作成されていること (59 ページ、「スペクトルの記録」を参照)。

1 適格性確認モデルの作成と命名

- **キャリブレーションと評価 ▶ 適格性確認モデル** で  をクリックします。
新しい適格性確認モデルが新しいタブに表示されます。
- 適切な名前を入力フィールド **適格性確認モデルの名前** に入力します。

2 校正サンプルの選択

- すべてのサンプルリストは **サンプルリスト** をクリックして表示します。
- 校正セットのために準備されたサンプルリストを選択します。

認証モデルの作成

認証モデルの名前

サンプルリスト

検索リクエスト

XDS-/DS インポート

校正セット

名前	保存済み

i サンプルは検索リクエストによっても選択できます。加えて、XDS 装置および DS 装置のサンプルもインポートできます (174 ページ, 「XDS/DS アナライザの変更 (定量化)」を参照)。


i サンプル選択は後で調整できます。

3 検証サンプルの選択 (オプション)

- **検証セットの追加** をクリックします。
- 検証セットのために準備されたサンプルリストを、対応するチェックボックスを使って正または負の検証セットに指定します。

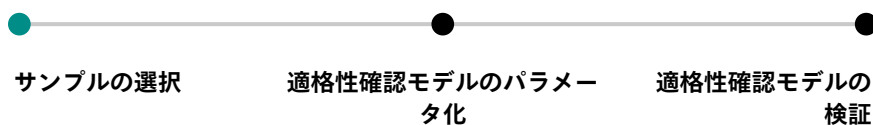
検証セット			
名前	保存済み	正	負
		<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
		<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

4 適格性確認モデルの作成

- **[作成]** をクリックします。
- モデルの保存:  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

7.2 サンプル選択とデータセット分割

適格性確認モデルのタブで、最上部に水平ナビゲーションバーナビゲーターが表示されます。ナビゲーターは、モデル開発のその後の手順をガイドします。



i スペクトルの表示

3つのプロセス工程では、個々のスペクトルがカーブ、点、またはテーブルの行の形で表示されます。選択されたスペクトルは、すべての表示とすべてのプロセス工程で同時に強調表示されます。

テーブルおよびグラフ

テーブルとグラフの処理については補遺に記載されています：

- ・ テーブルの処理 (163 ページ, 11.2 章を参照)
- ・ グラフの処理 (164 ページ, 11.3 章を参照)

プロセス工程「サンプルの選択」

範囲**校正セット**は校正セットのスペクトルを一覧表示します：

スペクトルのリスト			◀▶	⏪+	⏩-	?	↕
			サンプル名	サブサンプル名	ソース		
							
							
							

検証セットのサンプルが選択された場合、そのスペクトルが範囲**検証セット**に表示されます。

以下のアイコンは、データセットに対する割り当てを表示します：



スペクトルは校正セットに割り当てられています。



スペクトルは正の検証セットに割り当てられています。



スペクトルは負の検証セットに割り当てられています。



スペクトルは、データセットに手動で割り当てられました。



スペクトルは、データセットに自動的に割り当てられました。



スペクトルは、OMNIS Software に記録されました。



スペクトルは、外部ファイルからインポートされました。

範囲**スペクトルオーバーレイ**では、校正セットのスペクトルは**青**で表示され、正の検証セットのスペクトルは**緑**、負の検証セットのスペクトルは**赤**で表示されます。

プロセス工程により **サンプルの選択** 次のことができます：

・ サンプル選択の調整

さらにスペクトルを追加したり、スペクトルを消去したりします。

■ **データセットの分割**

自動または手動のデータセットの分割：

- **校正セット**: 校正セットのスペクトルでモデルを計算します。
- **検証セット**: 検証セットのスペクトルは、モデルの検証にのみ使用されます。

i モデルは、例えば最初のフェーズにおいて制限された数のサンプルのみを利用できる、あるいは検証が外部データセットでのみ行われる場合、検証セットなしで開発できます。

サンプル選択の調整

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること (117 ページ, 「[適格性確認モデルの作成](#)」を参照)。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択** に含まれていること。

1 スペクトルの追加または消去

- スペクトルの追加: 範囲 **校正セット** または範囲 **検証セット** で **+** をクリックします。
- スペクトルの削除: スペクトルを選択し、**-** をクリックします。
注記：関連するサンプルは、スペクトルを含めてデータベースに残ります。

2 モデルの保存

- **保存** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

データセットの自動分割

分割には、校正セットおよび両方の検証セットのすべてのスペクトルが含まれます。分割では以下が可能です:


- 負の検証セットの自動作成 (オプション)
負の検証セットのスペクトルは、アウトライヤーによって算出されます (スペクトルアウトライヤー)。
- 正の検証セットの自動作成 (オプション)
残ったスペクトルは、校正セットと正の検証セットで自動的に分割することができます。

サンプルは、手動でも、随時割り当てることができます。

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択** に含まれていること。

1 データセット分割の呼び出し

- 範囲 **校正セット** にて  をクリックします。
ダイアログ **データセット分割** が開きます。

2 負の検証セットの算出 (オプション)

- スペクトルアウトライヤーを自動で負の検証セットに割り当てるためには、トグルボタン **負のスペクトルの算出** を有効にします。
 - 必要に応じて **有意水準** を調整します。有意水準が高いほど、より多数のスペクトルのアウトライヤーが検出されます。典型的な値は 5% または 1% です。

i 負のスペクトルの算出は、慎重に使用してください。有意水準が高い場合、正の結果の信頼性を改善することができます。ただし、より多くの正のサンプルを見落とししたり、誤って負の結果として評価したりする場合があります。

したがって、算出された負の検証セットのスペクトルでは、実際にアウトライヤーであるかどうかを調べる必要があります。そのためには、影響プロットとスコアプロットが役立ちます。

3 正の検証セットの算出 (オプション)

自動分割では、校正セットと正の検証セットが母集団を示し、互いに独立していることを保証します。

- スペクトルを自動で正の検証セットに割り当てるため、トグルボタン **正のスペクトルの算出** を有効にします。
 - フィールド **割合** で、例えば 20% ~ 30% など、正の検証セットに対するスペクトルの割合を定義します。

4 オプションの設定

データセット分割に対するオプションの設定:

- **パラメータ設定の適用**: データ前処理と波長の選択をスペクトルに適用します (127 ページ, 「**適格性確認モデルのパラメータ化**」を参照)。

注記: パラメータ設定を後で変更しても、データセット割り当てには影響を及ぼしません。ただし、データセットが再度分割される場合を除きます。

- **負のスペクトルの保持:** 負の検証セットにある既存のスペクトルは維持され、分割時には考慮されません。このオプションでは、**有意水準**が変更されない場合でも、負の検証セットが大きくなる可能性があります。
- **正のスペクトルの保持:** 正の検証セットにある既存のスペクトルは維持され、分割時には考慮されません。このオプションは、**割合**が変更されない場合でも、正の検証セットが大きくなる原因となります。

i 別のスペクトルが検証セットに追加された場合、オプション**負のスペクトルの保持**および**正のスペクトルの保持**を有効にする必要があります。これを行わなかった場合、すべてのスペクトルがまとめられて新たに分割されるため、望ましくない結果の原因となることがあります。

5 自動分割の開始

- **[分割]** をクリックします。

データセットは事前の設定に従って分割されます。

6 モデルの保存

- **保存** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

影響プロットおよびスコアプロット

自動データセット分割後、影響プロットとスコアプロットのグラフが利用可能になります:

- プロセス工程**サンプルの選択**でいずれかの範囲で**▼**をクリックし、グラフ**影響プロット**または**スコアプロット**を選択します。

影響プロットとスコアプロットは計算方法**PCA** (主成分分析) に基づいています。主成分の数は、説明された分散が少なくとも 95% となるように選択されます。

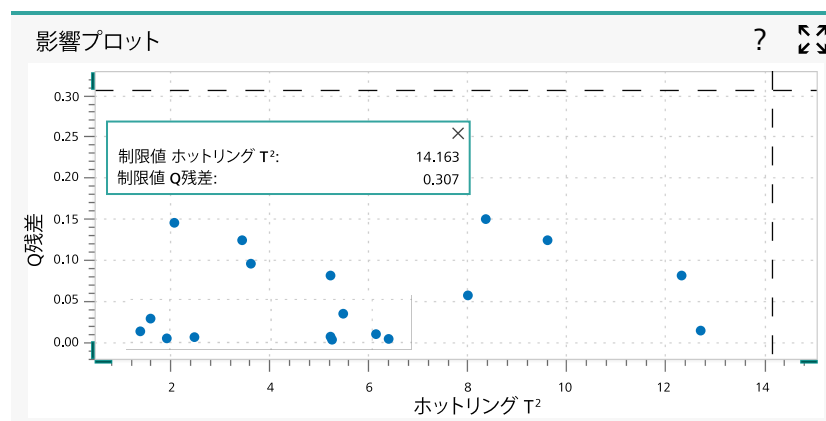
PCA の出発点は、次の形式のスペクトルです:

- 自動データセット分割でオプション**パラメータ設定の適用**が無効化されている場合、データ前処理や波長の選択を伴わないスペクトル。
- 自動データセット分割でオプション**パラメータ設定の適用**が有効化されている場合、データ前処理や波長の選択を伴うスペクトル。

オプションが有効になっている場合の注記: パラメータ設定が変更される場合、影響プロットとスコアプロットは再度自動データセット分割を行った後にのみ利用可能です。

影響プロット

影響プロットはスペクトルの特徴的なプロパティを記述し、負の検証セットのスペクトルのアウトライヤーを算出するのに役立ちます。



📌 グラフの処理

グラフの表示は調整可能で、個々または複数の点を選択することができます (164 ページ, 11.3 章を参照)。

各点はスペクトルを示します。高いホテリングの T^2 および Q 残差の値は、アウトライヤーの可能性を示します。

ホテリングの T^2 値が高いスペクトルは、該当するサンプルの極端な組成を示しています。

Q 残差が高いスペクトルは、該当のサンプルに異常な化学成分が含まれていることを示します。

📌 破線は、指定された有意水準の臨界値（限界値）を示します。自動データセット分割で負のスペクトル検出が行われなかった場合、有意水準は 5% です。

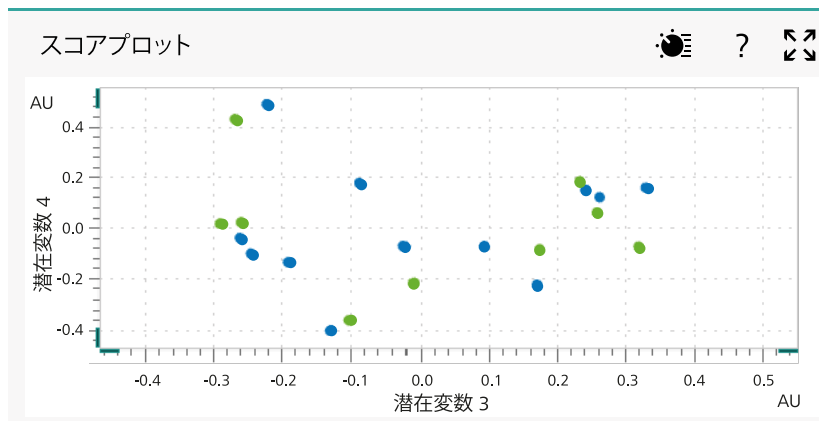
上図は考えられる負のスペクトルがないことを示します。すべての点は破線内にあります。

スコアプロット

📌 スペクトルのホテリングの T^2 値がすべての主成分のスコアを 1 つの値にまとめるのに対し、スコアプロットはスコアのさらに詳細な分析を可能にします。

スコアプロット内の各点はスペクトルを示します。最初の 2 つの主成分のスコアは、x 軸と y 軸で読み取ることができます。スコアは正規化され、各主成分は同じ重みを受け取ります。

📌 **プロパティ**では、別の各ペアの主成分も表示することができます。



データセットの手動分割 (オプション)

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。
- ナビゲーターがプロセス工程 **サンプルの選択** に含まれていること。

i 手動分割の前に自動データセット分割を実行すると、**影響プロット** および **スコアプロット** が使用可能になります。

1 スペクトルの再割り当て

- いずれかの範囲でスペクトルを選択します。
影響プロットでの選択の例:
 - 範囲 **影響プロット** を開きます。
 - 影響プロットで1つ以上の点を選択します (166 ページ、「複数の点またはカーブの選択」を参照)。
 - 選択した点の1つを右クリックして、コンテキストメニューを開きます。スペクトルをデータセットに割り当てます:
 - 正の検証セット**
 - 負の検証セット**
 - 校正セット**

2 モデルの保存

- **A** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

7.3 適格性確認モデルの計算

最初のモデルはパラメータ設定なしで計算できます。それにより、検証結果のベンチマークが生成されます。後のパラメータ設定の影響をより良く評価できます。

i ノイズやその他アーチファクトにより、いくつかの波長を使用できなくなった場合、この波長を直接除外できます (127 ページ、「適格性確認モデルのパラメータ化」を参照)。

モデルの計算

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** で適格性確認モデルが前面に開いていること。

1 計算の開始

- [計算] をクリックしてモデルを計算します。

i コマンドボタン[計算]が非アクティブの場合、次の原因が考えられます:

- モデルはすでに計算されており、それ以降に何も変更が行われていない。
- プロセス工程の一つに誤った入力が含まれている。ナビゲーターでは、該当する範囲のプロセス工程が赤く表示されます。誤った入力のなされたフィールドは赤く枠で囲まれます。

7.4 適格性確認モデルの検証

プロセス工程 **適格性確認モデルの検証** により、次のサンプルの検証が可能になります:

- 校正セットのサンプル**
このサンプルはモデル作成用に使用されました。そのため、モデルによる正しい分類は別のサンプルの場合よりも簡単です。
- 正および負の検証セットのサンプル (ある場合)**
このサンプルはモデルに依存していません。その検証結果は不明なサンプルの適格性評価に対し、より優れた基準となります。

サンプルの検証結果

各サンプルに対し、適格性確認モデルは結果を算出します (正または負)。校正セットおよび正の検証セットのサンプルに対しては、正の結果が予測されます。負の検証セットのサンプルに対しては負の結果



果が予測されます。OMNIS Software は、モデルで算出された結果と予測された結果を比較します。そこから検証結果が生成されます:

- **成功:** モデルによって算出された結果は予測された結果と一致します。
- **失敗:** モデルによって算出された結果は予測された結果と一致しません。

範囲検証概要

範囲**検証概要**には校正セットと検証セット (ある場合) のサンプルの結果が要約されます。

リンクはすべての校正サンプルおよび検証サンプルの概要です:

合計	
成功 %	正しく予測されたサンプル [%]
成功	正しく予測されたサンプル数
失敗	誤って予測されたサンプル数
スペクトルの数	校正セットおよび両方の検証セットのスペクトルの数

右側には個別のデータセットに関する概要があります。

範囲検証結果

範囲**検証結果**は個々のサンプルの詳細結果を示します。表示されるのは、範囲**検証概要**で選択されているすべてのデータセットのサンプルです。

適格性確認モデルの最適化

次の措置は、適格性確認モデルの改善に役立ちます:

- データ前処理を調整します ([129 ページ](#), [「データ前処理」を参照](#))。
- 波長範囲を調整します ([128 ページ](#), [「波長の選択」を参照](#))。

新たにデータセットの分割を行う場合、負のスペクトルによって適格性確認モデルを要件に合わせて調整できます:

- 有意水準を高くする場合、正の結果の信頼性を向上することができます。すなわち、誤った正の結果が少なくなる一方で、正のサンプルの見落としがより多くなります。
- 有意水準を低くする場合 (または負のスペクトルの算出を放棄する場合)、正のサンプルの見落としをより減らすことができます。すなわち、誤った負の結果は少なくなります、より多くの負のサンプルが誤って正として評価されます。

7.5 適格性確認モデルのパラメータ化

プロセス工程 **適格性確認モデルのパラメータ化** はスペクトルの最適化を可能にします。アーチファクトおよび非線形性を修正します。正確に実施すると、パラメータ設定はモデルの精度とロバスト性を改善します。

パラメータ設定は以下に適用されます:

- 校正セットのすべてのスペクトル
- 両方の検証セットのすべてのスペクトル

i ワークエリア **サンプル** の予測では、サンプルのスペクトルが記録され、モデルによって評価されます。このスペクトルにも、モデルで定義されたパラメータ設定が適用されます。

2つのパラメータ設定オプションを利用できます:

- 使用する波長範囲を定義します。
- データ前処理を適用し、スペクトルを適切な形式にします。

スペクトルの目視検査はプロセス工程 **サンプルの選択** から始まります。

スペクトルの表示

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。

1 プロセス工程 'サンプルの選択'

- ナビゲーターでプロセス工程 **サンプルの選択** をクリックします。

このプロセス工程では、スペクトルは表形式と曲線形式で同時に検査することができます。自動データセット分割が実行されていると、影響プロットおよびスコアプロットが使用可能になります。

2 スペクトルの検査

- テーブルの処理 (163 ページ, 11.2 章を参照)
- グラフの処理 (164 ページ, 11.3 章を参照)

その他の手順

- 波長の選択 (128 ページ, 「波長の選択」を参照)
- データ前処理の定義 (129 ページ, 「データ前処理」を参照)

7.5.1 波長の選択

波長の選択は適格性確認モデルを改善できます。例：吸光度値が高くてノイズが確認できる場合、該当する波長範囲を除外できます。

モデルは定義された波長範囲を使用します。波長範囲が定義されていない場合、モデルは全ての波長を使用します。

波長範囲の定義


前提条件:




- ワークエリア **キャリブレーションと評価**においてモデルが開いており、前面にあること。

1 プロセス工程 「適格性確認モデルのパラメータ化」

- ナビゲーターで**適格性確認モデルのパラメータ化**をクリックします。

2 波長範囲の追加

- 範囲**波長範囲**でをクリックして波長範囲を追加します。

波長範囲		?	
#	開始波長	終了波長	
1	<input type="text" value="1000.0 nm"/>	<input type="text" value="2250.0 nm"/>	

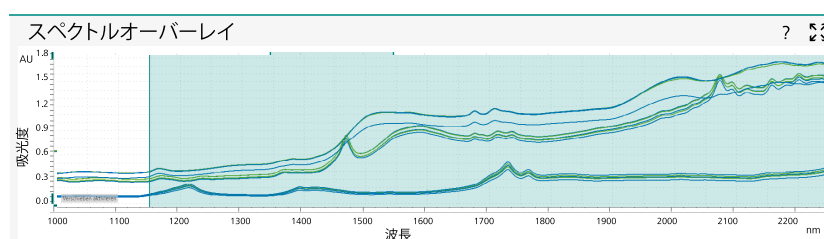
波長範囲を追加します。範囲はまずすべての波長範囲をカバーします。

3 波長範囲の設定

波長範囲を次の方法で設定します:

- 数字を入力して波長範囲を設定するため、**開始波長**および**終了波長**を対応する入力フィールドに入力します。

- 波長範囲をグラフで設定するため、次の手順を実行します：
 - 範囲**スペクトルオーバーレイ**にて**[移動を有効化]**をクリックします。
 - カーソルが $\leftarrow \rightarrow$ で表示されるまで、強調表示された範囲の左の縁にカーソルを移動させます。
 - マウスの左ボタンを押したまま、左の縁を該当するポジションに移動します。
 - 強調表示された範囲の右の縁も同様の方法で実施します。
 - 波長範囲を移動させるには、カーソルが \leftrightarrow で表示されるまで、範囲内でカーソルを移動させます。マウスの左ボタンを押したまま、範囲を左または右に動かします。
 - **[移動を無効化]** をクリックします。



図では波長範囲 1150 から 2250 nm までが定義されています。この範囲はモデルにより使用されます。

4 さらに波長範囲を追加

さらなる波長範囲は $\equiv \equiv$ をクリックして追加できます。

i 波長範囲は重複してはなりません

新しい波長範囲は、はじめは既存の波長範囲と重複します。重複がなくなるように波長範囲を調整します。

5 モデルの保存

- **A** をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

i データセットの分割で新しく作成された波長の選択を考慮する場合、データセットを新たに分割できます。

7.5.2 データ前処理


適切なデータ前処理により、適格性確認モデルを改善できます。例：ベースラインのシフトには、ほとんどのアプリケーションに関連する情報がないため、削除することができます。

データ前処理の定義

前提条件:

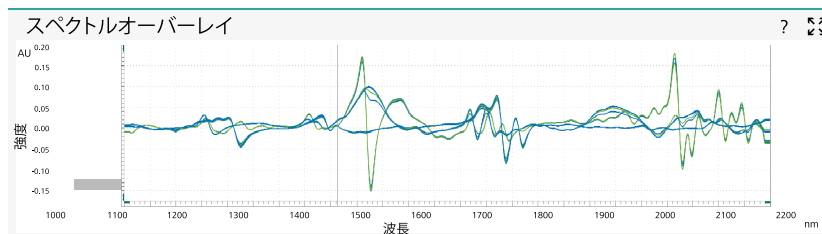
- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデルが開いており、前面にあること。
- ナビゲーターがプロセス工程 **適格性確認モデルのパラメータ化** に含まれていること。

1 データ前処理手順の追加


- 範囲 **データ前処理** で  をクリックしてデータ前処理手順を追加します。
- フィールド **データ前処理** でデータ前処理の種類を選択し、それに属するフィールドに入力します。
一定の（波長依存ではない）ベースラインシフトを削除する一次導関数を使用した Gap-Segment の例：

手順 1 で選択された製品の、前処理されたスペクトルは、範囲 **スペクトルオーバーレイ** に直ちに表示されます。

データ前処理後、スペクトルは異なって見えます。例：



2 さらなるデータ前処理手順の追加

さらなるデータ前処理手順は、 をクリックして追加できます。

i 複数のデータ前処理手順を使用する場合、順序が重要になる場合があります。Gap-Segment または Savitzky-Golay は SNV よりも優先的に適用され、SNV は detrend より優先的に適用されます。

☰↑と☰↓をクリックすると、行を上か下に移動することができ、これによって順序を決定することができます。

3 モデルの保存

- ☰をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

i データセットの分割で新しく作成されたデータ前処理を考慮する場合、データセットを新たに分割できます。

7.6 適格性確認モデルの発行

測定のためにモデルを使用できるようにするには、モデルを発行する必要があります。これにより、発行されたバージョン、およびそれによって実行された測定に影響を与えずにモデルを更に開発することが可能となります。

適格性確認モデルの発行

前提条件:

- モデルが計算、および保存されていること。
- モデルが開いていること。

1 ダイアログを開く

- ☰をクリックして、ダイアログ **適格性確認モデルの発行** を開きます。

i モデルが既に発行されており、メソッドで使用されている場合、このメソッドはチェックボックス**メソッドの更新**を有効にすることによって自動的に更新できます。

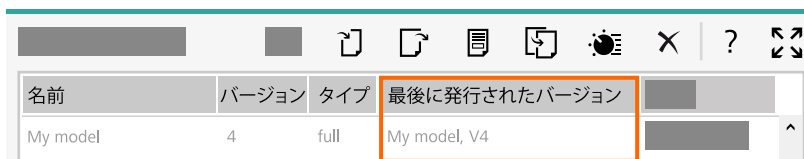
注記: 以下は自動的に更新されません:

- 開いているメソッド
- 署名されて発行されているメソッド
- データアクセス権のフィルタリングが有効になっている場合: 現在ログインしているユーザーのデータアクセス権がないメソッド

2 発行

- [発行]をクリックして、モデルを発行します。

キャリブレーションと評価 ▶ 適格性確認モデルでは、最後に発行されたバージョンが表示されます:



名前	バージョン	タイプ	最後に発行されたバージョン
My model	4	full	My model, V4

PREDICT コマンドは、発行されたモデルバージョンにアクセスできます。

8 モデル階層

モデル階層は以下を可能にします:

- **識別モデルの階層構造化**
 識別モデルが類似した製品をよく識別できない場合、その目的のために最適化されたサブモデルにその識別を委託することができます。
 例: 4つの異なる製品を含む識別モデルは、類似の製品であるフルクトースやグルコース同様によく識別できません。フルクトースとグルコースを製品グループ「糖」にまとめると、メインモデルは糖と2つの別の製品を識別することができます。サンプルが糖として識別されると、サブモデルはフルクトースとグルコースの分類を引き受けます。
 必要に応じてその他の階層を追加できます。
- **定量化モデルを製品とリンクさせる**
 識別されたサンプルを定量化分析することができます。それぞれの対象パラメータに、対応する製品の定量化モデルがリンクされます。オプションで、スロープ/γ インターセプト補正を適用できます。
- **定量化モデルの階層構造化**
 場合によっては、定量化モデルの階層構造は、単一の定量化モデルより優れた予測力を発揮することがあります。その場合、下位の定量化モデルは、上位モデルの基準値範囲の一部に対してそれぞれ最適化されます。
 例: 上位の定量化モデルが < 5 の結果を出した場合、下位の定量化モデルは < 5 の値に対して使用され、最終的な結果を特定します。結果についても同様に ≥ 5 です。
- **定量化モデルのモデル階層**
 モデル階層では、1つまたは複数の定量化モデルを、下位の定量化モデルの有無に関わらず、上下に一覧表示することができます。メソッドでは、単一の **PREDICT** コマンドだけですべての対象パラメータを予測することができます。

モデル階層は用途に応じて以下を提供します:

- 不明なサンプル (例えば フルクトースなど) の **識別**。結果は製品名です。
 - オプションとして、特定された製品に応じて、1つ以上の **定量化**。
- サンプルの製品属性 (例えば フルクトースなど) の **検証**。結果は、はい、またはいいえ - 検証は成功または失敗しました。
 - オプションとして、特定された製品に応じて、および検証結果に関わらず、1つ以上の **定量化**。
- 1つまたは複数の **定量化**。

8.1 モデル階層の開発

8.1.1 モデルの開発


最初に、モデル階層で使用する識別モデルおよび/または定量化モデルを開発する必要があります。

識別モデルの開発

識別モデルにモデル階層を含める場合は、以下の通りに開発します。

1 メインモデル

- 利用可能なすべての製品の識別モデルを開発します (100 ページ 6 章を参照)。
- 個々の製品の判別が困難な場合、これらの製品を 1 つの製品グループにまとめることができます:
 - 範囲 **製品リスト** のプロセス工程 **サンプルの選択** で、まとめる製品に対し、列 **製品グループ** に共通する名前を定義します。次の例では、製品 **C1** および **C2** を製品グループ **C** にまとめます:

製品リスト ? 		
製品	スペクトル数	製品グループ
A		
B		
C1		C
C2		C

モデルは製品グループ **C** を単一の製品のように取り扱います。モデルは A/B/C1/C2 の間ではなく、A/B/C の間で分類します。

i 必要に応じてさらなる製品グループを構築できます。

2 サブモデル

メインモデルの各製品グループについて、識別モデルを開発します (100 ページ 6 章を参照)。

上記例において、製品 **C1** と **C2** が属するすべてのサンプルを含むサブモデルを開発します。そのためには、同じサンプルを製品グループ **C** のメインモデルのように使用してください。

i **製品リスト**を右クリックすると、定義された製品グループのサブグループを作成できます。

3 さらにる階層レベル

サブモデルが2つ以上製品を含んでいる倍、必要に応じてより多くの製品を製品グループにまとめることができます。この製品グループに対して個別の識別モデルを開発します。このようにして、追加の階層レベルを作成します。

定量化モデルの開発

モデル階層に定量化モデルを含める場合、以下の通りに開発します。

1 各対象パラメータ用の定量化モデル

すべての定量化対象パラメータに対し、対応する定量化パラメータを開発します (65 ページ, 5 章を参照)。

2 下位の定量化モデル

定量化モデルに下位の定量化モデルが必要な場合、下位の定量化モデルを開発します。

8.1.2 モデル階層へのモデルの挿入


前提条件: モデル階層で使用するすべてのモデルが作成され (134 ページ, 「モデルの開発」を参照)、発行されていること。

次の手順は、モデル階層の作成とモデル階層へのモデルの挿入です:


- 発行されたメインモデルまたは発行された定量化モデルを挿入します。
- 発行されたサブモデルを製品グループとリンクさせます。
- 発行された定量化モデルを製品とリンクさせます。
- 発行された下位の定量化モデルを上位の定量化モデルとリンクさせます。

モデル階層の作成

1 モデル階層の生成

- **キャリブレーションと評価 ▶ モデル階層**でをクリックします。
新規モデル階層は新規タブに表示されます。


2 モデル階層に名前を付ける

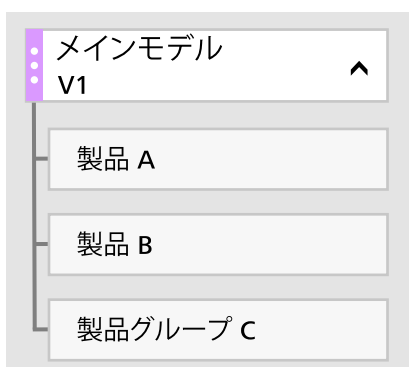
- 上部ツールバーのをクリックすると、ウィンドウ**プロパティ**が開きます。
- **プロパティ** ▶ **一般事項**からフィールド**名前**にて希望する名前を入力します。

モデル階層への識別モデルの挿入

モデル階層に識別モデルを含める場合、以下の通りに挿入します。


1 メインモデルの追加

- プロセス工程**モデル階層の編集**にはモデル階層エディタが含まれています。最初は、モデル階層エディタは空です。
- をクリックして、ウィンドウ**ライブラリ**を開きます。
- **ライブラリ** ▶ **識別モデル**において、メインモデルをドラッグアンドドロップで右にドラッグし、モデル階層エディタに挿入します。



i 縦向きの矢印は、製品を開いたり折りたたんだりするのに使われます。

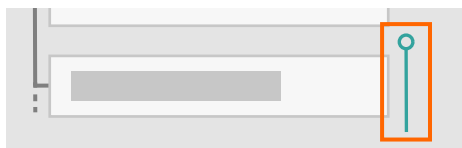
i モデルがライブラリに見つからない場合:

- モデルが発行されていることを確認してください。
- ライブラリでをクリックしてビューを更新します。

2 サブモデルを製品グループにリンク

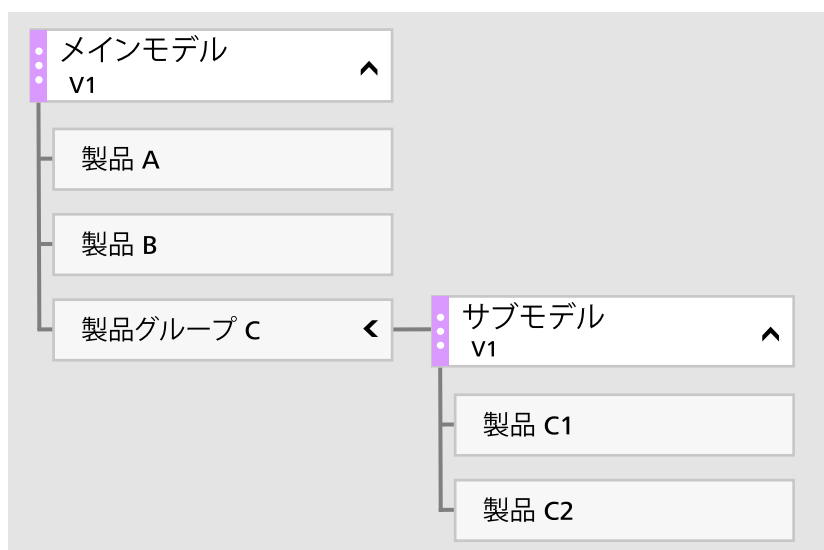
メインモデルで製品グループが定義されている場合:

- ライブラリ ▶ 識別モデル ではサブモデルをドラッグアンドドロップで関連の製品グループの横に挿入します。緑色の縦ラインが挿入位置を示しています:



- さらなるサブモデルおよび階層レベル
さらなるサブモデルを同様の方法で各関係する製品グループとリンクします。

例: サブモデルは製品グループとリンクされています。



i 横向きの矢印は、サブモデルを開いたり折りたたんだりするのに使用します。

i サブモデルを製品グループまたは製品とリンクさせることができます。

3 モデルのバージョンング

モデルに新しいバージョンが発行されている場合でも、モデル階層に含まれているモデルはそのまま変わりません。必要に応じて対応するモデルをモデル階層から削除し、新しいバージョンを挿入します。

4 モデル階層の保存

- をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

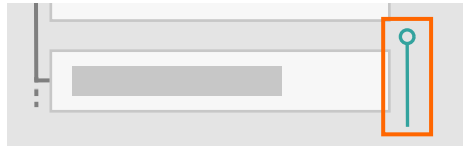
モデル階層への定量化モデルの挿入

モデル階層に定量化モデルを含める場合、以下の通りに挿入します。

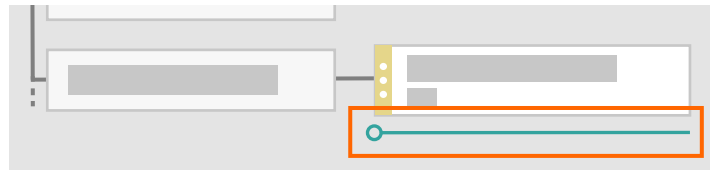
1 識別モデルを含むモデル階層

モデル階層に識別モデルも含まれる場合、定量化モデルを製品とリンクさせる必要があります：

- **ライブラリ ▶ 定量化モデル** で定量化モデルをドラッグアンドドロップして関連の製品グループの横に挿入します。緑色の縦ラインが挿入位置を示しています：

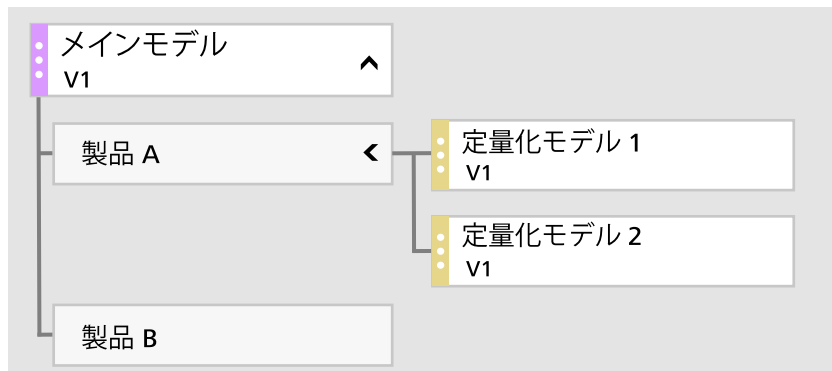


- 同じ製品のために複数の定量化対象パラメータを予測する必要がある場合：
 - その他の定量化モデルをそれぞれドラッグアンドドロップで上下に挿入します。緑色の横ラインが、挿入位置を示しています：



- 他の製品に定量化分析が予定されている場合、同様の方法で対応する定量化モデルをリンクさせます。


例: 2つの定量化モデルが一つの製品とリンクされています。



i 定量化モデルを製品または製品グループとリンクさせることができます。

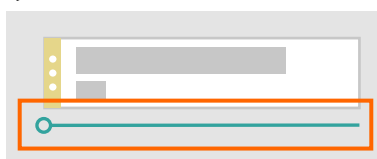
2 識別モデルを含まないモデル階層

モデル階層に定量化モデルのみを含める場合：


- プロセス工程**モデル階層の編集**にはモデル階層エディタが含まれています。最初は、モデル階層エディタは空です。
- をクリックして、ウィンドウ**ライブラリ**を開きます。
- **ライブラリ ▶ 定量化モデル**で、1番目の定量化モデルをドラッグアンドドロップで右にドラッグし、モデル階層エディタに挿入します。



- モデル階層に複数の対象パラメータを予測させる場合、その他の定量化モデルをそれぞれドラッグアンドドロップで上下に挿入します。緑色の横ラインが、挿入位置を示しています:



i モデルがライブラリに見つからない場合:

- モデルが発行されていることを確認してください。
- ライブラリでをクリックしてビューを更新します。

3 下位の定量化モデル

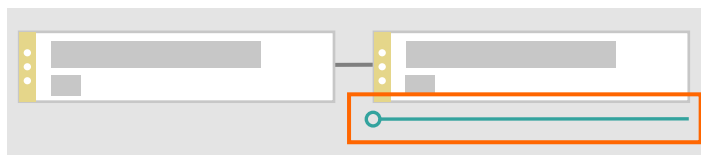
下位の定量化モデルをモデル階層に挿入するには、以下の通りに行ってください:

- **ライブラリ ▶ 定量化モデル**で下位の定量化モデルをドラッグアンドドロップで上位の定量化モデルの横に挿入します。緑色の縦ラインが挿入位置を示しています:



- ダイアログ**条件の追加**で、下位の定量化モデルに適用させる条件を設定します。条件には、下位の定量化モデルの予想値の一部、例えば<5などが含まれている必要があります。条件が追加されると、下位の定量化モデルが上位の定量化モデルとリンクされます。

- その他の下位の定量化モデルをそれぞれドラッグアンドドロップで上下に挿入します。緑色の横ラインが、挿入位置を示しています:



注記: 数値範囲に下位の定量化モデルが必要ない場合、代わりに上位モデルを使用し、それ自体とリンクさせることができます。

前提条件: 下位の定量化モデルは以下の前提条件を満たす必要があります:

- 条件は、有理数の全範囲を網羅している必要があります。
- 条件は、重複してはいけません。

正しい条件の例:


- モデル A1 (シングル値) の条件: < 5
- モデル A2 (間隔) の条件: ≥ 5 および < 10
- モデル A3 (シングル値) の条件: ≥ 10

前提条件を満たしていない場合でも、モデル階層は保存できますが、発行はできません。

条件の確認:

- **内部検証** をクリックします。
- エラー通知が表示されない場合、前提条件は満たされています。
- そうでない場合、エラー通知が前提条件の満たされていない箇所、および理由について通知します。

条件の確認または編集:

- 下位の定量化モデルを選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。
- サブエリア条件を開きます。
- 該当する会の定量化モデルを順に選択し、それぞれの条件を表示させます。必要に応じて条件を調整します。
- 他の定量化モデルに下位の定量化モデルを予定している場合、これらも同様にリンクさせます。


4 スロープ/y インターセプト補正

スロープ/y インターセプト補正を必要とするすべての定量化モデルを以下の通りに修正します:

- 定量化モデルを選択します。
- ウィンドウ**プロパティ**ををクリックして開きます。

- ・ **プロパティ ▶ パラメータ** でスロープ/γ インターセプト補正を定義します。



記号  は、定量化モデルがスロープ/γ インターセプト補正とリンクされていることを示しています。下位の定量化モデルがある場合には、その条件の確認時に補正結果が使用されます。

5 モデルとスロープ/γ インターセプト補正のバージョン管理

モデル階層に含まれるモデルまたはスロープ/γ インターセプト補正に新しいバージョンが発行された場合でも、モデルとスロープ/γ インターセプト補正はそのまま変わりません。必要に応じて、対応するモデルまたはスロープ/γ インターセプト補正をモデル階層から削除し、新しいバージョンを挿入します。

6 モデル階層の保存

- ・  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

8.2 モデル階層の検証

定量化モデルを含むモデル階層

モデル階層を検証する場合、定量化モデルは評価されません。ただし、下位の定量化モデルを含む定量化モデルの場合、前提条件を満たしているか確認が行われます:

- ・ 条件は、有理数の全範囲を網羅している必要があります。
- ・ 条件は、重複してはいけません。

条件の確認

- ・ **内部検証** をクリックします。
- ・ エラー通知が表示されない場合、前提条件は満たされています。
- ・ そうでない場合、エラー通知が、前提条件の満たされていない箇所と理由について通知します。

内部検証および外部検証

識別モデルを含むモデル階層は、プロセス工程 **モデル階層の検証** に 2 種類の異なる検証を提供します:

内部検証

内部検証は校正セットを使用し、ある場合にはメインモデルの検証セットを使用します。

▪ **外部検証**

外部検証は、個別に外部データセットを使用します。外部データセットの場合、サンプルは別の日に、場合によっては別の人により、別の装置で収集・測定されます。

モデル階層の検証

前提条件:

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** においてモデル階層が作成され、開いており、前面にある (134 ページ, 8.1 章を参照)。
- 外部で検証される場合、スペクトルと製品名を備えた対応するデータセットがあります (59 ページ, 「スペクトルの記録」を参照)。

1 プロセス工程'検証'への切換

- ナビゲーションで**モデル階層の検証**をクリックしてプロセス工程検証に切り替えます。

2 内部検証または外部検証の実行

内部検証

- **内部検証** をクリックします。

i 内部検証はメインモデルのスペクトルのみを使用します(校正セット、あるばいには検証セット)。サブモデルのアウトライヤーと追加のスペクトルは含まれていません。

外部検証

- **外部検証** をクリックします。
- サンプルをサンプルリストまたは検索リクエストから選択します。
選択には製品パラメータを持つサンプルが含まれている必要があります。列**製品**は含まれている製品を一覧表示します。
- **[検証]** をクリックします。

3 検証結果を検査します

- プロセス工程 **モデル階層の検証** において範囲 **検証概要** を確認します。検証概要は単一モデルの場合と同じ方法で結果をまとめます (109 ページ, 「範囲 検証概要」を参照)。この場合、モデル階層は単一の大きなモデルとしてみなされます。スペクトルの検証結果は成功か失敗です。

- 単一スペクトルの結果を確認する。
 - 範囲**検証概要**では、単一のスペクトルを表示するすべての製品を選択します。
 - 範囲**検証結果**は選択した製品のスペクトルを一覧表示します。
モデル階層結果は、それぞれモデル階層の最終結果を表示します。
 続いて、各階層レベルのステップ評価が示されます。
レベル 1 の結果はメインモデルの結果を表示します。
 その後、すべてのその他階層レベルに対して対応するサブモデルの結果が続きます。

8.3 モデル階層の発行


測定のためにモデル階層を使用できるようにするには、モデル階層が発行されなければなりません。

モデル階層の発行

前提条件:

- モデル階層は保存されていること。
- 検証はオプションである古都。Metrohm 推奨、検証を実行することをお勧めします。
- モデル階層は開いていること。

1 ダイアログを開く

-  をクリックして、ダイアログ **モデル階層の発行** を開きます。

i モデル階層が既に発行されており、メソッドで使用されている場合、このメソッドはチェックボックス**メソッドの更新**を有効にすることによって自動的に更新できます。

注記: 以下は自動的に更新されません:

- 開いているメソッド
- 署名されて発行されているメソッド
- データアクセス権のフィルタリングが有効になっている場合: 現在ログインしているユーザーのデータアクセス権がないメソッド

2 発行

- **[発行]**をクリックしてモデル階層を発行します。

キャリブレーションと評価 ▶ **モデル階層** では、最後に発行されたバージョンが表示されます:

名前	バージョン	タイプ	最後に発行されたバージョン
My model	4	full	My model, V4

PREDICT コマンドは、発行されたモデル階層バージョンにのみアクセスできます。

9 予測

予測では、不明なサンプルのスペクトルにモデルが適用されます。モデルに応じて以下を予測できます:

- 対象パラメータ (定量化)
- 製品属性もしくは検証結果 (識別)
- 適格性確認結果 (適格性評価)

i 予測用のサンプルは、モデルを作成したサンプルと同様に取り扱われ、測定される必要があります。

i OMNIS Software のシーケンスの図は補遺にあります (181 ページ、「予測」を参照)。



9.1 予測の準備

予測を準備するため、メソッド、作業手順、サンプルプロファイル、サンプルリストを次のように作成します。メソッドには、モデルへの接続を構築する **PREDICT** コマンドが含まれています。

メソッドの作成

1 メソッドの適用と命名

スペクトルは、モデル開発のスペクトルと同じ設定で記録される必要があります。最も簡単な方法は、モデル開発に使用されたメソッドを適用することです (49 ページ、「スペクトル記録の準備」を参照)。

- **プロセス ▶ メソッド**で、モデル開発に使用されたメソッドを選択します。
-  をクリックして選択されたメソッドを複製します。
- メソッド名をダブルクリックして複製されたメソッドを開きます。
- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。
- **プロパティ ▶ 一般事項** で適切な名前をフィールド **名前** に入力します。

2 PREDICT コマンドの挿入

PREDICT は記録したスペクトルの予測を作成します。

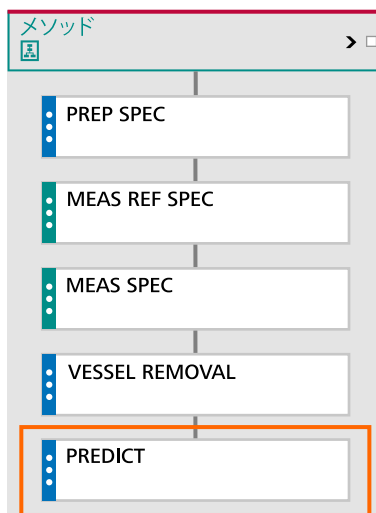
- ウィンドウ **ライブラリ** を  をクリックして開きます。

- ライブラリ ▶ コマンド で **PREDICT** コマンドを検索し、ドラッグアンドドロップでメソッドに挿入します。

コマンドの正しい順序に注意してください：

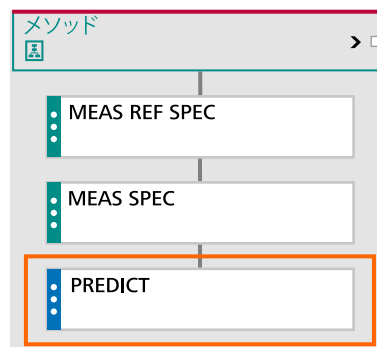
液体サンプル

基本構造




固形物のサンプル

基本構造



PREDICT コマンドは、**VESSEL REMOVAL** コマンドの前または横に置くこともできます。

3 PREDICT コマンドパラメータの設定

- PREDICT コマンドを選択します。
- ウィンドウ **プロパティ** を  をクリックして開きます。



- **プロパティ ▶ パラメータ**にてコマンドパラメータを定義します:
 - **スペクトルの参照**
リスト**測定コマンドの名前**を開きます。評価するスペクトルを記録する **MEAS SPEC** コマンドの名前を選択します。
 - **モデルの参照**
モデルの**構造**を選択します: **単一モデル**または**モデル階層**。
 - 構造**単一モデル**が選択されている場合、**モデルタイプ**を選択します: 定量化モデル、識別モデル、または適格性確認モデル。
 - 発行されたモデルまたは発行されたモデル階層を選択します。
定量化: 必要に応じてスロープ/γ インターセプト補正を選択します。
検証: 検証に識別モデルまたはモデル階層を使用する必要がある場合、オプション **検証用に使用する** をオンにします。

4 複数の対象パラメータ (定量化)

各サンプルに対して1つ以上の対象パラメータを予測する必要がある場合 (152 ページ、「[複数の対象パラメータ \(定量化\)](#)」を参照)、次の手順に従います:



- 各対象パラメータについて **PREDICT** コマンドを挿入します。
注記: モデル階層に含まれる定量化モデルの数に関わらず、モデル階層に必要なのは **PREDICT** コマンド一つだけです。
- 各 **PREDICT** コマンドについて、コマンドパラメータを上記のように定義します。すべての **PREDICT** コマンドは、同じスペクトルを参照しますが、各対象パラメータについては別の定量化モデルを参照します。

5 メソッドの保存

- メソッドを、をクリックして検証します。
- をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押してメソッドを保存します。

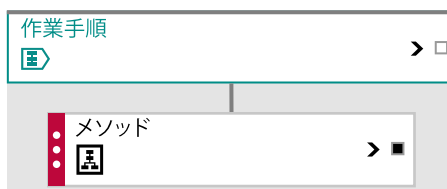
作業手順の作成

1 作業手順の作成と命名


- プロセス ▶ 作業手順で  をクリックします。
新規作業手順は新規タブに表示されます。
- ウィンドウプロパティを  をクリックして開きます。
- プロパティ ▶ 一般事項で適切な名前をフィールド名前に入力します。



2 メソッドの挿入


- ウィンドウライブラリを  をクリックして開きます。
- 作成したメソッドをドラッグアンドドロップでライブラリ ▶ メソッドから作業手順に挿入します。



3 結果のモニタリングの定義（オプション）

-  定量化について結果のモニタリングを使用できます。例:校正サンプルの基準値範囲内など、分析結果が特定の限界内にあるかをモニタリングします。
識別について、通常は結果のモニタリングを使用しません。ただし、必要に応じて同じ方法でコマンド変数 'IdentificationProbability.Final. コマンド名' をモニタリングできます。

-  をクリックします。
-  をクリックして、ウィンドウプロパティを開きます。
- サブエリアプロパティ ▶ 結果のモニタリングを選択します。
- [結果のモニタリング] をクリックします。

-  をクリックして、新たな結果のモニタリングを追加します:
 - **(X)** をクリックして、変数のダイアログを開きます。
 - 予想値に対して **PREDICT** コマンドの変数を選択します。定量化での例: '**Predicted.Quantification.Result.コマンド名**'
 - モデル階層変数が索引によって選択されている場合、必要に応じて一番上の入力フィールドで索引を変更します、例:
'**Predicted.Quantification{2}.Result.コマンド名**
(172 ページ, 11.4.1 章を参照)
 - **[適用]** をクリックして、選択した変数を適用します。
 - フィールド **警告下限**、**警告上限**、**介入下限** および **介入上限** で、定量化モデルの限界を設定します。限界は校正サンプルの基準値範囲を超えてはなりません。
注記: 警告範囲について、制限範囲内の小さな範囲を選択します。
識別: コマンド変数 '**IdentificationProbability.Final.コマンド名**' をモニタリングする場合、両方の上限に値 100 を選択します。
 - オプションで、限界を超えた時に作動する動作を定義することができます。動作を選択するには、作業手順において少なくとも 1 つの **オプションのシーケンス Execute on limit** が定義されている必要があります。
 - **→** をクリックして範囲を閉じます。

4 結果を直接サンプルリストに表示 (オプション)

予測結果をサンプルリストに直接表示する場合、サブサンプルデータのフィールドを定義できます (167 ページ, 「**PREDICT コマンド変数**」を参照)。

5 作業手順の保存


-  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。

サンプルプロファイルの作成

サンプルプロファイルを使用すると、複数の同様のサンプルの作成が容易になります。

1 サンプルプロファイルの適用と命名

モデル開発に使用するサンプルプロファイルを適用します (49 ページ, 「**スペクトル記録の準備**」を参照)。

- **サンプル ▶ サンプルプロファイル**では、モデル開発に使用されたサンプルプロファイルを選択します。
-  をクリックして選択したサンプルプロファイルを複製します。
- サンプルプロファイル名をダブルクリックして、複製されたサンプルプロファイルを開きます。
- 適切な名前をフィールド **サンプルプロファイルの名前** に入力します。

2 サンプル名の入力フィールド

必要に応じてサンプル名の標準値を調整します。

サンプルデータ

フィールド名 (短)

名前

フィールド名 (長)

名前

入力フィールドのタイプ

テキスト ▼

用途

入力フィールド ▼

▶ プロパティ入力フィールド

標準値

My Sample name


3 参照パラメータ/製品パラメータ

サンプルプロファイルには、参照パラメータ (定量化) または製品パラメータ (識別、検証) のサンプルデータが含まれます。

- **定量化と識別:** 予測には、サンプルデータは必ずしも必要ではありません。入力フィールドは、消去するか、対照サンプルに使用できます。対照サンプルは、モデルおよび装置のモニタリングと、システムがさらなる分析に適しているかを確認するためのものです。

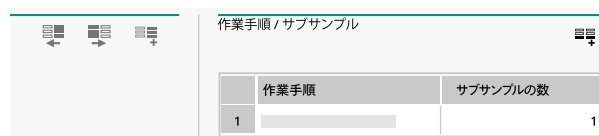
- **検証:** サンプルデータでは、サンプルを検証する対象となる製品を定義します:
 - **入力フィールドのタイプ:** 選択リスト
 - 製品入力フィールドは、製品として使用できるように作成する必要があります: **用途:** 製品
 - 製品名のリスト要素はすでに存在している必要があります。
 - **標準値:** 空
 - チェックボックス **空のフィールドを許可** および **入力を強制する** を有効化します。
- **適格性評価:** 予測には、特定のサンプルデータは必要ありません。

4 その他のサンプルデータの追加 (オプション)

- 必要に応じて範囲 **サンプルデータ** で  をクリックして入力フィールドを追加します。

5 作業手順およびサブサンプル数の定義

- 範囲 **作業手順 / サブサンプル** で、作成した作業手順を選択します。
- サブサンプル数を定義します: **1**



作業手順	サブサンプルの数
1	1

6 サンプルプロファイルの保存

-  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。


サンプルリストの作成

1 サンプルリストの作成と命名

- **サンプル ▶ サンプルリスト** で  をクリックします。新規タブが開きます。
- 適切な名前をフィールド **名前** に入力します。


サンプルリスト・



2 サンプルの追加

- アイコン  の左にある選択リストで、作成したサンプルプロファイルを選択します。



続いて、追加されたサンプルは選択されたサンプルプロファイルの仕様に従って作成されます。

- アイコン  をクリックして、新規サンプルをサンプルリストに追加します。必要なだけサンプルを追加します。

サンプルリストの各行には、アイコン  で表示されたサンプルが含まれています。その右にはサンプルデータが続きます。その後、 で表示されたサブサンプルとサブサンプルデータが続きます。

サンプルは仕様に従って選択されたサンプルプロファイルで作成されます。各サンプルには、指定された作業手順を使用する1つのサブサンプルが含まれています。







	サンプル名	参照パラメータの名前		番号	サブサンプル名	作業手順
	サンプル1	%		1	サブサンプル1	
	サンプル2	%		2	サブサンプル2	
	サンプル3	%		3	サブサンプル3	

図 6 サンプルリスト (定量化の例)

- サンプル名とサブサンプル名を必要に応じて編集します。
- 検証: サンプルを検証する対象の製品が分かっている場合:
 - 製品入力フィールドで製品を選択します。

3 サンプルリストの保存

- アイコン  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

9.1.1 複数の対象パラメータ (定量化)

各サンプルに対して複数の定量対象パラメータを予測する場合、モデル開発と予測の準備に対して、次の修正を使用します。

定量化モデルの開発用サンプル

- **スペクトル記録の準備**

サンプルプロファイルでそれぞれの参照パラメータに個別の入力フィールドを追加します。

サンプルデータ

フィールド名 ショート	フィールド名 ショート	フィールド名 ショート
H2O	Methyl acetate	Methanol
フィールド名 ロング	フィールド名 ロング	フィールド名 ロング

入力フィールドタイプ	入力フィールドタイプ	入力フィールドタイプ
数	数	数
使用	使用	使用
入力フィールド	入力フィールド	入力フィールド
▲ プロパティ入力フィールド		
標準値	標準値	標準値
最小値	最小値	最小値
0	0	49
最大値	最大値	最大値
5	50	99.7
単位	単位	単位
%	%	%
<input checked="" type="checkbox"/> 編集可能フィールド	<input checked="" type="checkbox"/> 編集可能フィールド	<input checked="" type="checkbox"/> 編集可能フィールド
<input checked="" type="checkbox"/> 空のフィールドを作成	<input checked="" type="checkbox"/> 空のフィールドを作成	<input checked="" type="checkbox"/> 空のフィールドを作成
<input type="checkbox"/> 強制入力	<input type="checkbox"/> 強制入力	<input type="checkbox"/> 強制入力

各参照パラメータに対してサンプルリストには入力フィールドが含まれています。

サンプル名	H2O	Methyl acetate	Methanol
	%	%	%
	%	%	%
	%	%	%
	%	%	%

- **スペクトルの記録**

通常通りにスペクトルを記録します。

定量化モデルの開発

- 各対象パラメータに別の定量化モデルを作成します。

予測の準備

バリエーション 1: モデル階層を含む

このバリエーションには、すべての定量化モデルを含むモデル階層の作成が必要です。必要に応じて、モデル階層は、下位の定量化モデルを使用して予測力を高めることもできます。

このメソッドでは、1つの **PREDICT** コマンドのみが必要です:

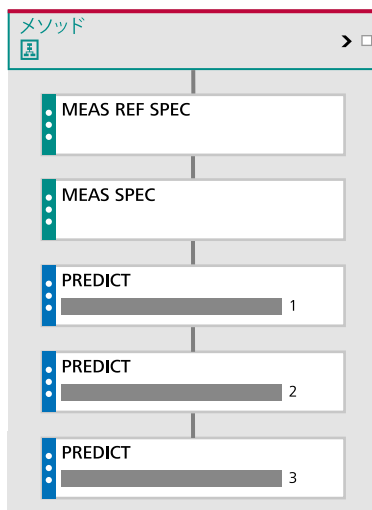
- モデル階層を作成します ([135 ページ](#), 「[モデル階層へのモデルの挿入](#)」を参照)。

- 定量化モデルをモデル階層に挿入します (135 ページ, 「モデル階層へのモデルの挿入」を参照)。
- メソッドの PREDICT コマンドでモデル階層を参照します。

バリエーション 2: 複数の PREDICT コマンド

このバリエーションにはメソッドで複数の PREDICT コマンドが必要です。それぞれのコマンドが定量化モデルを参照します:

- 各対象パラメータに対して PREDICT コマンドをメソッドに挿入します:



- 対象パラメータのいずれかに従って、各 PREDICT コマンドに名前を付けます。
- 各 PREDICT コマンドで、適切な定量化モデルを参照します。
- 各 PREDICT コマンドで同じスペクトル、すなわち 同じ MEAS SPEC コマンドを参照します。

9.2 予測の開始

警告

高温表面の可燃性物質

可燃性物質がこぼれることによる火事や火傷の危険。サンプル、サンプルバイアル、サンプルホルダー、サンプル提示は、温度が最高 85 °C まで達することがあります。

- 着火源を避ける。
- 保護接地を使用する。
- 吸引装置を使用する。
- 液体がこぼれたり固形物が落下したりした場合は、早急に除去してください。

⚠ 注意**加熱によるサンプルの堆積膨張**

サンプル容器からあふれたり破損したり、ストッパーが吹き飛ぶことによる負傷や健康被害。

- サンプル容器は 2 cm の最低高さまでのみ充填します。液体は、残った空気中で膨張する可能性があります。あるいは、毛細血管のあるストッパーを使用します。
- サンプル容器が損傷しないようにストッパーを軽く押し込みます。

⚠ 注意**熱いサンプルバイアル**

高温の表面や液体と接触することによる火傷。サンプル、サンプルバイアル、サンプルホルダー、サンプル提示は、温度が最高 85 °C まで達することがあります。

- 個人用保護具と耐熱性の保護手袋を着用します。
- 液体がこぼれたり固形物が落下したりした場合は、早急に除去してください。

予測の開始**前提条件:**

- 予測が準備されている (145 ページ, 「予測の準備」を参照)。
- スペクトロメーターが予約されていること (27 ページ, 「装置の予約および共有」を参照)。
- 正しいサンプルホルダーが挿入されていること。サンプルホルダーは使用するサンプル容器に適合する必要があります。

1 サンプルリストを開く

- サンプルリストが閉じている場合、**サンプル ▶ サンプルリスト**でサンプルリストをダブルクリックして開きます。


i 検証

検証するには、サンプルを検証する対象となる製品がサンプルデータで定義されている必要があります。製品入力フィールドは、製品として使用できるように作成する必要があります。大文字/小文字は関係ありません。

製品入力フィールドで、他の識別モデルとリンクされている製品グループの名前を入力すると、検証はその都度失敗します。他の識別モデルとリンクされている製品も同様です。



2 さらなるサンプルの追加（オプション）

さらなるサンプルが必要である場合：

- アイコン  の左にある選択リストで、作成したサンプルプロファイルを選択します。



新しく追加されたサンプルは、仕様に従って選択されたサンプルプロファイルで作成されます。




-  をクリックして新規サンプルをサンプルリストに追加します。
- サンプル名とサブサンプル名を必要に応じて編集します。
- 検証: 製品入力フィールドで、サンプルを検証する対象となる製品を選択します。
- サンプルリストの保存:  をクリックするか、**[CTRL]+[S]** キーを押します。


3 測定の実行

注記

サンプル容器の温度調節時の温度センサーの損傷

センサーがサンプル容器と直接接触している間にサンプル容器を取り外す場合、センサーが損傷するおそれがあります。

- 測定が完了し、温度センサーをサンプル容器から取り外してから、サンプル容器を取り外します。
 - 分析するサブサンプルを次の方法から一つ選択します：
 - サブサンプルをアイコン  をクリックして選択します。
 - 分析目的として、サブサンプルから単一のセルを選択すれば十分です。
 - 対応する物理的サンプルを準備します。
サンプル容器をサンプルホルダーに挿入します。
 -  をクリックして測定を開始します。コマンドボタンの数字は、サブサンプルの実行数を表示します。
 - サブサンプルに割り当てられた作業手順を開始します。範囲 **曲線とデータ ▶ ライブデータ** で、指示がある場合は指示に従います。サンプル容器の温度が制御されている場合、サンプル容器は要請が出てから取り外します。
- 分析完了後、サブサンプルステータスは  として表示されます。
- その他すべてのサンプルの測定を同じ方法で実行します。

- i** 目標温度は環境温度の最大 5.0 K まで下回ることができません。
- i** プロセスがシリーズ測定に適している場合、複数のサブサンプルを一度に選択できます。あるいは、 がサンプルリストのすべての実行可能なサブサンプルを開始します。
 - 液体サンプル: **VESSEL REMOVAL** コマンドによりシリーズ測定が可能となります。
 - 固形物のサンプル: シリーズ測定を実施するには、ユーザーアクションがあらかじめ必要です (例えば **WAIT** コマンドを使用)。

予測結果


選択したサンプルの予測結果は、範囲**結果 ▶ 予測**でご覧いただけます (157 ページ, 9.3 章を参照)。

9.3 予測結果

予測結果の表示:

- 1 つまたは複数のサブサンプルを選択します。
- 選択したすべてのサブサンプル、および分析済みのサブサンプルの予測結果は、**サンプル ▶ サンプルリスト ▶ 結果 ▶ 予測**でご覧いただけます。

サブエリア**概要**の定量化の例:

結果	予測	概要	? 
サンプル情報		検証結果	
番号	サンプル名	サブサンプル名	H2O / %
1	██████████	██████████	4.7
2	██████████	██████████	6.1
3	██████████	██████████	8.0

複数のサブエリアが利用できます:

- サブエリア**概要**では、各サブサンプルの最終結果が表示されます。
- サブエリア**詳細のビュー**では、各サブサンプルの詳細な予測結果が表示されます。異なるモデルまたはモデル階層が使用されている場合、その結果は別のテーブルに表示されます。1 つのサブサンプルを複数のテーブルに表示させることができます。必要に応じて、それぞれのモデル特性を表示させることができます。
- 定量化: サブエリア**編集**では、評価されたサブサンプルを他の定量化モデルで評価できます。

- モデル階層: サブエリア編集では、評価されたサブサンプルを他のモデル階層で評価できます。

i 予測結果は、必要に応じてサブサンプルデータでも表示させることができます (167 ページ, 「PREDICT コマンド変数」を参照)。

モデルに応じて、結果は以下のように表示されます:

サンプル ▶ サンプルリスト ▶ 結果 ▶ 予測での結果		
サブエリア	概要	サブエリア 詳細のビュー
定量化	定量化結果 (スロープ/γ インターセプト補正を含む)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 算出値: スロープ/γ インターセプト補正なしの予測結果 ▪ 補正済みの値: スロープ/γ インターセプト補正ありの予測結果 <p>注記: スロープ/γ インターセプト補正が適用されなかった場合、補正済みの値は算出値と同一です。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 対応する限界値を上回っていない場合、ホテリングの T² および Q 残差 が表示されます。
識別	識別結果: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 識別に成功した場合: 特定された製品の名前。 ▪ 識別に失敗した場合: 識別のステータス (未識別 または 多義的)。 	さらに: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 特定された製品の確率
検証	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 識別結果 ▪ 検証結果: 成功 または 失敗 	さらに: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 期待される製品 ▪ 特定された製品の確率
適格性評価	適格性確認結果: 成功 または 失敗	さらに: <ul style="list-style-type: none"> ▪ モデルによるグループ化 ▪ モデル特性
モデル階層	識別、定量化および検証の最終結果が並べて一覧表示されます。 注記: 識別に失敗した場合、定量化は実行できません。	使用されたすべてのモデルの詳細な予測結果は、それぞれ階層レベルの表記と共に並べて一覧表示されます。 下位の定量化モデルの場合、モデルの実行に対して定義された条件も表示されます。

サブサンプルのステータス警告

- サンプルリストのサブサンプルを確認します。エラー、または警告の場合、ステータス警告が表示されます:



- 該当する予測結果は、ステータスアイコン ■ で表示されます。カーソルをいずれかのアイコンの上に置くと、原因が表示されず。考えられる原因は次の通りです:
 - サブサンプル測定前のテストにおけるエラー。
 - 識別: サンプルの識別に失敗しました (未識別 または 多義的)。
 - 検証: サンプルの検証に失敗しました。
 - 適格性評価: サンプルの適格性評価に失敗しました。
 - 定量化: 記録されたスペクトルはスペクトルのアウトライヤーです (ホテリングの A^2 アウトライヤーまたは Q 残差-アウトライヤー)。
 - 定量化: 結果のモニタリングで定義されている限界の超過 (次の点を参照)。

定量化: 警告範囲および制限範囲

作業手順に結果のモニタリングが定義されている場合 (148 ページ、「作業手順の作成」を参照)、モニタリングステータスを次のように確認できます:

- 範囲結果 ▶ 予測 ▶ モニタリングを開きます。
- モニタリングステータスを確認するサブサンプルを選択します。
注記: 複数のサンプルが選択されている場合、最後にクリックしたサンプルのステータスが表示されます。


結果の値に応じて次のステータスアイコンのうちのいずれかが表示されます:

-
- 値は定義された警告範囲内にあります。
-
- ▲ 値は定義された警告範囲外にありますが、定義された制限範囲内にあります。
-
- 値は定義された制限範囲外にあります。
-

スペクトルの目視確認 (オプション)

- 範囲曲線とデータ ▶ 曲線を開きます。
- 個々のスペクトルの表示:
 - サンプルリストで該当するサブサンプルを選択します (アイコン で表示)。



- 複数のスペクトルの表示:
 - をクリックしてカーブのオーバーレイを有効にします。
 - **[CTRL]** または **[SHIFT]** キーを使って、サンプルリストで複数のサブサンプルを選択します。
- スペクトルを確認します (164 ページ, 11.3 章を参照)。

10 テストとメンテナンスの間隔

10.1 装置の性能テスト

装置の性能テストは定期的の実施する必要があります。

タスク	OMNIS コマンド	推奨の実施間隔	結果
波長テスト	TEST WL	非制御箇所: 1 ~ 2 週間ごと (測定モード内部) 制御箇所: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 毎日: 測定モード内部 ▪ 毎週: 測定モード外部 	波長の正確度と精度は許容誤差内にあります。
ノイズテスト	TEST NOISE	非制御箇所: 1 ~ 2 週間ごと (測定モード内部) 制御箇所: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 毎日: 測定モード内部 ▪ 毎週: 低フラックステストと高フラックステスト 	ノイズは指定許容誤差内にあります。
測光直線性	TEST PHOTOMETRIC LINEARITY	制御箇所: 毎週	測光直線性は指定許容誤差内にあります。

テストに失敗した場合：

- 液体のサンプル提示: 測定ウィンドウの汚れを確認し、必要に応じて洗浄します。
- ランプモジュールの稼働時間を確認します。必要に応じてランプを交換します。
- 装置の性能テストを繰り返します。
 - 波長テストに失敗した倍、波長のキャリブレーションを繰り返します。それでも波長テストに失敗した場合、現地の Metrohm サービス担当者にお問い合わせください。
 - ノイズテストに失敗した場合、現地の Metrohm サービス担当者にお問い合わせください。
 - 測光直線性テストに失敗した場合、現地の Metrohm サービス担当者にお問い合わせください。

10.2 波長のキャリブレーション

特定のアクションの後、OMNIS Software では装置に対して波長のキャリブレーションを実施する必要があります。 (37 ページ, 「波長のキャリブレーションの開始」を参照)

タスク	OMNIS コマンド	推奨の実施間隔	結果
波長のキャリブレーション	CAL WL および VAL WL	ハードウェアコンポーネントの交換後。 装置の長期輸送後。	スペクトルの x 軸がキャリブレーションされました。

10.3 装置のメンテナンス

装置を定期的にメンテナンスする必要があります。

タスク	実施間隔	結果
現地の Metrohm サービス担当者によるメンテナンス	毎年。 必要に応じて頻度を上げる。	装置は引き続き技術仕様に準拠しています。 フィルターマットは点検され、必要に応じて交換されています。 内部波長基準が再認証を受けました。

外部参照基準の再認証

外部の装置の性能テストに参照基準を使用する場合、定期的にこの基準を再認証する必要があります。

- 認証書の、最も近い推奨校正日時を順守してください。

11 補遺

11.1 レポート



OMNIS Software で h では、じど自動または手動のレポート作成用に複数のオプションが用意されています ([Metrohm Knowledge Base](#) を参照)。

i レポートには一般的に、OMNIS ユーザ名とは異なる Windows ユーザ名が指定されています。


11.2 テーブルの処理

モデルおよびモデル階層のテーブルは、以下のように処理できます。記載されている技術は、他のテーブルにも部分的に使用することができます。

範囲の最大化と最小化

-  をクリックして、テーブルを含む範囲の一部を最大化します。
-  をクリックして範囲の一部を最小化します。

列幅の変更

1. カーソルをタイトルバーの第 1 列と第 2 列の間に配置します。カーソルが  に変わります。
2. マウスの左ボタンを押したままにすると、カーソルが右または左に移動します。
3. 最初の列の希望する幅に達したら、マウスボタンを離します。
4. 残りの列も同様に順次調整します。

テーブル行を並べ替える

1. 列の見出しをクリックして、その列に従って行を並べ替えます。
2. 必要に応じて、列の見出しを再度クリックして並べ替え順を逆にします。

1 つ以上のテーブル行の選択

新規選択：

- 単一の行をクリックします。
または
- モデルの概要リストでは、左マウスボタンを押したまま複数の行を移動させることもできます。

選択の変更：

- [CTRL] キーを押しながら単一の行をクリックします。
行の選択が反転します。残りの行の選択は変更されません。
または
- [SHIFT] キーを押しながら単一の行をクリックします。
[SHIFT] キーを押さずに最後にクリックした行から現在の行までのすべての行が選択されます。残りの行は選択解除されます。
または
- ショートカット [CTRL]+[SHIFT] を押しながら 1 つの行をクリックします。
最後にクリックした行から現在の行までのすべての行が選択されます。残りの行の選択は変更されません。
または
- [CTRL]+[A] ですべての行を選択します。

テーブルを Windows のクリップボードにコピーする

テーブル全体のコピー：

1. テーブルで右クリックします。
2. コンテキストメニューにて[表のコピー]を選択します。

1 つ以上のテーブル行のコピー：



1. 希望する行を選択します。
2. ショートカット [CTRL]+[C] で選択した行をコピーします。

これで、テーブルまたはテーブル行を任意のファイルに挿入できるようになりました。

11.3 グラフの処理

モデルおよびモデル階層のグラフは、以下のように処理できます。記載されている技術は、サンプルリスト内のスペクトルなど、他のグラフにも部分的に使用することができます。

範囲の最大化と最小化

-  をクリックして、グラフを含む範囲の一部を最大化します。
-  をクリックして範囲の一部を最小化します。

詳細ウィンドウの表示および非表示

一部のグラフには、詳細ウィンドウや凡例が含まれています。ウィンドウは表示したり非表示にしたりできます：

1. グラフを右クリックします。
2. コンテキストメニューにて[詳細ウィンドウの表示/非表示]を選択します。

拡大

マウスホイールで拡大：

1. カーソルをグラフに置きます。
2. 拡大するにはマウスホイールを前方に回し、縮小するには後方に回します。
 - a. 垂直方向にのみ拡大: **[CTRL]** キーを同時に押します。
 - b. 水平方向にのみ拡大: **[SHIFT]** キーを同時に押します。

マウスボタンで拡大：

- マウスの左ボタンを押したまま、左下または左上の角から範囲を展開します。
または
- **[CTRL]+[SHIFT]** キーを押しながらマウスの左ボタンを押すと拡大し、マウスの右ボタンを押すと縮小します。
 - 垂直方向のみに拡大: **[CTRL]** キーを押しながら、マウスの左ボタンを押すと拡大し、右ボタンを押すと縮小します。
 - 水平方向のみに拡大: **[SHIFT]** キーを押しながら、マウスの左ボタンを押すと拡大し、右ボタンを押すと縮小します。

ズーム要素で拡大：

1. x 軸または y 軸の始点または終点にある緑色のズーム要素のいずれかにカーソルを置きます。
カーソルが \leftrightarrow または \updownarrow に変わります。
2. マウスの左ボタンを押したまま、軸に沿って、または軸を越えて移動します。
3. 目的のビューに到達したら、マウスボタンを離します。

表示範囲の移動

任意の方向に移動：

1. カーソルをグラフに置きます。
 2. マウスの右ボタンを押したまま、表示範囲を任意の方向に移動させます。
 3. 目的のビューに到達したら、マウスボタンを離します。
- タッチスクリーンの場合：長押しします。次に、表示範囲を移動させます。

垂直または水平移動：

1. x 軸または y 軸の番号範囲にカーソルを置きます。
2. 次のいずれかの方法で表示範囲を移動させます：
 - a. マウスホイールを回します。
 - a. マウスの左ボタンを押しながら軸に沿って移動させます。

グラフを標準表示にリセットする

- グラフを右クリックします。コンテキストメニューにて**ビューのリセット**を選択します。
または

- マウスの左ボタンを押したまま、範囲を右から左に展開します。

複数の点またはカーブの選択

- **[CTRL]** キーを押しながら、順番に点またはカーブをクリックします。
点またはカーブの選択がそれぞれ反転されます。残りの点またはカーブの選択は変更されません。

グラフ**影響プロット**、**スコアプロット**および**相関図**に対しては、複数選択モードも利用可能です:

- **複数選択の有効化**
複数選択の有効化をクリックします。
上記のグラフ調整機能の一部は、以下の機能に置き換えられます。
 - **新規選択**
マウスの左ボタンを押したまま、範囲を展開します。
範囲内のすべての点を選択されます。範囲外の点は選択解除されます。
 - **選択を拡張する**
[SHIFT] キーを押しながら個々の点をクリックするか、範囲を展開します。
該当する点を選択されます。残りの点の選択は変更されません。
 - **選択を減らす**
[ALT] キーを押しながら個々の点をクリックするか、範囲を展開します。
該当する点を選択解除されます。残りの点の選択は変更されません。
 - **選択の反転**
[CTRL] キーを押しながら個々の点をクリックするか、範囲を展開します。
該当する点の選択が反転します。残りの点の選択は変更されません。
 - **選択のキャンセル**
グラフの空いている面をクリックします。
- **複数選択の無効化**
複数選択の無効化をクリックすると、グラフをカスタマイズするための標準機能を再び使用できるようになります。

グラフを Windows のクリップボードにコピーする


1. グラフを右クリックします。
2. コンテキストメニューにて**[グラフのコピー]**を選択します。



これで、グラフを任意のファイルに挿入できるようになりました。

サンプルリストのグラフ

i カーブのオーバーレイ

複数のスペクトルをサンプルリストにまとめて表示する：

- サンプルリストで、**曲線とデータ ▶ 曲線**を開きます。
- カーブのオーバーレイを  をクリックして有効にします。アイコンが表示されていない場合、区切りバーをドラッグして範囲を拡大します。
- [CTRL] または [SHIFT] キーを使って、サンプルリストで複数のサブサンプルを選択します。

サンプルリストですべてのスペクトルを表示するには、 または  をクリックします。

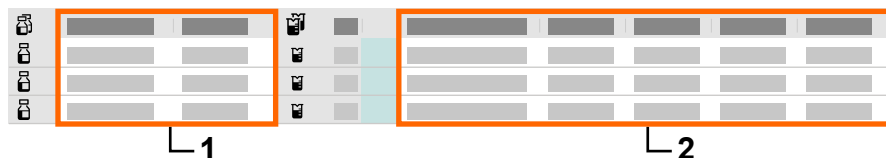
11.4 PREDICT コマンド変数

OMNIS Software はさまざまなカテゴリーの変数を提供します。例えばサンプルデータ、サブサンプルデータ、メソッド変数、コマンド変数、システム変数などです。

ソフトウェアは複数の変数を自動的に作成します。追加の変数は必要に応じて作成できます。変数を使用する場合、そのデータ形式も考慮してください (**数**、**テキスト** または **日付/時間**)。

変数は、他の計算に使用したり、結果としてレポートに出力したり、例えば **IF**-コマンドで条件として入力したりすることができます。

ワークエリア**サンプル**のサンプルリストにサンプルデータ **(1)** およびサブサンプルデータ **(2)** が表示されます：



i サンプルデータを作成するにはサンプルプロファイルを編集します。

サブサンプルデータを作成するには作業手順を編集します。

予測結果をサブサンプルデータとして表示

例として次の **PREDICT** コマンド変数がサブサンプルデータに表示される必要があります ([19 ページ, 2.3.1 章を参照](#))：



- 定量化: **Predicted.Quantification.Result**. コマンド名
対象パラメータの予想値。

- 識別: **Product.Identification.Result.** コマンド名
 特定されたサンプルの、特定された製品または特定された製品グループ。識別に失敗した場合、変数は空のままです。

前提条件:


予測を編集するために、メソッドと作業手順が作成された (145 ページ, 「予測の準備」を参照)。

1 サブサンプルデータの作成

- 対応する作業手順を開きます。
-  をクリックします。
- **プロパティ ▶ パラメータ**を開きます。
-  をクリックしてサブサンプルデータフィールドを作成します。
 - **フィールド名 (短)** として、予測結果または特定された製品に対して適切な名前を入力します。
 - **定量化: 入力フィールドのタイプ**として数値データフィールドを作成するには、オプション**数**を選択します。**識別: 入力フィールドのタイプ**として英数字データフィールドを作成するには、オプション**テキスト**を選択します。
 - データフィールドは、**CALC** コマンドの結果コマンドの結果を入力する必要があります。**用途**からオプション**結果**を選択します。
 注記：**結果**に対する入力フィールドは手動で編集できません。

定量化 (1) および識別 (2) の例:



- 作業手順の保存:  をクリックするか、[CTRL]+[S] キーを押します。

i 作成されたサブサンプルデータの変数名は、選択した**フィールド名 (短)** に依存します：

'フィールド名 ショート.CurrentSubsampleData'

i 定量化: 各サンプルに対して複数の対象パラメータを予測する場合、予測結果に対して複数のサブサンプルデータを作成します。

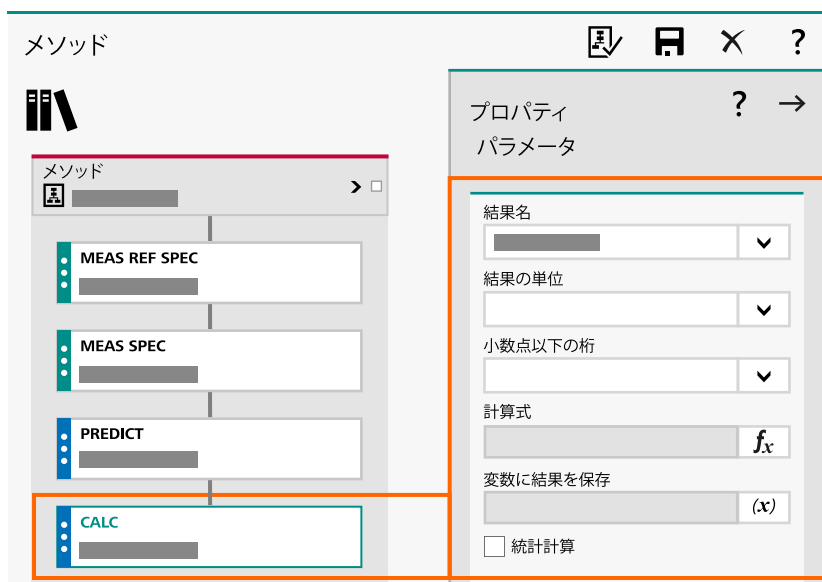
2 予測結果に対し、CALC コマンドを挿入する

作成したサブサンプルデータを、**CALC** コマンドの結果で充填します：

- 対応するメソッドを開きます。
- CALC** コマンドを追加します。
CALC コマンドを **PREDICT** コマンド下に割り当てます。

表示する値の計算

- CALC** コマンドを選択し、**プロパティ ▶ パラメータ** を開きます。
 - 結果名** として、予測結果または特定された製品に対して適切な名前を入力します。
 - 定量化：**結果の単位**と**小数点以下の桁**の必要数を入力します。



i **統計を計算する**はサンプル内の複数のサブサンプルに適用されます。**統計を計算する**を無効にします。

- フィールド **計算式** では計算式エディターを開くために **fx** をクリックします。

計算式エディター

fx
☰

変数

機能

その他演算子

変数カテゴリー

サブカテゴリー

コマンド変数

☰

🔍

検索結果

追加

- 計算式は、変数カテゴリー **コマンド変数** を使用して作成します。結果表示について、計算式は唯一の **PREDICT** コマンド変数のみで構成されます：
 - 識別：
Product.Identification.Result. コマンド名
 - 定量化：
Predicted.Quantification.Result. コマンド名
モデル階層変数が索引によって選択されている場合、必要に応じて一番上の入力フィールドで索引を変更します。例: **'Predicted.Quantification{2}.Result. コマンド名'** ([172 ページ, 11.4.1 章を参照](#))
- 入力した計算式を、**fx** をクリックして有効期限を確認します。
- 注記:** 予測結果は測定実行中のみ生成されます。計算式を計算時に、**☰** をクリックして、結果 **無効** が表示されます。
- 計算式エディターを **→** をクリックして閉じます。

サブサンプルデータの算出値の保存

- フィールド **結果を変数に保存する** で **(x)** をクリックします。
- 変数カテゴリー **サブサンプルデータ** を選択します。
- サブカテゴリーとして対応する作業手順を選択します。検索結果は選択した作業手順で定義されているサブサンプルデータを表示します。
- 新規作成した変数を選択します。選択された変数はフィールド **変数** で追加します。

変数 ?

変数カテゴリー サブカテゴリー

サブサンプルデータ


検索語を入力 🔍

検索結果

.....CurrentSubsampleDate

.....CurrentSubsampleData

移行
キャンセル

- **適用** をクリックします。
- メソッドの保存： をクリックするか、ボタン [CTRL]+[S] を押します。

定量化：各サンプルに対して複数の対象パラメータを予測する場合、予測する各結果に対して **CALC** コマンドを追加します。

サンプルの分析

1 サンプルリストを開く

- サンプルリストが閉じている場合、**サンプル ▶ サンプルリスト** でサンプルリストをダブルクリックして開きます。

- 2 サンプルリストには、まだ分析されていないすべてのサンプルに対して、作成したサブサンプルデータ用のフィールドが表示されます。

🗑	サンプル名	🗑	サブサンプル名
🗑	🗑

予測後、結果フィールドが表示されます。

識別：識別に失敗した場合、結果フィールドは空のままです。

さらなる変数

上記と同じ方法で、サブサンプルデータのその他の変数を表示できます ([21 ページ, 2.3.2 章を参照](#))。

11.4.1 モデル階層 – 定量化モデルの索引

モデル階層は複数の定量化モデルを含むことができます。PREDICT コマンド変数が定量化モデルを区別できるようにするために索引番号を使用します。

特定の製品または特定の製品グループとリンクされている一番目の定量化モデルには、索引 1 が付けられます。他の定量化モデルが同じ製品または同じ製品グループとリンクされている場合、索引は増加されます。増加は、モデル階層の定量化モデルの順序に基づいて行われます。

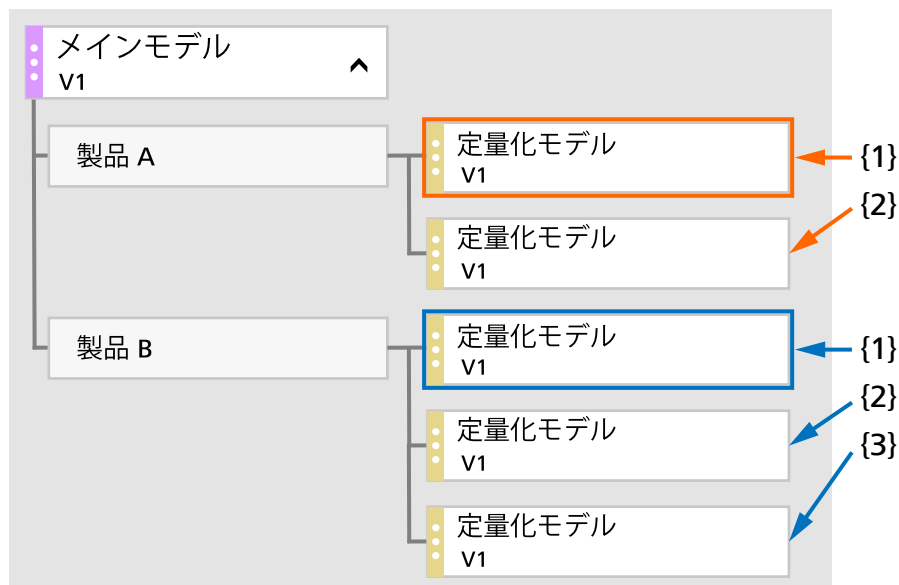


図 7 モデル階層の定量化モデルのための索引番号

PREDICT-コマンド変数は定量化モデルを索引番号で参照します。

例: **Predicted.Quantification{1}.Result** コマンド名

サンプルが予測で製品 A として識別される場合、製品 A とリンクしているすべての定量化モデルが使用されます。上記のコマンド変数は、この場合、製品 A とリンクしている定量化モデルと 索引 1 (画像でオレンジ色の枠で囲まれている) を参照します。

サンプルが製品 B として識別される場合、上記のコマンド変数は、製品 B とリンクしている定量化モデルと 索引 1 (画像で青色の枠で囲まれている) を参照します。

青色の枠で囲まれた定量化モデルに対し、オレンジ色の枠で囲まれた定量化モデルに対するのとは別の方法でコマンド変数を使用する必要がある場合、IF コマンドによって編集を特定の製品属性に制限することができます。

- i** 識別モデルのないモデル階層の場合、1番上の定量化モデルに索引 1 が付けられます。続く定量化モデルでは、索引が順次増えていきます。

下位の定量化モデル

下位の定量化モデルには、索引番号は割り当てられません。


PREDICT コマンド変数は上位の定量化モデルを参照する必要があります。反対に、変数は各サブサンプルに対して、使用された下位のモデルの値を出します。

11.5 モデルのエクスポートとインポート

モデルは、別の OMNIS のインストールで使用するためにエクスポートおよびインポートすることができます。

モデルのエクスポート

1 エクスポートダイアログを開く

- ワークエリア **キャリブレーションと評価** で以下のサブエリアのいずれかを開きます:
 - 定量化モデル
 - スロープ/y インターセプト補正
 - 識別モデル
 - 適格性確認モデル
 - モデル階層
-  をクリックします。

エクスポートダイアログが開きます。

2 エクスポートファイルの作成

- エクスポートするすべてのモデルを選択します。
- 発行されたモデル **タイプ full** のみw 選択した場合、**エクスポートタイプ** を定義できます:
 - モデル**タイプ full** は完全に機能します。インポートした後は、モデルを編集し、保存することができます。
 - モデルが発行されると、最後に発行されたバージョンを **タイプ light** としてエクスポートできます。これらのモデルは予測のためだけに使用できます。
- 出力先フォルダを必要に応じて調整します。


- i** 以下の特殊文字、あるいは文字列は使用できません: ><:"/\|*? ならびに CON、PRN、AUX、NUL、COM1 ~ COM9、LPT1 ~ LPT9

- **[エクスポート]**をクリックして、エクスポートファイルを作成します。

モデルは指定されたフォルダにエクスポートされます。

モデルのインポート

1 インポートダイアログを開く

- ワークエリア**キャリブレーションと評価**で以下のサブエリアのいずれかを開きます:
 - **定量化モデル**
 - **スロープ/γ インターセプト補正**
 - **識別モデル**
 - **適格性確認モデル**
 - **モデル階層**
- をクリックします。

2 ファイルを開く

- フォルダとインポートするすべての *.opmo ファイル、または *.osic ファイルを選択します。
- **[開く]**をクリックします。

モデルが OMNIS Software にインポートされます。

11.6 XDS/DS アナライザの変更 (定量化)

DS2500 または XDS アナライザを交換する場合、XDS/DS アナライザの定量化モデル作成用に使用されるスペクトルと、参照パラメータを OMNIS Software にインポートすることができます。このデータにより、定量化モデルを開発できます。

2 つ目の手順ではスロープ/γ インターセプト補正を作成します。そのために、OMNIS Software で記録したスペクトルを使用します。このスペクトルに対する基準値は既知でなければなりません。

スロープ/γ インターセプト補正について、定量化モデルの開発の場合よりも使用するサンプルは少なくても済みます。

- 信頼できるバイアス推定値を得るためには、20 以上のサンプルが必要です。
- スロープの信頼できる推定値を得るには、30 以上のサンプルが必要です。

定量化モデルの開発

前提条件:

- スペクトルファイル(.da)は利用可能で、XDS/DS スペクトルが含まれています。
- 同じフォルダには参照パラメータファイル(.cn)があり、参照パラメータが含まれています。

1 定量化モデルの作成と名前付け

- **キャリブレーションと評価 ▶ 定量化モデル**で $\frac{fx}{+}$ をクリックします。
- 適切な名前を入力フィールド**定量化モデルの名前**に入力します。


2 スペクトルのインポート

- **XDS/DS のインポート** をクリックします。

定量化モデルの作成

定量化モデル名

サンプルリスト	検索リクエスト	XDS/DSインポート
---------	---------	-------------

-  をクリックします。
- インポートするスペクトルファイル(.da)を選択します。
- **[開く]**をクリックして選択を確定します。
- **[次へ]**をクリックします。

3 参照パラメータの選択

- リスト **参照パラメータ / ユニット** から参照パラメータを選択します。
- 入力フィールド**参照パラメータの単位**で参照パラメータの単位を選択します。

選択された参照パラメータの名称を持つ、全てのスペクトルが、定量化モデルに追加されます。

4 自動または手動のモデル開発

モデル開発には複数のオプションをご利用いただけます。

- **OMNIS Model Developer (OMD)**を備えた自動モデル開発：**[OMD の開始]**をクリックします。
[章5.2、自動モデル開発-OMD、ページ67](#)で続行します。
- 手動モデル開発：**[作成]**をクリックします。
[章5.3、手動モデル開発、ページ70](#)で続行します。

5 自動または手動のモデル開発

i まずサンプル選択を手動で調整し、その後モデルを自動で開発する場合で、手動モデル開発を続行する場合。

- **自動モデル開発:** [OMD の開始]をクリックします。
章5.2、自動モデル開発-OMD、ページ67で続行します。
- **手動モデル開発:** [作成]をクリックします。
章5.3、手動モデル開発、ページ70で続行します。

6 モデルの発行

- 定量化モデルの発行 (91 ページ、「定量化モデルの発行」を参照)。

スロープ/y インターセプト補正のサンプル

スロープ/y インターセプト補正に対して各サンプルが必要です。

- 補正するパラメータの基準値。
- スペクトル。
- 各スペクトルの算出値。

1 サンプルの収集

- 定量化モデルの開発用サンプルであるかのように、スロープ/y インターセプト補正に対して物理的サンプルを収集します (48 ページ、4 章を参照)。ただし、サンプル数は小さくても十分です。

2 スペクトルの記録と予測の準備

- 定量化モデルの開発用のサンプルであるかのように、メソッド、作業手順、サンプルプロファイル、サンプルリストを作成します (49 ページ、「スペクトル記録の準備」を参照)。ただし：
 - **メソッド**
メソッドにおいて、**MEAS SPEC** コマンド、ある場合には **VESSEL REMOVAL** コマンドの後に **PREDICT** コマンドを追加します。
PREDICT コマンドパラメータとして次を指定します。
 - **測定コマンドの名前**
 - インポートしたスペクトルで開発した**定量化モデル**。

3 スペクトルの記録と対象パラメータの予測

- 定量化モードの開発用のサンプルであるかのように、スペクトルを記録し、対象パラメータを予測します (59 ページ; 「[スペクトルの記録](#)」を参照)。

つづいて、各サンプルはスペクトル、基準値、予測値を有します。

複数の対象パラメータがある場合、サンプルはスペクトルを有し、各対象パラメータに対しては基準値および予測値を有しています。

スロープ/γ インターセプト補正の作成

- スロープ/γ インターセプト補正を作成します。そのために、OMNIS Software で記録したスペクトルを使用します。このスペクトルに対する基準値は既知でなければなりません。
(92 ページ; 「[スロープ/γ インターセプト補正](#)」を参照)

予測

1 予測の準備

- 予測に必要なプロセスを準備します (145 ページ; 「[予測の準備](#)」を参照)。
PREDICT コマンドでは、定量化モデルと対応するスロープ/γ インターセプト補正を指定します。

2 予測の実行

- 予測を実行します (154 ページ; 「[予測の開始](#)」を参照)。
- i** 分析の実行は対照サンプルで監視する必要があります。対照サンプルは、分光メソッドだけでなく、参照メソッドも使って分析します。両方のメソッドの結果を比較できます。

11.7 OMNIS NIR Analyzer 用ワークフロー

OMNIS NIR Analyzer を使ってサンプルを分析するため、OMNIS Software は次のタスクを実行します：

1. 装置の準備：
 - a. 装置の設定
 - b. 波長のキャリブレーションと検証
 - c. 装置の性能テスト
2. 校正サンプルのスペクトルの記録
3. 校正サンプルの基準値の記録
4. モデルの開発
5. 対象パラメータの予測
6. 装置の性能テスト: 必要に応じて繰り返します。

次のセクションでは、OMNIS Software の対応するワークフローを説明します。

装置の準備

スペクトルを記録できるようにする前に、装置を準備する必要があります。特に波長のキャリブレーションを実行する必要があります。

次の [図8](#) は、波長のキャリブレーションの例を示しています。個別のコマンドを例に挙げて、メソッドについて説明します。

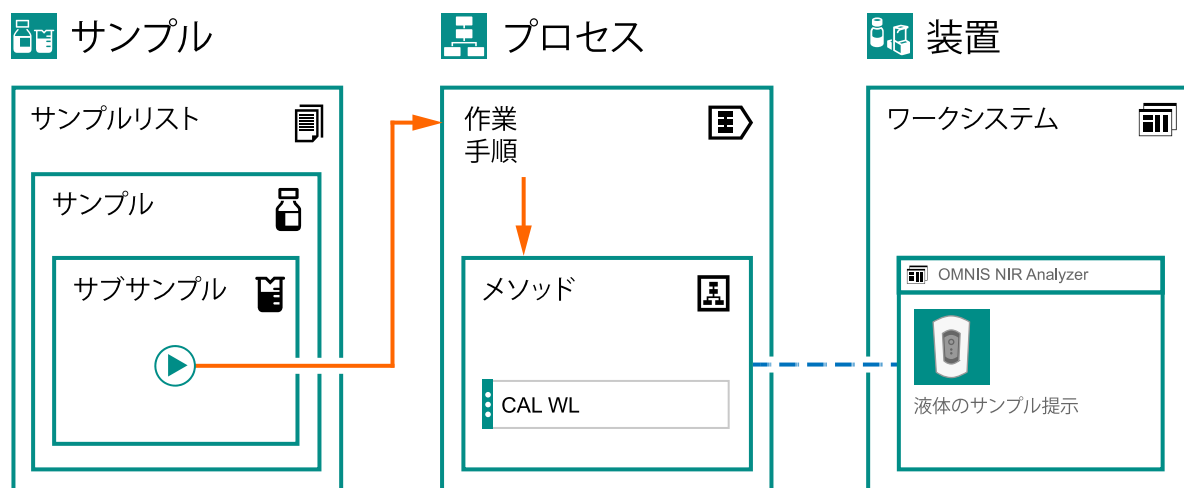


図 8 装置のセットアップ



OMNIS Software のリンク。



メソッドにワークシステムが割り当てられています。

ワークエリア**サンプル**にはサンプルのあるサンプルリストが含まれています。サンプルはサブサンプルを含みます。サブサンプルには作業手順が割り当てられています。

通常、サンプルは実際のサンプルの分析に使用されます。ただし、この場合にはサンプルは波長のキャリブレーションを実行するためのものです。対応するサブサンプルが開始されると、以下の手順が実行されます：

1. サブサンプルは割り当てられた作業手順を開始します。
2. 作業手順はそこに含まれているメソッドを実行します。
3. メソッドは **CAL WL** コマンドを実行します。コマンドは、メソッドに割り当てられているワークシステムで実行されます。ワークシステムには OMNIS NIR Analyzer 装置のファンクションユニットが含まれています。この装置は波長のキャリブレーションを実行します。校正データは装置上に保存されます。

基準値または製品名の登録

モデルを作成するためには、各校正サンプルと検証サンプルに対して、基準値（定量化）または製品名（識別）を記録する必要があります。適格性評価では、個別のサンプルが正として、または負として評価されているかを把握する必要があります。

定量化の例

次の [図9](#) は、サンプルの水分などの対象パラメータに対する基準値の記録を示しています。

サンプル

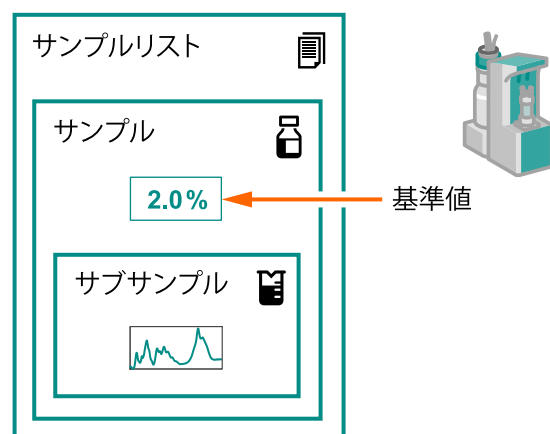


図9 基準値の記録

対象パラメータは、滴定などにより基準メソッドで測定されます。測定値は基準値として使用されます。

サンプルリストにある各サンプルの基準値は、対応する入力フィールドに入力されます。

校正サンプルのスペクトルの記録

モデルを作成するためには、各校正サンプルと検証サンプルに対して、スペクトルを記録する必要があります。

次の [図 10](#) は、スペクトル記録の概略図を示しています。

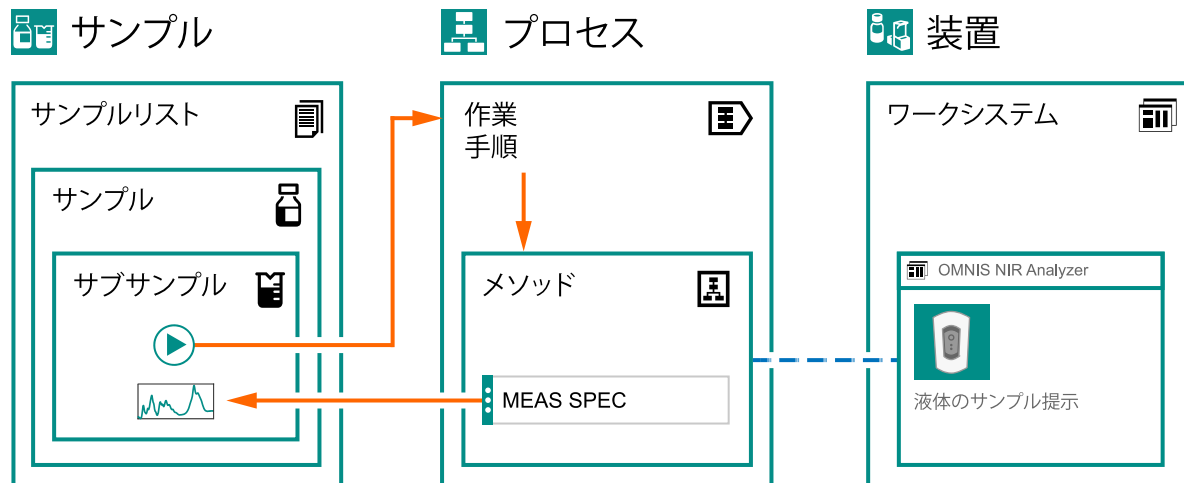


図 10 校正サンプルのスペクトルの記録



OMNIS Software のリンク。



メソッドにワークシステムが割り当てられています。

ワークエリア**サンプル**には校正サンプルを含めたサンプルリストが含まれています。各サンプルはサブサンプルを含みます。サブサンプルにはそれぞれ作業手順が割り当てられています。

サブサンプルが開始されると、以下の手順が実行されます：

1. サブサンプルは割り当てられた作業手順を開始します。
2. 作業手順はそこに含まれているメソッドを実行します。
メソッドは **MEAS SPEC** コマンドを実行します。コマンドは、メソッドに割り当てられているワークシステムで実行されます。ワークシステムはファンクションユニットを含みます (例 **Liquid Sample Presentation**)。ファンクションユニットはスペクトルを記録し、OMNIS Software に送信します。OMNIS Software はスペクトルをサブサンプルデータに保存します。

モデル開発

定量化: 校正サンプルのスペクトルと基準値から、**OMD** (OMNIS Model Developer) によって自動で、または手動で定量化モデルが作成されます。

識別: 校正サンプルのスペクトルと製品名から識別モデルを作成します。

適格性評価: 校正サンプルのスペクトルから適格性確認モデルが作成されます。

定量化の例

次の [図 11](#) は、定量化モデルの手動開発の手順を示しています。

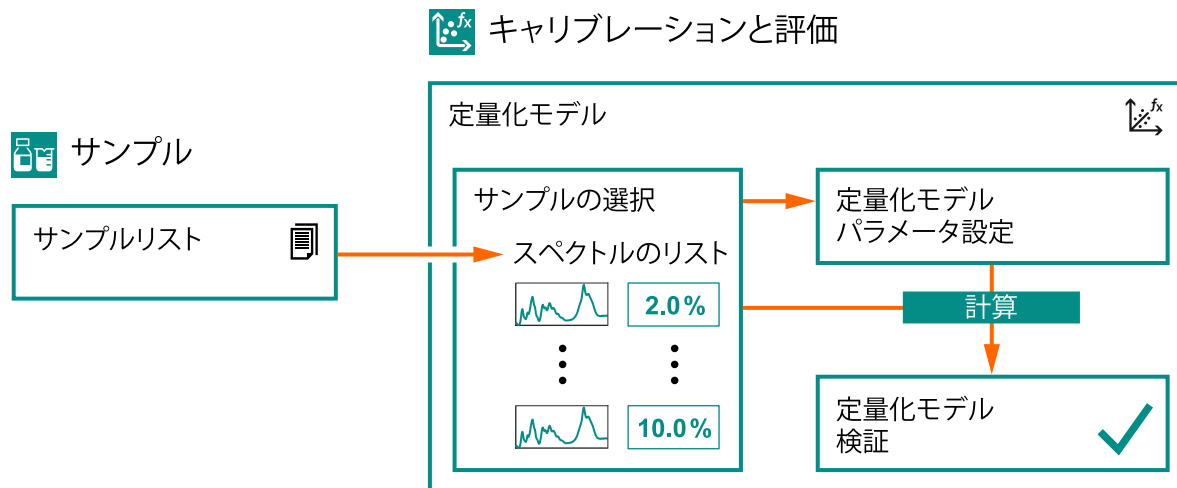


図 11 モデル開発 (定量化の例)

まず基準値を含むサンプルをスペクトルのリストに転送します。次に、3つのプロセス工程でモデルの開発を行います:

1. プロセス工程**サンプルの選択**により、アウトライヤーを検出し、検証スペクトルを決定し、交差検証方法を指定することができます。
2. プロセス工程**定量化モデルのパラメータ設定**では、データ前処理をスペクトルに適用し、波長範囲を定義することができます。
3. モデル計算後、プロセス工程**定量化モデルの検証**では、モデルが要件を満たしているかを評価します。
モデルを最適化するため、前の手順を調整できます。適切なモデルが特定された場合、**発行**することができます。発行されたモデルは、不明なサンプルの予測に用いることができます。

予測

予測では、不明なサンプルのスペクトルにモデルが適用されます。モデルに応じて以下を予測できます:

- 対象パラメータ (定量化)
- 製品属性もしくは検証結果 (識別)
- 適格性確認結果 (適格性評価)

定量化の例: 次の [図 12](#) は、対象パラメータの予測を例示しています。

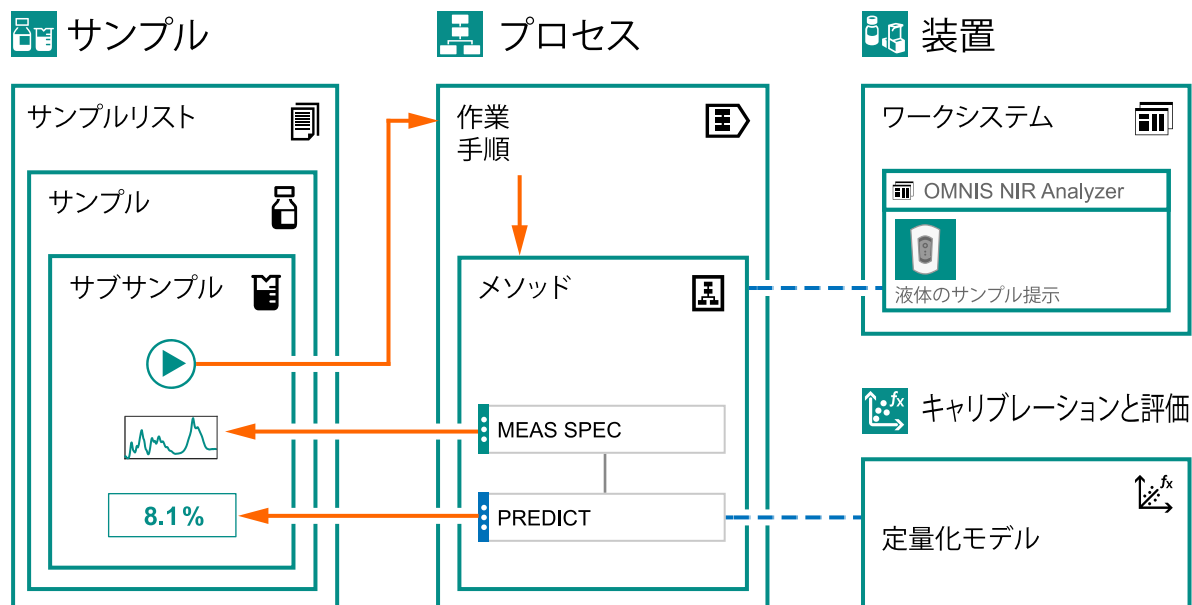


図 12 対象パラメータの予測 (定量化の例)



OMNIS Software のリンク。



メソッドにワークシステムが割り当てられています。

PREDICT コマンドはモデルを特定します。

ワークエリア**サンプル**には、分析用に準備したサンプルを含むサンプルリストが含まれています。各サンプルはサブサンプルを含みます。サブサンプルにはそれぞれ作業手順が割り当てられています。

サブサンプルが開始されると、以下の手順が実行されます：

1. サブサンプルは割り当てられた作業手順を開始します。
2. 作業手順はそこに含まれているメソッドを実行します。メソッドには少なくとも 2 つのコマンドが含まれています：
 - a. **測定コマンド**
MEAS SPEC コマンドはサンプルのスペクトルを記録します。コマンドは、メソッドに割り当てられているワークシステムで実行されます。
 ワークシステムはファンクションユニットを含みます (例 **Liquid Sample Presentation**)。これにより、装置はスペクトルを記録し、OMNIS Software に転送します。
 - b. **予測**
PREDICT コマンドでは測定コマンドとモデルが選択されています。モデルは、測定コマンドで記録したスペクトルを評価します。それにより、例えば 8.1% の水分などの予測が得られます。