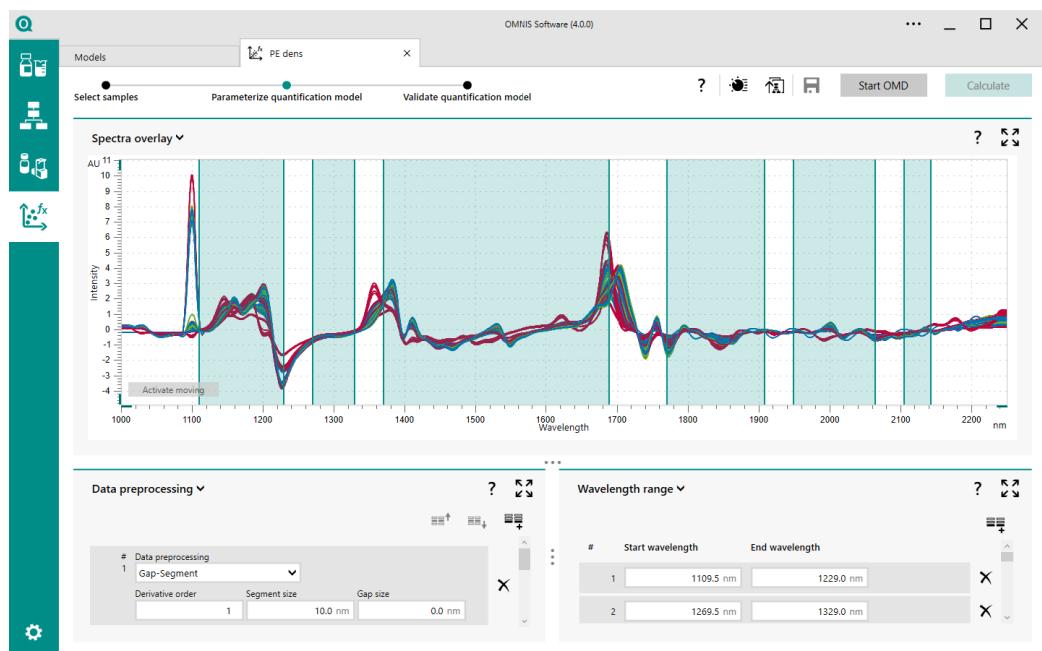


OMNIS NIR (랩)



OMNIS의 단계별 분광법

사용 지침

8.0600.8202KO / v5 / 2025-05-20



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

OMNIS NIR (랩)

OMNIS Software 버전 4.4

사용 지침

8.0600.8202KO / v5 /
2025-05-20

Technical Communication
Metrohm AG
CH-9100 Herisau

본 문서는 저작권법의 보호를 받습니다. 모든 권리가 당사에 있습니다.

본 문서는 원본 문서입니다.

본 문서는 신중을 기하여 작성하였습니다. 하지만 오류를 완전히 배제할 수는 없습니다. 만약 본 문서에서 오류를 발견하신다면 위에 명시한 주소로 연락주시기 바랍니다.

면책조항

부적절한 보관, 부적절한 사용 등과 같이 Metrohm의 귀책사유가 아닌 다른 이유로 발생한 결함에 대해서는 품질보증이 제공되지 않음을 분명하게 밝히는 바입니다. 제품에서의 자체 변경(예를 들어 개조 또는 부착)에 대해 제조사는 그로 인해 발생하는 손해 및 후속 손해에 대해 어떠한 책임도 지지 않습니다. Metrohm 제품 문서에 명시된 지침 및 매뉴얼의 내용은 반드시 준수해야 합니다. 그렇지 않을 경우 Metrohm에서는 어떠한 보증도 제공하지 않습니다.

목차

1 개요	1
1.1 서문	1
1.2 문서 정보	1
1.3 OMNIS 라이선스	1
1.4 사용자 권한	2
1.5 상세한 정보	2
2 OMNIS Software에 대한 간략한 개요	3
2.1 구조 및 기능	3
2.1.1 작업 영역	3
2.1.2 템 및 하위 영역	3
2.1.3 작업 영역 샘플	5
2.1.4 작업 영역 프로세스	6
2.1.5 장비 작업 영역	7
2.1.6 모델 작업 영역	8
2.2 실용적인 소개	9
2.3 OMNIS 명령	16
2.3.1 스펙트럼 기록	17
2.3.2 예측	18
2.3.3 계산 및 통계	22
2.3.4 파장 보정	22
2.3.5 장비 성능 테스트	23
2.4 장비 예약 및 릴리스	24
2.5 온도 조절 (Liquid Sample Presentation)	25
3 장비 준비	27
3.1 작업 시스템 만들기	27
3.2 파장 보정	28
3.2.1 파장 보정 준비	29
3.2.2 파장 보정을 시작합니다	32
3.3 장비 성능 테스트	34
3.3.1 내부 장비 성능 테스트 준비	35
3.3.2 내부 장비 성능 테스트 실행	38
3.3.3 외부 장비 성능 테스트 (옵션)	40
4 모델 개발을 준비합니다	43
4.1 스펙트럼 분석 준비	44
4.2 스펙트럼 기록	54



5 정량화 모델	59
5.1 정량화 모델 만들기	59
5.2 자동 모델 개발 - OMD	61
5.3 수동 모델 개발	64
5.3.1 샘플 선택 및 데이터 세트 분할	64
5.3.2 정량화 모델을 계산하기	70
5.3.3 정량화 모델 검증	70
5.3.4 정량화 모델의 parameter 지정	77
5.4 정량화 모델 게시	85
5.5 기울기 수정/y 절편 수정	86
6 식별 모델	93
6.1 식별 모델 생성	93
6.2 샘플 선택 및 데이터 세트 분할	94
6.3 식별 모델을 계산	100
6.4 식별 모델을 검증하기	101
6.5 식별 모델을 파라미터화	103
6.5.1 파장 선택	105
6.5.2 데이터 전처리	107
6.6 식별 모델 게시	108
7 검증 모델	110
7.1 검증 모델 만들기	110
7.2 샘플 선택 및 데이터 세트 분할	111
7.3 검증 모델 계산	118
7.4 검증 모델 검증	118
7.5 검증 모델의 파라미터 지정	120
7.5.1 파장 선택	121
7.5.2 데이터 전처리	123
7.6 검증 모델 게시	124
8 모델 계층 구조	126
8.1 모델 계층 구조 생성	126
8.2 모델 계층 구조의 유효성 검사	131
8.3 모델 계층 구조 게시	132
9 예측	134
9.1 예측을 준비합니다	134
9.2 예측을 시작합니다	141

9.3	여러 관심있는 parameter (수량화)	145
10	테스트 및 유지보수 주기	147
10.1	장비 성능 테스트	147
10.2	파장 보정	148
10.3	장비 유지보수	148
11	부록	149
11.1	리포트	149
11.2	표 처리	149
11.3	다이어그램 처리	150
11.4	PREDICT 명령 변수	153
11.4.1	모델 계층 구조 – 정량화 모델을 위한 색인	158
11.5	모델을 내보내고 가져옵니다	159
11.6	XDS/DS Analyzer(수량화)를 변경합니다	160
11.7	OMNIS NIR Analyzer에 대한 워크플로우	163

1 개요

1.1 서문

본 사용 지침에서는 OMNIS Software 버전 4.4 기반의 **OMNIS NIR Analyzer** 제품군 장비의 조작 방법이 설명됩니다.

본 사용 지침은 OMNIS Software에 대한 요약 개요를 제공하며 장비설정, 모델 개발 및 예측에 대해 설명합니다.

1.2 문서 정보

문서에서 가능한 표현 :

(1)	그림 내 위치번호에 대한 레퍼런스
1	지시 단계
method	Parameter, 메뉴 항목, 탭 및 대화상자
프로세스 ► 작업 과정	메뉴 경로
[다음]	스위치 또는 버튼
	설명 텍스트에 대한 상세 정보

1.3 OMNIS 라이선스

OMNIS는 모듈라 플랫폼입니다。 장비 기능 및 소프트웨어 모듈은 자유롭게 조합할 수 있습니다 :

- 장비 기능은 라이센스 패키지로서 사용할 수 있습니다(*Metrohm Knowledge Base* 참조)。

본 사용 지침을 위해서는 다음 기능 라이센스가 필요합니다 :

- 기능 라이센스 Lab NIR Spectroscopy

- 소프트웨어 모듈은 개별적으로 라이선싱 및 활성화가 가능합니다 (*Metrohm Knowledge Base* 참조)。

본 사용 지침을 위해서는 다음 소프트웨어 라이선스가 필요합니다 (OMNIS Stand-Alone에 대한 예시) :

- 소프트웨어 라이선스 OMNIS Stand-Alone
- 정량화 모델 개발을 위해: 소프트웨어 라이선스 Quant Development
- 식별 모델 및 검증 모델의 개발을 위해 : 소프트웨어 라이선스 Ident Development

 라이선스에 대한 상세 정보는 [Metrohm Knowledge Base](#) 또는 해당 지역 Metrohm 담당자를 통해 확인할 수 있습니다.

1.4 사용자 권한

사용자 관리가 활성화된 경우 관리자는 추가 사용자를 생성하고 사용자 권한을 할당할 수 있습니다。 사용자 역할은 일련의 개별 권한으로 구성되며 이를 통해 권한 관리를 용이하게 합니다([Metrohm Knowledge Base](#) 참조)。

사용자 관리가 활성화된 경우 이 사용 지침의 완전한 실시를 위해서는 **Method 개발자** 또는 **실험실 관리자** 사용자 역할이 필요합니다。

대안적 방법으로서 OMNIS Software는 사용자 관리 기능이 활성화되지 않은 상태에서도 사용할 수 있습니다。

1.5 상세한 정보

OMNIS 도움말은 OMNIS Software 또는 웹브라우저에서 호출할 수 있습니다。

OMNIS Software에서 도움말 호출하기

- **온라인 또는 오프라인 액세스 결정**
 - 온라인 액세스(인터넷 접속 요구됨) : 제목 표시줄의 ...에서 **Metrohm Knowledge Base** 옵션을 활성화시킵니다.
 - 오프라인 액세스 : 제목 표시줄의 ...에서 **Metrohm Knowledge Base** 옵션을 비활성화시킵니다.
- **도움말의 시작 페이지 호출**
 - 제목 표시줄의 ...에서 **도움말** 버튼을 클릭합니다.
 - 또는 **[F1]** 버튼을 누릅니다.
- **컨텍스트에 따른 도움말 호출**
 - 해당 영역 또는 창에서 ? 아이콘을 클릭합니다。
지시사항: 오프라인 액세스의 경우 항상 시작 페이지가 나타납니다。

웹브라우저를 통해 도움말 호출

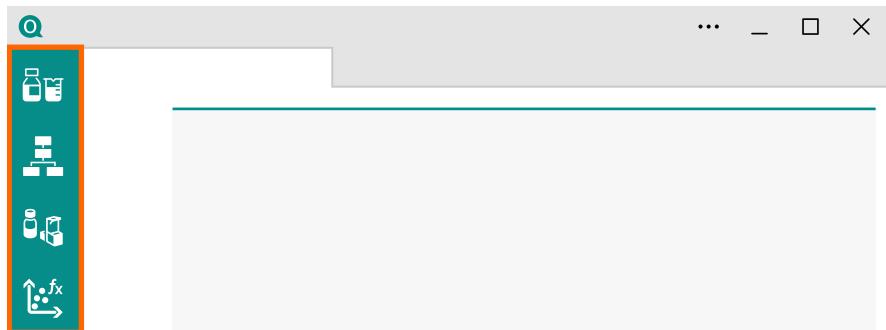
- <https://guide.metrohm.com/>을 호출합니다。
- **OMNIS Software**를 클릭합니다.
- **Release** 필터에서 원하는 OMNIS Software 버전을 선택합니다.
- OMNIS Software의 최신 버전 및 Long-term support 버전의 경우에도 PDF 형식의 도움말을 사용할 수 있습니다 : **정보 ▶ 발행 ▶ 매뉴얼** 필터를 사용합니다。

2 OMNIS Software에 대한 간략한 개요

2.1 구조 및 기능

2.1.1 작업 영역

OMNIS Software는 유저 인터페이스를 여러 작동 범위로 나눕니다。 화면 왼쪽에 있는 아이콘은 각각 특정 작동 범위를 엽니다。



작업 영역



샘플 작동 범위에서 샘플을 구성하고 subsample을 분석할 수 있습니다。



프로세스 작업 영역에서는 작업 과정 및 method를 샘플의 분석에 대해 정의할 수 있습니다。



장비 작업 영역에서는 장비 및 부속품을 관리할 수 있습니다。



분광적 모델은 **모델** 작동 범위에서 개발할 수 있습니다。 모델은 샘플 속성을 예측할 수 있습니다。

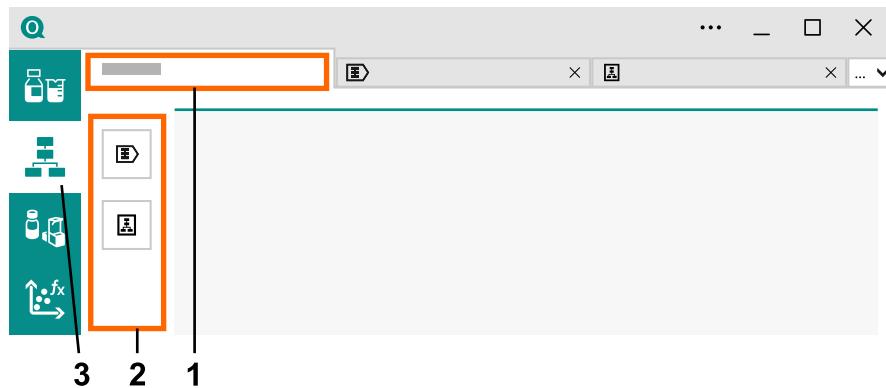
또 **설정** 작동 범위도 있습니다。

시스템에 따라 작업 범위 **사용자 관리** 및 **Audit Trail**도 사용할 수 있습니다。

2.1.2 탭 및 하위 영역

작동 범위에는 하나 이상의 **탭**이 있습니다。 각 탭에는 특정 용도가 있습니다。 작업 영역 프로세스에는 다음과 같은 탭은 예를 들어 작업 과정을 처리할 수 있습니다。

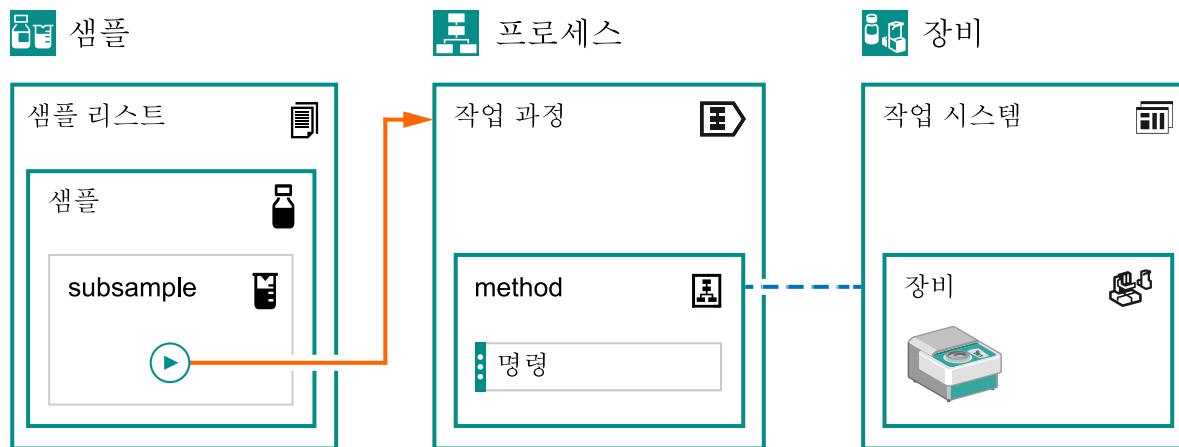
각 작동 범위에는 자체 탭이 있습니다。 왼쪽의 탭 (1) 선택한 작동 범위를 구성하는 데 사용됩니다。 여기서 특정 작업을 수행하기 위해 다른 탭을 열 수 있습니다。



작동 범위는 **하위 영역**으로 나눠 됐습니다。 왼쪽의 탭(1)은 선택한 작동 범위(3)의 하위 영역(2)을 표시합니다。

관련한 하위 영역

다음 [그림 1](#)에는 개략적인 구조가 설명되어 있습니다。 작업 영역 샘플에는 샘플 리스트가 있습니다。 샘플 리스트에는 샘플과 subsample이 포함되어 있습니다。 각 subsample에는 하나의 작업 과정이 할당합니다。



subsample은 작업 과정을 호출합니다。



method는 작업 시스템에 할당된 상태입니다。

subsample을 분석하는 경우 OMNIS Software는 할당된 작업 과정을 시작하고 해당 샘플에 포함된 method 및 명령을 실행합니다。

method는 작업 시스템에 할당된 상태。 이에 따라 명령이 작업 시스템 및 작업 시스템에 포함된 실험 장비에 액세스할 수 있습니다。

2.1.3 작업 영역 샘플

샘플은 분석할 물질입니다。 샘플은 하나 이상의 subsample로 나뉩니다。

subsample에는 하나의 작업 과정이 할당합니다。 subsample을 분석하는 경우 할당된 작업 과정이 실행됩니다。

샘플 리스트는 샘플 및 subsample을 구성합니다。 샘플 또는 subsample은 하나 이상의 샘플 리스트에 포함될 수 있습니다。

샘플 프로파일은 샘플의 생성을 위한 템플릿에 해당합니다。

샘플 - 개요



샘플 작동 범위에서 샘플을 구성하고 subsample을 분석할 수 있습니다。

다음 [그림 2](#)에는 subsample이 포함된 샘플의 샘플 리스트에 대한 단순화된 예시가 설명되어 있습니다。

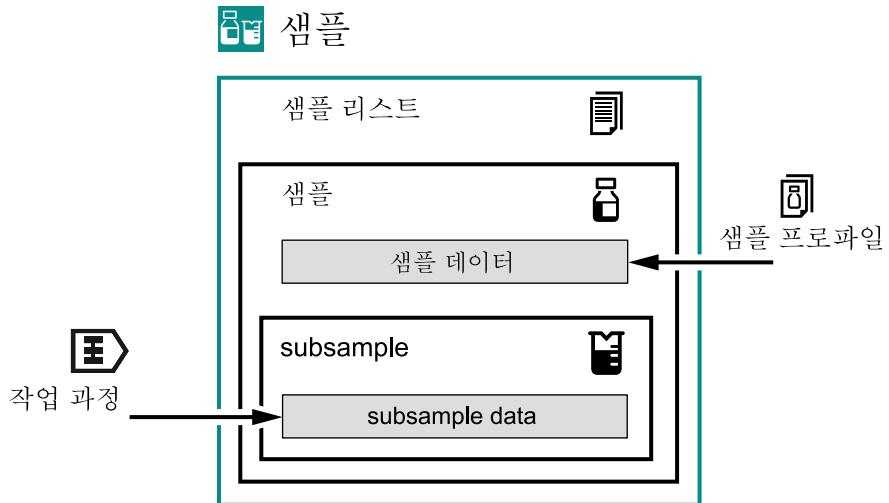


그림 2 작업 영역 샘플



데이터 필드의 사양。

샘플 및 subsample에 대해 데이터 필드를 생성할 수 있습니다。 예를 들어 기준값에 대한 샘플 데이터 또는 분석 결과에 대한 subsample data。

[그림 2](#)에는 데이터 필드를 생성하는 방법도 설명되어 있습니다 :

- 샘플 프로파일을 사용하여 샘플 데이터의 필드를 지정할 수 있습니다。
- 작업 과정을 사용하여 subsample data의 필드를 지정할 수 있습니다。

데이터 필드는 수동 또는 자동(예를 들어 명령)으로 데이터를 채울 수 있습니다。

샘플 - 하위 영역



샘플 리스트 하위 영역은 다음과 같은 기능을 제공합니다 :

- 샘플 리스트를 생성 및 관리합니다.
- 샘플 리스트에서 :
 - 새 샘플 또는 subsample 추가。
 - subsample을 처리하여 각 subsample에 대해 할당된 작업 과정을 실행합니다。
 예를 들어 작업 과정은 샘플 분석 또는 파장 보정을 수행할 수 있습니다。



검색 하위 영역에서는 검색을 사용하여 데이터베이스의 모든 샘플과 subsample을 다양한 기준에 따라 필터링할 수 있습니다.

필터 조건이 새 검색로서 저장할 수 있습니다.

검색된 샘플은 샘플 리스트로서 저장할 수 있습니다.



샘플 프로파일 하위 영역에서 샘플 프로파일은 유사한 샘플의 집합에 대해 다음을 정의합니다 :

- 샘플 데이터의 구조, 즉 샘플 데이터의 필드 수와 타입。
- 샘플 데이터 필드의 표준값。
- 기준 subsample 수에 적용되는 하나 이상의 기준 작업 과정。

2.1.4 작업 영역 프로세스

프로세스 - 개요



프로세스 작업 영역에서는 작업 과정 및 method를 샘플의 분석에 대해 정의할 수 있습니다.

다음 [그림/3](#)에는 프로세스의 구성 요소가 표시됩니다 :

- **작업 과정**
- **method**
- **명령** (예를 들어 **MEAS SPEC**)

프로세스

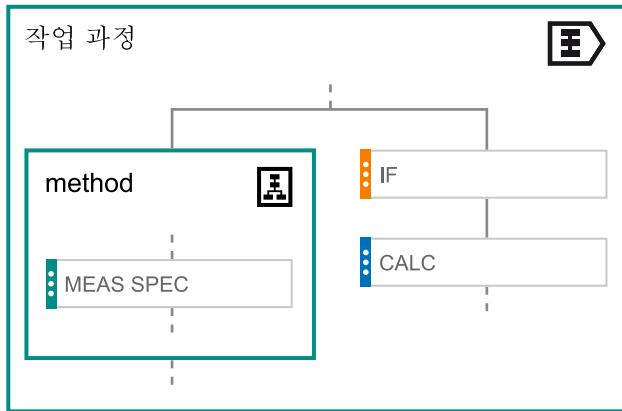


그림 3 작업 영역 프로세스

프로세스 - 하위 영역

-  **작업 과정** 하위 영역에서 method 및 명령으로 작업 과정을 컴파일할 수 있습니다。method 및 명령은 순차적 또는 동시 실행을 위해 정의할 수 있습니다。
-  **method** 하위 영역에서 method는 명령에서 작업 과정을 컴파일할 수 있습니다。명령은 순차적 또는 동시 실행을 위해 정의할 수 있습니다。
method에는 작업 시스템의 작업을 제어하는 명령이 포함될 수 있습니다。이러한 명령은 method에 할당된 작업 시스템에서 실행됩니다。

2.1.5 장비 작업 영역

장비 - 개요



장비 작업 영역에서는 장비 및 부속품을 관리할 수 있습니다。

다음 [그림 4](#)에는 장비에 액세스하는 방법이 설명되어 있습니다 :

1. **장비** 하위 영역에는 사용 가능한 모든 네트워크 및 USB 장비가 재고에 나열됩니다。
2. **연결 장비 list** 통해 장비를 예약할 수 있습니다。이에 따라 사용자가 장비의 실험 장비를 사용할 수 있습니다。
3. **작업 시스템** 하위 영역에서는 측정에 대해 필요한 모든 실험 장비를 포함하는 작업 시스템을 구성할 수 있습니다。

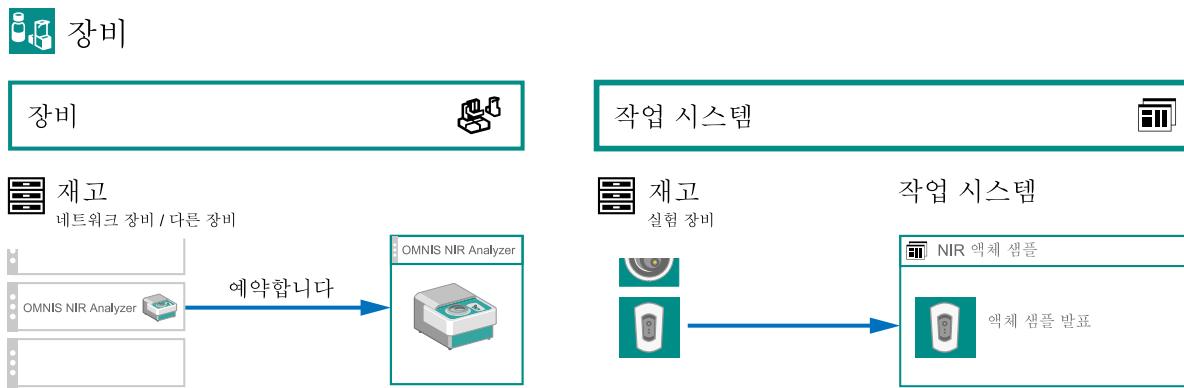


그림 4 장비 작업 영역

장비 - 하위 영역



장비 하위 영역에서는 장비를 예약하고 해제할 수 있습니다. 장비가 예약되는 경우 사용자가 해당 장비를 사용할 수 있습니다.

분석 후에는 다른 사용자가 액세스할 수 있도록 장비를 다시 해제할 수 있습니다.



작업 시스템 하위 영역에서는 작업 시스템을 하나 이상의 실험 장비로 구성할 수 있습니다. 동일한 실험 장비가 여러 작업 시스템에 포함할 수 있습니다.

샘플을 분석하기 위해 method는 작업 시스템에 액세스하고 포함된 실험 장비를 사용합니다. 작업 시스템은 여러 가지 method로 할당할 수 있습니다.

주의사항: 필요한 경우 작업 시스템의 실험 장비를 쉽게 변경할 수 있습니다. 이에 따라 method를 변경하지 않고도 서로 다른 장비에서 분석을 수행할 수 있습니다.

2.1.6 모델 작업 영역

모델은 기록된 스펙트럼을 기반으로 하는 샘플 분석을 가능하게 합니다 :

- **정량화 모델** : 정량에 관련된 관심있는 parameter의 예측(예를 들어 수분 함량 5.1%)
- **식별 모델** : 샘플(예를 들어 과당)의 식별 또는 검증
- **검증 모델** : 샘플의 검증(예를 들어 : 샘플이 사양을 충족합니다)

모델 - 개요



분광적 모델은 **모델** 작동 범위에서 개발할 수 있습니다。

작동 범위는 하위 영역으로 나뉩니다.

모델 - 하위 영역



정량화 모델 하위 영역에서 정량화 모델을 개발할 수 있습니다.

정량화 모델은 샘플의 기록된 스펙트럼에 대한 정량적 관심이 있는 parameter의 종속성을 설명합니다.



기울기 수정/y 절편 수정 하위 영역에서 기울기 수정/y 절편 수정을 생성할 수 있습니다. 이를 통해 특정 정량화 모델을 적용할 때 체계적인 오류를 수정할 수 있습니다. 예를 들어 샘플 또는 샘플 취급 중에 체계적인 오류가 발생할 수 있습니다.



식별 모델 하위 영역에서는 샘플의 동일시 또는 검증을 위한 모델을 개발할 수 있습니다.

식별 모델은 기록된 스펙트럼을 근거로 샘플을 다양한 제품(예를 들어 과당, 포도당 및 유당)으로 구분합니다.



정량화 모델 하위 영역에서는 샘플의 검증을 위한 모델을 개발할 수 있습니다.

검증 모델에서는 기록된 스펙트럼을 근거로 샘플을 포지티브(사용 가능한) 샘플 및 네거티브(사용할 수 없는) 샘플로 구분합니다.



모델 계층 구조 하위 영역에서 모델 계층 구조를 개발할 수 있습니다 :

- 샘플을 단일 식별 모델로 구분할 수 없는 경우 모델 계층 구조가 여러 식별 모델을 계층적으로 연결할 수 있습니다.
- 식별된 샘플에 대해 정량 분석을 수행하는 경우에는 모델 계층 구조 정량화 모델을 제품에 링크시킬 수 있습니다.

2.2 실용적인 소개

다음 소개에서는 OMNIS Software에 대한 첫 번째 통찰력을 제공합니다.

작업 영역

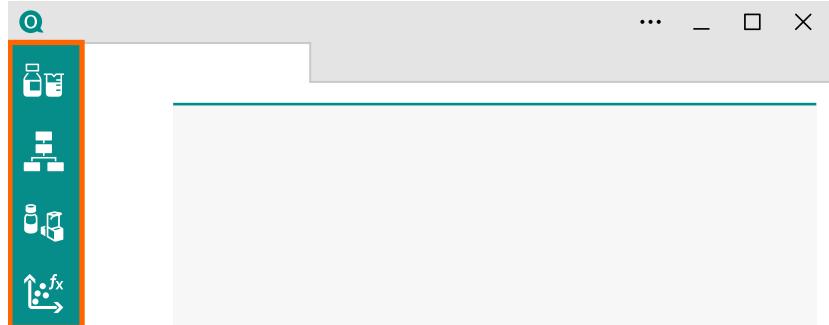
OMNIS Software는 유저 인터페이스를 여러 작동 범위로 나눕니다. 작업 영역은 다양한 하위 영역을 가질 수 있습니다.

본 사용 지침에서 하위 영역은 메뉴 경로를 통해 명시됩니다. 예를 들어 : **프로세스** 작업 영역의 **method** 하위 영역은 **프로세스** ► **method**(으)로 표시됩니다.

다음은 작동 범위의 이러한 하위 영역을 여는 방법을 보여 줍니다.

1 작동 범위를 엽니다

화면 왼쪽에 있는 아이콘을 클릭하여 다른 작동 범위 간에 전환합니다.

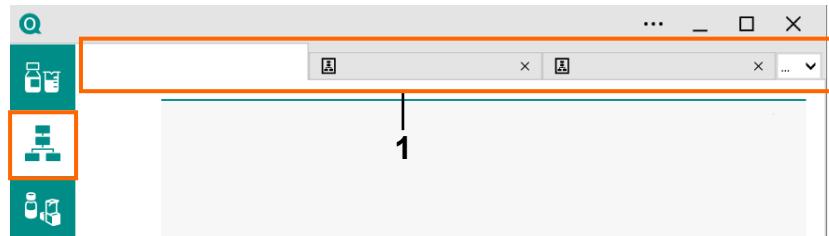


위의 예에서 해당 아이콘을 클릭하여 [프로세스](#) 작동 범위를 엽니다.

툴팁

커서를 아이콘 위에 대면 작업 영역의 이름, 요약 설명 및 상세 정보 link가 포함된 툴팁이 나타납니다。동일한 방식으로 유저 인터페이스의 다른 요소에 대한 툴팁을 표시할 수 있습니다。

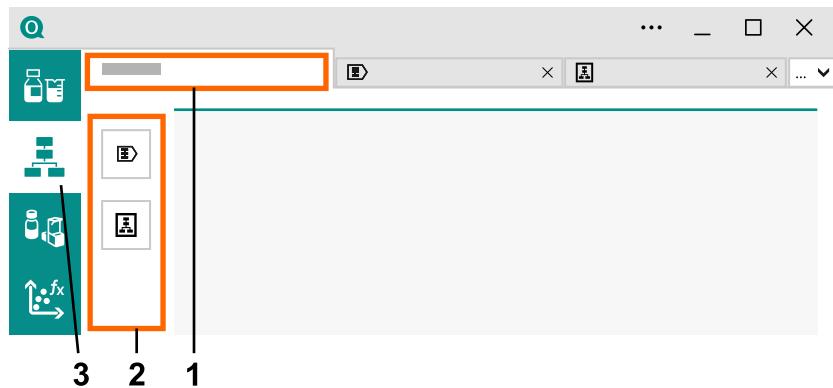
터치스크린에서 툴팁을 표시하는 경우 해당 요소를 길게 누르십시오。



작업 영역에는 하나 이상의 탭(1)이 포함될 수 있습니다。

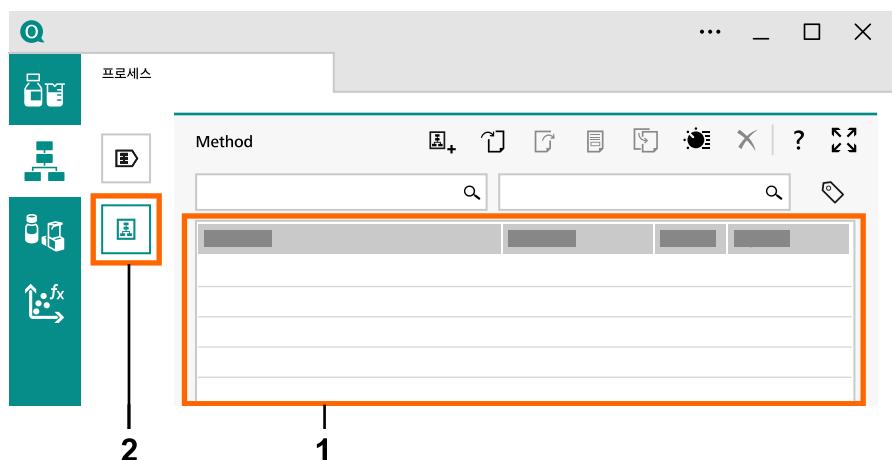
2 하위 영역 탭 열기

왼쪽의 탭(1)은 클릭하여 선택한 작동 범위(3)의 하위 영역(2)을 표시합니다。



3 하위 영역 열기

(2) 클릭하여 **method** 하위 영역을 엽니다.



method 하위 영역에서 데이터베이스 (1)의 모든 메서드가 포함된 개요 목록이 포함되어 있습니다。

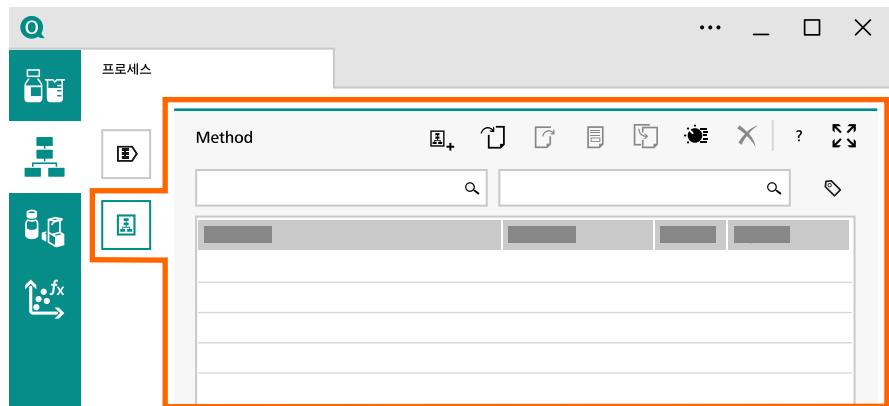
탭

3단계에서와 같이 작동 범위의 하위 영역에는 개요 목록이 포함될 수 있습니다. 목록에서 입력을 열거나 새 입력이 생성되는 경우 해당 항목이 별도의 탭에 표시됩니다.

다음에서는 새 방법을 생성하는 method를 보여 줍니다.

1 method 하위 영역 열기

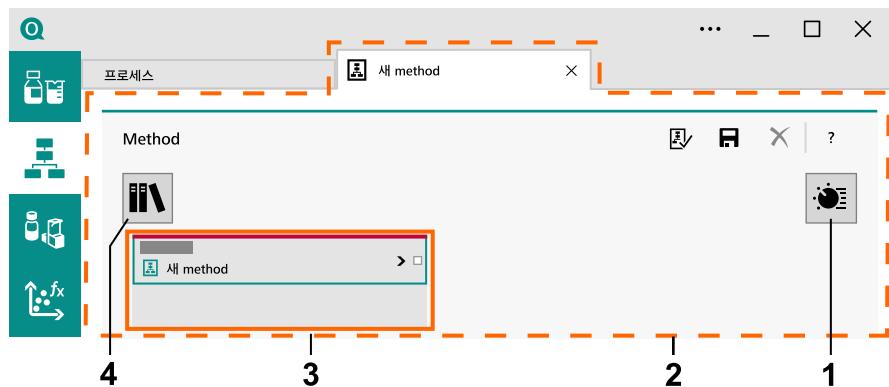
프로세스 ► **method** 위에서 설명한 대로 엽니다.



2 method 만들기

- 클릭하십시오.

`#!/method(2)`라는 이름의 새 탭이 나타나며 여기에서 method를 만들 수 있습니다(3)。



아이콘 (1) 및 (4)을 이용하면, 아래에 설명한 바와 같이 현재 숨겨져 있는 다른 창에 액세스할 수 있습니다。

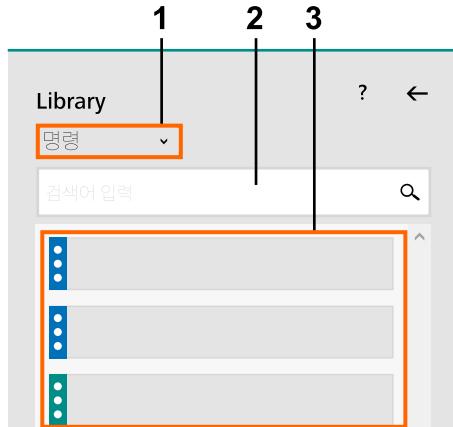
창

창은 탭 또는 탭의 범위에 속합니다。 일부 창은 표시되고 다른 창은 숨겨지고 아이콘을 통해 열어야 합니다。

1 Library 창

Library에서 프로세스에 포함할 수 있는 요소가 포함되어 있습니다。

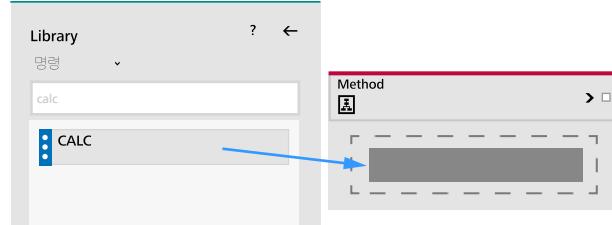
- 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다。
Library 창이 열립니다 :



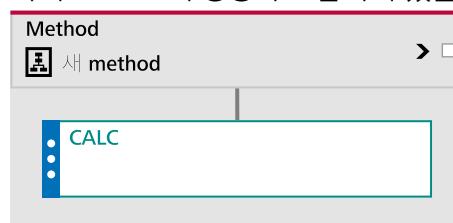
Library 창에는 선택항목 리스트 (1)에서 선택할 수 있는 여러 **하위 영역**이 있습니다. 예를 들어 **Library** ▶ **명령**.

(2) 검색 필드를 사용하는 경우 (3) 명령과 같은 하위 영역의 요소를 검색할 수 있습니다.

- 예를 들어 **CALC** 명령을 method에 삽입합니다 :
 - **Library** ▶ **명령**에서 **CALC** 명령을 찾습니다.
 - 드래그&드롭 기능을 이용해 **CALC** 명령을 method에 삽입합니다。



이제 method에 명령이 포함되어 있습니다 :



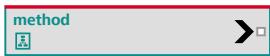
필요한 경우 추가 명령을 추가할 수 있습니다. 순차적으로 배치되는 명령은 순서에 따라 실행됩니다. 나란히 배치되는 명령은 병렬로 실행됩니다.

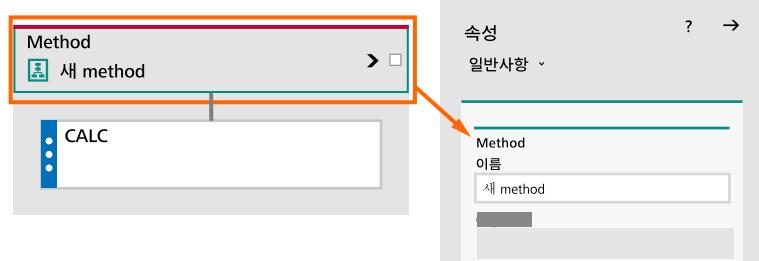
- Library 창을 닫으려면 ← 클릭합니다.



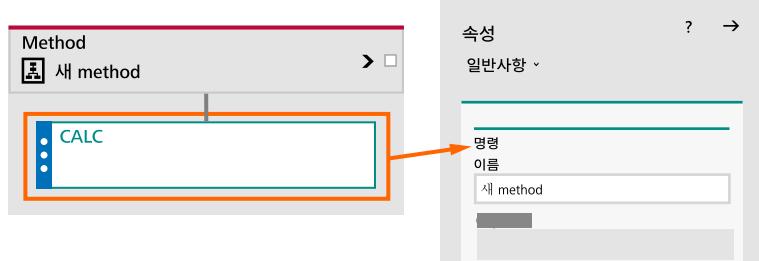
2 속성창

- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다。
속성창의 내용은 선택한 요소에 따라 다릅니다 :

-  클릭하여 method 속성에 액세스합니다 :



-  클릭하여 명령 속성에 액세스합니다 :

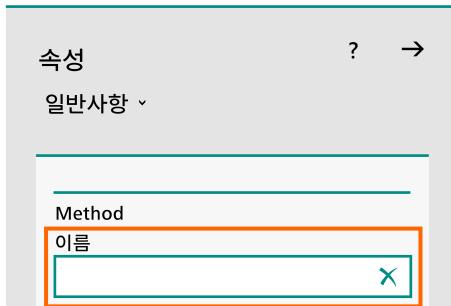


- 요소 중 하나를 두 번 클릭하는 경우 속성 ► parameter 하위 영역이 열립니다.
- 속성 창을 닫으려면 → 클릭합니다。

소개의 완료

1 method 이름 지정

-  클릭하십시오.
- 속성 ► 일반사항을 엽니다.
- method의 이름을 입력합니다 :



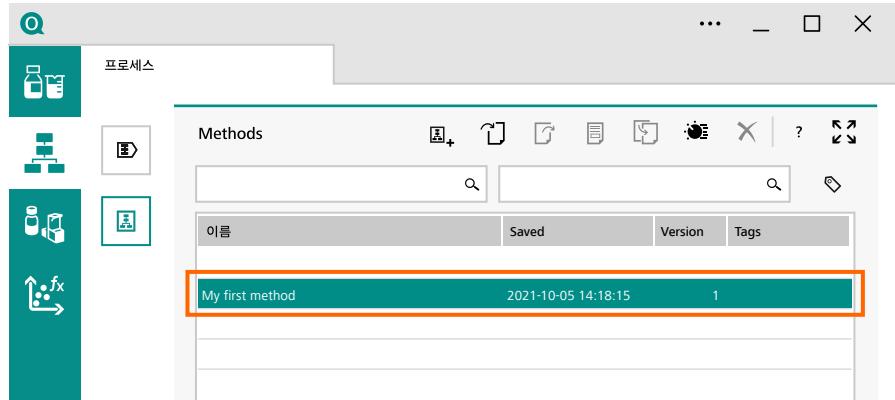
2 method 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 눌러 method를 저장합니다.

3 개요 목록 열기

- 탭을 닫고 하위 영역 (왼쪽 탭)의 **프로세스** ► **method** 탭으로 돌아갑니다.

이제 생성된 method가 개요 목록에 표시됩니다 :



4 method 삭제

- 생성된 method를 선택합니다.
- 클릭하여 선택된 방법을 삭제합니다.
주의사항: 탭이 열려 있는 동안에는 method를 삭제할 수 없습니다.
- 점검 메시지가 나타납니다.
삭제할 method의 이름을 점검합니다.
- **삭제**로 확인합니다.

해당 method가 데이터베이스에서 삭제되고 개요 목록에서 삭제됩니다.

2.3 OMNIS 명령

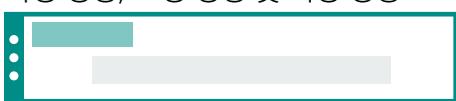
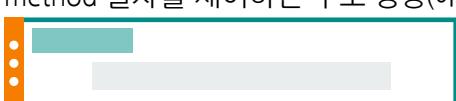
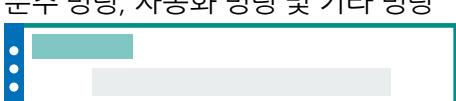
명령은 특정 지정된 과제를 수행합니다。 예를 들어 **MEAS SPEC** 명령을 사용하는 경우 스펙트럼이 참조됩니다。 **MEAS SPEC** 명령은 method에서 사용되고 method에 할당된 작업 시스템에 액세스할 수 있습니다。

몇몇 명령은 작업 과정에 삽입할 수도 있습니다(예를 들어 **IF** 명령)。

명령은 두 줄로 표시됩니다。 첫 번째 행에는 명령 타입(예를 들어 **MEAS SPEC**)의 이름, 두 번째 행에는 사용자 정의 명령 이름이 표시됩니다。

i 표준 명령 이름(예를 들어: 스펙트럼 1 기록)을 보다 구체적인 이름으로 변경하는 것이 좋습니다。 명령에 대한 상호 참조가 자동으로 조정됩니다。

명령 요소의 좌측 가장자리는 명령의 종류에 따라서 다른 컬러를 갖습니다 :

- 측정 명령, 보정 명령 및 적정 명령
- method 절차를 제어하는 구조 명령(예를 들어 분기 및 루프)
- 분주 명령, 자동화 명령 및 기타 명령

명령 변수

각각의 명령은 적어도 하나의 명령 변수를 포함하는데, 이것은 프로세스 진행 중에 생성되고 '변수 이름.명령 이름' 명칭으로 수식에 사용될 수 있습니다。

다음 변수는 모든 명령에 사용할 수 있습니다:

'Finished. 명령 이름'

명령의 상태。

- **유효하지 않음**: 명령이 (아직) 시작되지 않았습니다.
- **0**: 명령이 아직 실행 중입니다.
- **1**: 명령이 올바르게 종료되었습니다.
- **2**: 명령이 올바르게 종료되지 않았습니다. 오류 또는 경고가 발생했습니다.
- **3**: 명령이 **SKIP** 명령을 통해 또는 수동으로 **라이브 데이터** 건너뛰기 되었습니다.
- **4**: 명령이 사용자의 수동 개입(정지 또는 비상정지) 또는 **STOP** 명령을 통해 또는 동시에 실행된 명령에서 오류에 의해 정지됩니다.

2.3.1 스펙트럼 기록

명령 이름	설명	생성된 명령 변수(명령 이름 뒤에 있음)
PREP SPEC	액체 샘플 분석을 준비합니다 :	
Liquid Sample Presentation	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 삽입된 샘플 홀더가 지정된 샘플 용기와 일치하는지 점검합니다. ▪ 그렇지 않으면 측정이 취소됩니다. 	
타입 의 경우	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 샘플 용기를 삽입해야 합니다. ▪ 그렇지 않으면 샘플을 삽입하라는 메시지가 표시됩니다. ▪ 샘플 용기 또는 샘플 홀더에서 온도 조절할 수 있습니다 온도 조절 (Liquid Sample Presentation) (참조: 25페이지, 2.5장)。 	
MEAS REF SPEC	<p>할당된 실험 장비에 대한 기준 스펙트럼을 삽입합니다. 기준 스펙트럼은 장비에 저장됩니다.</p> <p>실험 장비당 1개의 기준 스펙트럼이 있습니다. MEAS REF SPEC 명령을 실행할 때마다 이전 기준 스펙트럼을 덮어씁니다.</p> <p>저장된 기준 스펙트럼은 각 실험 장비에서 실행되는 모든 MEAS SPEC 명령에 사용됩니다。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 기준 스펙트럼이 기록된 시점。 <p>또한 실험 장비 Liquid Sample Presentation 타입 의 경우 :</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ TemperatureControlMode.Result 온도 조절 장소 <ul style="list-style-type: none"> - Inactive: 온도 조절이 없습니다. - Sample holder: 샘플 홀더에 서 온도를 설정했습니다. - Sample vessel: 샘플 홀더: 샘플 용기에서 온도를 설정했습니다. ▪ 'CurrentTemperature.Result 명령을 실행하는 동안의 현재 온도。 단위: °C

명령 이름	설명	생성된 명령 변수(명령 이름 뒤에 있음)
MEAS SPEC	<p>활당된 실험 장비에 대한 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다。</p> <p>샘플의 흡수 스펙트럼은 해당 실험 장비에 대해 장비에 저장된 기준 스펙트럼을 사용하여 계산됩니다。</p>	<p>실험 장비 Liquid Sample Presentation 타입의 경우 :</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ TemperatureControlMode.Result 온도 조절 장소 <ul style="list-style-type: none"> - Inactive: 온도 조절이 없습니다. - Sample holder: 샘플 홀더에서 온도를 설정했습니다. - Sample vessel: 샘플 홀더: 샘플 용기에서 온도를 설정했습니다. ▪ 'CurrentTemperature.Result 명령을 실행하는 동안의 현재 온도。 단위: °C
VESSEL REMOVAL 실험 장비 Liquid Sample Presentation 타입의 경우	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 샘플 용기의 제거를 확인할 수 있습니다。 샘플 용기가 제거될 때 까지 프로세스가 중단됩니다。 이를 통해 시리즈 분석의 경우 조절된 과정을 수행할 수 있습니다。 ▪ 샘플 용기의 온도가 조절되는 경우 온도 센서가 샘플 용기에서 멀리 이동합니다。 샘플 용기를 제거하라는 메시지가 나타나는 경우 온도 센서를 손상시키지 않고 샘플을 채취할 수 있습니다。 ▪ 온도 조절은 비활성화하거나 샘플 홀더에서 계속할 수 있습니다。 	

2.3.2 예측

PREDICT – 수량화

PREDICT 명령은 MEAS SPEC 명령을 통해 기록된 흡수 스펙트럼에 모델을 사용합니다。

정량화 모델은 정량적 관심있는 parameter의 예측을 제공합니다。 옵션으로서 기울기 수정/y 절편 수정을 사용할 수 있습니다。

생성된 명령 변수 (. 명령 이름 뒤에 있음)

- **Predicted.Quantification.Result**
관심있는 parameter의 예상되는 결과。

- **Uncorrected.Quantification.Result**
기울기 수정/y 절편 수정을 적용하지 않고 관심있는 parameter에 대한 계산된 값。
- **Unit.Quantification.Result**
관심있는 parameter의 단위。
- **IsOutlier.OutlierDetection.Result**
스펙트럼이 특이값인지 여부를 나타내는 평가。
0: 스펙트럼은 특이값으로 간주되지 않습니다。
1: 스펙트럼은 특이값으로 간주됩니다。
- **HotellingsT2.OutlierDetection.Result**
스펙트럼의 Hotelling T^2 。
- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection.Result**
특이값으로서 표시를 위한 Hotelling T^2 한계값。 이 한계값은 모델에서 결정된 특이값 레벨에 따라 다릅니다。
- **QResiduals.OutlierDetection.Result**
스펙트럼의 Q residuals。
- **LimitQResiduals.OutlierDetection.Result**
특이값으로서 표시를 위한 Q residuals 한계값。 이 한계값은 모델에서 결정된 특이값 레벨에 따라 다릅니다。
- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
스펙트럼의 Nearest Neighbor Distance (NND)。
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection.Result**
특이값으로서 표시를 위한 NND 한계값。

PREDICT – 식별 및 검증

PREDICT 명령은 **MEAS SPEC** 명령을 통해 기록된 흡수 스펙트럼에 모델을 사용합니다。

사용에 따라서 식별 모델은 알 수 없는 샘플(예를 들어 과당)의 동일시 또는 샘플의 제품 제휴의 검증을 제공합니다。

생성된 명령 변수 (.명령 이름 뒤에 있음)

- **Product.Identification.Result**
식별된 샘플의 제품 또는 제품분류。
동일시에 실패한 경우 결과가 표시되지 않습니다。
- **Status.Identification.Result**
 - **Identified:** 동일시 성공적。 제품 또는 제품분류도 측정할 수 있습니다。
 - **Ambiguous:** 동일시에 실패함。 여러 제품의 가능성의 임계값이 가능성의 스레시홀드를 초과합니다。
 - **Unidentified:** 동일시에 실패함。 한 제품의 가능성의 임계값이 가능성의 스레시홀드를 초과하지 않습니다。
- **Probability.Identification.Result**
 - **0.01 ~ 100:** 백분율로 확률은 샘플이 제품 또는 제품분류에 속하는 가능성을 나타냅니다。
 - **유효하지 않음:** 동일시 못했습니다.

이 모델이 검증을 위해 사용된 경우 :

- **Status.Verification.Result**

- 1: 검증 성공적。
- 0: 검증에 실패함。

PREDICT - 검증

PREDICT 명령은 **MEAS SPEC** 명령을 통해 기록된 흡수 스펙트럼에 모델을 사용합니다.

검증 모델은 샘플을 포지티브 (사용 가능한) 샘플로 검증하는 용도로 사용됩니다.

생성된 명령 변수 (.명령 이름 뒤에 있음)

- **Status.Qualification.Result**

- 1 : 검증 성공적。
- 0 : 검증에 실패함。

PREDICT - 모델 계층 구조

PREDICT 명령은 **MEAS SPEC** 명령을 통해 기록된 흡수 스펙트럼에 모델 계층 구조를 사용합니다.

사용에 따라서 모델 계층 구조는 알 수 없는 샘플(예를 들어 과당)의 동일시, 샘플의 제품 제휴의 검증 또는 샘플의 관심있는 parameter 수량화를 제공합니다.

생성된 명령 변수 (.명령 이름 뒤에 있음)

- **모델 계층 구조 (동일시)**

- **Product.Identification.Result**

식별된 샘플의 제품 또는 제품분류。

동일시에 실패한 경우 결과가 표시되지 않습니다.

- **Status.Identification.Result**

Identified: 동일시 성공적。 어떤 제품이나 제품분류도 식별했습니다。

Ambiguous: 동일시에 실패함。 여러 제품의 가능성의 임계값이 가능성의 스레시홀드를 초과합니다。

Unidentified: 동일시에 실패함。 한 제품의 가능성의 임계값이 가능성의 스레시홀드를 초과하지 않습니다。

- **Probability.Identification.Result**

0.01 ~ 100: 백분율로 확률은 샘플이 제품 또는 제품분류에 속하는 가능성을 나타냅니다。

유효하지 않음: 동일시 못했습니다.

- **모델 계층 구조 (검증)**

- **Status.Verification.Result**

0: 검증에 실패함。

1: 검증 성공적。

- **모델 계층 구조 (수량화)**

주의사항: **x = 정량화 모델의 색인** [모델 계층 구조 - 정량화 모델을 위한 색인 \(참조: 158페이지, 11.4.1장\)](#)

정량화 모델의 기준을 구축할 수 없는 경우 다음 변수가 유효하지 않음 값을 출력합니다.

- **Predicted.Quantification{x}.Result**
관심있는 parameter에 대해 예상된 끝값。
- **Uncorrected.Quantification{x}.Result**
기울기 수정/y 절편 수정을 적용하지 않고 관심있는 parameter에 대한 계산된 값。
- **Unit.Quantification{x}.Result**
관심있는 parameter의 단위。
- **ParameterName.Quantification{x}.Result**
기준 parameter의 이름。
- **IsOutlier.OutlierDetection{x}.Result**
스펙트럼이 특이값인지 여부를 나타내는 평가。
0: 스펙트럼은 특이값으로 간주되지 않습니다。
1: 스펙트럼은 특이값으로 간주됩니다。
- **AnyOutlier.OutlierDetection.Result**
0: 정량화 결과가 특이값으로 표시되지 않습니다。
1: 적어도 하나의 정량화 결과가 특이값으로 표시됩니다。
- **HotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
스펙트럼의 Hotelling T^2 。
- **LimitHotellingsT2.OutlierDetection{x}.Result**
특이값으로서 표시를 위한 Hotelling T^2 한계값。 이 한계값은 모델에서 결정된 특이값 레벨에 따라 다릅니다。
- **QResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
스펙트럼의 Q residuals。
- **LimitQResiduals.OutlierDetection{x}.Result**
특이값으로서 표시를 위한 Q residuals 한계값。 이 한계값은 모델에서 결정된 특이값 레벨에 따라 다릅니다。
- **NearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
스펙트럼의 Nearest Neighbor Distance (NND)。
- **LimitNearestNeighborDistance.OutlierDetection{x}.Result**
특이값으로서 표시를 위한 NND 한계값。

2.3.3 계산 및 통계

명령 이름	설명	생성된 명령 변수(명령 이름 뒤에 있음)
CALC	예를 들어 예측 결과를 추가로 처리하기 위해 계산을 수행합니다. 수식은 수식 편집기를 이용해 만들 수 있습니다.	<ul style="list-style-type: none"> '결과 이름' 계산의 결과값。 주의사항: '결과 이름'을 정의하거나 parameter 설정으로 계산할 수 있습니다. 기준 이름은 '결과 1'입니다. 'MeanValue.결과값 이름' 사전에 동일한 버전의 작업 과정 및 동일한 버전의 method로 이미 측정된 모든 결과의 평균값。 'StandardDeviation.결과값 이름' 절대 표준편차。 사전에 동일한 버전의 작업 과정 및 동일한 버전의 method로 이미 측정된 모든 subsample 및 현재 subsample의 값이 결과에 사용됩니다。
EVAL BASE STATISTICS	스펙트럼의 기준 통계 값을 측정합니다. 사용할 데이터 전처리 및 파장범위를 정의할 수 있습니다。	<ul style="list-style-type: none"> Mean.Result 흡수값의 평균값。 StandardDeviation.Result 흡수값의 표준편차。 Minimum.Result 흡수값의 최소값。 Maximum.Result 흡수값의 최대 값。 First.Result 첫 번째 흡수값 Last.Result 마지막 흡수값 Integral.Result 스펙트럼의 적분 값。

또한 **IF**, **LOOP**, **SKIP**, **STOP**, **SYNC** 또는 **WAIT** 같은 구조 명령을 사용할 수 있습니다。

EXPORT 또는 **REPORT** 명령을 사용하여 측정 data의 출력을 생성할 수 있습니다。

2.3.4 파장 보정

명령 이름	설명	생성된 명령 변수(명령 이름 뒤에 있음)
CAL WL	장비의 파장 보정을 수행합니다。 파장 보정은 파장 값, 즉 스펙트럼의 x축을 표준화합니다。	<ul style="list-style-type: none"> Date.Result 파장 보정이 실시된 시점。

명령 이름	설명	생성된 명령 변수(명령 이름 뒤에 있음)
VAL WL	파장 보정을 점검합니다.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 파장 보정의 유효성이 검사된 시점。 ▪ OverallStatus.Result 1: 검증에 성공했습니다. 2: 검증에 실패했습니다. ▪ ExpectedWavelength.Peak{X} 피크 X의 요구된 파장 (mm)。 ▪ MeasuredWavelength.Peak{X} 피크 X의 측정된 파장 (mm)。 ▪ ExpectedBandwidth.Peak{X} 피크 X의 요구된 밴드폭 (mm)。 ▪ MeasuredBandwidth.Peak{X} 피크 X의 측정된 밴드폭 (mm)。 ▪ Index.Peak{X} 피크 X의 피크번호。 예를 들어: 'Index.Peak{2}'는 결과 2를 생성합니다。 X에 대한 피크가 없는 경우 위의 명령 변 수는 결과를 반환합니다: 유효하지 않음

2.3.5 장비 성능 테스트

명령 이름	설명	생성된 명령 변수(명령 이름 뒤에 있음)
TEST WL	<p>파장 테스트에서는 파장 정확도 및 파장 정밀도가 테스트됩니다。</p> <p>내부 (기본) : 내부 파장 표준이 사용됩니다。</p> <p>외부 (옵션) : 외부 파장 표준이 사용됩니다。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 파장 테스트가 실시된 시점。 ▪ OverallStatus.Result 1: 테스트에 성공했습니다。 2 : 테스트에 실패했습니다。
TEST NOISE	<p>노이즈 테스트에서는 신호 노이즈가 테스트됩니다。</p> <p>내부 (기본) : 사용된 샘플 발표의 기준 경로가 사용됩니다。</p> <p>저 플럭스 테스트 및 고온 플럭스 테스트 (옵션) : 외부 기준 표준이 사용됩니다。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 신호 잡음이 테스트된 시점。 ▪ OverallStatus.Result 1: 테스트에 성공했습니다。 2 : 테스트에 실패했습니다。
TEST PHOTOMETRIC LINEARITY	외부 테스트 옵션에서는 외부 기준 표준을 통해 측광 선형성이 테스트 됩니다。	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Date.Result 측광 선형성이 테스트된 시점。 ▪ OverallStatus.Result 1: 테스트에 성공했습니다。 2: 테스트에 실패했습니다。

2.4 장비 예약 및 릴리스

특정 장비는 한 번에 하나의 OMNIS 시스템에서만 사용할 수 있습니다。

장비를 사용하려면 먼저 예약해야 합니다。 장비가 예약되어 있는 한 다른 OMNIS 시스템은 이 장비에 액세스할 수 없습니다。

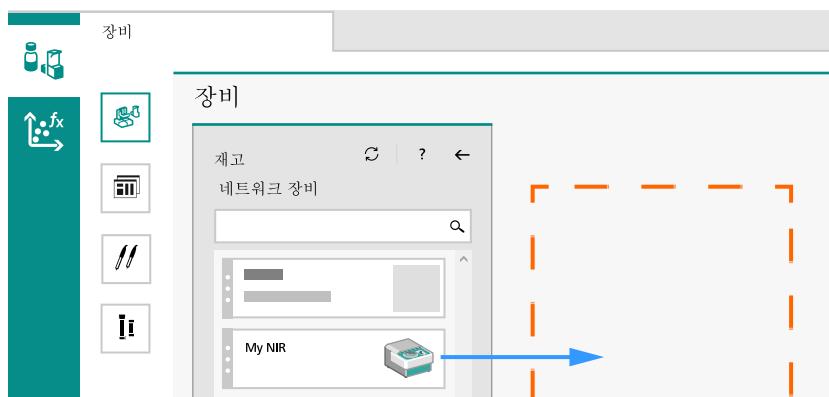
장비를 예약합니다

1 사용 가능한 장비 검색

- 장비 ▶ 장비를 엽니다。
- 버튼을 클릭하여 연결 장비 list 창을 엽니다。
- 필요한 장비를 검색합니다。
주의상황: 아이콘이 회색으로 표시된 장비는 유효하지 않습니다。

2 장비를 예약합니다

장비를 드래그&드롭 기능을 이용해 그 옆에 있는 작업면으로 드래그 하십시오。



이제 장비가 예약된 상태입니다 :



장비 옆의 녹색 상태 램프는 장비를 사용할 수 있다는 것을 표시합니다。

i 필요한 경우 다른 장비를 예약할 수 있습니다。

i OMNIS Software를 종료해도 장비가 예약되어 있습니다。

윈도우가 종료될 때까지 장비가 해제되지 않습니다。 컴퓨터를 다시 켜는 경우 장비가 다시 예약됩니다。 동일한 사용자가 로그인하든 다른 사용자가 로그인하든 상관 없습니다。

장비 릴리스

예약된 장비를 영구적으로 해제하려면 다음과 같이 하십시오 :

1 장비 하위 영역 열기

- 장비 ► 장비를 엽니다。

2 장비 릴리스

- 공유할 장비를 선택합니다。
- ✗ 아이콘을 클릭하여 선택한 장비를 제거합니다。

장비가 공유되고 다른 사용자가 다시 사용할 수 있습니다。

2.5 온도 조절 (Liquid Sample Presentation)

온도 조절은 선택적으로 샘플 홀더 또는 샘플의 온도를 제어합니다。

샘플 홀더에서 온도 조절

- 일회용 바이알, 큐벳 및 플로우 셀을 위한 샘플 홀더를 지원합니다。
- 샘플 홀더의 설정 온도 : 25°C와 80°C 사이(주변 온도를 기준으로 5.0 K 이상 낮지 않음)。
- 온도 센서의 정확성 : < 0.5 K

샘플에서 온도 조절

- 일회용 바이알을 지원합니다。
- 샘플의 설정 온도 : 25°C와 80°C 사이(주변 온도를 기준으로 5.0 K 이상 낮지 않음)。
- 온도 센서의 정확성 : < 0.5 K
- 조절 알고리즘 :
 - 조절 알고리즘은 샘플의 정의된 설정 온도와 센서에서 측정된 온도를 고려합니다。 샘플의 모델링된 온도가 충분한 안정성에 도달하고 그 편차가 설정 온도를 기준으로 0.5 K를 초과하지 않은 경우 분광분석 측정을 시작할 수 있습니다。 필요한 경우 분광분석 측정은 일회용 바이알을 삽입한 직후에 시작됩니다。
 - 전형적인 정확성 : 1.0 K (23°C의 주변 온도를 기준으로 25°C~80°C의 샘플 온도에 대해 물 샘플에서 점검됨)。

온도 조절을 커니다

- PREP SPEC 명령으로 (parameter 설정 온도 조절)。



- 수동조작 (샘플 홀더의 온도 조절에만 해당) :
 - 장비 ▶ 장비에서 예약된 장비를 두 번 클릭하여 **수동 조작** 엽니다。
 - 샘플 홀더 설정 온도 입력 필드의 **온도 조절** 영역에 원하는 온도를 입력하고 클릭합니다.

온도 조절을 끕니다

- **VESSEL REMOVAL** 명령으로 (옵션 **비활성화**)。
- 수동조작에서 :
 - 장비 ▶ 장비에서 예약된 장비를 두 번 클릭하여 **수동 조작** 엽니다。
 - 온도 조절 영역에서 버튼을 클릭합니다. 온도 조절은 샘플 홀더 또는 샘플의 온도가 측정되는지 여부에 상관없이 종료됩니다。
- 온도 조절은 일반적으로 2시간 동안 사용하지 않거나 장비를 끄는 경우 종료됩니다。

3 장비 준비

장비가 스펙트럼을 삽입하기 전에 다음 준비가 필요합니다 :

- **작업 시스템**이 구축되어야 합니다。

이후 다음 작업은 스펙트럼을 서로 비교할 수 있도록 합니다 :

- **파장 보정**은 스펙트럼의 x축을 보정합니다。
- **장비 성능 테스트**는 장비 성능이 요구 사항을 충족하는지 점검합니다。

장비 성능 테스트는 정기적으로 실시해야 합니다 [장비 성능 테스트 \(참조: 147페이지, 10.1장\)](#)。

i 또한 스펙트럼의 y축에서 흡수값 값을 표준화해야 합니다。 이를 위해 스펙트럼의 기록 전에 각각 하나의 **MEAS REF SPEC** 명령이 사용됩니다。

i OMNIS Software의 과정에 대한 설명은 부록을 참조합니다([참조: 163페이지, "장비 준비"](#))。

3.1 작업 시스템 만들기

전제조건 :

- 분광계를 예약하지 않습니다 [장비 예약 및 릴리스 \(참조: 24페이지, 2.4장\)](#)。

1 작업 시스템 만들기

- **장비** ▶ **작업 시스템**에서 버튼을 클릭하십시오。
새 탭이 열립니다。

2 작업 시스템 이름 지정

- **새 작업 시스템** 하위 영역을 선택합니다。
하위 영역의 프레임은 녹색으로 바뀝니다。
- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다。
- **속성** ▶ **일반사항** 아래에서 **이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다。

3 실험 장비를 삽입합니다

- 버튼을 클릭하여 **연결 장비 list** 창을 엽니다。



- 실험 장비 **Liquid Sample Presentation** 또는 **Solid Sample Presentation** 드래그&드롭 기능을 이용해 작업 시스템에 삽입합니다。

i **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** 탑입의 장비는 2개의 실험 장비를 제공합니다. 두 개의 실험 장비 중 하나를 사용하여 별도의 작업 시스템을 만들 것을 Metrohm 사는 추천합니다.

i 실험 장비는 작업 시스템에서 다시 제거할 수 있습니다 :

- 삭제될 실험 장비를 선택합니다.
- ✕ 클릭하거나 [삭제] 키를 누릅니다.

i 필요한 경우 실험 장비의 이름을 변경할 수 있습니다 :

- 이름을 변경할 실험 장비를 선택합니다.
- **속성** ▶ **일반사항** ▶ **이름** 아래에서 적절한 이름을 입력합니다.

4 작업 시스템 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

i 하나의 실험 장비를 복수의 작업 시스템에 할당할 수 있습니다.

i 작업 시스템이 생성되는 경우 장비를 해제하고 필요에 따라 다시 예약 할 수 있습니다.

3.2 파장 보정

파장 보정은 스펙트럼의 파장 값을 비교할 수 있도록 합니다. 그것은 계측학적으로 추적 가능한 내부 파장 표준을 사용합니다.

파장 보정은 2단계로 수행됩니다 :

1. **CAL WL** 명령은 파장 값, 즉 스펙트럼의 x축을 표준화합니다.
2. **VAL WL** 명령은 파장 보정을 점검합니다.
실험 장비로 스펙트럼을 측정하기 전에 검증이 성공적으로 수행되어야 합니다.

i **OMNIS NIR Analyzer Liquid/Solid** 탑입의 장비는 2개의 실험 장비를 제공합니다. 파장 보정 및 검증은 두 실험 장비에 대해 별도로 수행해야 합니다.



3.2.1 파장 보정 준비

i OMNIS Software를 처음 사용할 때는 계속하기 전에 서문을 읽으십시오
오 [실용적인 소개\(참조: 9페이지, 2.2 장\)](#).

아래 지침에 따라 **CAL WL** 및 **VAL WL** 명령을 사용하여 method를 생성합니다。 그런 다음 작업 과정, 샘플 프로파일 및 샘플 리스트를 작성합니다。 이를 통해 샘플 측정과 동일한 방식으로 파장 보정을 시작할 수 있습니다。

method 만들기

1 method 만들기

- ▶ **프로세스** ▶ **method**에서 + 클릭하십시오。

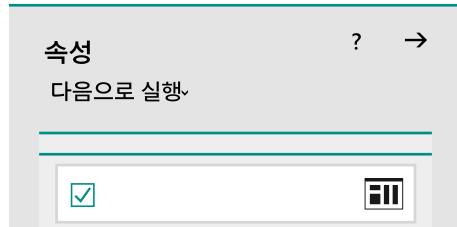
새로 만든 method가 포함된 **새 method** 제목의 탭이 열립니다。

2 method 이름 지정

- ▶ 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다。
- ▶ **속성** ▶ **일반사항** 아래에서 **이름** 필드에 다음 이름을 입력합니다:
Wavelength Cal/Val.

3 method의 작업 시스템 할당

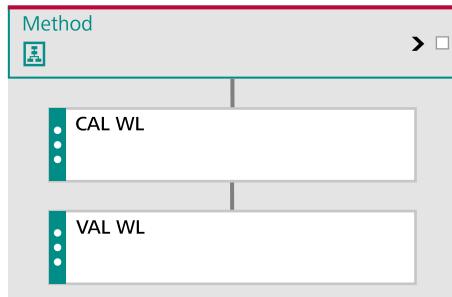
- ▶ **속성** ▶ **다음으로 실행**에서 사용될 작업 시스템을 선택합니다。



i 이 문서의 모든 method에 대해 동일한 작업 시스템을 사용합니다。

4 명령 삽입

- ▶ 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다。
- ▶ **Library** ▶ **명령**에서 **CAL WL** 명령을 찾습니다。
- ▶ 드래그&드롭 기능을 이용해 **CAL WL** 명령을 method에 삽입합니다。
- ▶ **VAL WL** 명령을 찾아 **CAL WL** 명령으로 정렬합니다。



info method 순서는 중요합니다。 순차적으로 배치되는 명령은 순서에 따라 실행합니다。 먼저 **CAL WL** 명령을 실행한 다음 **VAL WL** 명령을 실행합니다。

info 이 명령은 기준 스펙트럼을 자동으로 기록합니다。 따라서 **MEAS REF SPEC** 명령은 필요하지 않습니다。

5 method 저장

- **■**을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다。

작업 과정 작성

1 작업 과정 만들기

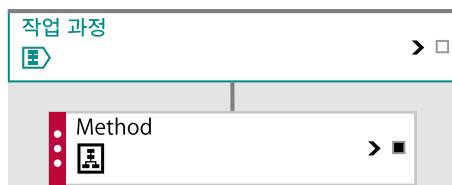
- **프로세스** ▶ **작업 과정** 통해 **■** 클릭한 다음 **■** 클릭하여 엽니다。
- **■** + 클릭하여 새 작업 과정을 생성합니다。

2 작업 과정 이름 지정

- **■** 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다。
- **속성** ▶ **일반사항** 아래에서 **이름** 필드에 다음 이름을 입력합니다: **Wavelength Cal/Val**

3 method 삽입

- **■** 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다。
- **Library** ▶ **method**에서 드래그&드롭 방식으로 작성된 method 를 작업 과정에 삽입합니다。



4 작업 과정 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

샘플 프로파일 생성

1 샘플 프로파일 만들기

- 샘플 ► 샘플 프로파일에서 + 클릭하십시오.

2 샘플 프로파일 이름 지정

- 샘플 프로파일 이름 필드에 다음 이름을 입력합니다:
Wavelength Cal/Val

샘플 프로파일
샘플 프로파일 이름
[highlighted input field]

3 샘플 이름의 입력 필드

샘플 데이터 영역에는 샘플의 이름을 위한 필드가 포함되어 있습니다 :

샘플 데이터

짧은 필드 이름
이름

긴 필드 이름
이름

입력 필드의 타입
텍스트

다음으로 사용
입력 필드

▲ 입력 필드 속성

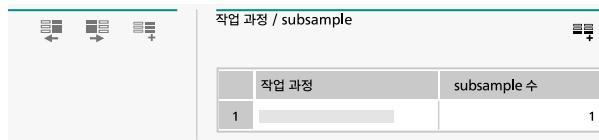
표준값
My Sample name

- 샘플 이름에 대해 표준값 입력합니다.

4 subsample 수 및 작업 과정 정의

- 작업 과정 / subsample 영역에서 Wavelength Cal/Val 작업 과정을 선택합니다.

- **subsample 수** 각 샘플에 대해 자동으로 추가된 subsample 수를 지정합니다。 1을 입력합니다。



5 샘플 프로파일 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다。

샘플 항목 리스트를 생성

1 샘플 리스트 만들기

- 샘플 ► 샘플 리스트에서 + 클릭하십시오。

2 샘플 리스트 이름 지정

- 이름 필드에 다음 이름을 입력합니다: Wavelength Cal/Val
[Enter]로 점검합니다。

샘플 리스트 ~

3 샘플 리스트 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다。
 샘플은 나중에 추가됩니다。

3.2.2 파장 보정을 시작합니다

실행 주기에 유의합니다 [파장 보정\(참조: 148페이지, 10.2장\)](#)。

장비를 켜 후 1시간 동안 기다렸다가 파장 보정을 시작할 것을 Metrohm 사는 추천합니다。

파장 보정을 시작합니다

전제조건:

파장 보정이 준비되었습니다 [파장 보정 준비\(참조: 29페이지, 3.2.1장\)](#)。

1 장비를 예약합니다

분광계를 예약합니다 [장비 예약 및 릴리스\(참조: 24페이지, 2.4장\)](#)。

2 'Wavelength Cal/Val'의 샘플 리스트를 엽니다

- 샘플 작동 범위를 엽니다.
- 샘플 리스트 Wavelength Cal/Val이 닫히는 경우 샘플 탭에서 샘플 리스트 하위 영역을 열고 샘플 리스트 Wavelength Cal/Val을 두 번 클릭합니다.

3 'Wavelength Cal/Val' 샘플 프로파일을 선택합니다

- + 아이콘 왼쪽에 있는 선택항목 리스트에서 Wavelength Cal/Val 샘플 프로파일을 선택합니다.



 이후 추가된 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다.

4 샘플 추가

- + 아이콘을 클릭하여 새 샘플을 샘플 리스트에 추가합니다.

샘플 리스트에 새 입력이 나타납니다. 여기에는  레이블이 지정된 샘플 및  레이블이 지정된 subsample이 포함됩니다.

샘플 이름	번호	Subsample 이름
사료 1	1	Subsample 1

샘플 프로파일에 따라 새 샘플 1에는 Wavelength Cal/Val 작업 과정이 사용하는 subsample이 포함되어 있습니다.

- 필요한 경우 샘플 이름 및 subsample 이름을 편집합니다.
- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 눌러 샘플 리스트를 저장합니다.

5 파장 보정을 실행합니다

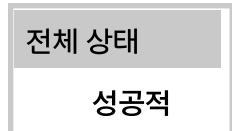
- 추가된 샘플을 선택합니다.
-  클릭하여 파장 보정을 시작합니다.

보정이 완료되는 경우 subsample의 상태가  표시됩니다.

6 결과를 점검합니다

- 오른쪽 하단에 있는 결과들 ▶ 원시 data 엽니다.

보정 및 검증의 결과는 표시됩니다. 검증의 전체 상태를 점검합니다 :



1 상태 경고 : 검증에 실패하는 경우 subsample 아이콘이 샘플 리스트에서 적색으로 표시됩니다 :



1 최근 실행된 파장 보정 및 파장 검증에 대한 정보는 장비 속성에서 확인할 수 있습니다 :

- 장비 ► 장비에서 예약된 장비를 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.
- 고유 데이터 ► 보정 data 및 테스트 데이터

1 OverallStatus.Result **VAL WL** 명령 변수는 검증의 전체 상태를 표시합니다 :

- 1: 검증에 성공했습니다.
- 2 : 검증에 실패했습니다.

3.3 장비 성능 테스트

내부 및 외부 장비 성능 테스트를 사용할 수 있습니다 :

▪ **내부 장비 성능 테스트 (기본)**

해당 실험 장비로 스펙트럼을 기록하기 전에 내부 장비 성능 테스트가 성공적으로 수행되어야 합니다.

- 파장 테스트에서는 파장 정확도 및 파장 정밀도가 **TEST WL** 명령을 통해 테스트됩니다. 파장 테스트에서는 계측학적으로 추적 가능한 내부 파장 표준이 사용됩니다.
- 노이즈 테스트에서는 측광 노이즈, 피크 대 피크 노이즈 및 노이즈의 바탕선 바이어스가 **TEST NOISE** 명령을 통해 테스트됩니다.

▪ **외부 장비 성능 테스트 (옵션)**

외부 장비 성능 테스트는 USP <856>, Ph.Eur 2.2.40 및 JP 2.27과 같은 약전에 따른 검증을 지원합니다. 다음 명령이 사용됩니다 :

TEST WL(파장 정확도 및 파장 정밀도), **TEST NOISE**(측광 노이즈, 피트 대 피크 노이즈 및 낮은 광도 및 높은 광도에서의 노이즈 바탕선 바이어스) 및 **TEST PHOTOMETRIC LINEARITY**(측광 선형성)。

이 외부 장비 성능 테스트에서는 계측학적으로 추적 가능한 외부 기준 표준이 요구됩니다 [외부 장비 성능 테스트 \(옵션\) \(참조: 40페이지, 3.3.3장\)](#)。

3.3.1 내부 장비 성능 테스트 준비

아래 지침에 따라 **TEST WL** 및 **TEST NOISE** 명령을 사용하여 method를 생성합니다. 그런 다음 작업 과정, 샘플 프로파일 및 샘플 리스트를 작성합니다. 이를 통해 샘플 측정과 동일한 방식으로 장비 성능 테스트를 시작할 수 있습니다.

method 생성

1 method 만들기

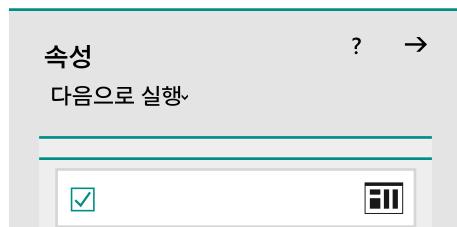
- ▶ **프로세스** ▶ **method**에서 + 클릭하십시오.

2 method 이름 지정

- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- 속성** ▶ **일반사항** 아래에서 **이름** 필드에 다음 이름을 입력합니다:
장비 성능 테스트.

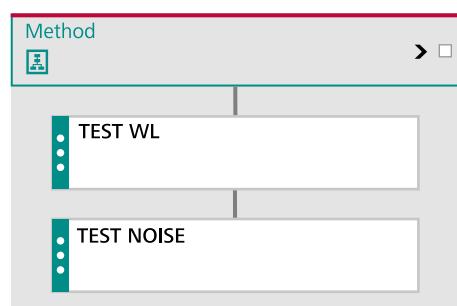
3 method의 작업 시스템 할당

- 속성** ▶ **다음으로 실행**에서 사용될 작업 시스템을 선택합니다.



4 명령 삽입

- 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다.
- Library** ▶ **명령**에서 **TEST WL** 명령을 찾습니다.
- 드래그&드롭 기능을 이용해 **TEST WL** 명령을 method에 삽입합니다.
- TEST NOISE** 명령을 찾아 **TEST WL** 명령으로 정렬합니다.





! 이 명령은 기준 스펙트럼을 자동으로 기록합니다. 따라서 **MEAS REF SPEC** 명령은 필요하지 않습니다.

! 이 장비 성능 테스트에서는 샘플 발표에 따라 각각의 기준 경로가 사용됩니다. 파장 테스트에서는 계측학적으로 추적 가능한 내부 파장 표준이 사용됩니다.

이 외부 장비 성능 테스트(옵션)에서는 외부 기준 표준이 요구됩니다 [외부 장비 성능 테스트\(옵션\) \(참조: 40페이지, 3.3.3장\)](#)。

5 method 저장

- 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다.

작업 과정 작성

1 작업 과정 만들기

- **프로세스** ► **작업 과정**에서 클릭하십시오.

2 작업 과정 이름 지정

- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- **속성** ► **일반사항** 아래에서 **이름** 필드에 다음 이름을 입력합니다:
장비 성능 테스트

3 method 삽입

- 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다.
- **Library** ► **method**에서 드래그&드롭 방식으로 작성된 method를 작업 과정에 삽입합니다.



4 작업 과정 저장

- 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다.



샘플 프로파일 생성

1 샘플 프로파일 만들기

- 샘플 ► 샘플 프로파일에서 클릭하십시오.

2 샘플 프로파일 이름 지정

- 샘플 프로파일 이름 필드에 다음 이름을 입력합니다: **장비 성능 테스트**.



3 샘플 이름의 입력 필드

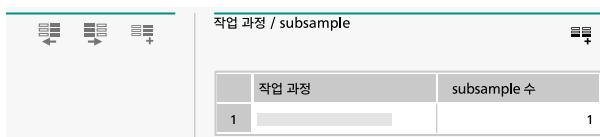
샘플 데이터 영역에는 샘플의 이름을 위한 필드가 포함되어 있습니다 :



- 샘플 이름에 대해 **표준값** 입력합니다.

4 subsample 수 및 작업 과정 정의

- 작업 과정 / **subsample** 영역에서 생성된 **장비 성능 테스트** 작업 과정을 선택합니다.
- subsample 수** 각 샘플에 대해 자동으로 추가된 subsample 수를 지정합니다. **1**을 입력합니다.



5 샘플 프로파일 저장

- ▶을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

샘플 항목 리스트를 생성

1 샘플 리스트 만들기

- ▶ 샘플 ► 샘플 리스트에서 + 클릭하십시오.

2 샘플 리스트 이름 지정

- ▶ 이름 필드에 다음 이름을 입력합니다: 장비 성능 테스트.

샘플 리스트 ~

[Enter]로 점검합니다.

3 샘플 리스트 저장

- ▶▶을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

샘플은 나중에 추가됩니다.

3.3.2 내부 장비 성능 테스트 실행

권장 실행 주기에 유의합니다 장비 성능 테스트 (참조: 147페이지, 10.1장).

장치 성능 테스트를 수행합니다

전제조건:

장치 성능 테스트가 준비되었습니다 내부 장비 성능 테스트 준비 (참조: 35페이지, 3.3.1장).

1 장비를 예약합니다

분광계를 예약합니다 장비 예약 및 릴리스 (참조: 24페이지, 2.4장).

2 '장비 성능 테스트' 샘플 리스트 열기

- ▶ 샘플 작동 범위를 엽니다.

- 샘플 리스트 장비 성능 테스트이 닫히는 경우 샘플 탭에서 샘플 리스트 하위 영역을 열고 샘플 리스트 장비 성능 테스트를 두 번 클릭합니다.

3 샘플 프로파일 '장비 성능 테스트'를 선택합니다

- 아이콘 왼쪽에 있는 선택항목 리스트에서 장비 성능 테스트 샘플 프로파일을 선택합니다.



이후 추가된 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다.

4 샘플 추가

- 아이콘을 클릭하여 새 샘플을 샘플 리스트에 추가합니다.

샘플 리스트에 새 입력이 나타납니다. 여기에는 레이블이 지정된 샘플 및 레이블이 지정된 subsample이 포함됩니다.

샘플 이름	번호	Subsample 이름
사료 1	1	Subsample 1

샘플 프로파일에 따라 새 샘플 1에는 장비 성능 테스트 작업 과정이 사용하는 subsample이 포함되어 있습니다.

- 필요한 경우 샘플 이름 및 subsample 이름을 편집합니다.
- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 눌러 샘플 리스트를 저장합니다.

5 장치 성능 테스트를 수행합니다

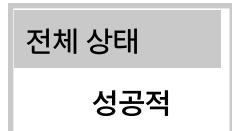
- 장비 성능 테스트를 실시할 샘플을 선택합니다.
- 아이콘을 클릭하여 테스트를 시작합니다.

장비 성능 테스트의 완료 후에 subsample의 상태가 아이콘으로 표시됩니다.

6 결과를 점검합니다

- 오른쪽 하단에 있는 결과들 ► 원시 data 엽니다.

파장 테스트 및 노이즈 테스트 결과가 표시됩니다. 두 테스트의 전체 상태를 점검합니다 :



1 **상태 경고** : 장비 성능 테스트에 실패하는 경우 subsample 아이콘이 샘플 리스트에서 적색으로 표시됩니다 :



1 최근 실행된 장비 성능 테스트에 대한 정보는 장비 속성에서 확인 할 수 있습니다 :

- **장비** ▶ **장비**에서 예약된 장비를 선택합니다.
- **:•=** 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- **고유 데이터** ▶ **보정 data 및 테스트 데이터**

1 **TEST WL** 및 **TEST NOISE** 명령의 **OverallStatus.Result** 변수는 각각 테스트의 전체 상태를 표시합니다 :

- 1: 테스트에 성공했습니다.
- 2: 테스트에 실패했습니다.

1 테스트 실패 시 오류 제거 단계에 유의합니다 [장비 성능 테스트 \(참조: 147페이지, 10.1장\)](#).

3.3.3 외부 장비 성능 테스트 (옵션)

외부 장비 성능 테스트는 USP <856>, Ph.Eur 2.2.40 및 JP 2.27과 같은 약전에 따른 검증을 지원합니다。 계측학적으로 추적 가능한 외부 기준 표준이 요구됩니다。 각각의 외부 기준 표준에 대해 해당 OMNIS 표준물질 파일 (*.ostd)을 OMNIS Software로 가져오기해야 합니다([Metrohm Knowledge Base](#) 참조)。

내부 및 외부 장비 성능 테스트를 서로 독립적으로 실행하기 위해 :

- 별도의 method, 작업 과정 및 샘플 프로파일을 만듭니다.
- 외부 장비 성능 테스트를 위해, 다음 변형 및 보완 사항이 포함된 내부 장비 성능 테스트에서와 같이 진행합니다。

1 이 명령은 기준 스펙트럼을 자동으로 기록합니다。 따라서 **MEAS REF SPEC** 명령은 필요하지 않습니다。

TEST WL

- method에서 **TEST WL** 명령을 삽입하고 선택합니다.
- **:•=** 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.

- 속성 ► parameter ► 측정 parameter에서 측정 parameter를 입력 합니다 :
 - 외부 측정 모드를 선택합니다.
 - Liquid Sample Presentation :
WL Standard Transmission OMNIS NIR 표준을 선택합니다.
 - Solid Sample Presentation :
WL Standard Reflection OMNIS NIR 표준을 선택합니다.

TEST NOISE - 저 플럭스 테스트

- method에서 TEST NOISE 명령을 삽입하고 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.
- 속성 ► parameter ► 측정 parameter에서 측정 parameter를 입력 합니다 :
 - 저 플럭스 테스트 측정 모드를 선택합니다.
 - Liquid Sample Presentation :
ND Standard Transmission 4 (OD 1.0) OMNIS NIR 표준을 선택합니다.
 - Solid Sample Presentation :
ND Standard Reflection 2 (R10) OMNIS NIR 표준을 선택합니다.

TEST NOISE - 고온 플럭스 테스트

- method에서 다른 TEST NOISE 명령을 삽입하고 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.
- 속성 ► parameter ► 측정 parameter에서 측정 parameter를 입력 합니다 :
 - 고온 플럭스 테스트 측정 모드를 선택합니다.
 - Liquid Sample Presentation :
ND Standard Transmission 0 (OD 0) OMNIS NIR 표준을 선택합니다.
 - Solid Sample Presentation :
ND Standard Reflection 5 (R99) OMNIS NIR 표준을 선택합니다.

TEST PHOTOMETRIC LINEARITY

- method에서 TEST PHOTOMETRIC LINEARITY 명령을 삽입하고 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.



- 속성 ► parameter ► 측정 parameter에서 기준 표준을 입력합니다 :

- **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

외부 장비 성능 테스트 실행

i 권장 실행 주기에 유의합니다 **장비 성능 테스트** (참조: 147페이지, 10.1장)。

테스트의 실행을 위해 내부 장비 성능 테스트에서와 같이 진행하십시오.
기준 표준의 배치를 위해 **곡선 및 데이터** ► **라이브 데이터** 영역에 표시되는 지시사항에 따르십시오.

주의사항

잘못된 표준

배치된 표준 및 해당 명령에서 선택된 표준이 일치하지 않는 경우 테스트 결과가 불량합니다.

- 배치된 표준의 일련번호는 **곡선 및 데이터** ► **라이브 데이터** 영역에 표시되는 일련번호와 일치해야 합니다.

4 모델 개발을 준비합니다

Liquid Sample Presentation 타입의 실험 장비를 사용하여 액체 샘플을 위한 모델을 개발할 수 있습니다. **Solid Sample Presentation** 타입의 실험 장비를 사용하여 고체 샘플을 위한 모델을 개발할 수 있습니다.

모델 개발은 교정 샘플과 검증 샘플의 수집으로 시작합니다.

샘플을 수집합니다

모델 개발을 위한 샘플을 신중하게 수집합니다 :

- 샘플은 계절적 변동 또는 환경 조건뿐만 아니라 미래에 예상되는 전형적인 표본 변동을 포함해야 합니다。
- 샘플은 변동 폭에 걸쳐 고르게 분포되어야 합니다。
- 보정 및 검증을 위해 별도의 샘플 세트를 수집하는 것이 좋습니다。
- 모든 샘플은 동일한 방법으로 취급해야 합니다。

수량화

최소 50개의 샘플 또는 첫 번째 모델의 경우 약 20개의 샘플을 Metrohm 사는 추천합니다. 조건, 화학 성분 또는 입자 크기의 변동성이 많을수록 더 많은 샘플이 필요합니다.

1. 각 샘플에 대해 스펙트럼이 삽입됩니다.
2. 각 샘플에 대해 관심있는 parameter의 기준값은 예를 들어 적정을 통해 기준 방법에 의해 측정됩니다.
특정한 관심있는 parameter에 대해 샘플당 여러 개의 기준값이 있는 경우 각 샘플에 대해 기준값의 산술적 평균값을 계산해야 합니다.
이 평균값은 각 샘플의 기준값으로 사용됩니다. 각 평균값은 동일한 수의 기준값에서 형성되어야 합니다. 이 경우 성능지수는 특정 수의 기준값에 비례하여 출력됩니다.

기준 측정 중에 샘플이 변경되지 않거나 파괴되지 않는 경우 측정도 역순으로 수행할 수 있습니다.

동일시

각 제품에 대해 샘플은 예상 변동을 포함해야 합니다. 제품의 샘플 수는 다를 수 있고 최소 샘플 수는 3개입니다.

- 각 샘플에 대해 스펙트럼이 삽입됩니다.
- 샘플의 ID를 알아야 합니다.

검증

보정 샘플은 요구되는 변형을 커버해야 합니다. 보정 데이터 세트에서 샘플의 최소 개수는 3입니다.

옵션으로서 검증 샘플은 각각 포지티브 유효성 검사 데이터 세트 또는 네거티브 유효성 검사 데이터 세트에 할당할 수 있습니다.

- 각 샘플에 대해 하나의 스펙트럼이 기록됩니다.

워크플로우

- i** OMNIS Software의 과정에 대한 설명은 부록을 참조합니다 :
- 보정 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다 ([참조: 165페이지, "보정 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다"](#))
 - 기준값 또는 제품 이름을 삽입합니다 ([참조: 164페이지, "기준값 또는 제품 이름을 삽입합니다"](#))

4.1 스펙트럼 분석 준비

각 보정 샘플 및 검증 샘플에 대해 스펙트럼을 기록해야 합니다。

- i** 각 샘플에 대해 1개의 스펙트럼만 기록합니다。 이질적인 고체의 경우 **멀티 포인트 측정** 옵션을 사용합니다 (s. u.)。

스펙트럼 삽입을 준비하기 위해 method, 작업 과정, 샘플 프로파일 및 샘플 리스트를 다음과 같이 작성합니다。

method 생성

전제조건:

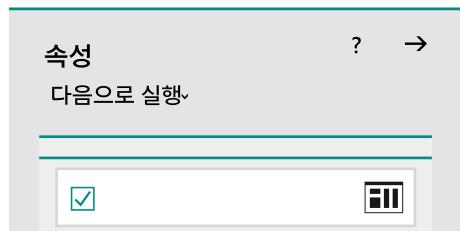
적절한 작업 시스템이 생성됩니다 [작업 시스템 만들기](#) ([참조: 27페이지, 3.1장](#))。

1 방법 생성 및 이름 지정

- 프로세스** ▶ **method**에서 클릭하십시오。
- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- 속성** ▶ **일반사항**아래에서 **이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다。

2 작업 시스템 할당

- 속성** ▶ **다음으로 실행**에서 사용될 작업 시스템을 선택합니다 :
 - 액체 샘플의 경우 **Liquid Sample Presentation** 타입의 실험 장비를 포함하는 작업 시스템을 선택합니다。
 - 고체 샘플의 경우 **Solid Sample Presentation** 타입의 실험 장비를 포함하는 작업 시스템을 선택합니다。



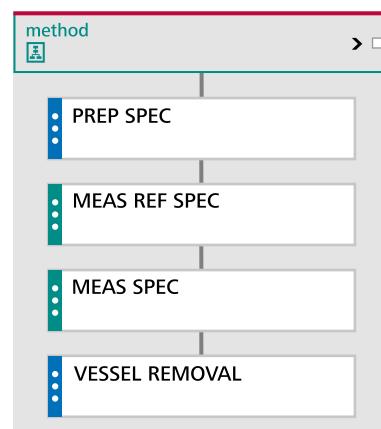
3 명령 삽입

- 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다.
- **Library** ► **명령**에서 다음 명령을 찾아 드래그&드롭 방식으로 method에 추가합니다 :
 - 액체 샘플 발표 전용: **PREP SPEC** 액체 샘플 분석을 준비합니다.
 - **MEAS REF SPEC** 기준 스펙트럼을 삽입합니다.
 - **MEAS SPEC** 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다.
 - 액체 샘플 발표의 경우: **VESSEL REMOVAL** 액체 샘플 발표의 샘플 훌더에서 샘플 용기를 제거된 방식으로 제거하는데 사용됩니다.

올바른 명령 순서를 준수합니다 :

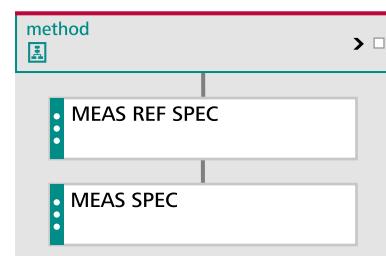
액체 샘플

기본 구조



고체 샘플

기본 구조



i 샘플의 기준 스펙트럼과 삽입된 스펙트럼을 사용하여 샘플의 흡수 스펙트럼을 계산합니다。

i 실험 장비당 1개만 기준 스펙트럼이 있습니다. **MEAS REF SPEC** 명령을 실행할 때마다 이전 기준 스펙트럼을 덮어씁니다. 이런 이유에서 **MEAS SPEC** 명령은 항상 각 실험 장비의 가장 최근에 기록된 기준 스펙트럼을 사용합니다.



속성 ► 일반사항 아래의 각 명령에 의미 있는 이름을 지정할 것을 Metrohm 사는 추천합니다.

4 MEAS SPEC 명령 parameter 설정 (고체 샘플 발표에만 해당)

- **MEAS SPEC** 명령을 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- **속성 ► parameter ► 측정 parameter**에서 측정 parameter를 입력합니다 :
 - 샘플의 측정에 사용되는 훌더를 선택합니다.
 - 측정 횟수를 결정하는 측정 모드를 선택하십시오. 권장 : **멀티 포인트 측정**: 이질성 고체용。
싱글 포인트 측정: 균질성 고체용。
 - 샘플의 측정에 사용되는 샘플 용기를 선택합니다.

5 PREP SPEC 명령 parameter 설정 (액체 샘플 발표에만 해당)

PREP SPEC 명령을 사용하는 경우 온도를 조절할 수 있습니다. 샘플 또는 샘플 훌더의 온도는 25°C에서 80°C 사이의 값으로 조정할 수 있습니다 [온도 조절 \(Liquid Sample Presentation\) \(참조: 25페이지, 2.5장\)](#)。

또한 **PREP SPEC** 명령은 삽입된 샘플 훌더가 지정된 샘플 용기와 일치하는지 점검합니다. 그렇지 않으면 측정이 취소됩니다. 샘플 용기를 사용하지 않은 경우 샘플을 삽입하라는 메시지가 표시됩니다.

- **PREP SPEC** 명령을 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- **parameter** 하위 영역을 엽니다.
 - **샘플 용기**에서 사용된 샘플 용기의 타입과 정확한 이름을 선택합니다.
 - **온도 조절**에서 온도 조절을 켜거나 끕니다. 필요한 경우 온도 조절 위치와 설정 온도를 지정합니다. 샘플의 온도를 조절하려면 **샘플 용기** 옵션을 선택합니다.
 - 주의사항 : 설정 온도는 주변 온도를 기준으로 최대 5.0 K 아래에 있어야 합니다.
 - 필요한 경우 관련 **VESSEL REMOVAL** 명령을 선택합니다.

1 주의사항

온도 센서 손상

샘플 용기의 온도가 조절되는 한 온도 센서는 샘플 용기와 직접 접촉합니다. 온도 센서를 손상시키지 않으려면 샘플 용기를 제거하기 전에 온도 센서를 샘플 용기 밖으로 이동시켜야 합니다. **VESSEL REMOVAL** 명령을 사용하여 이 작업을 수행할 수 있습니다.



6 VESSEL REMOVAL 명령 parameter 설정 (액체 샘플 발표에만 해당)

VESSEL REMOVAL 명령은 샘플 용기의 제거를 확인할 수 있습니다. 샘플 용기가 제거될 때까지 프로세스가 중단됩니다. 이를 통해 시리즈 분석의 경우 조절된 과정을 수행할 수 있습니다.

샘플 용기의 온도가 조절되는 경우 온도 센서가 샘플 용기에서 멀리 이동합니다. 샘플 용기를 제거하라는 메시지가 나타나는 경우 온도 센서를 손상시키지 않고 샘플을 채취할 수 있습니다.

온도 조절은 비활성화하거나 샘플 홀더에서 계속할 수 있습니다.

- **VESSEL REMOVAL** 명령을 선택합니다.
-  버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- **parameter** 하위 영역을 엽니다.
 - **샘플 용기의 제거 확인** 옵션을 활성화합니다. 이렇게 하면 프로세스가 중단되고 사용자가 샘플 홀더에서 샘플 용기를 꺼낼 수 있습니다. 샘플을 채취하는 즉시 프로세스가 계속 됩니다.
 - **샘플 홀더 온도 조절** parameter의 경우 **계속 진행** 옵션을 활성화합니다. 이렇게 하면 샘플 홀더의 기존 온도 조절이 계속되고 이전 온도 조절 위치와 무관합니다.

7 method 저장

- 를 클릭하여 method를 점검합니다.
- 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 눌러 method를 저장합니다.

작업 과정 작성

1 작업 과정 만들기

- **프로세스** ▶ **작업 과정**에서  클릭하십시오.

2 작업 과정 이름 지정

-  버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다.
- **속성** ▶ **일반사항**아래에서 **이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

3 method 삽입

-  버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다.

- **Library ▶ method**에서 드래그&드롭 방식으로 작성된 method를 작업 과정에 삽입합니다.



4 작업 과정 저장

- **S**을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

샘플 프로파일 생성

1 샘플 프로파일 생성 및 이름 지정

- **샘플 ▶ 샘플 프로파일**에서 **+ 클릭하십시오.**
- **샘플 프로파일의 이름** **샘플 프로파일의 이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

2 샘플 이름의 입력 필드

샘플 데이터 영역에는 샘플의 이름을 위한 필드가 포함되어 있습니다 :

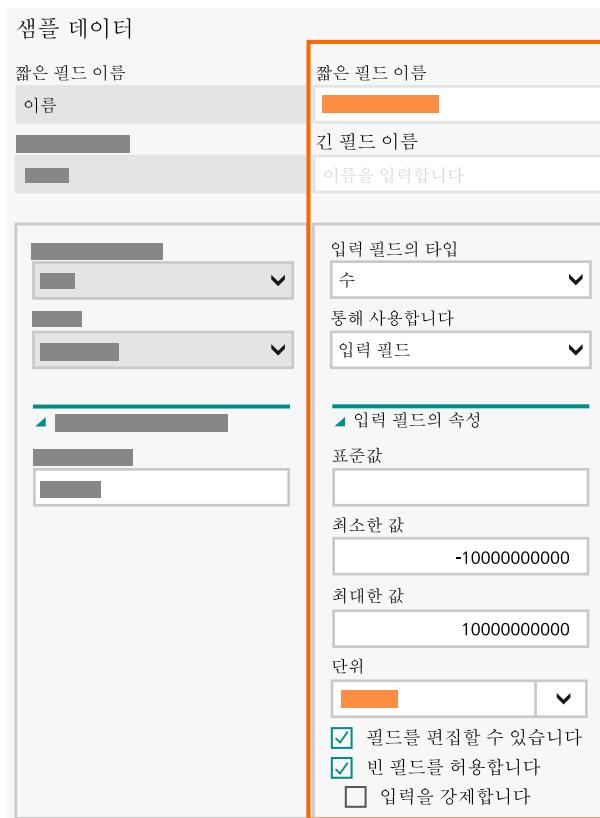


- 샘플 이름에 대해 **표준값** 입력합니다.

3 정량화에 대해: 기준 parameter에 대한 입력 필드를 추가합니다

i 샘플 데이터만 기준 parameter로 사용할 수 있으며 subsample data는 사용할 수 없습니다.

- **샘플 데이터** 영역에서  아이콘을 클릭해 입력 필드를 추가합니다.
새 입력 필드가 우측에 추가됩니다.
 - **짧은 필드 이름**: 샘플 리스트의 열 머리글에 사용할 이름을 입력합니다.
 - **긴 필드 이름**: 선택적으로 리포트의 이름으로 사용할 이름을 입력합니다.
- 주의사항:** 긴 필드 이름 필드가 빈 경우 리포트에는 짧은 필드 이름 필드에 있는 이름이 사용됩니다.
- **입력 필드의 타입** : 숫자。
 - **다음으로 사용** : 입력 필드
 - **입력 필드 속성** 섹션에서 :
 - **빈 필드 허용** 체크박스를 활성화시킵니다。
 - **강제 입력** 체크박스를 비활성화시킵니다。
 - **표준값** 필드를 비워 두십시오。
 - **단위** 입력하여 참조 기준 parameter를 지정합니다。
 - 옵션으로서 입력 필드의 **최소값** 및 **최대값**을 변경합니다。
 - 입력 필드를 편집하기 위해서는 **필드 편집 가능** 체크박스가 활성화된 상태여야 합니다。



1 여러 기준 parameter

두 개 이상의 관심있는 parameter를 예측해야 하는 경우 각 기준 parameter에 대해 별도의 입력 필드를 추가해야 합니다 [여러 관심있는 parameter \(수량화\) \(참조: 145페이지, 9.3장\)](#)。

1 입력 필드를 삭제하는 경우 마우스 오른쪽 버튼으로 **짧은 필드 이름** 버튼을 클릭하고 [입력 필드 삭제] 컨텍스트 메뉴를 선택합니다.

4 식별 및 검증을 위해 : 제품 parameter를 위한 입력 필드 추가

1 샘플 데이터만 제품 parameter로 사용할 수 있으며 subsample data는 사용할 수 없습니다.

- **샘플 데이터** 영역에서 아이콘을 클릭해 입력 필드를 추가합니다.
새 입력 필드가 우측에 추가됩니다.
- **짧은 필드 이름**: 샘플 리스트의 열 머리글에 사용할 이름을 입력합니다.
- **긴 필드 이름**: 선택적으로 리포트의 이름으로 사용할 이름을 입력합니다.
주의사항: **긴 필드 이름** 필드가 빈 경우 리포트에는 **짧은 필드 이름** 필드에 있는 이름이 사용됩니다.

제품 이름은 샘플 리스트에 텍스트 또는 목록 선택으로 입력할 수 있습니다. 나중에 검증을 실시하는 경우에는 목록 선택을 사용하십시오.

텍스트 필드에 제품 이름을 입력합니다:

- **입력 필드의 타입** : 텍스트。
- **다음으로 사용** : 제품
- 필요에 따라 **입력 필드 속성** 섹션을 완료합니다.

목록에서 제품 이름 선택:

- **입력 필드의 타입** : 선택 목록。
- **다음으로 사용** : 제품
- **입력 필드 속성** 섹션에서 제품 이름을 모델에서 선택하거나 또는 수동으로 추가합니다 :
 - **요소 선택**: **요소를 선택합니다** 버튼을 클릭합니다. 식별 모델 또는 모델 계층 구조를 선택합니다. **선택함** 버튼을 클릭해 모델의 제품 이름을 적용합니다.
 - **수동으로 요소 추가**: **리스트 엘리먼트**에서 원하는 제품 이름을 입력하고 입력된 각 제품 이름을 **+** 버튼을 클릭해 추가합니다.
- 사전에 정의된 목록 요소에 추가적으로 자유 텍스트의 입력도 가능해야 하는 경우 **자유로운 텍스트를 허용됩니다** 체크박스를 활성화시킵니다.
- 필요에 따라 추가 설정을 수행합니다.

텍스트 필드에 제품 이름을 입력합니다

샘플 데이터

짧은 필드 이름
긴 필드 이름
이름을 입력합니다

입력 필드의 타입
텍스트
통해 사용합니다
제품

▲ 입력 필드의 속성
표준값
☒ 펠드를 편집할 수 있습니다
☒ 빈 필드를 허용합니다
☐ 입력을 강제합니다

목록에서 제품 이름 선택

샘플 데이터

짧은 필드 이름
긴 필드 이름
이름을 입력합니다

입력 필드의 타입
선택항목 리스트
통해 사용합니다
제품

▲ 입력 필드의 속성
요소를 선택합니다
리스트 요소
이름을 입력합니다
제품 A
제품 B
제품 C

표준값
비다
☐ 자유로운 텍스트를 허용합니다
☒ 빈 필드를 허용합니다
☐ 입력을 강제합니다

5 subsample 수 및 작업 과정 정의

- 작업 과정 / **subsample** 영역에서 생성된 작업 과정을 선택합니다.
- subsample 수 각 샘플에 대해 자동으로 추가된 subsample 수를 지정합니다. **1**을 입력합니다.

작업 과정 / subsample	
작업 과정	subsample 수
1	1

6 샘플 프로파일 저장

- ▣ 아이콘을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

여러 개의 샘플 프로파일이 필요한 경우 (예를 들어 다른 제품의 경우) :

1. 이미 생성된 샘플 프로파일을 **샘플** ▶ **샘플 프로파일**에서 선택합니다.
2. **▣** 아이콘을 클릭하여 선택된 샘플 프로파일을 복제합니다.

3. 복제된 샘플 프로파일을 열고 필요한 조정을 수행합니다.

샘플 항목 리스트를 생성

1 샘플 리스트 생성 및 이름 지정

- 샘플 ► 샘플 리스트에서 + 클릭하십시오.
새 탭이 열립니다.
- 이름 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

샘플 리스트 ~

2 샘플을 추가합니다

- + 아이콘 왼쪽에 있는 선택항목 리스트에서 생성된 샘플 프로파일을 선택합니다.



게다가 추가된 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다。

- + 아이콘을 클릭하여 새 샘플을 샘플 리스트에 추가합니다. 필요한 만큼 샘플을 추가합니다.
- 샘플 리스트의 각 행에는 아이콘으로 표시된 샘플이 포함되어 있습니다. 오른쪽에는 샘플 데이터가 있습니다. 그런 다음 표시된 부분 샘플과 부분 샘플 데이터가 표시됩니다.
- 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다 :
 - 수량화: 단위가 정의된 경우 기준 parameter 및 해당 단위에 대해 정의된 입력 필드.
 - 동일시 및 검증: 제품 parameter를 위한 정의된 입력 필드 포함.
 - 각 샘플에 정의된 작업 과정을 사용하는 1개의 subsample이 포함되어 있습니다.

번호	샘플 이름	기준 parameter의 이름	번호	Subsample 이름	작업 과정
1	시료 1	%	1	Subsample 1	
2	시료 2	%	2	Subsample 2	
3	시료 3	%	3	Subsample 3	

그림 5 샘플 리스트(수량화의 예)

- 필요한 경우 샘플 이름 및 subsample 이름을 편집합니다.
- 기준값(수량화) 또는 제품 이름(동일시, 검증)을 이미 알고 있는 경우 이것을 해당 필드에 입력합니다.

3 샘플 리스트 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.



여러 개의 샘플 리스트가 필요한 경우 (예를 들어 다른 제품의 경우) :

1. 이미 생성된 샘플 리스트를 **샘플 ► 샘플 리스트**에서 선택합니다.
2. 클릭하여 선택한 샘플 리스트를 복제합니다.
3. 복제된 샘플 리스트를 열고 필요한 조정을 수행합니다.

i 기준값 또는 제품 이름을 샘플 리스트에 입력할 수도 있습니다

(*Metrohm Knowledge Base* 참조).

- 예를 들어, 측정 중에 수동으로 요청 창에 있습니다.
- 또한 기준 방법을 사용하여 후속 또는 이전 측정에서 자동으로 수량화할 수 있습니다.

샘플 리스트는 프로세스는 스펙트럼을 기록할 준비가 되어 있습니다 [스펙트럼 기록](#) (참조: 54페이지, 4.2장).

4.2 스펙트럼 기록

경고

가열된 표면에 있는 가연성 물질

인화성 물질이 누출될 경우 화재 및 화상 위험이 있습니다. 샘플은 최대 80°C의 온도로 가열할 수 있습니다.

- 발화원을 방지하십시오.
- 접지 보호 장치를 사용하십시오.
- 흡입 장치를 사용하십시오.
- 유출된 액체 및 고체 물질은 즉시 제거하십시오.

주의

가열에 의한 샘플의 볼륨 확장

샘플 용기의 오버플로 또는 파손 또는 튕겨나오는 마개로 인한 부상 및 건강 위험.

- 샘플 용기는 2 cm의 최소 높이까지만 채웁니다. 액체가 남은 공기 부피에서 팽창할 수 있습니다.
- 또는 모세관 구멍이 있는 마개를 사용합니다.
- 샘플 용기가 손상되지 않도록 마개를 부드럽게 누릅니다.

주의

뜨거운 시료 바이알

가열된 표면 또는 가열된 액체와 접촉하여 피부를 태우는 것. 샘플 홀더, 시료 바이알 및 샘플은 최대 80 °C의 온도로 가열될 수 있습니다.

- 개인 보호 장비 및 내열 보호 장갑을 착용하십시오.
- 유출된 액체 및 고체 물질은 즉시 제거하십시오.



모델 개발을 위한 스펙트럼 기록

전제조건:

- 스펙트럼 삽입이 준비되었습니다 [스펙트럼 분석 준비 \(참조: 44페이지, 4.1장\)](#)。
- 분광계를 예약하지 않습니다 [장비 예약 및 릴리스 \(참조: 24페이지, 2.4장\)](#)。
- 올바른 샘플 훌더가 사용됩니다。 샘플 훌더는 사용할 샘플 용기와 일치해야 합니다。

1 샘플 리스트 열기

- 샘플** 작동 범위를 엽니다。
- 샘플 리스트를 닫은 경우 **샘플** ► **샘플 리스트**에서 샘플 리스트를 두 번 클릭합니다。

i 수량화: 이 시점에는 기준 parameter의 입력 필드가 아직 비어 있을 수 있습니다. 기준값은 스펙트럼 획득 후 측정하고 입력할 수 있습니다。
동일시 및 검증: 동일시는 스펙트럼 기록 전 또는 후에 입력할 수 있습니다。

2 다른 샘플 추가 (옵션)

추가 샘플이 필요한 경우 :

-  아이콘 왼쪽에 있는 선택항목 리스트에서 생성된 샘플 프로파일을 선택합니다。



이후 추가된 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다。

-  클릭하여 샘플 리스트에서 새 샘플을 추가합니다。
- 필요한 경우 샘플 이름 및 subsample 이름을 편집합니다。
-  아이콘을 클릭하여 샘플 리스트를 저장합니다。

3 측정을 시행

주의사항

샘플 용기의 온도 조절 시 온도 센서가 손상되었습니다

센서가 샘플 용기와 직접 접촉하는 동안 샘플 용기를 제거하는 경우 센서가 손상될 수 있습니다。

- 측정이 완료되고 온도 센서가 샘플 용기 밖으로 이동된 후에만 샘플 용기를 제거합니다。



- 다음 subsample 중 하나를 사용하여 분석할 subsample을 선택합니다 :
 - 아이콘을 클릭하여 subsample을 선택합니다.
 - 분석을 위해 subsample의 단일 셀을 선택하는 경우 총분합니다.
 - 적절한 물리적 샘플을 준비합니다.
샘플 용기를 샘플 홀더에 삽입합니다.
 - 클릭하여 측정을 시작합니다. 버튼의 숫자는 실행할 subsample 수를 나타냅니다.
 - subsample에 할당된 작업 과정이 시작됩니다。상황에 따라 **곡선 및 데이터 ► 라이브 데이터** 영역에 표시되는 지시내용에 따르십시오。샘플 용기의 온도가 조절되는 경우, 요청 메시지가 표시된 후에 비로소 샘플 용기를 꺼내십시오。
- 분석이 성공적으로 완료되는 경우 subsample의 상태가 표시됩니다。
- 다른 모든 샘플에 대해 동일한 방법으로 측정을 시행합니다。

i 설정 온도는 주변 온도를 기준으로 최대 5.0 K 아래에 있어야 합니다。

i 시리즈 분석 생산에 적합한 경우 여러 subsample을 동시에 선택 할 수 있습니다。또는 샘플 리스트의 모든 실행 가능한 subsample이 시작됩니다。

- 액체 샘플: **VESSEL REMOVAL** 명령을 사용하는 경우 시리즈 분석을 사용할 수 있습니다。
- 고체 샘플: 시리즈 분석을 수행하려면 사용자 작업이 필요합니다(예를 들어 **WAIT** 명령 사용)。

스펙트럼의 육안 검사

스펙트럼의 육안 검사를 통해 노이즈가 많은 파장범위와 잘못된 측정을 식별할 수 있습니다。

전제조건:

subsample의 분석이 성공적으로 완료되었습니다。

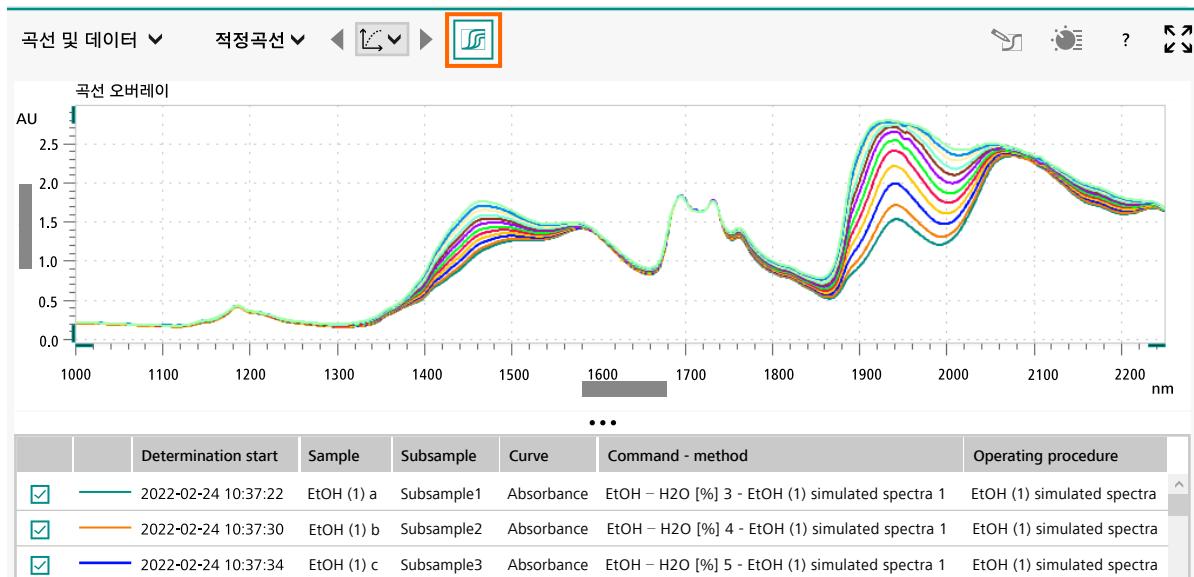
1 '적정곡선' 하위 영역 열기

- 좌측 하단 샘플 리스트의 탭에서 **곡선 및 데이터 ► 적정곡선**을 엽니다。



2 스펙트럼 표시 및 점검

- 단일 스펙트럼을 표시합니다 :
 - 샘플 리스트에서 해당 subsample을 선택합니다 ( 아이콘으로 표시됨)。
- 여러 스펙트럼을 표시합니다 :
 -  클릭하여 곡선 오버레이를 활성화합니다.
 - 샘플 리스트에서 [CTRL] 또는 [SHIFT] 버튼을 이용해 여러 subsample을 선택합니다.
- 스펙트럼을 점검합니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)。



기준값(수량화) 및 제품 이름(동일시, 검증)

1 기준 방법(수량화)

- 예를 들어 적정을 사용하여 샘플의 기준값을 측정합니다。

2 기준값 또는 제품 이름 입력

- 샘플 리스트의 해당 필드에 기준값 또는 제품 이름을 입력합니다。

샘플 리스트에 샘플 데이터 추가

측정 시작 시 기준 parameter 또는 제품 parameter에 대한 샘플 데이터가 아직 없는 경우, 입력 필드를 다음과 같이 추가할 수 있습니다 :

-  아이콘을 클릭하여 입력 필드를 추가할 샘플을 선택합니다。
다. 모든 샘플을 선택하려면  아이콘을 클릭합니다.
- 선택된 샘플을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하여 컨텍스트 메뉴를 열고 **샘플 데이터 추가** 선택합니다.
- 기준 parameter 또는 제품 파라미터에 대한 샘플 데이터를 추가합니다 [스펙트럼 분석 준비 \(참조: 44페이지, 4.1장\)](#)。

3 샘플 리스트 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

여러 개의 샘플 리스트를 준비한 경우 위에 설명된 대로 각 샘플 리스트를 처리합니다。

수량화 : 정량화 모델을 개발하는 경우에는 [정량화 모델을 이용해 계속 진행합니다\(장 5, 페이지 59.\)](#)。

식별, 검증 : 식별 모델을 개발하는 경우에는 [식별 모델로 계속 진행합니다\(장 6, 페이지 93.\)](#)。

검증 : 검증 모델을 개발하는 경우에는 [검증 모델로 계속 진행합니다\(장 7, 페이지 110.\)](#)。

5 정량화 모델

5.1 정량화 모델 만들기

i OMNIS Software의 과정에 대한 설명은 부록을 참조합니다([참조: 166 페이지, "모델 개발"](#))。

i **여러 관심있는 parameter**

각 샘플에 대해 두 개 이상의 관심있는 parameter를 예측하려면 각 모델에 대해 별도의 모델을 만듭니다 [여러 관심있는 parameter \(수량화\)](#) ([참조: 145페이지, 9.3장](#)).

정량화 모델 만들기

전제조건:

- 모델 개발을 위한 스펙트럼을 삽입했습니다 [스펙트럼 기록](#) ([참조: 54페이지, 4.2장](#)).

1 정량화 모델을 생성 및 이름을 지정

- 모델 ► 정량화 모델**에서 클릭하십시오.
새 정량화 모델이 새 탭에 나타납니다.
- 정량화 모델의 이름** 입력 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

2 샘플 및 기준 parameter 선택함

- 샘플 리스트** 클릭하여 모든 샘플 리스트를 표시합니다.
- 모델 개발을 위해 준비된 모든 샘플 리스트를 선택합니다.

정량화 모델 생성

정량화 모델의 이름

샘플 리스트	검색	XDS-/DS- 가져오기
EtOH (1) simulation EtOH (2) simulation My sample list		
기준 parameter	단위	
H2O	%	

- !** 샘플은 검색을 통해 선택할 수도 있습니다。
필요한 경우 XDS 및 DS 장비에서 샘플을 가져올 수도 있습니다
[XDS/DS Analyzer\(수량화\)를 변경합니다\(참조: 160페이지, 11.6장\)](#).

- !** 샘플 선택은 나중에 조정할 수 있습니다。

- **기준 parameter** 목록에서 기준 parameter로 적합한 모든 샘플 데이터가 표시됩니다。
모델을 개발할 기준 parameter를 선택합니다。 기준 parameter의 이름이 다른 경우 모든 이름을 선택합니다。
- [다음] 클릭하십시오。

3 기준 parameter 정의

- **기준 parameter** 목록에서 이전 단계에서 선택한 기준 parameter의 모든 이름이 표시됩니다。
이 목록에서 필요한 모든 이름을 선택합니다。

기준 parameter를 정의합니다

정량화 모델의 이름

기준 parameter		단위	기준 parameter의 이름
H2O	%		H2O
		기준 parameter의 이름	%
		소수점 위치	2

- **기준 parameter의 이름** 필드에 모델이 사용할 이름을 입력합니다。
- 모델이 사용할 **기준 parameter의 단위** 선택합니다。
- 결과를 표시할 **소수점 위치** 수를 입력합니다。

기준 parameter의 선택된 이름을 갖는 모든 스펙트럼이 모델에 추가됩니다。

4 자동 또는 수동 모델 개발

- !** 모델을 자동으로 개발해야 하지만 먼저 샘플 선택을 조정해야 하는 경우 수동 모델 개발을 계속합니다。

- **자동 모델 개발**
OMD(OMNIS Model Developer) 및 선택한 샘플을 사용한 자동 모델 개발。 자동 모델 개발에 이어서 모델의 계시, 검증 또는 계속 개발을 수행할 수 있습니다。
 - [OMD 시작] 클릭하십시오。
OMD 지속의 시간은 스펙트럼의 수에 따라 달라집니다。
 - [장5.2, 자동 모델 개발- OMD, 쪽 61](#) 계속。

▪ 수동 모델 개발

- [만들기] 클릭하십시오。
새 모델이 탭에서 열립니다.
- 모델 저장: 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.
- [장 5.3, 수동 모델 개발, 쪽 64](#) 계속。

5.2 자동 모델 개발 - OMD

OMD (OMNIS Model Developer)는 정량화 모델 개발을 자동화하며 가장 적합한 모델의 선택을 표시하고 그 예측력을 평가합니다.

전제조건:

OMD는 **[OMD 시작]** 시작되었습니다.

1 계산된 정량화 모델을 점검합니다

계산이 완료되는 경우 OMD는 5가지 모델을 선택합니다.

계산된 값 정량화 모델		소수점 위치			
정량화 모델의 이름		4			
모델#	▲	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

모델은 예측력에 맞추어 정렬됩니다. 각 모델에 대한 성능지수가 표시됩니다.

모델의 왼쪽 표에 다음과 같은 색상이 표시됩니다 :

- **녹색**으로 표시된 모델은 예측력이 우수합니다. 샘플 수가 충분히 많은 경우 동일한 타입의 알려지지 않은 모든 샘플에서 모델이 잘 작동합니다. 성능지수는 미래의 오류에 대한 신뢰할 수 있는 추정치를 제공합니다.
- **노란색**으로 표시된 모델에는 평균 예측력이 있습니다. 샘플 수가 충분히 많은 경우 모델의 성능이 우수할 것으로 예상됩니다. 성능지수는 향후 샘플에 대해 지나치게 낙관적일 수 있습니다. 별도의 검증이 권장됩니다.
- **빨간색**으로 표시된 모델은 예측력이 부족합니다. 그 모델에는 심각한 결함이 있습니다. 그것은 사용해서는 안 됩니다.

 정량화 모델을 개선할 수 있는 경우 모델 툴팁에 제안이 표시됩니다.

2 성능지수를 점검합니다

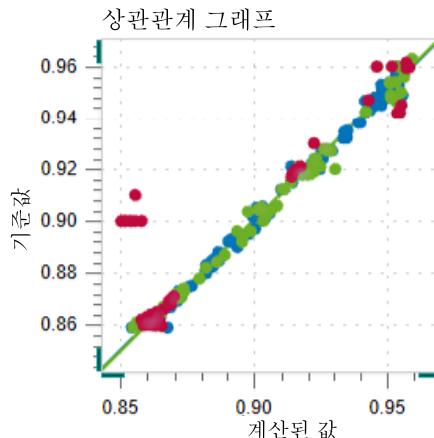
각 모델에 대해 다음과 같은 표준 오류가 표시됩니다 :

- **SEC**: 보정의 표준 오차。
 - **SECV**: 교차 검증의 표준 오차。
 - **SEP**: 예측의 표준 오차。 이 숫자는 알 수 없는 샘플을 분석할 때 예측 오차의 가장 좋은 추정치입니다。 SEP는 유효성 검사 데이터 세트를 사용할 수 있는 경우에만 표시됩니다。
- 주의사항**: 이상값 검출 후에 최소 100개의 스펙트럼이 남아 있는 경우에만 OMD에서 유효성 검사 데이터 세트가 생성됩니다。

모델 1은 예측 능력이 가장 뛰어나지만 표준 오차가 가장 작은 것은 아닙니다。

3 상관 관계 차트를 점검합니다

개별 모델을 클릭하면 관련된 상관관계 그래프 표시됩니다。



상관관계 그래프 사용하는 경우 모델의 성능을 한 눈에 평가할 수 있습니다。 다이어그램은 모델에서 계산된 값(x축)과 기준 값(y축) 사이의 상관 관계를 보여 줍니다。

각 점은 샘플을 나타냅니다 :

- 파란색 점은 보정 데이터 세트의 샘플을 나타냅니다。
- 녹색 점은 유효성 검사 데이터 세트의 샘플을 나타냅니다(있는 경우)。
- 빨간색 점은 특이값 데이터 세트의 샘플을 나타냅니다(있는 경우)。

따라서 회귀선은 파란색 또는 파란색으로 표시됩니다. 녹색 점은 기준값과 계산된 값 사이의 관계를 가능한 한 잘 설명하는데 사용됩니다。

상관관계 그래프를 평가합니다

- 파란색과 녹색 회귀선의 기울기는 가능한 한 1에 가깝고 y 축 절편은 0에 가까워야 합니다.
- 파란색과 녹색 점은 해당 회귀선에 가능한 가깝게 배치해야 합니다.

 회귀선과 점이 겹칠 수 있습니다.

4 모델을 검증, 개발 또는 게시

 재평가 및 측정을 위해 모델을 사용하기 위해서는 모델을 게시해야 합니다.

5가지 모델 중 하나를 직접 게시합니다

- 모델을 생성할 때 OMD가 시작된 경우 :
 - 모델을 선택하고 [저장 및 게시] 클릭합니다. 나머지 4개 모델은 폐기됩니다.
 - **모델 ▶ 정량화 모델** 아래에 가장 최근에 게시된 버전이 표시됩니다.
이제 **PREDICT** 명령은 모델의 게시된 버전에 액세스할 수 있습니다.
- 열린 모델에서 OMD가 시작된 경우 :
 - 모델을 선택하고 [편집] 클릭합니다.
 - 모델 저장: 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다.
 - [장5.4, 정량화 모델 게시, 쪽85](#) 계속。

하나 이상의 모델을 검증하거나 개발합니다

- 하나 이상의 모델을 선택합니다. 여러 항목을 선택하려면 **[SHIFT]** 버튼 또는 **[CTRL]** 버튼을 사용합니다.
- **[편집]** 클릭하십시오.
선택한 각 모델이 새 탭에서 열립니다.
- 새 모델 저장: 해당 탭에서 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다.
- [장5.3, 수동 모델 개발, 쪽64](#) 계속。

5.3 수동 모델 개발

5.3.1 샘플 선택 및 데이터 세트 분할

정량화 모델 탭의 최상단에는 **탐색기**라는 수평 탐색 막대가 표시됩니다.
탐색기는 다른 단계를 통해 모델 개발을 수행합니다.



샘플 선택

정량화 모델의 parameter 지정

정량화 모델 검증

i 스펙트럼의 표시

3개의 프로세스 단계에서 개별 스펙트럼이 곡선, 점 또는 테이블 라인의 형태로 나타난다.
선택된 스펙트럼은 모든 표시 및 모든 프로세스 단계에서 동시에 강조됩니다.

i 표 및 다이어그램

표 및 다이어그램의 처리 방법은 부록에 설명되어 있습니다 :

- 표 처리 [표 처리 \(참조: 149페이지, 11.2장\)](#)
- 다이어그램 처리 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)

프로세스 단계 샘플 선택

스펙트럼 목록 영역에는 선택한 샘플의 스펙트럼이 표시되어 있습니다 :

스펙트럼 목록				
	샘플 이름	subsample 이름	출처	
				H2O

입력 필드에는 해당 기준값이 각각 표시됩니다(그림에 주황색으로 표시됨)。

샘플 선택 프로세스 단계를 통해 다음과 같은 작업을 수행할 수 있습니다 :

- **샘플 선택기를 조정합니다**
스펙트럼을 추가하거나 삭제합니다.

■ 데이터 세트 분할

데이터 세트의 자동 또는 수동 분할 :

- **보정 데이터 세트**: 모델은 보정 데이터 세트의 스펙트럼 및 기준 값을 사용하여 계산됩니다.
- **유효성 검사 데이터 세트**: 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼 및 기준값은 모델 검증에만 사용됩니다.
- **특이값 데이터 세트**: 특이값 데이터 세트는 모델 또는 모델 검증에 영향을 미치지 않습니다. 특이값은 일부 다이어그램에만 표시됩니다.

i 예를 들어 첫 번째 단계에서 제한된 수의 샘플만 사용할 수 있는 경우 유효성 검사 데이터 세트 없이 모델을 개발할 수 있습니다.

샘플 선택 조정 (옵션)

전제조건 :

- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [정량화 모델 만들기\(참조: 59페이지, 5.1장\)](#)。
- 탐색기가 **샘플 선택** 프로세스 단계에 있음。

1 스펙트럼 추가 또는 삭제

샘플 선택 및 기준 parameter는 언제든지 **스펙트럼 목록** 범위에서 조정할 수 있습니다 :

- 스펙트럼 목록에 추가할 샘플을 선택하려면 아이콘을 클릭합니다.
- 스펙트럼 목록에서 스펙트럼을 제거하는 경우 스펙트럼을 선택합니다 아이콘을 클릭합니다.
주의사항: 스펙트럼을 포함한 관련 샘플은 데이터베이스에 유지됩니다.
- 다음을 변경하는 경우 아이콘을 클릭합니다 :
 - 기준 parameter의 단위 또는 이름
 - 기준 parameter의 명칭 선택
 - 기준 parameter 모든 결과의 소수점 자리수

i 스펙트럼의 기준값을 편집해야 하는 경우 샘플 리스트 또는 검색을 열고 기준값을 두 번 클릭합니다.

2 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

자동 모델 개발로 전환합니다

이 탭의 추가 설정은 OMD (OMNIS Model Developer)에 영향을 미치지 않습니다. 따라서 여기서 자동 모델 개발로 전환할 수 있습니다 :

- 필요한 경우 히스토그램에서 기준값의 균일한 분포를 점검합니다
([참조: 69페이지, "히스토그램"](#))。
- OMD는 독립적으로 특이값을 찾고 모델 개발에서 이를 제외합니다。

그럼에도 불구하고 특이치를 수동으로 제외하려면 샘플 리스트에서 해당 특이값을 제거해야 합니다. 특이값 데이터 세트에 대한 할당은 OMD에 영향을 미치지 않습니다.

- [[\[OMD 시작\]](#)] 클릭하십시오.

OMD 지속의 시간은 스펙트럼의 수에 따라 달라집니다.

이상값 검출을 위한 특이값 레벨

전제조건

- [모델](#) 작업 영역에서 정량화 모델이 열려 있습니다 [정량화 모델 만들기](#) ([참조: 59페이지, 5.1장](#))。

1 모델의 속성 편집

-  버튼을 클릭하여 [속성](#) 창을 엽니다.
- [속성](#) ▶ [parameter](#) ▶ [이상치 한계](#)에서 이상값 검출을 위해 [특이값 레벨](#) 측정합니다. 특이값 레벨이 높을수록 더 많은 스펙트럼 특이값이 감지됩니다. 일반적인 값은 5 % 또는 1 %입니다.
- 특이값 레벨이 다음과 같이 사용됩니다 :
 - 모델 개발 중 옵션인 자동 이상값 검출은 특이값 레벨 시 이상값 검출(s. u.)을 고려합니다.
 - 샘플 특성 예측에서 이상값 검출은 모델 게시 시점에 특이값 레벨을 고려합니다.

2 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다.

특이값 데이터 세트 및 유효성 검사 데이터 세트 측정

이상값 검출을 사용하는 경우 특이값 데이터 세트를 자동으로 생성할 수 있습니다. 나머지 스펙트럼은 보정 데이터 세트와 유효성 검사 데이터 세트로 자동 분할할 수 있습니다.

보정 및 검증을 위해 별도의 샘플을 수집한 경우 샘플을 수동으로 할당할 수 있습니다.

전제조건:

- **모델** 작업 영역에서 모델이 열립니다 [정량화 모델 만들기 \(참조: 59페이지, 5.1장\)](#)。
- 탐색기가 **샘플 선택** 프로세스 단계에 있음。

1 데이터 세트 분할을 호출합니다

- **스펙트럼 목록** 영역에서 버튼을 클릭합니다.
- 데이터 세트의 분할** 대화상자가 열립니다.

2 특이값 데이터 세트를 가져옵니다

- 특이값 데이터 세트에 스펙트럼을 자동으로 할당하려면 **특이값 측정** 토글스위치를 활성화합니다. 자동 이상값 검출은 다음과 같은 타입의 특이값을 감지합니다 :
 - 스펙트럼의 편차로 인한 스펙트럼 특이값
 - 기준값의 이상 징후로 인한 기준값 특이값

필요한 경우 **특이값 레벨** 조정합니다. 특이값 레벨이 높을수록 더 많은 스펙트럼 특이값이 감지됩니다. 일반적인 값은 5 % 또는 1 %입니다.

3 유효성 검사 데이터 세트 측정

자동 분할은 보정 데이터 세트와 유효성 검사 데이터 세트가 모집단을 대표하고 서로 독립적이라는 것을 보장합니다.

- 유효성 검사 데이터 세트에 스펙트럼을 자동으로 할당하려면 **유효성 검사 데이터 세트 측정** 토글스위치를 활성화합니다.
 - **백분율** 필드에서 유효성 검사 데이터 세트에 사용할 스펙트럼의 백분율을 정의합니다, 예를 들어: 20 % 및 30 %。

4 옵션을 결정

데이터 세트 할당 옵션을 측정합니다 :

- **파라미터화를 선택합니다**: 데이터 전처리 및 파장 선택을 스펙트럼에 적용합니다 [정량화 모델의 parameter 지정 \(참조: 77페이지, 5.3.4장\)](#)。
- **주의사항**: 파라미터 지정 또는 특이값 레벨의 이후 변경은 데이터 세트 할당에 영향을 미치지 않습니다. 데이터 세트가 다시 분할되지 않는 것。
- **특이값을 버리지 않습니다**: 이미 존재하는 특이값을 유지하고 분할할 때 고려하지 않습니다. 이 옵션을 사용하는 경우 **특이값 레벨** 변경되지 않은 경우에도 특이값 데이터 세트가 증가할 수 있습니다.



- **유효성 검사 데이터 세트를 버리지 않습니다:** 유효성 검사 데이터 세트를 유지하고 분할할 때 고려하지 않습니다. 이 옵션을 사용하는 경우 **백분율** 변경되지 않은 경우에도 유효성 검사 데이터 세트가 증가합니다.

5 자동 분할을 시작합니다

- [분할] 클릭하십시오.

데이터 세트는 결정에 따라 분할됩니다.

6 배열을 점검합니다

스펙트럼 목록에서 하나 이상의 스펙트럼을 선택하는 경우 선택한 스펙트럼이 **스펙트럼 오버레이** 범위 내에서 강조됩니다。

히스토그램 및 **스펙트럼 오버레이** 영역에는 보정 데이터 세트의 스펙트럼이 **청색으로**, 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼이 **녹색으로** 그리고 특이값 데이터 세트의 스펙트럼이 **적색으로** 표시됩니다.

스펙트럼 목록 영역에서는 이 할당이 다음 아이콘을 통해 표시되어 있습니다:



스펙트럼이 보정 데이터 세트에 지정됩니다.



스펙트럼이 유효성 검사 데이터 세트에 할당됩니다.



스펙트럼이 특이값 데이터 세트에 할당됩니다.



누락되었거나 잘못된 데이터를 표시합니다. 툴팁을 참고합니다.

7 수동 분할 (옵션)

수동 분할은 사전 자동 분할을 사용하거나 사용하지 않고 수행할 수 있습니다.

- 스펙트럼 중 하나를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하여 컨텍스트 메뉴를 엽니다. 스펙트럼을 해당 데이터 세트에 할당합니다 :

- **보정 데이터 세트**
- **유효성 검사 데이터 세트**
- **특이값 데이터 세트**



1 한 번에 여러 스펙트럼을 할당합니다 :

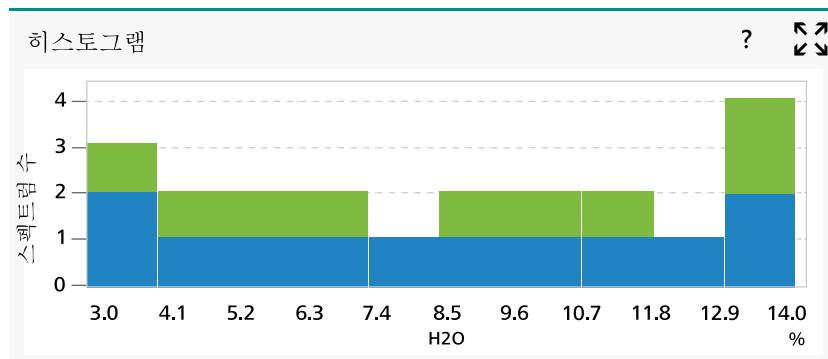
- 선택적으로 스펙트럼을 적절한 순서로 배열합니다。 열 머리를 클릭하여 개요 목록을 정렬합니다。
- [CTRL] 또는 [SHIFT] 버튼을 이용해 여러 스펙트럼을 선택합니다。
- 선택 항목을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하여 컨텍스트 메뉴를 엽니다。 선택한 스펙트럼을 할당합니다。

8 모델을 저장합니다

- 를 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다。

히스토그램

히스토그램은 기준값이 얼마나 균일하게 분포되어 있는지 표시합니다。 이를 위해 히스토그램은 기준값 범위를 10개의 동일한 제품분류로 나눕니다。



이 예에서는 3%에서 14%까지의 12개의 정수 기준값이 10개 제품분류로 나뉩니다。 첫 번째 제품분류는 기준값 3% 및 4%로 구성되고 마지막 제품분류는 기준값 13% 및 14%로 구성됩니다。 다른 8개 제품분류는 각각 1개의 기준값만 포함합니다。

이 예에서는 보정 데이터 세트(파란색) 및 유효성 검사 데이터 세트(녹색)의 스펙트럼이 기준값 범위에 걸쳐 균일하게 분포되어 있음을 점검합니다。

특이값

특이값 데이터 세트에 할당된 스펙트럼은 빨간색으로 표시됩니다。 이는 스펙트럼 특이값 또는 기준값 특이값일 수 있습니다。

특이값을 검사해야 합니다。 특이값이 유효한 기준값을 가진 유효한 스펙트럼인 경우 보정 데이터 세트 또는 유효성 검사 데이터 세트에 할당할 수 있습니다。

5.3.2 정량화 모델을 계산하기

첫 번째 모델은 파라미터화 없이 계산할 수 있습니다。따라서 성능지수에 대한 벤치마크가 생성됩니다。나중에 파라미터화의 영향을 더 잘 평가할 수 있습니다。

! 노이즈 또는 기타 아티팩트가 일부 파장을 사용할 수 없게 생성되는 경우 이러한 파장은 직접 제외할 수 있습니다 [정량화 모델의 parameter 지정\(참조: 77페이지, 5.3.4장\)](#)。

모델을 계산합니다

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 정량화 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 계산을 시작합니다

- [계산] 버튼을 클릭하여 모델을 계산합니다。
- !** [계산] 버튼이 비활성 상태인 경우 그 원인은 다음일 수 있습니다 :
- 모델이 이미 계산되었고 이후 변경이 없었습니다。
 - 프로세스 단계 중 하나에 잘못된 입력이 있습니다。탐색기에 서 해당 영역의 프로세스 단계가 적색으로 표시됩니다。입력이 잘못된 필드는 적색 프레임으로 표시됩니다。

5.3.3 정량화 모델 검증

교차 유효성 검사 방식 정의

전제조건:

- **모델** 작업 영역에서 정량화 모델이 열려 있습니다 [정량화 모델 만들기\(참조: 59페이지, 5.1장\)](#)。

1 모델의 속성 편집

-  버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다。

- 속성 ► **parameter** ► **교차 검증**에서 교차 유효성 검사 방식을 정의합니다 :
 - 최대 70개의 스펙트럼이 포함된 스펙트럼 목록의 경우 **Leave-One-Out** 방법이 권장됩니다.
 - 스펙트럼 목록이 클을 경우 **K-fold** 방법이 권장됩니다. **블록 수**이 클수록 모델 계산에 소요되는 시간이 길어집니다. K의 일반적인 값은 5입니다.
- **분할 알고리즘** 보정 데이터 세트의 스펙트럼이 개별 블록에서 어떻게 분할되는지를 결정합니다. **Random** 분할 알고리즘은 블록을 임의로 선택합니다. **Fixed Blocks (DUPLEX)** 분할 알고리즘은 블록을 재현 가능한 방식으로 선택합니다.

2 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

정량화 모델 검증

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 정량화 모델이 열리고 전경에 표시됩니다.
- 정량화 모델이 계산합니다 [정량화 모델을 계산하기 \(참조: 70페이지, 5.3.2장\)](#).

1 검증 프로세스 단계로 전환

- 탐색기에서 **정량화 모델 검증** 클릭하여 검증 프로세스 단계로 이동합니다.

계산된 정량화 모델의 데이터는 **성능지수, 상관관계 그래프** 및 **influence plot** 영역에 표시됩니다.

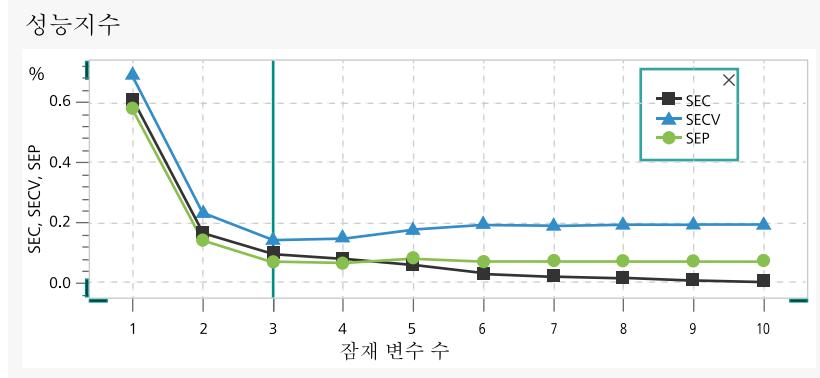
을 클릭해 **loading plot** 및 **score plot** 다이어그램을 표시할 수도 있습니다.

2 성능지수를 점검합니다

성능지수 범위에서 다음과 같은 성능지수를 표시하는 다이어그램 :

- **SEC**: 보정의 표준 오차。
- **SECV**: 교차 검증의 표준 오차。
- **SEP**: 예측의 표준 오차. 이 숫자는 알 수 없는 샘플을 분석할 때 예측 오차의 가장 좋은 추정치입니다. SEP는 유효성 검사 데이터 세트를 사용할 수 있는 경우에만 표시됩니다.

성능지수(y축)는 다양한 잠재 변수(x축)에 대해 표시됩니다.



녹색 수직선은 현재 선택된 잠재 변수 수를 표시합니다。 위의 그림에서는 3개의 잠재 변수가 선택되었습니다。 3개의 잠재 변수에서는 0.14%의 SECV가 첫 번째 최소값을 갖습니다。

표에서 소수점 자리수

성능지수의 소수점 자리수를 변경하는 경우 **스펙트럼 목록** 영역의 **샘플 선택** 프로세스 단계에서 아이콘을 클릭합니다。

3 잠재 변수 수 결정

잠재 변수 수를 측정합니다。 정량화 모델의 성능을 위해서는 최적의 수의 잠재 변수를 찾는 것이 중요합니다。

더 많은 잠재 변수는 보정 데이터 세트의 더 많은 스펙트럼 변동을 설명합니다。 그러나 잠재 변수가 너무 많은 경우 특정 변동이나 노이즈가 발생하고 이로 인해 알 수 없는 샘플에 대한 예측이 덜 정확해집니다。 이를 **과도한 조정**이라고 합니다。

잠재 변수가 적은 경우보다 신뢰할 수 있는 정량화 모델이 될 수 있습니다。 그러나 잠재 변수의 수가 너무 적은 경우 관련 스펙트럼 변동은 삽입되지 않습니다。 그러면 예측이 덜 정확해집니다。 이를 **과소 조정**이라고 합니다。

- 당분간 적절한 수의 잠복 변수를 선택합니다。 표에서 해당 행을 두 번 클릭합니다。
선택된 잠재 변수의 수는 표에서 아이콘으로 표시됩니다。
의심스러운 경우 OMNIS Software에서 제안한 숫자를 선택합니다。 선택된 잠재 변수의 수가 시스템에서 제안한 수와 다를 경우 제안된 수는 아이콘으로 표시됩니다。

4 상관관계 그래프 점검

상관관계 그래프은 정량화 모델의 성능 평가를 한 눈에 보여줍니다。 다이어그램은 계산된 값(x축)과 기준 값(y축) 사이의 상관 관계를 보여 줍니다。 각 점은 샘플을 나타냅니다。

상관관계 그래프와 인접 표는 각 샘플에 대해 다음 값을 표시합니다 :

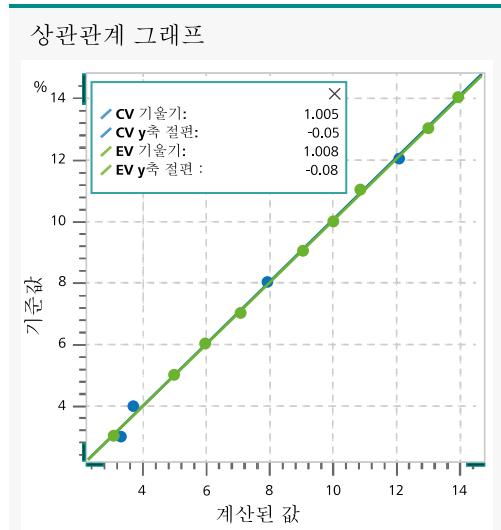
기준값	기준 parameter의 값
계산된 값	정량화 모델의 결과
잔류	계산된 값과 기준값 사이의 편차

표에서 소수점 자리수

상기 값의 소수점 자리수를 변경하는 경우 **스펙트럼 목록** 영역의 **샘플 선택** 프로세스 단계에서  아이콘을 클릭합니다.

파란색 점은 파란색 회귀선을 생성합니다. 녹색 점은 녹색 회귀선을 생성합니다.

회귀선은 계산된 값과 기준값 사이의 체계적인 관계를 보여줍니다. 회귀선은 기울기가 1이고 축 절편이 0인 것이 이상적입니다. 모든 샘플은 직선에 직접 배치하는 것이 이상적입니다. 이 경우 각 샘플에 대해 계산된 값은 기준값과 동일합니다.



상관 관계 다이어그램은 다양한 유형의 오류를 보여 줍니다 :

- 체계적인 오류**는 이상적인 직선($\text{경사} = 1$, $y\text{축 축 절편} = 0$)에서 회귀 직선의 편차로 간주할 수 있습니다.
- 임의의 오류**: 회귀선 주위에 점이 분산될수록 임의의 오류가 더 높습니다.

그림에서 다른 점 뒤에 여러 점이 숨겨져 있습니다. 파란색 회귀선은 녹색 회귀선 뒤에 숨겨져 있습니다.

- 성능지수** 범위에서 다른 수의 잠재 변수를 선택합니다. 상관관계 그래프의 변경 사항을 관찰합니다.

다이어그램 처리

다이어그램의 표시를 상응하게 조절하고 개별 점 또는 여러 점을 선택할 수 있습니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)。

5 Influence plot 점검

influence plot은 스펙트럼의 속성을 설명하고 스펙트럼 특이값의 측정 시 도움을 제공합니다.

PLS 또는 PCA 계산 방법에 대한 influence plot 표시할 수 있습니다.
목록에서 계산 방법을 선택합니다 :

- **PLS** (부분 최소 제곱 회귀 분석)
PLS는 스펙트럼 및 기준값에 대한 관련 정보를 사용합니다。 PLS는 정량화 모델의 기초입니다。
- **PCA** (주요 구성 요소 분석)
PCA는 스펙트럼에서 관련 정보를 추출합니다。

 Influence plot, PLS 및 PCA 모두 정의된 데이터 전처리 및 파장범위를 고려합니다 [정량화 모델의 parameter 지정 \(참조: 77페이지, 5.3.4장\)](#).

기준값은 PLS-Influence-Plot에 영향을 미치지만 PCA-Influence-Plot에서 영향을 미치지 않습니다。 유일한 예외는 극단적인 기준값 때문에 각 점을 가능한 기준값으로 표시할 수 있다는 것입니다。

선택한 잠재 변수의 수는 PLS-Influence-Plot에 영향을 미치지만 PCA-influence-plot에서 영향을 미치지 않습니다。 PCA의 경우 주요 구성 요소의 수는 선언된 다양성이 최소 95%가 되도록 선택됩니다。

예: 3개의 잠재 변수를 기반으로 한 EtOH 스펙트럼의 PLS-인플루언스 그림



다이어그램 처리

다이어그램의 표시를 상응하게 조절하고 개별 점 또는 여러 점을 선택할 수 있습니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)。

각 점은 스펙트럼을 나타냅니다。 Hotellings T^2 및 Q residuals의 높은 값은 특이값의 가능성을 의미합니다。

높은 Hotelling T^2 값을 갖는 스펙트럼은 해당 샘플의 극단적인 조성을 나타냅니다。 이런 샘플은 모델에 큰 영향을 미칩니다。 이런 샘플의 기준값이 불량한 경우 유사한 샘플의 예측이 불량한 결과를 발생시킬 수 있습니다。

높은 Q residuals를 갖는 스펙트럼은 모델링에 실패한 속성을 나타냅니다。 이런 예시로 예를 들어 해당 샘플에 특이한 화학적 성분이 존재하는 경우를 들 수 있습니다。

점선은 정의된 특이값 레벨에 대한 임계값(한계값)을 나타냅니다。

위의 그림에서 가능한 특이값이 발생하지 않습니다。 모든 점은 점선 내에 있습니다。

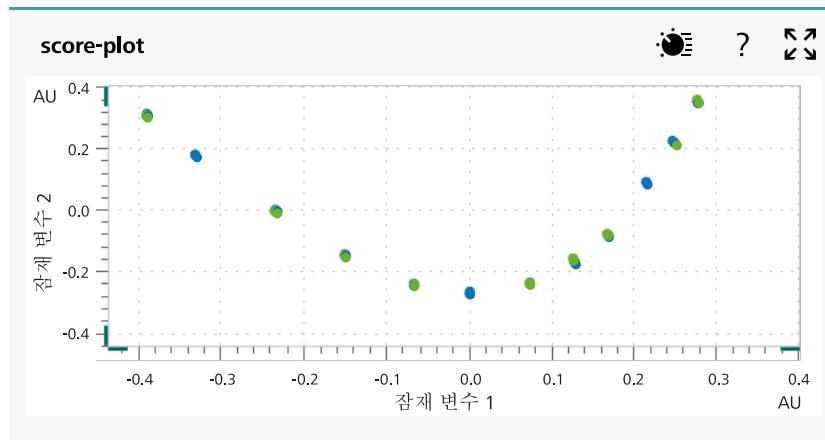
6 Score plot 점검

 스펙트럼의 Hotellings T^2 값은 모든 잠재 변수의 score를 단일 값으로 요약하는 반면, score plot은 이 score의 더욱 세부적인 분석을 가능하게 합니다。

정량화 모델을 위한 score plot은 [PLS](#) 계산 방법을 기준으로 하며 정의된 데이터 전처리 및 파장범위를 고려합니다 [정량화 모델의 parameter 지정 \(참조: 77페이지, 5.3.4장\)](#)。

각 점은 스펙트럼을 나타냅니다。 처음 두 개의 잠재 변수에 대한 점 수는 x축과 y축에서 읽을 수 있습니다。  속성 통해 다른 잠재적 변수 쌍도 표시할 수 있습니다。 score는 정규화되었고, 각 잠재 변수는 동일한 중량을 가집니다。

예: 잠재변수 1 및 2에 대한 EtOH 스펙트럼의 score plot :



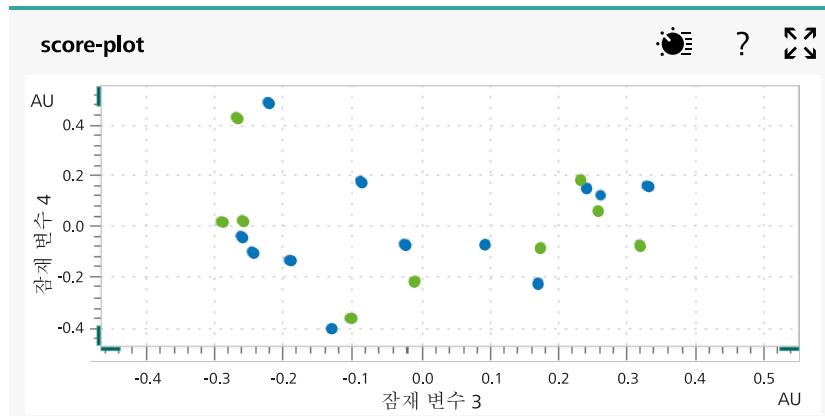
다이어그램 처리

다이어그램의 표시를 상응하게 조절하고 개별 점 또는 여러 점을 선택할 수 있습니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3 장\)](#)。

그 점들은 진주처럼 줄지어 있습니다。 이는 기준값 사이의 정기적인 간격과 추가 샘플 변동의 부재로 인해 발생합니다。 이 경우 향후 예상되는 모든 샘플 변동을 고려했는지 여부를 질문할 수 있습니다。

분산의 더 낮은 비율을 설명하는 더 높은 잠재 변수에서 다음 그림에 표시된 것처럼 다양성이 더 이상 보이지 않습니다。

예: 잠재변수 3 및 4에 대한 EtOH 스펙트럼의 score plot :



두 그림 모두에서 유효성 검사 데이터 세트(녹색 점)는 표시된 잠재 변수 내에서 보정 데이터 세트(파란색 점)와 거의 동일한 공간을 차지합니다。 잠재적 특이값은 감지되지 않습니다。

7 특이값을 포함하거나 배제

- 특이값 가능성을 주의 깊게 점검합니다。

- 샘플이 다른 데이터 세트에 할당된 경우 단계 한 번에 모든 샘플을 할당합니다 :
 - Influence plot, 상관관계 그래프 또는 score plot에서 할당할 모든 새 점을 선택합니다(참조: 152페이지, "여러 점 또는 적정곡선 선택")。
 - 선택한 항목 중 하나를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하는 경우 컨텍스트 메뉴가 열립니다. 적절한 데이터 세트를 선택합니다.
 - [계산] 버튼을 클릭하여 정량화 모델을 다시 계산합니다。
- 스펙트럼을 다시 할당한 후 정량화 모델을 다시 검증합니다。

8 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

정량화 모델 복제

필요한 경우 최신 상태로 되돌리기 위해 정량화 모델을 복제할 수 있습니다 :

1. 정량화 모델을 저장합니다.
2. **모델 ▶ 정량화 모델**에서 정량화 모델을 선택하십시오.
3.  클릭하여 선택한 정량화 모델을 복제합니다.
4. 복제된 정량화 모델을 열고 최적화를 계속합니다.

5.3.4 정량화 모델의 parameter 지정

정량화 모델의 parameter 지정 프로세스 단계는 스펙트럼의 자동 또는 수동 최적화를 가능하게 합니다. 아티팩트 및 비선형성이 수정됩니다. 올바르게 수행되는 경우 파라미터화는 모델의 정확성과 견고성을 개선합니다.

파라미터화는 다음에 사용됩니다 :

- 보정 데이터 세트의 모든 스펙트럼
- 유효성 검사 데이터 세트 및 특이값 데이터 세트에 있는 모든 스펙트럼

 예측이 작업 영역 **샘플** 내에 있는 경우 샘플의 스펙트럼이 기록되고 모델을 통해 평가됩니다. 이 스펙트럼에 대해서도 모델에 정의되어 있는 파라미터화가 사용됩니다.

두 가지 파라미터화 옵션을 사용할 수 있습니다 :

- 사용할 파장범위를 정의합니다.
- 스펙트럼을 보다 적절한 형태로 만들기 위해 데이터 전처리를 사용합니다.

자동 파라미터 지정

파라미터화를 최적화합니다

전제조건:

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다.

1 프로세스 단계 '정량화 모델의 parameter 지정'

- 탐색기에서 정량화 모델의 parameter 지정 프로세스 단를 클릭 합니다.

2 데이터 전처리 및 파장 범위 자동 정의

- 스펙트럼 오버레이 영역에서 [파라미터화를 최적화합니다] 버튼을 클릭합니다.
주의사항: 이미 존재하는 데이터 전처리 및 파장범위가 덮어쓰기 됩니다.

3 수동 파라미터 지정 (옵션)

- 필요 시 데이터 전처리 및 파장범위를 수동으로 편집할 수 있습니다.

수동 파라미터 지정

수동 파라미터 지정은 프로세스 단계 샘플 선택에서 스펙트럼의 시각적 점검으로 시작합니다.

스펙트럼을 표시합니다

전제조건:

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다.

1 프로세스 단계 '샘플 선택'

- 탐색기에서 샘플 선택 프로세스 단을 클릭합니다.
이 프로세스 단계에서 스펙트럼은 표 형식과 곡선 형태로 동시에 조사할 수 있습니다.

2 스펙트럼 분석

- 표 처리 표 처리 (참조: 149페이지, 11.2장)
- 다이어그램 처리 다이어그램 처리 (참조: 150페이지, 11.3장)

3 프로세스 단계 '정량화 모델의 parameter 지정'

- 탐색기에서 정량화 모델의 parameter 지정 프로세스 단를 클릭 합니다.
- 데이터 전처리 범위에서 사용하여 선택항목 리스트를 열고 loading plot 범위를 선택합니다.

이 프로세스 단계에서 스펙트럼은 곡선 형태와 loading plot에서 동시에 조사할 수 있습니다。loading plot에는 원래 파장 변수가 각 잠재 변수의 구조에 어떻게 기여하는지가 설명되어 있습니다。

후속 단계

- 수동 파장 선택 수동 파장 선택(참조: 79페이지, 5.3.4.1장)
- 데이터 전처리 수동 정의 데이터 전처리 수동 정의(참조: 82페이지, 5.3.4.2장)

5.3.4.1 수동 파장 선택

파장의 선택은 정량화 모델을 개선할 수 있습니다。예: 높은 흡광도 값에서 노이즈가 보이는 경우 해당 파장범위를 제외할 수 있습니다。

모델은 정의된 파장범위를 사용합니다。정의된 파장범위가 없는 경우 모델은 모든 파장을 사용합니다。

스펙트럼 및 loading을 표시합니다

전제조건:

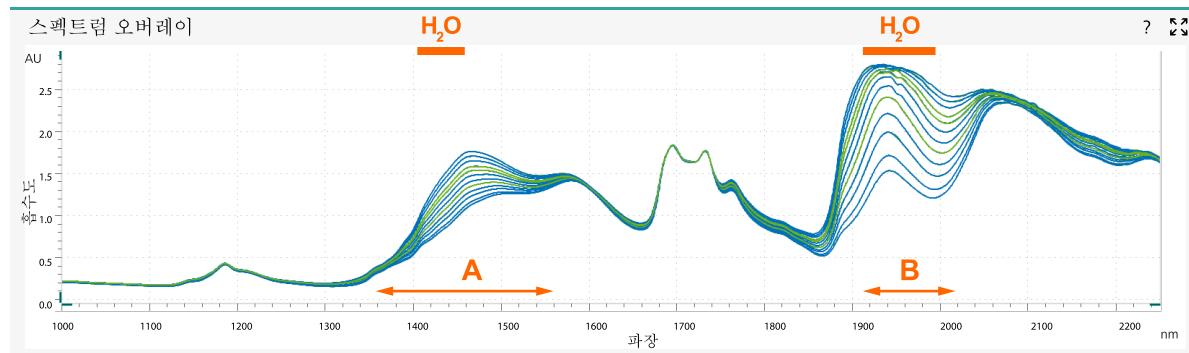
- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 프로세스 단계 '정량화 모델의 parameter 지정'

- 탐색기에서 정량화 모델의 parameter 지정 프로세스 단를 클릭 합니다。
- 스펙트럼 오버레이, loading plot 및 파장범위 범위를 동시에 표시합니다。

스펙트럼 오버레이

일반적인 H₂O 흡수 밴드는 다이어그램에서 찾을 수 있고 대략적인 참조점이 될 수 있습니다。H₂O 흡수 대역의 범위는 1400~1450 nm, 1900~1980 nm입니다。

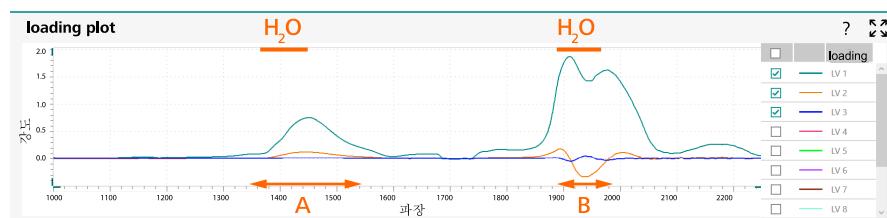


EtOH 스펙트럼은 샘플의 다른 H_2O 함량(범위 **A** 및 **B**)에 따라 눈에 띄게 변화합니다。

그러나 2 범위 사이에는 차이가 있습니다。 범위 **B**(1900 ~ 2000nm)와 달리 범위 **A**(1350 ~ 1550nm)는 기준값의 동일한 거리에 따라 라인 사이의 일정한 수직 거리를 표시합니다。

loading plot

Loading은 원래 파장 변수가 각 잠재 변수의 구조에 어떻게 기여하는지 보여줍니다。



이미 점검된 범위 **A**(1350 ~ 1550nm)와 **B**(1900 ~ 2000nm)는 특히 잠재 변수 1(녹색)에 대해 가장 높은 loading을 나타냅니다。 따라서 이러한 범위는 잠재 변수 1의 형성에 가장 큰 기여를 합니다。

i Loading이 양수인지 음수인지는 중요하지 않습니다。

범위 **B**의 아티팩트 때문에 범위 **A**(1350~1550nm)를 기반으로 모델을 테스트하는 것이 좋습니다。

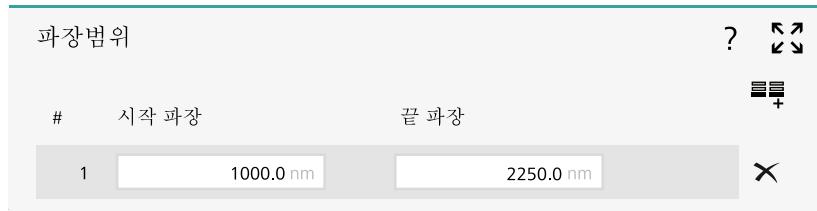
파장범위 정의

전제조건 :

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [정량화 모델 만들기](#)(참조: 59페이지, 5.1장)。
- 탐색기가 [정량화 모델의 parameter 지정](#) 프로세스 단계에 있음。

1. 파장범위 추가

- 파장범위 영역에서 클릭하여 파장 범위를 추가합니다。



파장범위가 추가됩니다。 범위는 먼저 모든 파장을 포함합니다。

2 파장범위 결정

다음 방법 중 하나로 파장범위를 결정합니다 :

- 입력 필드에 **시작 파장** 및 **끝 파장** 입력하여 파장범위를 입력합니다.
- 다이어그램에서 파장범위를 지정하려면 다음 단계를 수행합니다 :
 - **스펙트럼 오버레이** 영역에서 **[이동 활성화]** 버튼을 클릭합니다.
 - 커서가 아이콘으로 표시될 때까지 커서를 강조된 영역의 좌측 가장자리로 움직입니다.
 - 왼쪽 마우스 버튼을 누른 상태에서 왼쪽 여백을 적절한 위치로 이동합니다.
 - 강조된 영역의 우측면에서도 이 작업을 동일하게 수행합니다.
 - 파장 범위를 이동시키는 경우 커서가 아이콘으로 표시될 때까지 커서를 이 영역 위로 움직입니다。마우스 왼쪽 버튼을 사용하여 범위를 왼쪽 또는 오른쪽으로 이동합니다。
 - **[이동 비활성화]** 클릭하십시오。

3 파장범위를 더 추가합니다

클릭하여 더 많은 파장범위를 추가할 수 있습니다。

1 파장 범위는 중첩되지 않아야 합니다

새 파장범위가 먼저 기존 파장범위와 겹칩니다。겹치지 않도록 파장범위를 조정합니다。

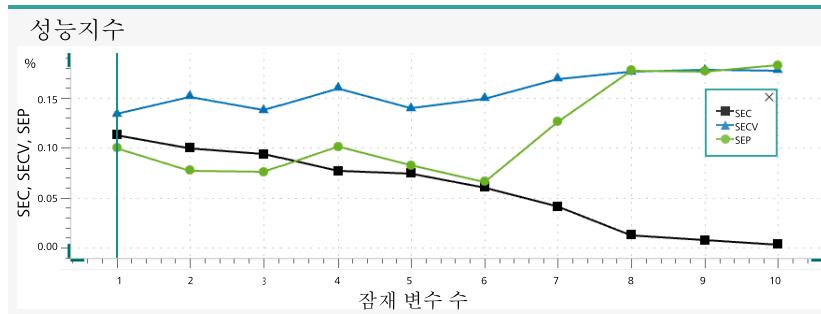
4 모델을 계산합니다

- **[계산]** 버튼을 클릭하여 모델을 계산합니다。

5 모델을 유효성 검사합니다

- 탐색기에서 **정량화 모델 검증** 클릭하여 검증 프로세스 단계로 이동합니다。

- 모델을 유효성 검사합니다. 성능지수를 이전에 생성한 모델과 비교합니다.



EtOH의 물과 1350~1550nm의 파장범위에서는 전체 파장범위를 사용할 때 3개의 잠재 변수 대신 단일 잠재 변수가 충분합니다. 두 경우 모두 SECV는 비슷합니다: 0.13 % 및 0.14%입니다.

3개의 변수 대신 하나 개의 변수를 갖는 것은 상당한 개선입니다. 관련 없는 다양성이 성공적으로 제거되었습니다. 변수가 적은 새 모델은 아마도 더 견고할 것입니다.

6 모델을 저장합니다

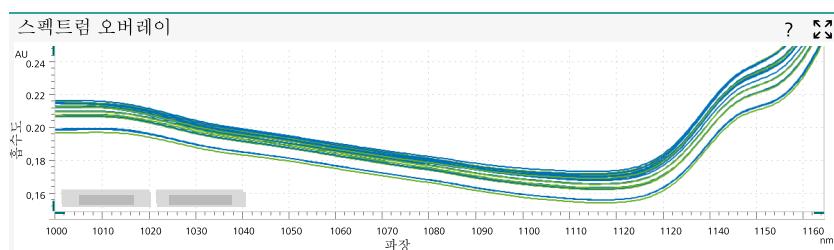
- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

i 데이터 레코드의 분할 또는 이상값 검출 시 새로 생성된 파장 선택을 고려해야 하는 경우 데이터 세트를 다시 분할할 수 있습니다.

5.3.4.2 데이터 전처리 수동 정의

적합한 데이터 전처리는 정량화 모델을 개선할 수 있습니다. 예: 기준선 이동은 대부분의 응용 프로그램에 대한 관련 정보를 포함하지 않고 제거할 수 있습니다.

EtOH 스펙트럼



EtOH 스펙트럼의 경우 1000~1200nm의 범위에서 스펙트럼 사이의 작은 기준선 이동이 나타납니다. 이는 일정한 (파장 의존적이지 않은) 기준선 이동입니다.

- i** 기준선의 변화는 흐름 플로우에서 의도적으로 사용되지 않은 샘플에서 기포가 형성되기 때문입니다.
깨끗한 액체는 보통 이 정도 크기의 기본 라인 이동을 나타내지 않습니다.

데이터 전처리를 통해 기준선 이동을 수정할 수 있습니다.

데이터 전처리 수동 정의

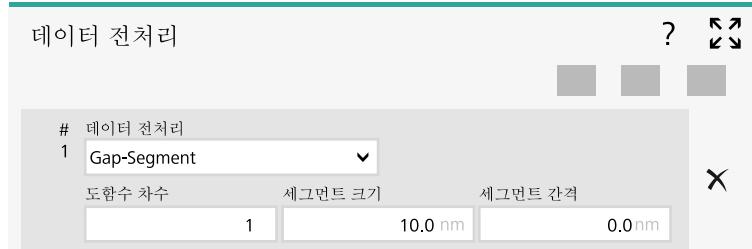
전제조건:

- 탐색기가 정량화 모델의 parameter 지정 프로세스 단계에 있음。

1 데이터 전처리 단계를 추가

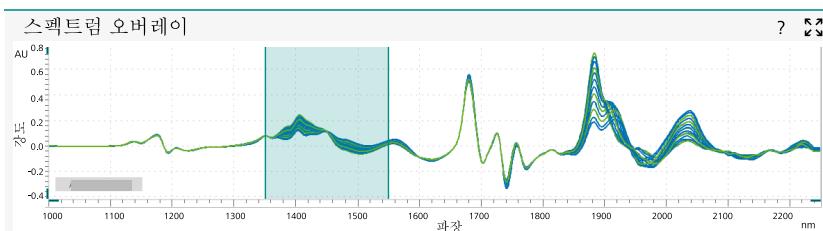
- 데이터 전처리 영역에서 클릭하여 데이터 전처리 단계를 추가 합니다.
- 데이터 전처리 필드에서 데이터 전처리 종류를 선택하고 해당 필드를 기입합니다.

기준선의 일정한 배출관(비파장 의존적)을 제거하는 첫 번째 순서에서 파생된 Gap-Segment의 예 :



전처리된 스펙트럼이 **스펙트럼 오버레이** 영역에 즉시 표시됩니다.

데이터 전처리 후 스펙트럼은 다르게 보입니다.



EtOH 스펙트럼의 경우 일정한 기준선 이동이 제거됩니다.

2 추가 데이터 전처리 단계를 추가합니다

클릭하여 추가 데이터 전처리 단계를 추가할 수 있습니다.



i 여러 데이터 전처리 단계를 사용할 경우 순서가 중요할 수 있습니다。Gap-Segment 또는 Savitzky-Golay는 SNV보다 먼저, SNV는 detrend보다 먼저 사용하는 것이 좋습니다。

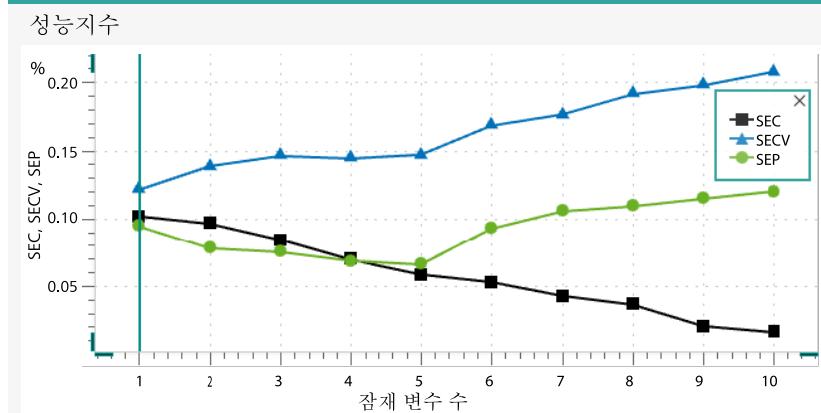
▲ 및 ▼ 아이콘을 클릭하여 행을 위로 또는 아래로 이동시키고 이를 통해 순서를 결정할 수 있습니다。

3 모델을 계산합니다

- [계산] 버튼을 클릭하여 모델을 계산합니다。

4 모델을 유효성 검사합니다

- 모델 탐색기에서 **정량화 모델 검증** 클릭하여 검증 프로세스 단계로 이동합니다。
- 모델을 유효성 검사합니다。성능지수를 이전에 생성한 모델과 비교합니다。



1350~1550nm의 파장범위와 도함수 차수 1의 Gap-Segment에서 EtOH의 H₂O의 경우 단일 잠재 변수가 여전히 충분한 것으로 보입니다。SECV는 0.12 %로 약간 개선했습니다。

기본 라인 이동에는 이 응용 프로그램에 대한 관련 정보가 포함되어 있지 않으므로 최소한의 개선에도 불구하고 데이터 전처리를 유지할 수 있습니다。

5 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다。

i 데이터 레코드의 분할 또는 이상값 검출 탐지할 때 새로 생성된 데이터를 고려해야 하는 경우 데이터 세트를 다시 분할할 수 있습니다。



5.4 정량화 모델 게시

측정을 위해 모델을 사용하기 위해서는 모델을 게시해야 합니다。 이를 통해 게시된 버전 및 해당 버전에 측정을 주지 않고 모델을 추가로 개발할 수 있습니다。

정량화 모델 게시

전제조건:

- 모델이 계산되고 저장됩니다。
- 모델이 열려 있습니다。
- 잠재 변수의 원하는 수를 선택합니다。

1 대화상자 열기

- 아이콘을 클릭하여 **정량화 모델 게시** 대화상자를 엽니다。

i 모델이 이전에 게시되어 method에 사용된 경우 **method 업데이트** 체크박스를 선택하여 이러한 method를 자동으로 업데이트할 수 있습니다。

주의사항: 자동으로 업데이트되지 않습니다 :

- 열린 method
- 서명 및 게시된 method
- 데이터 권한 필터링이 활성화된 경우: 현재 로그인한 사용자 의 데이터 권한이 없는 method입니다

2 게시

- [게시] 버튼을 클릭하여 모델을 게시합니다。

모델 ▶ 정량화 모델 아래에 가장 최근에 게시된 버전이 표시됩니다 :

이름	버전	타입	가장 최근에 게시된 버전
My model	4	full	My model, V4

이제 **PREDICT** 명령은 모델의 게시된 버전에 액세스할 수 있습니다。

i 모델 개요

하나 또는 하나 이상의 정량화 모델을 선택된 경우 모델 개요에 가장 중요한 데이터 (최대 5가지 모델)가 표시됩니다。

지난 저장된 버전이 지난 게시된 버전과 일치하지 않은 경우 모델 개요에 두 버전이 모두 표시됩니다。

5.5 기울기 수정/y 절편 수정

기울기 수정/y 절편 수정 사용하는 경우 정량화 모델을 적용할 때 체계적인 오류를 수정할 수 있습니다. 조건은 강력하고 신뢰할 수 있는 정량화 모델이 필요합니다. 오류는 통계적으로 유의해야 하지만 너무 크지는 않아야 합니다.

i 상관관계 그래프에서 체계적 결함은 이상적인 직선(기울기 = 1, y축 절편 = 0)에서 회귀 직선의 편차로 볼 수 있습니다.

상관관계 그래프에도 임의의 오류가 표시됩니다. 회귀선 주위에 점이 분산될수록 임의의 오류가 더 높습니다. 기울기 수정/y 절편 수정에서는 임의의 오류를 수정할 수 없습니다.

기울기 수정/y 절편 수정은 다음과 같은 경우에 사용됩니다 :

- 예를 들어, 정량화 모델이 검증되거나 제어 샘플에 의해 모니터링되는 경우, 예를 들어 환경 변화로 인해 성능지수가 더 이상 요구 사항을 충족하지 않는 것으로 나타납니다.
- 가져온 XDS/DS 스펙트럼을 사용하여 정량화 모델을 생성한 경우 [XDS/DS Analyzer\(수량화\)를 변경합니다\(참조: 160페이지, 11.6장\)](#)。

2 가지 수정 사항이 제공합니다 :

- **바이어스:** 바이어스를 수정합니다 – 기준값과 샘플의 계산된 값 사이의 평균 편차。
보정 후 편차는 0입니다。
- **기울기 수정/y 절편 수정:** 상관관계 그래프에서 회귀선의 기울기와 y축 절편을 수정합니다。
수정 후 기울기는 1 (45° 직선에 해당)이고 y축 절편은 0입니다。
주의사항: 기울기 수정/y 절편 수정 후 바이어스는 0입니다。

i 바이어스 수정, 특히 기울기 수정/y 절편 수정을 주의하여 적용해야 합니다.

오류가 통계적으로 유의하지 않은 경우 수정하지 않으면 좋겠습니다. 오류가 통계적으로 유의한 경우 철저히 조사해야 합니다. 가능한 경우 오류의 원인을 해결해야 합니다. 정당한 이유로 오류를 수정할 수 없는 경우 바이어스 수정 또는 기울기 수정/y 절편 수정을 적용할 수 있습니다.

샘플 수를 주의합니다 :

- 신뢰할 수 있는 바이어스 추정치를 얻으려면 최소 20개의 샘플이 필요합니다.
- 신뢰할 수 있는 기울기 추정치를 얻으려면 최소 30개의 샘플이 필요합니다.

샘플을 준비합니다

기울기 수정/y 절편 수정은 일반적으로 정량화 모델 검증에 사용되는 샘플 또는 정량화 모델의 성능을 모니터링하는 데 사용되는 제어 샘플을 사용하여 수행됩니다.

- 샘플을 **샘플 리스트** 또는 **검색**에서 조립합니다.
- 각 샘플에 다음이 포함되어 있는지 점검합니다 :
 - 수정할 파라미터의 기준값。
 - 스펙트럼。
 - 각 스펙트럼에 대해 계산된 값。

기울기 수정/y 절편 수정 만들기

i 여러 정량화 모델을 수정해야 하는 경우 각 모델에 대해 별도의 기울기 수정/y 절편 수정을 수행합니다.

1 새 기울기 수정/y 절편 수정 만들기

- **모델** ► **기울기 수정/y 절편 수정**에서 클릭하십시오.

2 기울기 수정/y 절편 수정 이름을 지정합니다

- **이름** 필드에서 적절한 이름을 입력합니다, 예를 들어: 수정할 정량화 모델 이름 또는 유사。

3 시료 선택함

- 기울기 수정/y 절편 수정의 만들기에 사용할 샘플의 샘플 **샘플 리스트** 또는 **검색** 검색을 선택합니다.

기울기 수정/y 절편 수정을 생성합니다

이름

샘플 리스트

검색

이름

저장했음

정량화 모델, 버전

4 정량화 모델을 선택

정량화 모델, 버전 목록에는 선택한 샘플로 수정할 수 있는 모든 정량화 모델이 표시됩니다.



- **정량화 모델, 버전** 목록에서 수정할 정량화 모델을 선택합니다.
- [다음] 클릭하십시오.

5 기준 parameter 선택

정량화 모델의 기준 parameter / 단위 필드는 선택한 정량화 모델에서 기준 parameter의 이름을 보여줍니다.

기준 parameter 목록에는 선택한 샘플의 사용 가능한 모든 기준 parameter가 나열됩니다.

기준 parameter를 선택합니다

이름



기준 parameter / 정량화 모델의 이름



기준 parameter	단위

- 이 목록에서 원하는 기준 parameter를 선택합니다.

1 원하는 기준 parameter가 샘플 리스트 또는 검색에서 복수의 이름을 갖는 경우 이 모든 이름을 선택할 수 있습니다.

6 입력 확인

- **[만들기]** 버튼을 클릭하여 새 기울기 수정/y 절편 수정을 만듭니다.

수정은 선택한 샘플의 기준값과 예상된 값을 근거로 계산됩니다.

새 탭에는 기울기 수정/y 절편 수정이 표시됩니다. **샘플** 영역에는 선택한 샘플이 나열됩니다.

샘플					?	⤒⤓
	샘플 이름	subsample 이름	기준값	계산된 값	수정된 값	
⤒⤓			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 %	

7 수정의 타입

수정의 타입 선택, **바이어스** 또는 **기울기/y축 절편**。

수정의 타입:

바이어스 기울기/y축 절편

8 특이값 선택

- 스펙트럼을 특이값으로서 선택하는 경우, **샘플** 영역에서 스펙트럼을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 **특이값으로서 샘플 선택** 버튼을 이용해 계산에서 배제시킵니다.

↑: 심벌은 스펙트럼을 특이값으로 표시합니다. 스펙트럼은 **상관관계 그래프** 범위와 모든 계산에서 제거됩니다.

- 스펙트럼을 더 이상 특이값으로서 표시하지 않는 경우에는 마우스 오른쪽 버튼으로 다시 스펙트럼을 클릭하고 **특이값으로서 샘플 선택을 해제** 클릭합니다.

스펙트럼은 ↑ 다시 표시됩니다. 스펙트럼은 **상관관계 그래프** 범위에 다시 나타나고 모든 계산에 다시 포함됩니다.

i [CTRL] 또는 [SHIFT] 버튼을 이용하여 여러 스펙트럼을 선택한 다음 한 번에 변경할 수 있습니다.

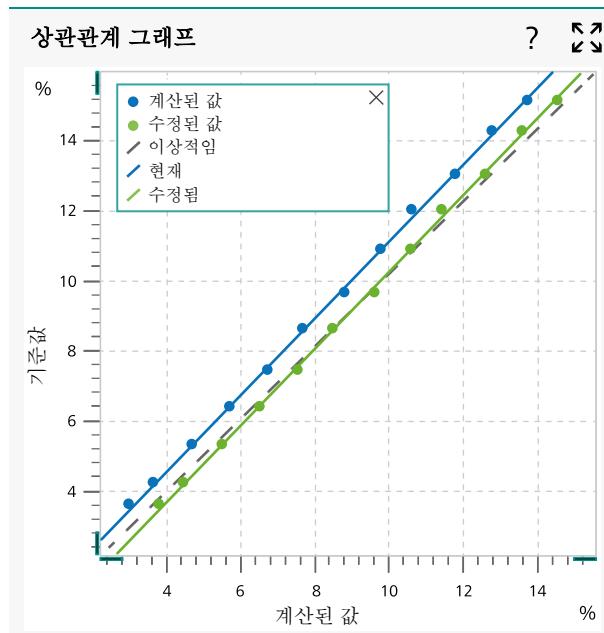
스펙트럼의 선택을 취소하는 경우 [CTRL] 버튼을 누른 상태에서 스펙트럼을 클릭합니다.

9 상관관계 그래프

상관관계 그래프 영역에는 각 스펙트럼에 대해 동일한 기준값을 갖는 2개의 점을 y축이 표시되지만 x축에는 다른 값이 표시됩니다 :

- 파란색 점은 x축의 정량화 모델에서 예측된 **계산된 값**을 나타냅니다.
 - 커서를 한 지점에 배치하여 잔류를 표시합니다, 즉, 계산된 값과 기준값 사이의 차이입니다.
- 녹색 점은 x축의 **수정된 값**을 나타냅니다. 수정된 값은 선택한 수정의 타입(바이어스 또는 기울기/y축 절편)에 따라 달라집니다.
 - 커서를 한 지점에 배치하여 잔류를 표시합니다, 즉, 수정된 값과 기준값 사이의 차이입니다.

바이어스 수정을 위한 상관관계 그래프

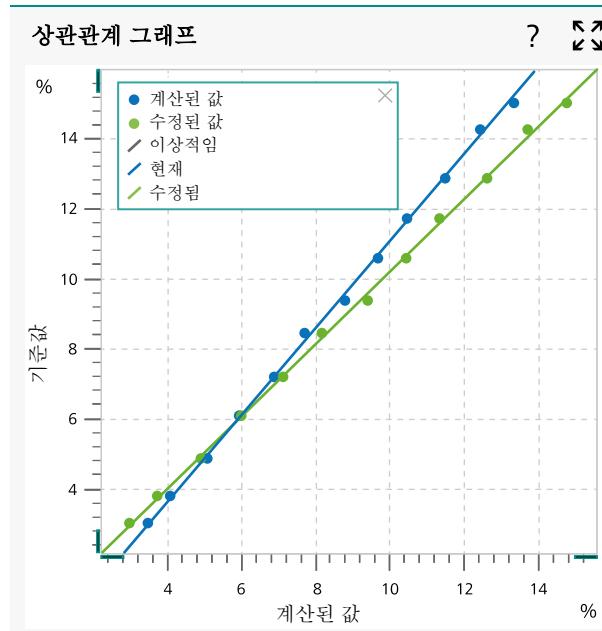


계산된 값(파란색 점)은 바이어스를 기준으로 수정됩니다。 수정된 회귀선 (녹색)은 점선 45° 이상을 절단하여 바이어스가 0이 되도록 합니다。

위의 상관관계 그래프의 예는 SEP가 0.82에서 0.24로 개선되었음을 나타냅니다。

! 신뢰할 수 있는 바이어스 추정치를 얻으려면 최소 20개의 샘플이 필요합니다。

기울기 수정/y 절편 수정에 대한 상관관계 그래프



계산된 값(파란색 점)은 기울기 및 y축 절편을 중심으로 수정됩니다.
수정된 값(녹색 점)에서 이상적인 회귀선(45° , y축 절편 0)이 있습니다.

위의 상관관계 그래프의 예는 SEP가 0.86에서 0.12로 개선되었음을 나타냅니다.

i 신뢰할 수 있는 기울기 추정치를 얻으려면 최소 30개의 샘플이 필요합니다.

10 수정값

수정값 범위에서 SEP, 기울기 및 y축 절편은 수정 없이 표로 표시됩니다, 바이어스 수정 및 기울기/y축 수정 포함 :

- **SEP** 예측의 표준 오차를 나타냅니다.
 - **기울기** 계수 및 **y축 절편** 계산된 값(파란색 점)을 수정된 값(녹색 점)으로 변경합니다 :
- 수정된 값 = 계산된 값 × 기울기 + y축 절편

수정값	SEP	기울기	y축 절편
수정되지 않음	0.86	1.000	0.00
바이어스 수정	0.71	1.000	0.53
기울기 수정/y 절편 수정	0.12	1.193	-1.11



1 이 표에서 계산된 값(파란색 점)의 다음 데이터가 포함되어 있습니다 :

- 회귀직선의 기울기 (1)。
- 회귀직선의 y축 절편 (2)。
- 회귀선의 바이어스 (3)。

11 기울기 수정/y 절편 수정 게시

- 올바른 수정 타입(바이어스 또는 기울기 y축 절편)이 선택되었는지 다시 점검합니다.
- **기울기 수정/y 절편 수정 게시** 대화상자를 열기 위해 아이콘을 클릭합니다.
- **[게시 및 닫기]** 버튼을 클릭하여 기울기 수정/y 절편 수정을 게시합니다.

기울기 수정/y 절편 수정이 게시되고 이와 동시에 저장됩니다。탭이 닫히고 기울기 수정/y 절편 수정이 개요 목록에 표시됩니다。

1 게시된 기울기 수정/y 절편 수정은 추가적으로 열거나 또는 편집 할 수 없습니다。

이제 **PREDICT** 명령은 기울기 수정/y 절편 수정의 게시된 버전에 액세스할 수 있습니다。



6 식별 모델

i OMNIS Software의 과정에 대한 설명은 부록을 참조합니다([참조: 166 페이지, "모델 개발"](#))。

식별 모델은 사용에 따라 다음 정보를 제공합니다 :

- 알 수 없는 샘플(예를 들어 과당)의 **동일시**。 결과는 제품 이름입니다。
- 샘플의 제품 제휴(예를 들어 과당)의 **검증**。 결과는 예/아니오입니다 – 검증 성공적 또는 실패함。

6.1 식별 모델 생성

식별 모델 생성

전제조건:

- 스펙트럼 및 제품 이름이 포함된 데이터 세트가 생성됩니다 [스펙트럼 기록](#)([참조: 54페이지, 4.2장](#))。

1 식별 모델을 생성 및 이름을 지정

- 모델 ► 식별 모델**에서  클릭하십시오.
새 식별 모델이 새 탭에 나타납니다.
- 식별 모델의 이름** 입력 필드에 적절한 이름을 입력합니다。

2 시료 선택함

- 샘플 리스트** 클릭하여 모든 샘플 리스트를 표시합니다。
- 준비된 모든 샘플 리스트를 선택합니다。

식별 모델 생성

식별 모델의 이름

샘플 리스트	검색	XDS-/DS- 가져오기	
이름	저장했음	제품	스펙트럼 수

i 샘플은 검색을 통해 선택할 수도 있습니다。 이외에도 XDS 장비 및 DS 장비에서 샘플을 가져올 수 있습니다 [XDS/DS Analyzer\(수량화\)](#)를 변경합니다([참조: 160페이지, 11.6장](#))。

i 샘플 선택은 나중에 조정할 수 있습니다.

선택 항목에는 제품 매개 변수가 있는 샘플이 포함되어야 합니다。
제품 열에는 포함된 제품이 나열됩니다。

3 식별 모델 생성

- [만들기] 클릭하십시오.
- 모델 저장: 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

6.2 샘플 선택 및 데이터 세트 분할

식별 모델 탭의 최상단에는 **탐색기**라는 수평 탐색 막대가 표시됩니다. 탐색기는 다른 단계를 통해 모델 개발을 수행합니다.



샘플 선택

식별 모델을 파라미터화

식별 모델을 검증하기

i **스펙트럼의 표시**

3개의 프로세스 단계에서 개별 스펙트럼이 곡선, 점 또는 테이블 라인의 형태로 나타난다.

선택된 스펙트럼은 모든 표시 및 모든 프로세스 단계에서 동시에 강조됩니다.

i **표 및 다이어그램**

표 및 다이어그램의 처리 방법은 부록에 설명되어 있습니다 :

- 표 처리 [표 처리 \(참조: 149페이지, 11.2장\)](#)
- 다이어그램 처리 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)

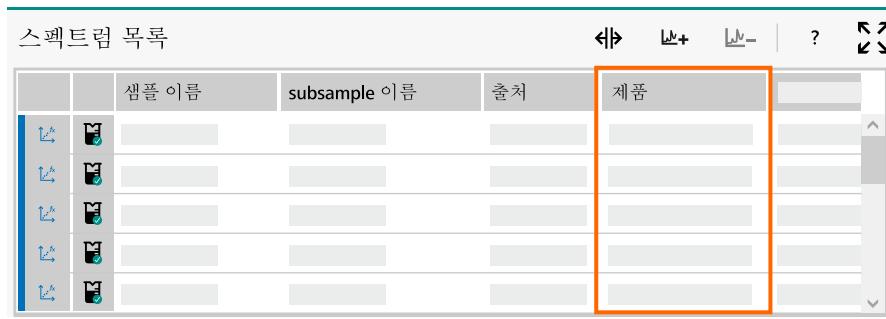
프로세스 단계 '샘플 선택'

제품 리스트 영역에는 선택한 샘플의 제품이 표시됩니다 :

제품 리스트		
제품	스펙트럼의 수	제품분류
[Red]	1	
[Yellow]	1	
[Blue]	1	

각 제품은 제품 색깔로 표시됩니다. 제품 색깔을 클릭하면 다른 색깔을 선택할 수 있습니다.

제품 리스트에서 적어도 하나의 제품을 선택하는 즉시 선택된 제품의 모든 스펙트럼이 영역 **스펙트럼 목록**에 표시됩니다 :



	샘플 이름	subsample 이름	출처	제품
1				
2				
3				
4				
5				

입력 필드에는 샘플의 제품 범주가 표시됩니다(그림에 주황색으로 표시됨)。

다음 아이콘은 데이터 세트에 대한 할당을 보여줍니다 :

-  스펙트럼이 보정 데이터 세트에 지정됩니다.
-  스펙트럼이 유효성 검사 데이터 세트에 할당됩니다.
-  스펙트럼이 특이값 데이터 세트에 할당됩니다.
-  누락되었거나 잘못된 데이터를 표시합니다. 툴팁을 참고합니다.

영역 **스펙트럼 목록**의 스펙트럼은 영역 **스펙트럼 오버레이**에도 나타나며 다음과 같이 표시됩니다 :

- 보정 데이터 세트의 스펙트럼은 **파란색**, 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼은 **녹색**, 특이값 데이터 세트의 스펙트럼은 **빨간색**입니다.
- **제품 색깔을 표시하기** 토글스위치가 활성화된 경우 스펙트럼은 제품 색깔에 따라 색깔로 표시됩니다.

샘플 선택 프로세스 단계를 통해 다음과 같은 작업을 수행할 수 있습니다 :

- **샘플 선택기를 조정합니다**

스펙트럼을 추가하거나 삭제합니다.

- **데이터 세트 분할**

데이터 세트의 자동 또는 수동 분할 :

- **보정 데이터 세트**: 모델은 보정 데이터 세트의 스펙트럼 및 제품 제휴를 사용하여 계산됩니다.
- **유효성 검사 데이터 세트**: 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼 및 제품 제휴는 모델 검증에만 사용됩니다.
- **특이값 데이터 세트**: 특이값 데이터 세트는 모델 또는 모델 검증에 영향을 미치지 않습니다. 특이값은 일부 표에만 정보 목적으로 표시됩니다.

i 예를 들어 첫 번째 단계에서 제한된 수의 샘플만 사용할 수 있는 경우 유효성 검사 데이터 세트 없이 모델을 개발할 수 있거나 검증이 외부 데이터 세트를 통해서만 수행되는 경우.

샘플 선택기를 조정합니다

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [식별 모델 생성](#) (참조: 93페이지, 6.1장).
- 탐색기가 **샘플 선택** 프로세스 단계에 있음.

1 스펙트럼 추가 또는 삭제

샘플 선택 및 제품 제휴는 언제든지 **스펙트럼 목록** 영역에서 조정할 수 있습니다 :

- 스펙트럼 목록에 추가할 샘플을 선택하려면 클릭합니다.
 - 스펙트럼 목록에서 스펙트럼을 제거하는 경우 스펙트럼을 선택합니다 아이콘을 클릭합니다.
- 주의사항: 스펙트럼을 포함한 관련 샘플은 데이터베이스에 유지됩니다.

2 제품 제휴를 변경합니다

- 다른 제품을 할당할 모든 스펙트럼을 선택합니다.
 - 선택한 스펙트럼을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 **제품을 할당** 컨텍스트 메뉴에서 선택합니다.
- 입력 창이 나타납니다 :
- **새로운 제품** 필드를 클릭합니다. 기존 제품을 선택하거나 새 제품 이름을 입력합니다.
 - **[할당]** 클릭하여 제품을 선택한 스펙트럼에 할당합니다.

3 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다.

데이터 세트 자동 분할

이상값 검출을 사용하는 경우 특이값 데이터 세트를 자동으로 생성할 수 있습니다. 나머지 스펙트럼은 보정 데이터 세트와 유효성 검사 데이터 세트로 자동 분할할 수 있습니다.

보정 및 검증을 위해 별도의 샘플을 수집한 경우 샘플을 수동으로 할당할 수 있습니다.

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [식별 모델 생성](#) (참조: 93페이지, 6.1장).

- 탐색기가 **샘플 선택** 프로세스 단계에 있음。

1 데이터 세트 분할을 호출합니다

- 스펙트럼 목록 영역에서  버튼을 클릭합니다.

데이터 세트의 분할 대화상자가 열립니다.

2 특이값 데이터 세트를 가져옵니다

- 특이값 데이터 세트에 스펙트럼을 자동으로 할당하려면 **특이값 측정** 토글스위치를 활성화합니다. 자동 이상값 검출은 스펙트럼의 편차로 인해 스펙트럼 특이값을 감지합니다。
 - 필요한 경우 **특이값 레벨** 조정합니다. 특이값 레벨이 높을 수록 더 많은 스펙트럼 특이값이 감지됩니다. 일반적인 값은 5 % 또는 1 %입니다。

3 유효성 검사 데이터 세트 측정

자동 분할은 보정 데이터 세트와 유효성 검사 데이터 세트가 모집단을 대표하고 서로 독립적이라는 것을 보장합니다.

- 유효성 검사 데이터 세트에 스펙트럼을 자동으로 할당하려면 **유효성 검사 데이터 세트 측정** 토글스위치를 활성화합니다。
 - 백분율** 필드에서 유효성 검사 데이터 세트에 사용되는 스펙트럼의 퍼센트를 정의합니다(예를 들어 20%와 30% 사이)。

4 옵션을 결정

데이터 세트의 분할을 위한 옵션을 결정합니다 :

- 파라미터화를 선택합니다** : 데이터 전처리 및 파장 선택을 스펙트럼에 적용합니다 [식별 모델을 파라미터화\(참조: 103페이지, 6.5 장\)](#)。
주의사항: 이후 파라미터 지정 변경은 데이터 세트 할당에 영향을 미치지 않습니다. 데이터 세트가 다시 분할되지 않는 것。
- 특이값을 버리지 않습니다**: 이미 존재하는 특이값을 유지하고 분할할 때 고려하지 않습니다. 이 옵션을 사용하는 경우 **특이값 레벨** 변경되지 않은 경우에도 특이값 데이터 세트가 증가할 수 있습니다。
- 유효성 검사 데이터 세트를 버리지 않습니다** : 유효성 검사 데이터 세트에 이미 존재하는 스펙트럼은 그대로 유지되며 분할 시 고려되지 않습니다. 이 옵션을 사용하는 경우 **백분율** 변경되지 않은 경우에도 유효성 검사 데이터 세트가 증가합니다。

5 자동 분할을 시작합니다

- [분할] 클릭하십시오.

데이터 세트는 설정에 따라 분할됩니다。

6 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

influence plot 및 score plot

자동 데이터 세트의 분할 후에 influence plot 및 score plot 다이어그램을 사용할 수 있습니다 :

- **샘플 선택** 프로세스 단계에서 해당 영역의 한 영역에서 을 클릭하고 **influence plot** 또는 **score plot** 다이어그램을 선택합니다.

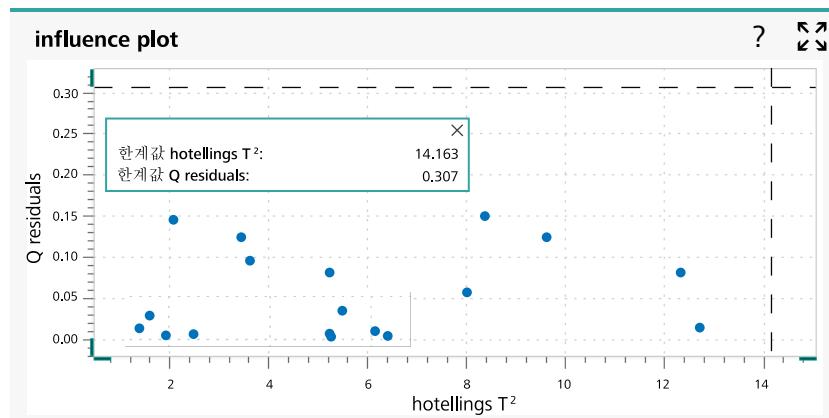
influence plot 및 score plot은 PCA 계산 방법을 기반으로 합니다(주요 구성 요소 분석)。 주요 구성 요소의 수는 선언된 다양성이 최소 95%가 되도록 선택됩니다。

PCA를 위한 초기 포인트로서 다음 형태의 스펙트럼이 사용됩니다 :

- 자동 데이터 세트의 분할에서 **파라미터화를 선택합니다** 옵션이 비활성화된 경우 파장 선택 및 데이터 전처리가 포함되지 않은 스펙트럼。
- 자동 데이터 세트의 분할에서 **파라미터화를 선택합니다** 옵션이 활성화된 경우 파장 선택 및 데이터 전처리가 포함된 스펙트럼。
옵션이 활성화된 경우 주의사항: 파라미터 지정이 변경된 경우 influence plot 및 score plot은 자동 데이터 세트의 분할 후에 비로소 사용할 수 있습니다。

influence plot

influence plot은 스펙트럼의 속성을 설명하고 특이값의 측정 시 도움을 제공합니다。



다이어그램 처리

다이어그램의 표시를 상응하게 조절하고 개별 점 또는 여러 점을 선택할 수 있습니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)。

각 점은 스펙트럼을 나타냅니다。 Hotellings T^2 및 Q residuals의 높은 값은 특이값의 가능성성을 의미합니다。

높은 Hotelling T^2 값을 갖는 스펙트럼은 해당 샘플의 극단적인 조성을 나타냅니다。

높은 Q residuals를 갖는 스펙트럼은 해당 샘플에 특이한 화학적 성분이 있음을 의미합니다。

i 점선은 정의된 특이값 레벨에 대한 임계값(한계값)을 나타냅니다。 자동 데이터 세트의 분할 시 특이값 측정이 실시되지 않은 경우 특이값 레벨은 5%에 해당합니다。

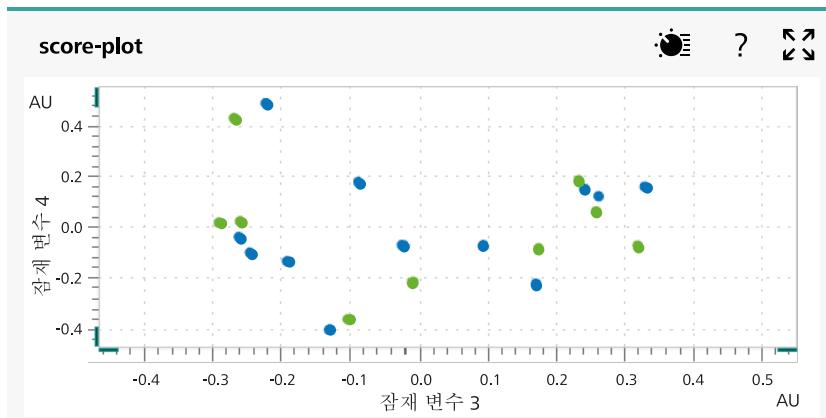
위의 그림에서 가능한 특이값이 발생하지 않습니다。 모든 점은 점선 내에 있습니다。

score plot

i 스펙트럼의 Hotelling T^2 값은 모든 주요 구성 요소의 score를 단일 값으로 요약하는 반면, score plot은 이 score의 더욱 세부적인 분석을 가능하게 합니다。

score plot 내의 각 점은 스펙트럼을 나타냅니다。 처음 두 개의 주요 구성 요소에 대한 score는 x축과 y축에서 읽을 수 있습니다。 score는 정규화되었고, 각 주요 구성 요소는 동일한 중량을 가집니다。

●을 통해 속성은 주요 구성 요소의 다른 각 쌍을 표시할 수도 있습니다。



데이터 세트 수동 분할 (옵션)

전제조건 :

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [식별 모델 생성](#) ([참조: 93페이지, 6.1장](#))。
- 탐색기가 샘플 선택 프로세스 단계에 있음。



i 수동 분할 전에 자동 데이터 세트의 분할이 실시되는 경우 **influence plot** 및 **score plot**을 사용할 수 있습니다.

1 스펙트럼 다시 할당하기

- 영역 중 하나에서 스펙트럼을 선택합니다.
influence plot에서의 선택에 대한 예시 :
 - **influence plot** 범위를 엽니다.
 - influence plot에서 하나의 점 또는 여러 점을 선택합니다(참조: 152페이지, "여러 점 또는 적정곡선 선택")。
 - 선택된 점 중 하나를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하여 컨텍스트 메뉴를 엽니다。 스펙트럼을 데이터 세트에 할당합니다 :
- ↗ 보정 데이터 세트
 ↗ 유효성 검사 데이터 세트
 ↗ 특이값 데이터 세트

2 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

6.3 식별 모델을 계산

첫 번째 모델은 파라미터화 없이 계산할 수 있습니다。 따라서 검증의 결과에 대한 벤치마크가 생성됩니다。 나중에 파라미터화의 영향을 더 잘 평가할 수 있습니다。

i 노이즈 또는 기타 아티팩트가 일부 파장을 사용할 수 없게 생성되는 경우 이러한 파장은 직접 제외할 수 있습니다 [식별 모델을 파라미터화\(참조: 103페이지, 6.5장\)](#).

모델을 계산합니다

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 식별 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 계산을 시작합니다

- [계산] 버튼을 클릭하여 모델을 계산합니다。



1 [계산] 버튼이 비활성 상태인 경우 그 원인은 다음일 수 있습니다 :

- 모델이 이미 계산되었고 이후 변경이 없었습니다.
- 프로세스 단계 중 하나에 잘못된 입력이 있습니다. 탐색기에 서 해당 영역의 프로세스 단계가 적색으로 표시됩니다. 입력이 잘못된 필드는 적색 프레임으로 표시됩니다.

6.4 식별 모델을 검증하기

식별 모델을 검증하기 프로세스 단계를 통해 다음 샘플을 검증할 수 있습니다 :

▪ 보정 데이터 세트의 샘플

이 샘플들은 모델을 만드는 데 사용되었습니다. 따라서 모델에 의한 올바른 분류는 다른 샘플보다 쉽습니다.

▪ 유효성 검사 데이터 세트의 샘플 (있는 경우)

이 샘플들은 모델에 따라 다릅니다. 검증의 결과는 알 수 없는 샘플을 식별하기 위한 더 나은 기준입니다.

1 다음은 제품분류일 수도 있지만 제품에 대해 설명합니다. 제품분류는 여러 제품을 결합하여 모델 계층 구조에 사용됩니다 [모델 계층 구조 \(참조: 126페이지, 8장\)](#).

샘플의 식별

이 모델에서는 확률이 각 제품의 샘플에 할당됩니다.

1 이 확률은 서로 독립적입니다. 이 값이 100%로 합산되지 않습니다.

이 값은 서로 상대적인 것으로 간주해야 하며 이런 접근 방식은 다양한 제품의 비교를 가능하게 합니다.

평가는 설정 가능한 **확률 임계값** 및 개별 제품에 대한 검증을 통해 이루어집니다 :

1. 그 확률이 확률 임계값을 초과하는 각 제품에 대해 샘플 검증이 상응하는 검증 모델을 통해 수행됩니다. 검증에 실패하는 경우 해당 제품에 대한 확률은 영으로 설정됩니다.
2. 단계 1에서 변형된 확률을 통한 평가 :
 - a. 확률 임계값을 초과하는 확률이 존재하지 않는 경우 식별에 실패한 것입니다(식별 상태 **식별하지 못 했기**)。
 - b. 하나의 개별 확률이 확률 임계값을 초과하는 경우 샘플이 성공적으로 식별된 것이며 이 샘플은 상응하는 제품에 할당됩니다(식별 상태 **식별했기**)。
 - c. 복수의 확률이 확률 임계값을 초과하는 경우 이런 예측은 다적으로 해석되며 식별에 실패한 것입니다(식별 상태 **다의적임**)。

샘플의 검증의 결과

OMNIS Software는 모델에 의해 측정된 제품을 예상 제품과 비교합니다.
따라서 검증의 결과가 도출됩니다 :

- **성공적**: 동일시는 성공적이고 예상 제품과 일치합니다.
- **실패함**: 일치, 동일시 또는 다의적인 동일시가 없습니다.

검증 개요 영역

검증 개요 범위는 보정 데이터 세트 및 유효성 검사 데이터 세트(있는 경우)의 샘플 결과를 요약합니다。

좌측에는 모든 보정 샘플 및 검증 샘플에 대한 개요가 표시됩니다 :

총체	
% 성공적	% 단위의 샘플이 올바르게 분류
성공적	올바르게 분류된 샘플 수
실패함	잘못 분류된 샘플 수
스펙트럼 수	보정 데이터 세트 및 유효성 검사 데이터 세트에 있는 스펙트럼의 수

우측에는 개별 제품 및 제품분류에 대한 개요가 표시됩니다 :

제품/제품분류	실패함	성공적	% 성공적
제품 A	제품 A로 분류되지 않은 제품 A 샘플 수	올바르게 분류된 제품 A 샘플 수	% 단위의 제품 A 샘플이 올바르게 분류
제품 B	제품 B로 분류되지 않은 제품 B 샘플 수	올바르게 분류된 제품 B 샘플 수	% 단위의 제품 B 샘플이 올바르게 분류
제품분류 C	제품분류 C로 분류되지 않은 제품분류 C 샘플 수	올바르게 분류된 제품분류 C 샘플 수	% 단위의 제품분류 C 샘플이 올바르게 분류

검증의 결과 영역

검증의 결과 범위는 개별 샘플의 자세한 결과를 표시합니다. **검증 개요** 범위에서 선택한 모든 제품의 샘플이 표시됩니다.

i 각 샘플에 대해, 그 본래 확률이 확률 임계값을 초과하는 제품이 표시됩니다. 0.0% 확률이 표시되는 경우 해당 제품의 검증에 실패한 것입니다.

데이터 처리 및 복사

- 표 처리 [표 처리 \(참조: 149페이지, 11.2장\)](#)

식별 모델을 최적화

다음의 조치들은 식별 모델을 개선하는 데 도움이 될 수 있습니다.

1 확률 임계값 조정

- 다수의 예측이 다의적이거나 또는 다수의 0.0% 확률이 발생하는 경우 확률 임계값을 높일 수 있습니다.
- 확률 임계값에 도달하지 않아서 다수의 샘플이 식별되지 않은 경우 확률 임계값을 낮출 수 있습니다.
- 가능성의 스레시홀드 조정하려면 다음 단계를 수행합니다 :
 -  클릭하면 식별 모델의 속성을 엽니다.
 - 선택 목록에서 **parameter** 선택합니다.
 - **가능성의 스레시홀드** 조정합니다. 표준값은 80%입니다.
 - 식별 모델을 다시 계산하고 점검합니다.

2 파라미터화의를 조정

- 데이터 전처리를 조정합니다 [데이터 전처리 \(참조: 107페이지, 6.5.2장\)](#).
- 파장범위를 조정합니다 [파장 선택 \(참조: 105페이지, 6.5.1장\)](#).

3 모델 계층 구조 개발

모델 계층 구조 버튼은 식별 모델의 계층적 구조화 및 식별된 샘플의 정량적 분석을 가능하게 합니다 [모델 계층 구조 \(참조: 126페이지, 8장\)](#)。

6.5 식별 모델을 파라미터화

식별 모델을 파라미터화 프로세스 단계를 통해 스펙트럼을 최적화할 수 있습니다. 아티팩트 및 비선형성이 수정됩니다. 올바르게 수행되는 경우 파라미터화는 모델의 정확성과 견고성을 개선합니다.

파라미터화는 다음에 사용됩니다 :

- 보정 데이터 세트의 모든 스펙트럼
- 유효성 검사 데이터 세트 및 특이값 데이터 세트에 있는 모든 스펙트럼

 예측이 작업 영역 **샘플** 내에 있는 경우 샘플의 스펙트럼이 기록되고 모델을 통해 평가됩니다. 이 스펙트럼에 대해서도 모델에 정의되어 있는 파라미터화가 사용됩니다.

두 가지 파라미터화 옵션을 사용할 수 있습니다 :

- 사용할 파장범위를 정의합니다.



- 스펙트럼을 보다 적절한 형태로 만들기 위해 데이터 전처리를 사용합니다.

스펙트럼의 육안 검사는 **샘플 선택** 프로세스 단계에서 시작합니다。

스펙트럼을 표시합니다

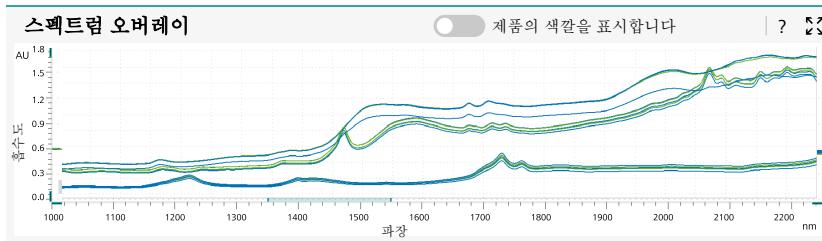
전제조건:

- 모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다.

1 검사할 스펙트럼의 선택

- 샘플 선택** 프로세스 단계의 **제품 리스트** 범위에서 스펙트럼을 표시할 모든 제품을 선택합니다.

스펙트럼 오버레이 범위는 선택한 제품의 스펙트럼을 표시합니다。



이 그림은 3가지 다른 제품의 스펙트럼을 보여줍니다。서로 다른 제품의 스펙트럼은 시각적으로 우수하거나 구별하기가 어려울 수 있습니다。

스펙트럼은 다음과 같이 표시됩니다 :

- 보정 데이터 세트의 스펙트럼은 **파란색**, 검증 데이터 세트의 스펙트럼은 **녹색**, 특이값 데이터 세트의 스펙트럼은 **빨간색**입니다。
- 제품 색깔을 표시하기 토글스위치가 활성화된 경우 스펙트럼은 제품 색깔에 따라 색깔로 표시됩니다。

2 스펙트럼 분석

- 표 처리 [표 처리 \(참조: 149페이지, 11.2장\)](#)
- 다이어그램 처리 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)

후속 단계

- 파장 선택 [파장 선택 \(참조: 105페이지, 6.5.1장\)](#)
- 데이터 전처리 정의 [데이터 전처리 \(참조: 107페이지, 6.5.2장\)](#)

6.5.1 파장 선택

파장의 선택은 식별 모델을 개선할 수 있습니다。 예: 높은 흡광도 값에서 노이즈가 보이는 경우 해당 파장범위를 제외할 수 있습니다。

모델은 정의된 파장범위를 사용합니다。 정의된 파장범위가 없는 경우 모델은 모든 파장을 사용합니다。

파장범위 정의

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 표시할 스펙트럼의 선택

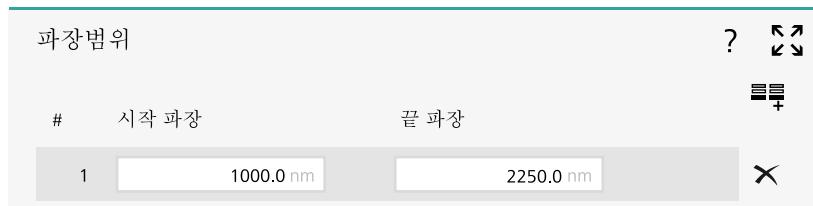
- **샘플 선택** 프로세스 단계의 **제품 리스트** 범위에서 스펙트럼을 표시할 모든 제품을 선택합니다。

2 프로세스 단계 '식별 모델을 파라미터화' 전환

- 탐색기에서 **식별 모델을 파라미터화** 클릭합니다。

3 파장범위 추가

- **파장범위** 영역에서 클릭하여 파장 범위를 추가합니다。



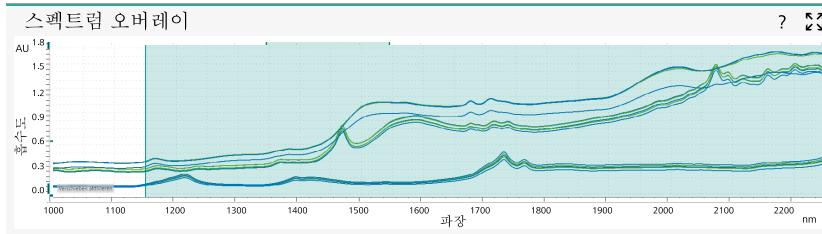
파장범위가 추가됩니다。 범위는 먼저 모든 파장을 포함합니다。

4 파장범위 결정

다음 방법 중 하나로 파장범위를 결정합니다 :

- 입력 필드에 **시작 파장** 및 **끝 파장** 입력하여 파장범위를 입력합니다。

- 다이어그램에서 파장 범위를 지정하려면 다음 단계를 수행합니다 :
 - **스펙트럼 오버레이** 영역에서 [이동 활성화] 버튼을 클릭합니다.
 - 커서가 아이콘으로 표시될 때까지 커서를 강조된 영역의 좌측 가장자리로 움직입니다.
 - 왼쪽 마우스 버튼을 누른 상태에서 왼쪽 여백을 적절한 위치로 이동합니다.
 - 강조된 영역의 우측면에서도 이 작업을 동일하게 수행합니다.
 - 파장 범위를 이동시키는 경우 커서가 아이콘으로서 표시될 때까지 커서를 이 영역 위로 움직입니다. 마우스 왼쪽 버튼을 사용하여 범위를 왼쪽 또는 오른쪽으로 이동합니다.
 - **[이동 비활성화]** 클릭하십시오.



이 그림은 1150nm에서 2250nm까지의 파장 범위를 정의합니다。 이 범위는 모델에서 사용됩니다。

5 파장 범위를 더 추가합니다

클릭하여 더 많은 파장 범위를 추가할 수 있습니다。

파장 범위는 중첩되지 않아야 합니다

새 파장 범위가 먼저 기존 파장 범위와 겹칩니다。 겹치지 않도록 파장 범위를 조정합니다。

6 모델을 저장합니다

을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 누릅니다。

데이터 레코드의 분할 또는 이상값 검출 시 새로 생성된 파장 선택을 고려해야 하는 경우 데이터 세트를 다시 분할할 수 있습니다。

6.5.2 데이터 전처리

적절한 데이터 전처리는 식별 모델을 개선할 수 있습니다。 예: 기준선 이 동은 대부분의 응용 프로그램에 대한 관련 정보를 포함하지 않고 제거할 수 있습니다。

데이터 전처리 정의

전제조건:

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 표시할 스펙트럼의 선택

- 샘플 선택 프로세스 단계의 제품 리스트 범위에서 스펙트럼을 표시할 모든 제품을 선택합니다。

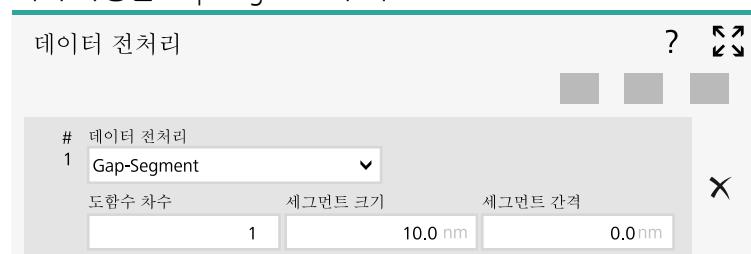
2 프로세스 단계 '식별 모델을 파라미터화' 전환

- 탐색기에서 식별 모델을 파라미터화 클릭합니다。

3 데이터 전처리 단계를 추가

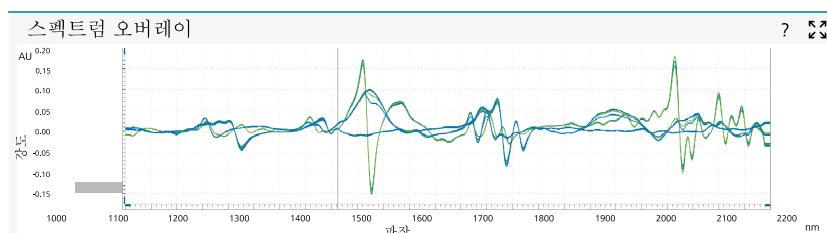
- 데이터 전처리 영역에서 클릭하여 데이터 전처리 단계를 추가 합니다.
- 데이터 전처리 필드에서 데이터 전처리 종류를 선택하고 해당 필드를 기입합니다。

기준선의 일정한 배출관(비파장 의존적)을 제거하는 첫 번째 순서에서 파생된 Gap-Segment의 예 :



1단계에서 선택한 제품의 사전 처리된 스펙트럼은 **스펙트럼 오버레이** 범위에 즉시 표시됩니다。

데이터 전처리 후 스펙트럼은 다르게 보입니다, 예를 들어。 :



4 추가 데이터 전처리 단계를 추가합니다

클릭하여 추가 데이터 전처리 단계를 추가할 수 있습니다.

여러 데이터 전처리 단계를 사용할 경우 순서가 중요할 수 있습니다. Gap-Segment 또는 Savitzky-Golay는 SNV보다 먼저, SNV는 detrend보다 먼저 사용하는 것이 좋습니다.

및 아이콘을 클릭하여 행을 위로 또는 아래로 이동시키고 이를 통해 순서를 결정할 수 있습니다.

5 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

데이터 레코드의 분할 또는 이상값 검출 탐지할 때 새로 생성된 데이터를 고려해야 하는 경우 데이터 세트를 다시 분할할 수 있습니다.

6.6 식별 모델 게시

측정을 위해 모델을 사용하기 위해서는 모델을 게시해야 합니다. 이를 통해 게시된 버전 및 해당 버전에 측정을 주지 않고 모델을 추가로 개발할 수 있습니다.

식별 모델 게시

전제조건:

- 모델이 계산되고 저장됩니다.
- 모델이 열려 있습니다.

1 대화상자 열기

- 아이콘을 클릭하여 **식별 모델 게시** 대화상자를 엽니다.

모델이 이전에 게시되어 method에 사용된 경우 **method 업데이트** 체크박스를 선택하여 이러한 method를 자동으로 업데이트할 수 있습니다.

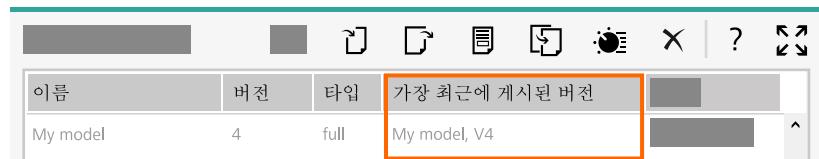
주의사항: 자동으로 업데이트되지 않습니다 :

- 열린 method
- 서명 및 게시된 method
- 데이터 권한 필터링이 활성화된 경우: 현재 로그인한 사용자의 데이터 권한이 없는 method입니다

2 게시

- [게시] 버튼을 클릭하여 모델을 게시합니다.

모델 ► 식별 모델 아래에 가장 최근에 게시된 버전이 표시됩니다 :



아제 **PREDICT** 명령은 모델의 게시된 버전에 액세스할 수 있습니다。

7 검증 모델

i OMNIS Software의 과정에 대한 설명은 부록을 참조합니다([참조: 166 페이지, "모델 개발"](#))。

검증 모델은 하나의 샘플 그룹을 다른 샘플로부터 구분하는 것을 가능하게 합니다。 예를 들어 이 검증 모델은, 사용 가능한 샘플(포지티브 샘플)을 사용할 수 없는 샘플(네거티브 샘플)에서 구분하는 용도에 적합합니다。

7.1 검증 모델 만들기

검증 모델 만들기

전제조건 :

- 스펙트럼이 포함된 데이터 세트가 생성된 상태입니다([스펙트럼 기록 \(참조: 54페이지, 4.2장\)](#))。

1 검증 모델 생성 및 이름 부여

- 모델 ► 정량화 모델**에서  클릭하십시오。
새 검증 모델이 새 탭에 나타납니다。
- 정량화 모델의 이름** 입력 필드에 적절한 이름을 입력합니다。

2 보정 샘플 선택

- 샘플 리스트** 클릭하여 모든 샘플 리스트를 표시합니다。
- 보정 데이터 세트를 위해 준비된 샘플 리스트를 선택합니다。

검증 모델 만들기

검증 모델의 이름

샘플 리스트

검색

XDS/DS 가져오기

보정 데이터 세트

이름	저장됨

i 샘플은 검색을 통해 선택할 수도 있습니다。 이외에도 XDS 장비 및 DS 장비에서 샘플을 가져올 수 있습니다([XDS/DS Analyzer\(수량화\)를 변경합니다 \(참조: 160페이지, 11.6장\)](#))。

i 샘플 선택은 나중에 조정할 수 있습니다.

3 검증 샘플 선택 (옵션)

- **유효성 검사 데이터 세트를 추가합니다** 클릭하십시오.
- 유효성 검사 데이터 세트를 위해 준비된 샘플 리스트를 해당 체크 박스를 이용해 포지티브 유효성 검사 데이터 세트 또는 네거티브 유효성 검사 데이터 세트에 할당합니다.

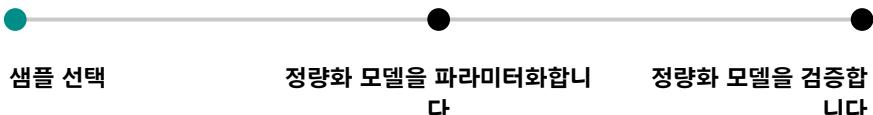
유효성 검사 데이터 세트			
이름	저장됨	포지티브	네거티브
[redacted]	[redacted]	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
[redacted]	[redacted]	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
[redacted]	[redacted]	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

4 검증 모델 만들기

- [만들기] 클릭하십시오.
- 모델 저장: 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

7.2 샘플 선택 및 데이터 세트 분할

검증 모델 탭의 최상단에는 **탐색기**라는 수평 탐색 막대가 표시됩니다. 탐색기는 다른 단계를 통해 모델 개발을 수행합니다.



i 스펙트럼의 표시

3개의 프로세스 단계에서 개별 스펙트럼이 곡선, 점 또는 테이블 라인의 형태로 나타난다.

선택된 스펙트럼은 모든 표시 및 모든 프로세스 단계에서 동시에 강조 됩니다.

i 표 및 다이어그램

표 및 다이어그램의 처리 방법은 부록에 설명되어 있습니다 :

- 표 처리 [표 처리 \(참조: 149페이지, 11.2장\)](#)
- 다이어그램 처리 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)

프로세스 단계 '샘플 선택'

보정 데이터 세트 영역에는 보정 데이터 세트의 스펙트럼이 나열됩니다 :

보정 데이터 세트				◀▶	◀+/-	?	⤒⤓
	샘플 이름	subsample 이름	소스				
⤒⤓	_____	_____	_____				
⤒⤓	_____	_____	_____				
⤒⤓	_____	_____	_____				

유효성 검사 데이터 세트를 위한 샘플이 선택된 경우 그 스펙트럼이 **유효성 검사 데이터 세트** 영역에 나타납니다.

다음 아이콘은 데이터 세트에 대한 할당을 보여줍니다 :



스펙트럼이 보정 데이터 세트에 지정됩니다.



스펙트럼이 포지티브 유효성 검사 데이터 세트에 할당되었습니다.



스펙트럼이 네거티브 유효성 검사 데이터 세트에 할당되었습니다.

스펙트럼 오버레이 영역에는 보정 데이터 세트의 스펙트럼이 **청색으로** 표시되고 포지티브 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼이 **녹색으로** 표시되며 네거티브 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼이 **적색으로** 표시됩니다.

샘플 선택 프로세스 단계를 통해 다음과 같은 작업을 수행할 수 있습니다 :

- **샘플 선택기를 조정합니다**

스펙트럼을 추가하거나 삭제합니다.

- **데이터 세트 분할**

데이터 세트의 자동 또는 수동 분할 :

- **보정 데이터 세트** : 모델은 보정 데이터 세트의 스펙트럼으로 계산됩니다.
- **유효성 검사 데이터 세트** : 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼은 모델을 검증하는 용도로만 사용됩니다.

i 예를 들어 첫 번째 단계에서 제한된 수의 샘플만 사용할 수 있는 경우 유효성 검사 데이터 세트 없이 모델을 개발할 수 있거나 검증이 외부 데이터 세트를 통해서만 수행되는 경우.

샘플 선택기를 조정합니다

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [검증 모델 만들기](#)(참조: 110페이지, 7.1장).

- 탐색기가 샘플 선택 프로세스 단계에 있음。

1 스펙트럼 추가 또는 삭제

- 스펙트럼 추가 : 보정 데이터 세트 영역 또는 유효성 검사 데이터 세트 영역에서 아이콘을 클릭합니다.
- 스펙트럼 제거 : 스펙트럼을 선택하고 아이콘을 클릭합니다.
주의사항: 스펙트럼을 포함한 관련 샘플은 데이터베이스에 유지됩니다.

2 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

데이터 세트 자동 분할

이 분할에는 보정 데이터 세트의 모든 스펙트럼 및 양측 유효성 검사 데이터 세트의 모든 스펙트럼이 관련됩니다. 이 분할은 다음과 같은 가능성을 제공합니다 :

- 네거티브 유효성 검사 데이터 세트의 자동 생성 (옵션)
네거티브 유효성 검사 데이터 세트를 위한 스펙트럼은 이상값 검출을 통해 측정됩니다(스펙트럼 특이값)。
- 포지티브 유효성 검사 데이터 세트의 자동 생성 (옵션)
나머지 스펙트럼은 보정 데이터 세트 및 포지티브 유효성 검사 데이터 세트로 자동으로 분할될 수 있습니다.

이 샘플은 언제든지 수동으로 할당할 수도 있습니다.

전제조건 :

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [검증 모델 만들기 \(참조: 110페이지, 7.1장\)](#)。
- 탐색기가 샘플 선택 프로세스 단계에 있음。

1 데이터 세트 분할을 호출합니다

- 보정 데이터 세트 영역에서 버튼을 클릭합니다.

데이터 세트의 분할 대화상자가 열립니다.



2 네거티브 유효성 검사 데이터 세트 측정 (옵션)

- 스펙트럼 특이값을 네거티브 유효성 검사 데이터 세트에 자동으로 할당하는 경우 **네거티브 스펙트럼 측정** 토글스위치를 활성화시킵니다。
 - 필요한 경우 **특이값 레벨** 조정합니다。 특이값 레벨이 높을 수록 더 많은 스펙트럼 특이값이 감지됩니다。 일반적인 값은 5% 또는 1%입니다。

! 네거티브 스펙트럼의 측정은 유의해서 사용해야 합니다。 높은 특이값 레벨은 포지티브 결과의 신뢰성을 개선할 수 있습니다。 하지만 복수의 포지티브 샘플이 간과될 수도 있으며 왜곡되어 네거티브로 분류될 수 있습니다。
측정된 네거티브 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼에서는 이 것이 실제로 특이값인지 여부를 체크해야 합니다。 이 과정에서 influence plot 및 score plot이 도움이 될 수 있습니다。

3 포지티브 유효성 검사 데이터 세트 측정 (옵션)

자동 분할에서는 보정 데이터 세트 및 포지티브 유효성 검사 데이터 세트가 모집단을 대표하고 서로 독립적이라는 것이 보장됩니다。

- 포지티브 유효성 검사 데이터 세트에 스펙트럼을 자동으로 할당하는 경우 **포지티브 스펙트럼 측정** 토글스위치를 활성화시킵니다。
 - 백분율** 필드에서 포지티브 유효성 검사 데이터 세트에 사용되는 스펙트럼의 퍼센트를 정의합니다(예를 들어 20%와 30% 사이)。

4 옵션을 결정

데이터 세트의 분할을 위한 옵션을 결정합니다 :

- 파라미터화를 선택합니다:** 데이터 전처리 및 파장 선택을 스펙트럼에 적용합니다 [검증 모델의 파라미터 지정\(참조: 120페이지, 7.5 장\)](#)。
주의사항: 이후 파라미터 지정 변경은 데이터 세트 할당에 영향을 미치지 않습니다。 데이터 세트가 다시 분할되지 않는 것。
- 네거티브 스펙트럼 유지 :** 네거티브 유효성 검사 데이터 세트에 이미 존재하는 스펙트럼은 그대로 유지되며 분할 시 고려되지 않습니다。 이 옵션을 사용하는 경우 **특이값 레벨**이 변경되지 않은 경우에도 네거티브 유효성 검사 데이터 세트가 증가할 수 있습니다。
- 포지티브 스펙트럼 유지 :** 포지티브 유효성 검사 데이터 세트에 이미 존재하는 스펙트럼은 그대로 유지되며 분할 시 고려되지 않습니다。 이 옵션을 사용하는 경우 **백분율**이 변경되지 않은 경우에도 포지티브 유효성 검사 데이터 세트가 증가합니다。



1 유효성 검사 데이터 세트를 위한 별도의 스펙트럼이 추가된 경우 **네거티브 스펙트럼 유지 및 포지티브 스펙트럼 유지** 옵션을 활성화시켜야 합니다. 그렇지 않을 경우 모든 스펙트럼이 병합되고 다시 분할되며 그 결과 원치 않는 경과가 발생할 수 있습니다.

5 자동 분할을 시작합니다

- [분할] 클릭하십시오.

데이터 세트는 설정에 따라 분할됩니다.

6 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

influence plot 및 score plot

자동 데이터 세트의 분할 후에 influence plot 및 score plot 다이어그램을 사용할 수 있습니다 :

- **샘플 선택** 프로세스 단계에서 해당 영역의 한 영역에서 을 클릭하고 **influence plot** 또는 **score plot** 다이어그램을 선택합니다.

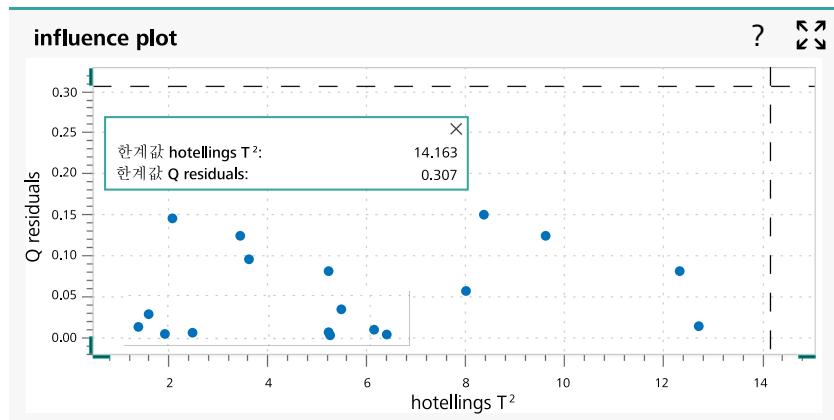
influence plot 및 score plot은 **PCA** 계산 방법을 기반으로 합니다(주요 구성 요소 분석)。 주요 구성 요소의 수는 선언된 다양성이 최소 95%가 되도록 선택됩니다。

PCA를 위한 초기 포인트로서 다음 형태의 스펙트럼이 사용됩니다 :

- 자동 데이터 세트의 분할에서 **파라미터화를 선택합니다** 옵션이 비활성화된 경우 파장 선택 및 데이터 전처리가 포함되지 않은 스펙트럼。
 - 자동 데이터 세트의 분할에서 **파라미터화를 선택합니다** 옵션이 활성화된 경우 파장 선택 및 데이터 전처리가 포함된 스펙트럼。
- 옵션이 활성화된 경우 주의사항: 파라미터 지정이 변경된 경우 influence plot 및 score plot은 자동 데이터 세트의 분할 후에 비로소 사용할 수 있습니다。

influence plot

influence plot은 스펙트럼의 특징적 속성을 설명하고 네거티브 유효성 검사 데이터 세트의 스펙트럼 특이값 측정 시 도움을 제공합니다.



i 다이어그램 처리

다이어그램의 표시를 상응하게 조절하고 개별 점 또는 여러 점을 선택할 수 있습니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3장\)](#)。

각 점은 스펙트럼을 나타냅니다。 Hotellings T^2 및 Q residuals의 높은 값은 특이값의 가능성을 의미합니다。

높은 Hotelling T^2 값을 갖는 스펙트럼은 해당 샘플의 극단적인 조성을 나타냅니다。

높은 Q residuals를 갖는 스펙트럼은 해당 샘플에 특이한 화학적 성분이 있음을 의미합니다。

i 점선은 정의된 특이값 레벨에 대한 임계값(한계값)을 나타냅니다。 자동 데이터 세트의 분할 시 네거티브 스펙트럼이 측정되지 않은 경우 특이값 레벨은 5%에 해당합니다。

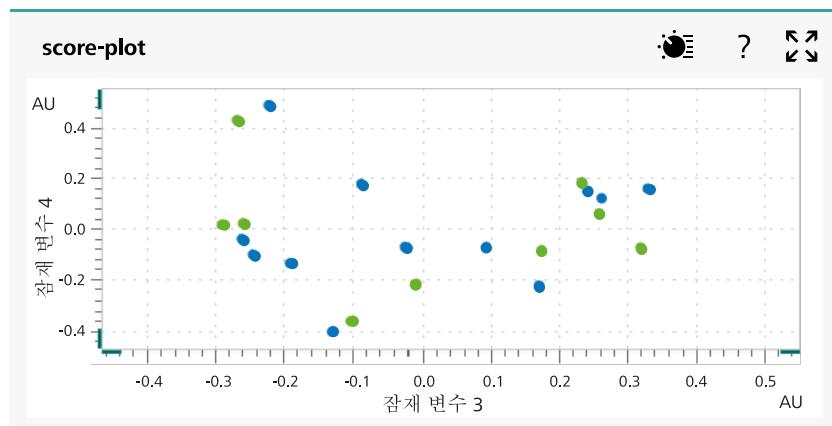
위의 그림에는 가능한 네거티브 스펙트럼이 표시되지 않습니다。 모든 점은 점선 내에 있습니다。

score plot

i 스펙트럼의 Hotelling T^2 값은 모든 주요 구성 요소의 score를 단일 값으로 요약하는 반면, score plot은 이 score의 더욱 세부적인 분석을 가능하게 합니다。

score plot 내의 각 점은 스펙트럼을 나타냅니다。 처음 두 개의 주요 구성 요소에 대한 score는 x축과 y축에서 읽을 수 있습니다。 score는 정규화되었고, 각 주요 구성 요소는 동일한 중량을 가집니다。

을 통해 속성은 주요 구성 요소의 다른 각 쌍을 표시할 수도 있습니다。



데이터 세트 수동 분할 (옵션)

전제조건 :

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다 [검증 모델 만들기](#)([참조: 110페이지, 7.1장](#))。
 - 탐색기가 [샘플 선택](#) 프로세스 단계에 있음。
- i** 수동 분할 전에 자동 데이터 세트의 분할이 실시되는 경우 [influence plot](#) 및 [score plot](#)을 사용할 수 있습니다.

1 스펙트럼 다시 할당하기

- 영역 중 하나에서 스펙트럼을 선택합니다。
influence plot에서의 선택에 대한 예시 :
 - [influence plot](#) 범위를 엽니다.
 - influence plot에서 하나의 점 또는 여러 점을 선택합니다([참조: 152페이지, "여러 점 또는 적정곡선 선택"](#))。
 - 선택된 점 중 하나를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하여 컨텍스트 메뉴를 엽니다. 스펙트럼을 데이터 세트에 할당합니다 :

[긍정적 유효성 검사 데이터 세트](#)

[부정적 유효성 검사 데이터 세트](#)

[보정 데이터 세트](#)

2 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

7.3 검증 모델 계산

첫 번째 모델은 파라미터화 없이 계산할 수 있습니다。 따라서 검증의 결과에 대한 벤치마크가 생성됩니다。 나중에 파라미터화의 영향을 더 잘 평가할 수 있습니다。

i 노이즈 또는 기타 아티팩트가 일부 파장을 사용할 수 없게 생성되는 경우 이러한 파장은 직접 제외할 수 있습니다 [검증 모델의 파라미터 지정\(참조: 120페이지, 7.5장\)](#).

모델을 계산합니다

전제조건 :

- **모델** 작업 영역에서 검증 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 계산을 시작합니다

- [계산] 버튼을 클릭하여 모델을 계산합니다。

i [계산] 버튼이 비활성 상태인 경우 그 원인은 다음일 수 있습니다 :

- 모델이 이미 계산되었고 이후 변경이 없었습니다。
- 프로세스 단계 중 하나에 잘못된 입력이 있습니다。 탐색기에 서 해당 영역의 프로세스 단계가 적색으로 표시됩니다。 입력이 잘못된 필드는 적색 프레임으로 표시됩니다。

7.4 검증 모델 검증

[정량화 모델을 검증합니다](#) 프로세스 단계를 통해 다음 샘플을 검증할 수 있습니다 :

▪ 보정 데이터 세트의 샘플

이 샘플들은 모델을 만드는데 사용되었습니다。 따라서 모델에 의한 올바른 분류는 다른 샘플보다 쉽습니다。

▪ 포지티브 및 네거티브 유효성 검사 데이터 세트의 샘플 (있는 경우)

이 샘플들은 모델에 영향을 받지 않습니다。 그 검증의 결과는 알 수 없는 샘플을 검증하기 위한 더욱 개선된 기준입니다。

샘플의 검증의 결과

각 샘플에 대해 검증 모델에서 하나의 결과가 측정됩니다(포지티브 또는 네거티브)。 보정 데이터 세트의 샘플 및 유효성 검사 데이터 세트의 샘플에 대해 포지티브 결과가 요구됩니다。 네거티브 유효성 검사 데이터 세트의 샘플에 대해 네거티브 결과가 요구됩니다。 OMNIS Software는 모델에서 측정된 결과를 요구되는 결과와 비교합니다。 따라서 검증의 결과가 도출됩니다 :

- **성공적** : 모델에서 측정된 결과가 요구되는 결과와 일치합니다.
- **실패함** : 모델에서 측정된 결과가 요구되는 결과와 일치하지 않습니다.

검증 개요 영역

검증 개요 영역은 보정 데이터 세트 및 유효성 검사 데이터 세트(있는 경우)의 샘플 결과를 요약합니다.

좌측에는 모든 보정 샘플 및 검증 샘플에 대한 개요가 표시됩니다 :

총체	
% 성공적	올바르게 예측된 샘플 (%)
성공적	올바르게 예측된 샘플 수
실패함	잘못 예측된 샘플 수
스펙트럼 수	보정 데이터 세트 및 양측 유효성 검사 데이터 세트에 있는 스펙트럼의 수

우측 면에는 개별 데이터 세트에 대한 개요가 표시됩니다.

검증의 결과 영역

검증의 결과 영역은 개별 샘플의 자세한 결과를 표시합니다。 **검증 개요** 영역에서 선택한 모든 데이터 세트의 샘플이 표시됩니다。

검증 모델 최적화

다음 조치들은 검증 모델을 개선하는 데 도움이 될 수 있습니다 :

- 데이터 전처리를 조정합니다 [데이터 전처리 \(참조: 123페이지, 7.5.2 장\)](#)。
- 파장 범위를 조정합니다 [파장 선택 \(참조: 121페이지, 7.5.1장\)](#)。

데이터 레코드의 분할을 다시 하는 경우 검증 모델은 네거티브 스펙트럼의 측정을 통해 요구에 맞게 조정할 수 있습니다 :

- 더 높은 특이값 레벨은 포지티브 결과의 신뢰성을 높일 수 있습니다。
그 의미 : 더 적은 수의 포지티브 결과가 나타나지만 더 많은 포지티브 샘플이 간과됩니다。
- 더 낮은 특이값 레벨(또는 네거티브 스펙트럼 측정의 포기)는 더 적은 수의 포지티브 샘플이 간과되는 결과를 가져올 수 있습니다。 그 의미 : 더 적은 수의 잘못된 네거티브 결과가 나타나지만 더 많은 네거티브 샘플이 왜곡되어 포지티브 결과로 분류됩니다。

7.5 검증 모델의 파라미터 지정

정량화 모델을 파라미터화합니다 프로세스 단계를 통해 스펙트럼을 최적화할 수 있습니다。 아티팩트 및 비선형성이 수정됩니다。 올바르게 수행되는 경우 파라미터화는 모델의 정확성과 견고성을 개선합니다。

파라미터화는 다음에 사용됩니다 :

- 보정 데이터 세트의 모든 스펙트럼
- 양측 유효성 검사 데이터 세트에 있는 모든 스펙트럼

i 예측이 작업 영역 **샘플** 내에 있는 경우 샘플의 스펙트럼이 기록되고 모델을 통해 평가됩니다。 이 스펙트럼에 대해서도 모델에 정의되어 있는 파라미터화가 사용됩니다。

두 가지 파라미터화 옵션을 사용할 수 있습니다 :

- 사용할 파장범위를 정의합니다。
- 스펙트럼을 보다 적절한 형태로 만들기 위해 데이터 전처리를 사용합니다。

스펙트럼의 육안 검사는 **샘플 선택** 프로세스 단계에서 시작합니다。

스펙트럼을 표시합니다

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 프로세스 단계 '샘플 선택'

- 탐색기에서 **샘플 선택** 프로세스 단계를 클릭합니다。

이 프로세스 단계에서 스펙트럼은 표 형식과 곡선 형태로 동시에 조사할 수 있습니다。 자동 데이터 세트의 분할이 실시된 경우 influence plot 및 score plot을 사용할 수도 있습니다。

2 스펙트럼 분석

- 표 처리 **표 처리** (참조: 149페이지, 11.2장)
- 다이어그램 처리 **다이어그램 처리** (참조: 150페이지, 11.3장)

후속 단계

- 파장 선택 **파장 선택** (참조: 121페이지, 7.5.1장)
- 데이터 전처리 정의 **데이터 전처리** (참조: 123페이지, 7.5.2장)

7.5.1 파장 선택

파장 선택은 검증 모델을 개선할 수 있습니다。 예: 높은 흡광도 값에서 노이즈가 보이는 경우 해당 파장범위를 제외할 수 있습니다。

모델은 정의된 파장범위를 사용합니다。 정의된 파장범위가 없는 경우 모델은 모든 파장을 사용합니다。

파장범위 정의

전제조건:

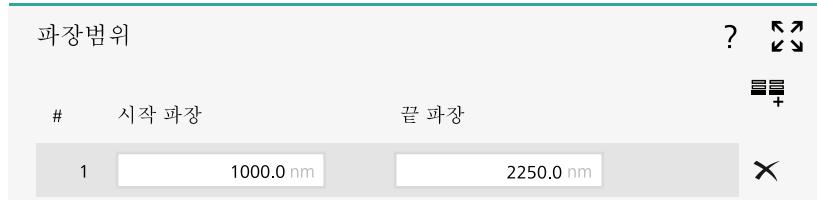
- **모델** 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。

1 프로세스 단계 '정량화 모델을 파라미터화합니다'

- 탐색기에서 **정량화 모델을 파라미터화합니다** 클릭합니다。

2 파장범위 추가

- **파장범위** 영역에서 클릭하여 파장 범위를 추가합니다。



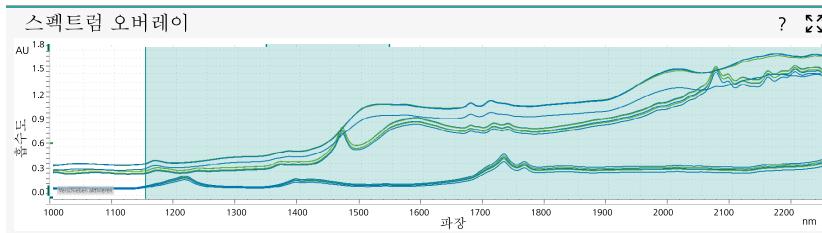
파장범위가 추가됩니다。 범위는 먼저 모든 파장을 포함합니다。

3 파장범위 결정

다음 방법 중 하나로 파장범위를 결정합니다 :

- 입력 필드에 **시작 파장** 및 **끝 파장** 입력하여 파장범위를 입력합니다。

- 다이어그램에서 파장 범위를 지정하려면 다음 단계를 수행합니다 :
 - **스펙트럼 오버레이** 영역에서 [이동 활성화] 버튼을 클릭합니다.
 - 커서가 아이콘으로 표시될 때까지 커서를 강조된 영역의 좌측 가장자리로 움직입니다.
 - 왼쪽 마우스 버튼을 누른 상태에서 왼쪽 여백을 적절한 위치로 이동합니다.
 - 강조된 영역의 우측면에서도 이 작업을 동일하게 수행합니다.
 - 파장 범위를 이동시키는 경우 커서가 아이콘으로서 표시될 때까지 커서를 이 영역 위로 움직입니다. 마우스 왼쪽 버튼을 사용하여 범위를 왼쪽 또는 오른쪽으로 이동합니다.
 - [이동 비활성화] 클릭하십시오.



이 그림은 1150nm에서 2250nm까지의 파장 범위를 정의합니다。 이 범위는 모델에서 사용됩니다。

4 파장범위를 더 추가합니다

클릭하여 더 많은 파장범위를 추가할 수 있습니다。

파장 범위는 중첩되지 않아야 합니다

새 파장범위가 먼저 기존 파장범위와 겹칩니다。 겹치지 않도록 파장범위를 조정합니다。

5 모델을 저장합니다

을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다。

데이터 레코드의 분할 시 새로 생성된 파장 선택을 고려해야 하는 경우 데이터 세트를 다시 분할할 수 있습니다。

7.5.2 데이터 전처리

적합한 데이터 전처리는 검증 모델을 개선할 수 있습니다。 예: 기준선이 같은 대부분의 응용 프로그램에 대한 관련 정보를 포함하지 않고 제거할 수 있습니다。

데이터 전처리 정의

전제조건:

- 모델 작동 범위에서 모델이 열리고 전경에 표시됩니다。
- 탐색기가 정량화 모델을 파라미터화합니다 프로세스 단계에 있음。

1 데이터 전처리 단계를 추가

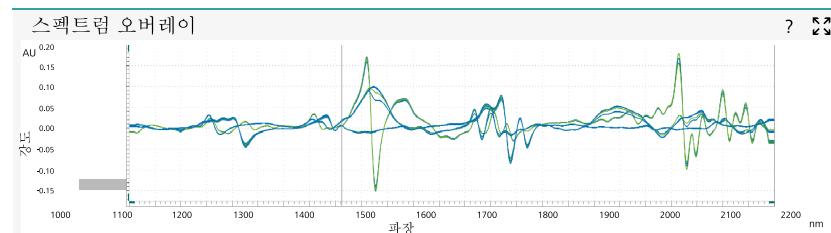
- 데이터 전처리 영역에서 클릭하여 데이터 전처리 단계를 추가합니다。
- 데이터 전처리 필드에서 데이터 전처리 종류를 선택하고 해당 필드를 기입합니다。

기준선의 일정한 배출관(비파장 의존적)을 제거하는 첫 번째 순서에서 파생된 Gap-Segment의 예 :



1단계에서 선택한 제품의 사전 처리된 스펙트럼은 **스펙트럼 오버레이** 범위에 즉시 표시됩니다。

데이터 전처리 후 스펙트럼은 다르게 보입니다, 예를 들어。 :



2 추가 데이터 전처리 단계를 추가합니다

클릭하여 추가 데이터 전처리 단계를 추가할 수 있습니다。



i 여러 데이터 전처리 단계를 사용할 경우 순서가 중요할 수 있습니다。Gap-Segment 또는 Savitzky-Golay는 SNV보다 먼저, SNV는 detrend보다 먼저 사용하는 것이 좋습니다。

클립업 및 클립다운 아이콘을 클릭하여 행을 위로 또는 아래로 이동시키고 이를 통해 순서를 결정할 수 있습니다。

3 모델을 저장합니다

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다。

i 데이터 레코드의 분할 시 새로 생성된 데이터 전처리를 고려해야 하는 경우 데이터 세트를 다시 분할할 수 있습니다。

7.6 검증 모델 게시

측정을 위해 모델을 사용하기 위해서는 모델을 게시해야 합니다。 이를 통해 게시된 버전 및 해당 버전에 측정을 주지 않고 모델을 추가로 개발할 수 있습니다。

정량화 모델 게시

전제조건:

- 모델이 계산되고 저장됩니다。
- 모델이 열려 있습니다。

1 대화상자 열기

- 아이콘을 클릭하여 정량화 모델 게시 대화상자를 엽니다。

i 모델이 이전에 게시되어 method에 사용된 경우 **method 업데이트** 체크박스를 선택하여 이러한 method를 자동으로 업데이트할 수 있습니다。

주의사항: 자동으로 업데이트되지 않습니다 :

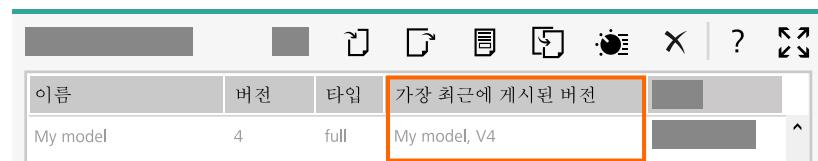
- 열린 method
- 서명 및 게시된 method
- 데이터 권한 필터링이 활성화된 경우: 현재 로그인한 사용자의 데이터 권한이 없는 method입니다

2 게시

- [게시] 버튼을 클릭하여 모델을 게시합니다。

모델 ► 정량화 모델 아래에 가장 최근에 게시된 버전이 표시됩니다 :





이름	버전	타입	가장 최근에 게시된 버전
My model	4	full	My model, V4

이제 **PREDICT** 명령은 모델의 게시된 버전에 액세스할 수 있습니다。

8 모델 계층 구조

모델 계층 구조는 다음을 가능하게 합니다 :

- **식별 모델의 계층적 구조화**

예: 4가지 다른 제품을 가진 식별 모델은 유사한 제품과 과당과 포도당을 구별하지 못할 수 있습니다. 만약 과당과 포도당이 하나의 제품분류로 결합된 경우 이 모델은 설탕과 다른 두 제품을 구별할 수 있을 것입니다. 만약 샘플이 설탕으로 식별된 경우 다른 식별 모델은 과당과 포도당을 분류합니다. 이 모델은 더 전문적이기 때문에 유사한 제품을 더 잘 구별할 수 있습니다.

계층적 상위 식별 모델이 주 모델입니다. 주 모델에 연결된 식별 모델은 하위 모델입니다.

- **제품과 정량화 모델 링크하기**

식별된 샘플에 대해 정량 분석을 수행할 수 있습니다. 각각의 관심있는 parameter를 위해 정량화 모델이 해당 제품에 링크됩니다. 옵션으로서 기울기 수정/y 절편 수정을 사용할 수 있습니다.

모델 계층 구조가 사용에 따라 다음 정보를 제공합니다 :

- 알 수 없는 샘플(예를 들어 과당)의 **동일시**。 결과는 제품 이름입니다。
 - 측정된 제품에 따라서 옵션으로서 하나 또는 복수의 **수량화**。
- 샘플의 제품 제휴(예를 들어 과당)의 **검증**。 결과는 예/아니오입니다 – 검증 성공적 또는 실패함。
 - 측정된 제품에 따라서 검증의 결과에 상관없이 옵션으로서 하나 또는 복수의 **수량화**。

8.1 모델 계층 구조 생성

하나의 모델 계층 구조는 하나 또는 복수의 식별 모델 및 옵션으로서 하나 또는 복수의 정량화 모델로 구성됩니다.

모델을 개발합니다

먼저 식별 모델 및 정량화 모델을 개발해야 합니다.

1 주 모델을 개발합니다

- 사용 가능한 모든 제품에 대한 식별 모델을 개발합니다 **식별 모델** (참조: 93페이지, 6장)。

- 개별 제품을 서로 구별하는 것이 어려운 경우에는 이런 제품을 하나의 제품분류로 묶을 수 있습니다 :
 - 그룹으로 분류된 제품에 대해 **제품 리스트** 영역의 **샘플 선택** 프로세스 단계에서 공동의 이름을 **제품분류** 열에 정의합니다. 다음 예에서는 **C1** 및 **C2** 제품이 함께 **C** 제품분류를 형성합니다 :

제품 리스트

제품	스펙트럼 수	제품분류
A		
B		
C1		C
C2		C

그런 다음 모델은 제품분류 **C**를 단일 제품으로 처리합니다. 모델은 더 이상 A/B/C/C1/C2로 분류되지 않고 A/B/C로 분류됩니다.

- 1** 필요한 경우 추가 제품분류를 생성할 수 있습니다.

2 하위 모델을 개발합니다

- 주 모델의 각 제품분류에 대한 식별 모델을 개발합니다 **식별 모델** ([참조: 93페이지, 6장](#))。
- 위의 예에서는 제품 **C1** 및 **C2**에 속하는 모든 샘플을 포함하는 하위 모델을 개발합니다. 이를 위해 제품분류 **C**의 주요 모델과 동일한 샘플을 사용해야 합니다.

- 1** **제품 리스트** 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하면 정의된 제품 그룹에 대한 하위 모델을 생성할 수 있습니다.

3 기타 계층 수준

하위 모델에 2 개 이상의 제품이 포함된 경우 여러 제품을 하나의 제품분류로 결합할 수 있습니다. 이 제품분류를 위해 별도의 식별 모델이 다시 개발되고 있습니다. 이렇게 하면 추가 계층 수준이 생성됩니다.

4 정량화 모델을 개발합니다

특정한 제품에 대해 정량적 관심있는 parameter를 예측해야 하는 경우 상응하는 정량화 모델을 개발합니다.

다음 단계는 모델 계층 구조를 생성하는 것입니다. 모델 계층 구조는 다음과 가능하게 합니다 :

- 하위 모델을 제품분류에 연결
- 제품과 정량화 모델 링크하기

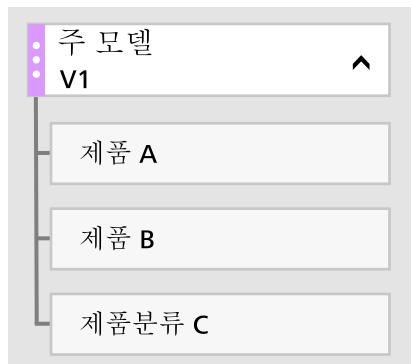
모델 계층 구조 생성

1 모델 계층 구조를 생성하고 이름을 지정

- 모델에서 ▶ 모델 계층 구조  클릭합니다.
새 모델 계층 구조가 새 탭에 나타납니다.
- 상단 공구 모음에서  클릭하여 속성 창을 엽니다.
- 속성 ▶ 일반사항의 이름 필드에 원하는 이름을 입력합니다.

2 기본 모델을 추가

- 모델 계층 구조를 처리합니다 프로세스 단계는 모델 계층 구조 편집기를 포함합니다. 먼저 모델 계층 구조 편집기가 비어 있습니다.
-  버튼을 클릭하여 Library 창을 엽니다.
- Library ▶ 식별 모델에서 드래그&드롭을 사용하여 주 모델을 오른쪽으로 끌어 모델 계층 구조 편집기에 삽입합니다.



 library에서 모델을 검색할 수 없는 경우 :

- 모델이 게시되었는지를 확인합니다.
- library에서  아이콘을 클릭해 보기 활성화시킵니다.

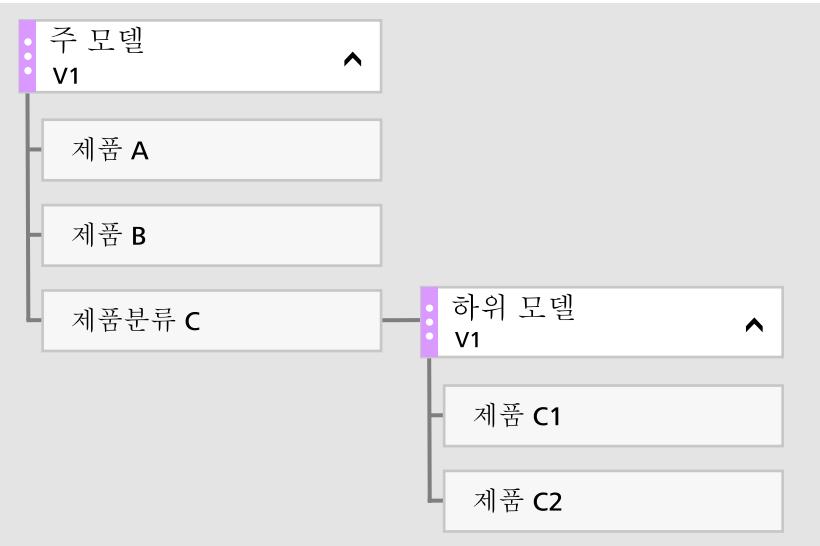
3 하위 모델을 제품분류에 연결

주 모델에서 제품분류가 정의되어 있는 경우 :

- Library ▶ 식별 모델에서 해당 제품분류 옆에 드래그&드롭을 사용하여 하위 모델을 삽입합니다. 제품분류 옆에 있는 녹색 수직 선은 삽입 위치를 나타냅니다。



- **기타 하위 모델 및 계층 수준**
동일한 방법으로 다른 하위 모델을 관련 제품분류에 연결합니다.
- 예시: 하위 모델이 제품분류에 링크되어 있습니다.



1 하위 모델을 제품분류 또는 제품에 링크시킬 수 있습니다。

4 제품과 정량화 모델 링크하기

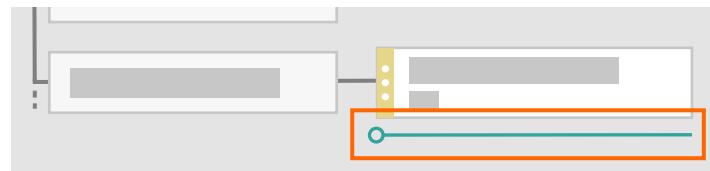
정량적 관심있는 parameter를 예측해야 하는 경우 :

- **Library** ▶ **정량화 모델**에서 드래그&드롭 기능을 이용해 정량화 모델을 해당 제품 옆에 삽입합니다. 제품 옆에 있는 녹색 수직선은 삽입 위치를 나타냅니다.



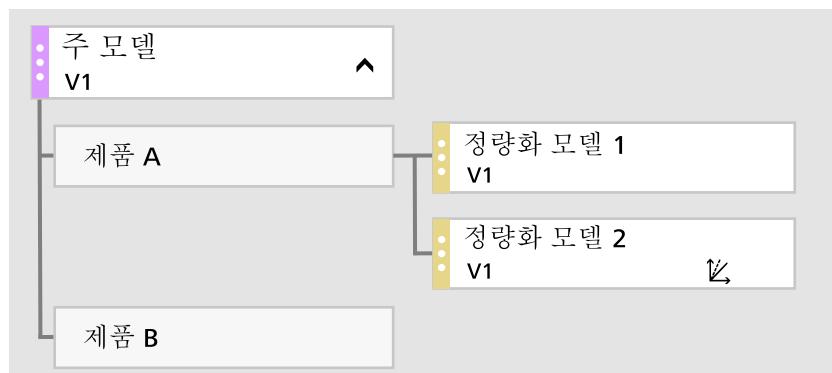
- 정량화 모델에서 기울기 수정/y 절편 수정을 필요로 하는 경우 :
 - 정량화 모델을 선택합니다.
 - 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.
 - 속성 ▶ **parameter**에서 기울기 수정/y 절편 수정을 정의합니다.

- 동일한 제품에 대해 복수의 정량적 관심있는 parameter를 예측해야 하는 경우 :
 - 드래그&드롭 기능을 이용해 다른 정량화 모델을 각각 아래 위로 삽입합니다. 녹색 수평선은 삽입 위치를 표시합니다.



- 동일한 방법으로 다른 정량화 모델을 각각의 해당 제품에 링크시킵니다. 필요 시 기울기 수정/y 절편 수정을 정의합니다.

예시: 2개의 정량화 모델이 하나의 제품에 링크되어 있습니다.



심벌은 2번 정량화 모델에 대해 하나의 기울기 수정/y 절편 수정이 정의되었음을 나타냅니다。

정량화 모델은 제품 또는 제품분류에 링크시킬 수 있습니다.

5 모델 버전화

모델 계층 구조에 포함된 모델은 모델에 대해 새 버전이 게시되는 경우에도 변함 없이 그대로 유지됩니다. 필요 시 해당 모델을 모델 계층 구조에서 제거하고 최신 버전을 삽입합니다.

6 모델 계층을 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

8.2 모델 계층 구조의 유효성 검사

모델 계층 구조를 유효합니다 프로세스 단계는 2 가지 다른 검증을 제공합니다 :

- **내부 검증**

내부 검증은 보정 데이터 세트 및 주 모델의 검증 데이터 세트를 사용합니다.

- **외부 검증**

외부 검증은 별도의 외부 데이터 세트를 사용합니다. 외부 데이터 세트를 위한 샘플은 다른 날에 수집되고 측정되며 필요한 경우 다른 장비로 다른 인원을 통해 수집되고 측정됩니다.

모델 계층 구조의 유효성 검사

전제조건:

- **모델** 작동 범위에서 모델 계층 구조가 생성되고 열려 있고 전경에 표시됩니다 [모델 계층 구조 생성\(참조: 126페이지, 8.1장\)](#).
- 외부 검증을 수행하는 경우 스펙트럼과 제품 이름이 포함된 데이터 세트가 있습니다 [스펙트럼 기록\(참조: 54페이지, 4.2장\)](#).

1 '검증' 프로세스 단계로 전환

- 탐색기에서 **모델 계층 구조를 유효합니다** 클릭하여 검증 프로세스 단계로 이동합니다.

2 내부 또는 외부 검증을 사용합니다

내부 검증

- **내부에 유효합니다** 클릭하십시오.

i 내부 검증은 주 모델의 스펙트럼만 사용합니다(보정 데이터 세트 및 검증 데이터 세트 있는 경우). 특이값 및 추가 스펙트럼은 하위 모델에 포함되지 않습니다.

외부 검증

- **외부에서 유효성 검사** 클릭하십시오.
- 샘플 리스트 또는 검색에서 샘플을 선택합니다.
선택 항목에는 제품 매개 변수가 있는 샘플이 포함되어야 합니다. **제품** 열에는 포함된 제품이 나열됩니다.
- **[유효성 검사]** 클릭하십시오.



3 검증의 결과 점검

- **모델 계층 구조를 유효합니다** 프로세스 단계에서 **검증 개요** 범위를 점검합니다. 검증 개요 단일 모델과 동일한 방식으로 결과를 요약합니다 ([참조: 102페이지, "검증 개요 영역"](#))。

모델 계층 구조는 하나의 큰 모델로 간주됩니다。스펙트럼의 검증의 결과가 성공적이거나 실패했습니다。
- 개별 스펙트럼의 결과를 점검합니다 :
 - **검증 개요** 영역에서 개별 스펙트럼을 표시할 모든 제품을 선택합니다。
 - **검증의 결과** 영역에는 선택한 제품의 스펙트럼이 나열됩니다。

모델 계층 구조의 결과에는 모델 계층 구조의 최종 결과가 표시됩니다。

그런 다음 각 계층 수준에 대한 평가가 표시됩니다。 **수준 1의 결과**는 주 모델의 결과를 보여줍니다。 그런 다음 해당 하위 모델의 결과가 모든 기타 계층 수준에 대해 뒤따릅니다。

8.3 모델 계층 구조 게시

측정을 위해 모델 계층 구조를 사용하기 위해서는 모델 계층 구조를 게시해야 합니다。

모델 계층 구조 게시

전제조건:

- 모델 계층 구조가 저장됩니다。
- 검증은 선택 사항입니다。 검증을 수행할 것을 Metrohm 사는 추천합니다。
- 모델 계층 구조가 열립니다。

1 대화상자 열기

- 아이콘을 클릭하여 **모델 계층 구조 게시** 대화상자를 엽니다。

1 모델 계층 구조가 이전에 게시되어 method에 사용된 경우 **method 업데이트** 체크박스를 선택하여 이러한 method를 자동으로 업데이트할 수 있습니다。

주의사항: 자동으로 업데이트되지 않습니다 :

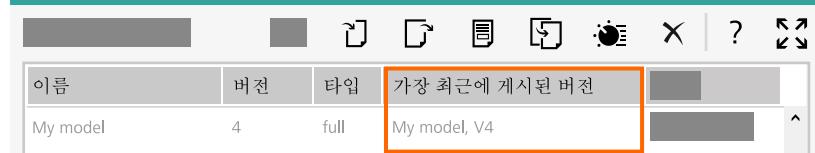
- 열린 method
- 서명 및 게시된 method
- 데이터 권한 필터링이 활성화된 경우: 현재 로그인한 사용자의 데이터 권한이 없는 method입니다



2 게시

- [게시] 클릭하여 모델 계층 구조를 엽니다.

모델 ► 모델 계층 구조 아래에 가장 최근에 게시된 버전이 표시됩니다 :



이름	버전	타입	가장 최근에 게시된 버전
My model	4	full	My model, V4

이제 **PREDICT** 명령은 모델 계층 구조의 게시된 버전에 액세스할 수 있습니다。

9 예측

예측 시 모델은 알 수 없는 샘플의 스펙트럼을 사용합니다。 모델에 따라서 다음 사항을 예측할 수 있습니다 :

- 관심있는 parameter (수량화)
- 제품 제휴 또는 검증 결과 (식별)
- 정량화의 결과 (검증)

i 예측 샘플은 모델을 생성하는 데 사용된 샘플과 동일하게 취급하고 측정해야 합니다。

i OMNIS Software의 과정에 대한 설명은 부록을 참조합니다([참조: 167 페이지, "예측"](#))。

9.1 예측을 준비합니다

예측을 준비하기 위해 method, 작업 과정, 샘플 프로파일 및 샘플 리스트를 다음과 같이 작성합니다。 이 method는 모델과의 연결을 생성하는 **PREDICT** 명령을 포함합니다。

method 생성

1 방법을 선택하고 이름을 지정

스펙트럼은 모델 개발을 위한 스펙트럼과 동일한 설정으로 삽입해야 합니다。 가장 쉬운 방법은 모델 개발에 사용되는 method를 선택하는 것입니다 [스펙트럼 분석 준비](#) ([참조: 44페이지, 4.1장](#))。

- **프로세스** ▶ **method**에서 모델 개발에 사용된 method를 선택합니다。
 - 클릭하여 선택한 method를 복제합니다。
 - 복제된 method 이름을 두 번 클릭하여 복제 method를 엽니다。
 - 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다。
 - **속성** ▶ **일반사항** 아래에서 **이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다。

2 PREDICT 명령 삽입

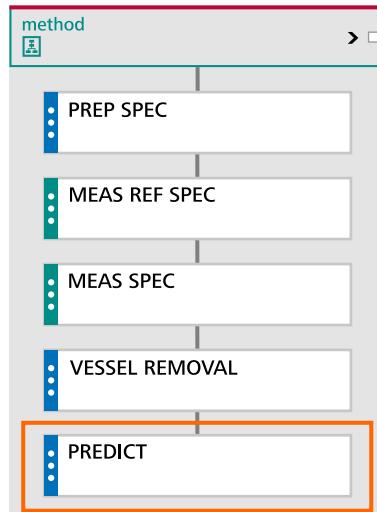
PREDICT에서는 기록된 스펙트럼에 대한 예측이 생성됩니다。

- 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다。
- **Library** ▶ **명령**에서 **PREDICT** 명령을 검색하고 드래그&드롭으로 method에 삽입합니다。

올바른 명령 순서를 준수합니다 :

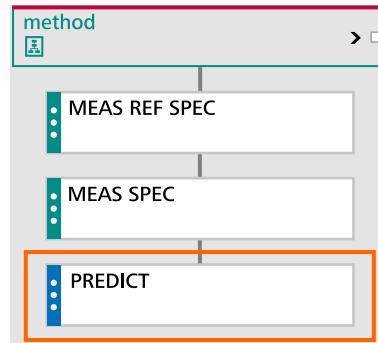
액체 샘플

기본 구조



고체 샘플

기본 구조



PREDICT 명령은 **VESSEL REMOVAL** 명령 앞이나 또는 옆에 있을 수도 있습니다.

3 PREDICT parameter 설정을 구성합니다

- PREDICT 명령을 선택합니다.
- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.
- 속성 ► parameter에서 parameter 설정을 정의합니다:
 - 스펙트럼을 참조
측정 명령의 이름 목록을 엽니다. 분석할 스펙트럼을 포함할 **MEAS SPEC** 명령의 이름을 선택합니다.
 - 모델을 참조
모델의 구조 선택합니다: **유일한 모델** 또는 **모델 계층 구조**.
 - 유일한 모델 구조가 선택된 경우 모델형 선택 : 정량화 모델, 식별 모델 또는 검증 모델.
 - 게시된 모델 또는 게시된 모델 계층 구조를 선택합니다.
수량화: 필요한 경우 기울기 수정/y 절편 수정을 선택합니다.
검증: 식별 모델 또는 모델 계층 구조가 검증에 사용되는 경우 **검증에 대해 사용합니다** 옵션을 셉니다.

4 여러 관심있는 parameter (수량화)

각 샘플에 대해 두 개 이상의 관심있는 parameter를 예측해야 하는 경우 [여러 관심있는 parameter \(수량화\) \(참조: 145페이지, 9.3장\)](#) 다음과 같이 진행합니다 :

- 각 관심있는 parameter에 대해 **PREDICT** 명령을 삽입합니다。
주의사항: 모델 계층 구조는 그에 포함된 정량화 모델의 수에 상관 없이 단 하나의 **PREDICT** 명령을 필요로 합니다。
- 각 **PREDICT** 명령에 대해 위와 같이 parameter 설정을 정의합니다。 모든 **PREDICT** 명령은 동일한 스펙트럼을 참조하지만 각 관심있는 parameter에 대해 다른 정량화 모델을 참조합니다。

5 method 저장

- 를 클릭하여 method를 점검합니다。
- 을 클릭하거나 또는 **[CTRL]+[S]** 버튼을 눌러 method를 저장합니다。

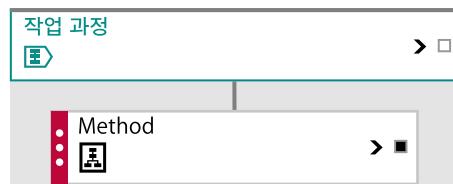
작업 과정 작성

1 작업 과정 생성 및 이름 지정

- **프로세스** ▶ **작업 과정**에서 클릭하십시오。
새 작업 과정이 새 탭에 나타납니다。
- 버튼을 클릭하여 **속성** 창을 엽니다。
- **속성** ▶ **일반사항**아래에서 **이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다。

2 method 삽입

- 버튼을 클릭하여 **Library** 창을 엽니다。
- **Library** ▶ **method**에서 드래그&드롭 방식으로 작성된 method를 작업 과정에 삽입합니다。



3 결과 모니터링 정의 (옵션)

i 수량화를 위해 결과 모니터링을 사용할 수 있습니다. 예: 분석 결과가 특정 한계, 예를 들어: 보정 샘플의 기준값 범위 내에 있는지 모니터링합니다.

일반적으로 결과 모니터링은 동일시에 사용되지 않습니다. 그러나 필요한 경우 명령 변수 'IdentificationProbability.Final. 명령 이름'을 동일한 방법으로 모니터링할 수 있습니다.

작업 과정
▶

▶ 클릭하십시오.

- 버튼을 클릭하여 속성 창을 엽니다.
- 속성 ▶ 결과 모니터링 하위 영역을 선택합니다.
- [결과 모니터링] 클릭하십시오.
- 아이콘을 클릭하여 새 결과 모니터링을 추가합니다 :
 - (**x**) 아이콘을 클릭하여 대화상자에 대한 변수를 엽니다.
 - 계산된 값에 대한 PREDICT 명령의 변수를 선택합니다. 수량화를 위한 예시: 'Predicted.Quantification.Result. 명령 이름'
 - 색인이 포함된 모델 계층 구조 변수가 선택된 경우 필요에 따라 최상위 입력 필드에서 예를 들어 다음과 같이 색인을 조정합니다 :

'Predicted.Quantification{2}.Result. 명령 이름'
모델 계층 구조 - 정량화 모델을 위한 색인 (참조: 158페이지, 11.4.1장)
 - [적용]을 클릭하여 선택된 변수를 적용합니다.
 - 하한 경고 한계, 상한 경고 한계, 하한 조절 한계 및 상한 조절 한계 필드에서 결과 모니터링의 정량화 모델을 결정합니다. 한계는 보정 샘플의 기준값 범위를 초과해서는 안 됩니다.
- 주의사항: 경고 한계의 경우 조절 한계 내에 있는 더 작은 영역을 선택합니다.
동일시: 명령 변수 'IdentificationProbability.Final. 명령 이름'을 모니터링하는 경우 두 상한 모두에 대해 값 100을 선택합니다.
- 주의사항: 옵션적으로 한계 위반 시 작동시키는 작업을 정의 할 수 있습니다. 작업을 선택하기 위해서는 적어도 작업 과정에서 하나의 optional run Execute on limit이 정의된 상태여야 합니다.
 - → 아이콘을 클릭하여 범위를 닫습니다.

4 결과를 샘플 리스트에 직접 표시합니다 (옵션)

예측 결과를 샘플 리스트에 직접 표시하는 경우 subsample data 필드를 정의할 수 있습니다 [PREDICT 명령 변수 \(참조: 153페이지, 11.4장\)](#)。

5 작업 과정 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

샘플 프로파일 생성

샘플 프로파일은 여러 개의 유사한 샘플을 쉽게 생성할 수 있습니다.

1 샘플 프로파일을 채택하고 이름을 지정

모델 개발에 사용되는 샘플 프로파일을 채택하는 것입니다 [스펙트럼 분석 준비 \(참조: 44페이지, 4.1장\)](#)。

- 샘플 ► 샘플 프로파일**에서 모델 개발에 사용된 샘플 프로파일을 선택합니다.
- 아이콘을 클릭하여 선택된 샘플 프로파일을 복제합니다.
- 복제된 샘플 프로파일 이름을 두 번 클릭하여 복제 샘플 프로파일을 엽니다.
- 샘플 프로파일의 이름** 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

2 샘플 이름의 입력 필드

필요한 경우 샘플 이름의 표준값을 조정합니다.



3 기준 parameter / 제품 파라미터

샘플 프로파일에는 기준 parameter(수량화) 또는 제품 파라미터(식별, 검증)에 대한 샘플 데이터가 포함되어 있습니다.

- **수량화 및 식별** : 샘플 데이터는 예측을 위해 반드시 필요한 것은 아닙니다. 입력 필드는 삭제가 가능하며 제어 샘플을 위해 사용 할 수 있습니다. 제어 샘플은 모델과 장비를 모니터링하고 시스 템이 추가 분석에 적합한지 점검하는데 사용됩니다.
- **샘플 데이터**: 샘플 데이터에서는 샘플이 검증되는 제품이 정의됩 니다 :
 - **입력 필드의 타입: 선택 목록**
 - 제품 입력 필드는 사용을 위해 제품으로서 생성되어 있어야 합니다: **다음으로 사용: 제품**
 - 제품 이름이 포함된 목록 요소는 이미 존재하는 상태여야 합니다.
 - **표준값: 비어 있음**
 - **빈 필드 허용 및 강제 입력** 체크박스를 활성화시킵니다.
- **검증** : 예측을 위해 특정한 샘플 데이터가 필요한 것은 아닙니 다。

4 다른 샘플 데이터 추가 (옵션)

- 필요 시 **샘플 데이터** 영역에 아이콘을 클릭해 입력 필드를 추加합니다.

5 subsample 수 및 작업 과정 정의

- **작업 과정 / subsample** 영역에서 생성된 작업 과정을 선택합니 다.
- subsample 수의 정의: **1**

작업 과정 / subsample	
작업 과정	subsample 수
1	1

6 샘플 프로파일 저장

- 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

샘플 항목 리스트를 생성

1 샘플 리스트 생성 및 이름 지정

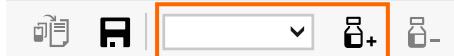
- **샘플 ► 샘플 리스트**에서 + 클릭하십시오. 새 탭이 열립니다.

- 이름 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

샘플 리스트▼

2 샘플을 추가합니다

- 업+ 아이콘 왼쪽에 있는 선택항목 리스트에서 생성된 샘플 프로파일을 선택합니다.



이후 추가된 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다。

- 업+ 아이콘을 클릭하여 새 샘플을 샘플 리스트에 추가합니다. 필요 만큼 샘플을 추가합니다.
샘플 리스트의 각 행에는 업 아이콘으로 표시된 샘플이 포함되어 있습니다. 오른쪽에는 샘플 데이터가 있습니다. 그런 다음 편집 아이콘으로 표시된 부분 샘플과 부분 샘플 데이터가 표시됩니다.
샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다. 각 샘플에 정의된 작업 과정을 사용하는 1개의 subsample이 포함되어 있습니다.

샘플 이름	기준 parameter의 이름	번호	Subsample 이름	작업 과정
시료 1	%	1	Subsample 1	
시료 2	%	2	Subsample 2	
시료 3	%	3	Subsample 3	

그림 6 샘플 리스트(수량화의 예)

- 필요한 경우 샘플 이름 및 subsample 이름을 편집합니다.
- 검증: 샘플이 검증되는 제품을 이미 알고 있는 경우 :
 - 제품 입력 필드에서 제품을 선택합니다.

3 샘플 리스트 저장

- 저장 아이콘을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

9.2 예측을 시작합니다

경고

가열된 표면에 있는 가연성 물질

인화성 물질이 누출될 경우 화재 및 화상 위험이 있습니다. 샘플은 최대 80°C의 온도로 가열할 수 있습니다.

- 발화원을 방지하십시오.
- 접지 보호 장치를 사용하십시오.
- 흡입 장치를 사용하십시오.
- 유출된 액체 및 고체 물질은 즉시 제거하십시오.

주의

가열에 의한 샘플의 볼륨 확장

샘플 용기의 오버플로 또는 파손 또는 튕겨나오는 마개로 인한 부상 및 건강 위험.

- 샘플 용기는 2 cm의 최소 높이까지만 채웁니다. 액체가 남은 공기 부피에서 팽창할 수 있습니다.
- 또는 모세관 구멍이 있는 마개를 사용합니다.
- 샘플 용기가 손상되지 않도록 마개를 부드럽게 누릅니다.

주의

뜨거운 시료 바이알

가열된 표면 또는 가열된 액체와 접촉하여 피부를 태우는 것. 샘플 홀더, 시료 바이알 및 샘플은 최대 80 °C의 온도로 가열될 수 있습니다.

- 개인 보호 장비 및 내열 보호 장갑을 착용하십시오.
- 유출된 액체 및 고체 물질은 즉시 제거하십시오.

예측을 시작합니다

전제조건:

- 예측이 준비되었습니다 [예측을 준비합니다](#)(참조: 134페이지, 9.1장).
- 분광계를 예약하지 않습니다 [장비 예약 및 릴리스](#)(참조: 24페이지, 2.4장).
- 올바른 샘플 홀더가 사용됩니다. 샘플 홀더는 사용할 샘플 용기와 일치해야 합니다.

1 샘플 리스트 열기

- 샘플 리스트를 닫은 경우 **샘플** ► **샘플 리스트**에서 샘플 리스트를 두 번 클릭합니다.

검증

검증을 위해서는 샘플이 검증되는 제품이 샘플 데이터에 정의되어 있어야 합니다. 제품 입력 필드는 사용을 위해 제품으로서 생성되어 있어야 합니다. 대문자/소문자는 구분되지 않습니다.

모델 계층 구조에서 식별 모델과 링크되지 않은 제품 또는 제품 분류만 검증할 수 있습니다. 계층적으로 상위 제품 또는 제품 분류에 대한 검증은 항상 실패합니다.

2 다른 샘플 추가 (옵션)

추가 샘플이 필요한 경우 :

-  아이콘 왼쪽에 있는 선택항목 리스트에서 생성된 샘플 프로파일을 선택합니다.



새로 추가된 샘플은 선택한 샘플 프로파일의 사양에 따라 생성됩니다.

-  클릭하여 샘플 리스트에서 새 샘플을 추가합니다.
- 필요한 경우 샘플 이름 및 subsample 이름을 편집합니다.
- 검증: 제품 입력 필드에서 샘플이 검증되는 제품을 선택합니다.
- 샘플 리스트 저장: 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

3 측정을 시행

주의사항

샘플 용기의 온도 조절 시 온도 센서가 손상되었습니다

센서가 샘플 용기와 직접 접촉하는 동안 샘플 용기를 제거하는 경우 센서가 손상될 수 있습니다.

- 측정이 완료되고 온도 센서가 샘플 용기 밖으로 이동된 후에만 샘플 용기를 제거합니다.
- 다음 subsample 중 하나를 사용하여 분석할 subsample을 선택합니다 :
 -  아이콘을 클릭하여 subsample을 선택합니다.
 - 분석을 위해 subsample의 단일 셀을 선택하는 경우 충분합니다.
- 적절한 물리적 샘플을 준비합니다.
샘플 용기를 샘플 홀더에 삽입합니다.
-  클릭하여 측정을 시작합니다. 버튼의 숫자는 실행할 subsample 수를 나타냅니다.

- subsample에 할당된 작업 과정이 시작됩니다。 상황에 따라 **곡선 및 데이터 ► 라이브 데이터** 영역에 표시되는 지시내용에 따르십시오。 샘플 용기의 온도가 조절되는 경우, 요청 메시지가 표시된 후에 비로소 샘플 용기를 꺼내십시오。

분석이 성공적으로 완료되는 경우 subsample의 상태가  표시됩니다。

- 다른 모든 샘플에 대해 동일한 방법으로 측정을 시행합니다。

i 설정 온도는 주변 온도를 기준으로 최대 5.0 K 아래에 있어야 합니다。

i 시리즈 분석 생산에 적합한 경우 여러 subsample을 동시에 선택할 수 있습니다。 또는  샘플 리스트의 모든 실행 가능한 subsample이 시작됩니다。

- 액체 샘플: **VESSEL REMOVAL** 명령을 사용하는 경우 시리즈 분석을 사용할 수 있습니다。
- 고체 샘플: 시리즈 분석을 수행하려면 사용자 작업이 필요합니다(예를 들어 **WAIT** 명령 사용)。

결과 표시

1 수량화, 식별 또는 유효성 검사 또는 검증의 결과

- 샘플 리스트에서 결과를 표시할 모든 샘플을 선택합니다。
- 결과들 ► 예측 ► 개요** 영역에는 선택된 샘플의 결과가 표시됩니다。

수량화의 예 :

결과	예측	개요	?	⤒⤓
샘플 정보		정량화 결과		
번호	샘플 이름	subsample 이름	H2O / %	
1	[redacted]	[redacted]	4.7	
2	[redacted]	[redacted]	6.1	
3	[redacted]	[redacted]	8.0	

i 상세 정보는 **결과들 ► 예측 ► 세부 정보 보기** 영역에 설명되어 있습니다。

i 필요한 경우 예측 결과 및 기타 명령 변수를 샘플 리스트의 subsample data에 표시할 수 있습니다 **PREDICT 명령 변수 (참조: 153페이지, 11.4장)**。



2 subsample에 대한 상태 경고

- subsample을 샘플 리스트에서 점검합니다。 상태 경고에서 subsample 아이콘이 적색으로 표시되어 있는 경우 :


- 상세 정보를 보려면 커서를 아이콘 위에 놓습니다。 상태 경고의 원인이 될 수 있습니다 :
 - 시험 테스트에서 subsample의 측정 전 오류。
 - 동일시: 샘플 동일시에 실패했습니다(식별하지 못 했기 또는 다의적임)。
 - 검증: 샘플의 검증에 실패했습니다。
 - 검증: 샘플의 검증이 실패했습니다。
 - 수량화: 기록된 스펙트럼은 스펙트럼 특이값(Hotellings T^2 특이값 또는 Q residuals 특이값)입니다。
 - 수량화: 결과 모니터링에 정의된 한계를 초과합니다 (다음 항목 참조)。

3 수량화: 경고 한계 및 조절 한계

작업 과정에 결과 모니터링이 정의된 경우 다음과 같이 모니터링 상태를 점검할 수 있습니다 :

- **결과들 ▶ 예측 ▶ 모니터링** 범위를 엽니다。
 - 모니터링 상태를 점검할 subsample을 선택합니다。
- 주의사항:** 여러 샘플을 선택하는 경우 마지막으로 클릭한 샘플의 상태가 표시됩니다。

결과 값에 따라 다음 상태 아이콘 중 하나가 나타납니다 :

-
- | | |
|---|--|
|  | 이 값은 정의된 경고 한계 내에 있습니다。 |
|  | 이 값은 정의된 경고 한계 밖에 있지만 정의된 조절 한계 내에 있습니다。 |
|  | 값이 정의된 조절 한계 외부에 있습니다。 |
-

4 스펙트럼의 육안 검사 (옵션)

- **곡선 및 데이터 ▶ 적정곡선** 범위를 엽니다。
- 단일 스펙트럼을 표시합니다 :
 - 샘플 리스트에서 해당 subsample을 선택합니다( 아이콘으로 표시됨)。
- 여러 스펙트럼을 표시합니다 :
 -  클릭하여 곡선 오버레이를 활성화합니다。
 - 샘플 리스트에서 [CTRL] 또는 [SHIFT] 버튼을 이용해 여러 subsample을 선택합니다。



- 스펙트럼을 점검합니다 [다이어그램 처리 \(참조: 150페이지, 11.3 장\)](#)。

9.3 여러 관심있는 parameter (수량화)

각 샘플에 대한 여러 정량적 관심있는 parameter를 예측하려면 모델 개발 및 예측 준비에 다음 수정 사항을 사용하십시오.

정량화 모델 개발을 위한 샘플

▪ 스펙트럼 분석 준비

샘플 프로파일에 각 기준 parameter에 대해 별도의 입력 필드를 추가합니다。

샘플 데이터		
짧은 필드 이름 H2O	짧은 필드 이름 Methyl acetate	짧은 필드 이름 Methanol
긴 필드 이름	긴 필드 이름	긴 필드 이름
입력 필드의 타입 수	입력 필드의 타입 수	입력 필드의 타입 수
통해 사용합니다 입력 필드	통해 사용합니다 입력 필드	통해 사용합니다 입력 필드
▲ 입력 필드의 속성		
표준값	표준값	표준값
최소한 값 0	최소한 값 0	최소한 값 49
최대한 값 5	최대한 값 50	최대한 값 99.7
단위 %	단위 %	단위 %
<input checked="" type="checkbox"/> 필드를 편집할 수 있습니다	<input checked="" type="checkbox"/> 필드를 편집할 수 있습니다	<input checked="" type="checkbox"/> 필드를 편집할 수 있습니다
<input checked="" type="checkbox"/> 빈 필드를 허용합니다	<input checked="" type="checkbox"/> 빈 필드를 허용합니다	<input checked="" type="checkbox"/> 빈 필드를 허용합니다
<input type="checkbox"/> 입력을 강제합니다	<input type="checkbox"/> 입력을 강제합니다	<input type="checkbox"/> 입력을 강제합니다

샘플 리스트에서 각 기준 parameter에 대한 입력 필드가 포함되어 있습니다.

샘플 이름	H2O	Methyl acetate	Methanol	
	%	%	%	
	%	%	%	
	%	%	%	
	%	%	%	

▪ 스펙트럼을 삽입합니다

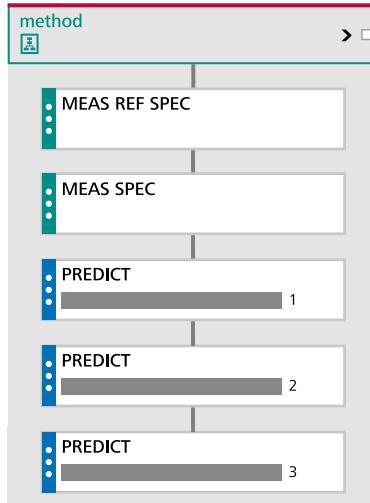
평소처럼 스펙트럼을 점검합니다.

정량화 모델을 개발합니다

- 각 속성에 대해 기준 parameter를 사용하여 별도의 정량화 모델을 생성 합니다.

예측을 준비합니다

- MEAS SPEC 명령 후 method와 VESSEL REMOVAL 명령 후 기준 parameter가 있는 만큼의 PREDICT 명령을 삽입합니다.



- 속성 ► 일반사항** 아래의 각 PREDICT 명령에 적절한 이름을 지정합니다.
- 속성 ► parameter** 아래의 각 PREDICT 명령에 대해 스펙트럼 및 모델을 참조합니다 :
 - 스펙트럼을 참조**
측정 명령의 이름 목록을 엽니다. 분석할 스펙트럼을 포함할 MEAS SPEC 명령의 이름을 선택합니다.
 - 모델을 참조**
모델의 구조 선택 : 유일한 모델
 - 모델형 선택** : 정량화 모델
게시된 모델을 선택합니다. 필요한 경우 기울기 수정/y 절편 수정 선택합니다。

10 테스트 및 유지보수 주기

10.1 장비 성능 테스트

장비 성능 테스트는 정기적으로 실시해야 합니다。

작업	OMNIS 명령	권장 실행 간격	결과
파장 테스트	TEST WL	규제되지 않은 산업 : 1~2 주마다 (내부 측정 모드) 규제 산업 : <ul style="list-style-type: none">▪ 매일 : 내부 측정 모드▪ 매주 : 외부 측정 모드	파장 정확도와 정밀도는 지정된 공차 내에 있습니다.
노이즈 테스트	TEST NOISE	규제되지 않은 산업 : 1~2 주마다 (내부 측정 모드) 규제 산업 : <ul style="list-style-type: none">▪ 매일 : 내부 측정 모드▪ 매주 : 저 플렉스 테스트 및 고온 플렉스 테스트	노이즈는 지정된 공차 내에 있습니다.
측광 선형성	TEST PHOTOMETR IC LINEARITY	규제 산업 : 매주	측광 선형성이 지정된 공차 내에 있습니다.

테스트가 실패하는 경우 :

- 액체 샘플 발표에 대해 : 측정창의 오염 여부를 점검하고 필요한 경우 청소하십시오.
- 램프 모듈의 운전시간을 점검합니다. 필요한 경우 램프를 교체합니다.
- 장비 성능 테스트를 반복합니다.
 - 파장 테스트가 실패하는 경우 파장 보정을 반복합니다. 이후에는 파장 테스트가 다시 실패하는 경우 지역 Metrohm 서비스 담당자에게 문의합니다.
 - 노이즈 테스트가 실패하는 경우 지역 Metrohm 서비스 담당자에게 문의합니다.
 - 측광 선형성 테스트에 실패하는 경우 지역 Metrohm 서비스 담당자에게 문의합니다.

10.2 파장 보정

특정 작업 후에는 OMNIS Software에서 장비에 대한 파장 보정을 수행해야 합니다。 [파장 보정을 시작합니다\(참조: 32페이지, 3.2.2장\)](#)

작업	OMNIS 명령	권장 실행 간격	결과
파장 보정	CAL WL 및 VAL WL	하드웨어 구성 요소를 교환한 후。 장비를 장시간 운반한 후。	스펙트럼의 x축이 보정했습니다。

10.3 장비 유지보수

장비를 정기적으로 수리해야 합니다。

작업	실행 간격	결과
지역 Metrohm 서비스 담당자 담당자를 통한 유지보수	매년。 필요한 경우 더 자주。	이 장비는 여전히 기술 사양을 준수합니다. 필터 매트가 교체되었습니다. 내부 파장 표준이 재인증되었습니다。

1 외부 기준 표준 재인증

외부 장비 성능 테스트를 위한 기준 표준이 사용되는 경우 이 표준은 주기적으로 재인증해야 합니다。

- 인증서에 표시된 다음 보정 날짜에 유의하십시오。

11 부록

11.1 리포트

OMNIS Software에서 자동 또는 수동 리포트 생성에 대한 몇 가지 옵션이 있습니다 ([Metrohm Knowledge Base](#) 참조)。

-  리포트는 일반적으로 OMNIS 사용자 이름과 다른 윈도우 사용자 이름을 제공합니다.

11.2 표 처리

모델 및 모델 계층 구조에서 표는 다음 설명에서와 같이 처리할 수 있습니다. 설명된 기술은 부분적으로 다른 표에서도 사용할 수 있습니다.

영역 최대화 및 최소화

-  클릭하여 표가 포함된 하위 영역을 최대화합니다.
-  클릭하여 하위 영역을 최소화합니다.

열 폭 변경

1. 첫 번째 열과 두 번째 열 사이의 제목 표시줄에 커서를 위치시킵니다.
커서가 으로 변합니다.
2. 마우스 왼쪽 버튼을 누를 상태에서 커서를 왼쪽 또는 오른쪽으로 움직입니다.
3. 첫 번째 열의 원하는 폭에 도달하는 즉시 마우스 버튼에서 손을 뗅니다.
4. 이 줄의 다른 열을 동일한 방식으로 조절합니다.

테이블 라인 정렬

1. 이 열에 따라 행을 정렬하기 위해 열 머리글을 클릭합니다.
2. 필요 시 열 머리글을 다시 클릭하여 정렬 순서를 전환합니다.

하나 또는 복수의 테이블 라인 선택

새로운 선택 :

- 하나의 개별 행을 클릭합니다.
또는
- 모델의 개요 목록에서 마우스 왼쪽 버튼을 누른 상태에서 여러 행으로 움직일 수 있습니다.

선택 변경 :



- [CTRL] 버튼을 누른 상태에서 개별 행을 클릭합니다。
행의 선택이 반전됩니다。 나머지 행의 선택은 그대로 유지됩니다。
또는
- [SHIFT] 버튼을 누른 상태에서 하나의 행을 클릭합니다。
[SHIFT] 버튼 없이 마지막으로 누른 행에서 현재 행까지의 모든 행이 선택됩니다。 나머지 행의 선택은 취소됩니다。
또는
- [CTRL]+[SHIFT] 버튼 조합을 누른 상태에서 하나의 행을 클릭합니다。
마지막으로 누른 행에서 현재 행까지의 모든 행이 선택됩니다。 나머지 행의 선택은 그대로 유지됩니다。
또는
- [CTRL]+[A]를 눌러 모든 행을 선택합니다。

Windows 클립 보드에 표 복사하기

모든 표 복사 :

1. 마우스 오른쪽 버튼으로 표를 클릭합니다.
2. 컨텍스트 메뉴에서 [표 복사] 선택합니다.

하나 또는 복수의 테이블 라인 복사 :

1. 원하는 행을 선택합니다.
2. 선택된 행을 [CTRL]+[C] 버튼 조합으로 복사합니다。

이제 표 또는 테이블 라인을 임의의 파일에 붙여넣기할 수 있습니다。

11.3 다이어그램 처리

모델 및 모델 계층 구조에서 다이어그램은 다음 설명에서와 같이 처리할 수 있습니다。 설명된 기술은 예를 들어 샘플 리스트의 스펙트럼과 같이 부분적으로 다른 다이어그램에서도 사용할 수 있습니다。

영역 최대화 및 최소화

- ↗↗을 클릭하여 다이어그램이 포함된 하위 영역을 최대화합니다。
- ↖↖ 클릭하여 하위 영역을 최소화합니다。

세부정보 창 표시 및 숨기기

몇몇 다이어그램에는 세부정보 창 또는 범례가 포함되어 있습니다。 이 창은 숨기거나 표시할 수 있습니다 :

1. 다이어그램을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다.
2. 컨텍스트 메뉴에서 [세부정보 창 표시/숨기기] 선택합니다。

확대/축소

마우스 휠을 통한 확대/축소 :

1. 커서를 다이어그램에 위치시킵니다。



2. 마우스 휠을 앞뒤로 돌려 확대/축소합니다。
 - a. 수직으로만 확대/축소: 동시에 **[CTRL]** 버튼을 누릅니다。
 - b. 수평으로만 확대/축소: 동시에 **[SHIFT]** 버튼을 누릅니다。

마우스 버튼을 통한 확대/축소 :

- 마우스 왼쪽 버튼을 누른 상태에서 영역을 좌측 하단 코너 또는 좌측 상단 코너에서 시작하여 확장합니다。
또는
- **[CTRL]+[SHIFT]** 버튼을 누른 상태에서 확대 시 마우스 왼쪽 버튼을 누르고 축소 시 마우스 오른쪽 버튼을 누릅니다。
 - 수직으로만 확대/축소: **[CTRL]** 버튼을 누른 상태에서 확대 시 마우스 왼쪽 버튼을 누르고 축소 시 마우스 오른쪽 버튼을 누릅니다。
 - 수평으로만 확대/축소: **[SHIFT]** 버튼을 누른 상태에서 확대 시 마우스 왼쪽 버튼을 누르고 축소 시 마우스 오른쪽 버튼을 누릅니다。

확대/축소 요소를 이용한 확대/축소 :

1. 커서를 x축 또는 y축의 시작 위치 또는 끝 위치에 있는 녹색 확대/축소 요소 중 하나에 놓습니다。
커서가 ⇔ 또는 ↑ 아이콘으로 변합니다。
2. 마우스 왼쪽 버튼을 누른 상태에서 축을 따라 축 밖으로 이동합니다。
3. 원하는 보기에 도달하는 즉시 마우스 버튼에서 손을 뗅니다。

표시된 영역 이동

임의의 방향으로 이동하기 :

1. 커서를 다이어그램에 위치시킵니다。
 2. 마우스 오른쪽 버튼을 누른 상태에서 표시된 영역을 임의의 방향으로 이동시킵니다。
 3. 원하는 보기에 도달하는 즉시 마우스 버튼에서 손을 뗅니다。
- 터치 스크린의 경우: 터치하고 길게 누릅니다. 이후 표시된 영역을 이동시킵니다。

수직 또는 수평으로 이동하기 :

1. 커서를 x축 또는 y축의 숫자 영역에 위치시킵니다。
2. 다음 method 중 하나를 이용해 표시된 영역을 이동시킵니다 :
 - a. 마우스 휠을 회전시킵니다。
 - a. 마우스 왼쪽 버튼을 누른 상태에서 축을 따라 이동합니다。

기본 보기로 다이어그램 초기화

- 다이어그램을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 컨텍스트 메뉴에서 **보기 초기화** 선택합니다。
또는



- 누른 마우스 왼쪽 버튼을 이용해 영역을 우측에서 좌측으로 늘입니다.

여러 점 또는 적정곡선 선택

- [CTRL] 버튼을 누른 상태에서 순차적으로 점 또는 적정곡선을 클릭합니다.
점 또는 적정곡선의 선택이 각각 반전됩니다. 나머지 점 또는 적정곡선의 선택은 그대로 유지됩니다.

다이어그램 **influence plot**, **score plot** 및 **상관관계 그래프**에 대해 추가적으로 다중 선택을 위한 모드를 사용할 수 있습니다 :

- 다중 선택 활성화**

다중 선택 활성화 클릭하십시오.

다이어그램의 조정을 위한 상기 기능 중 일부는 다음 기능으로 대체됩니다.

- **새로운 선택**

누른 마우스 왼쪽 버튼을 이용해 영역을 확장합니다.

영역 내의 모든 점이 선택됩니다. 영역 밖 점의 선택이 취소됩니다.

- **선택 확장**

[SHIFT] 버튼을 누른 상태에서 개별 점을 클릭하거나 또는 영역을 확장합니다.

해당 점이 선택됩니다. 나머지 점의 선택은 그대로 유지됩니다.

- **선택 감소**

[ALT] 버튼을 누른 상태에서 개별 점을 클릭하거나 또는 영역을 확장합니다.

해당 점의 선택이 취소됩니다. 나머지 점의 선택은 그대로 유지됩니다.

- **선택 반전**

[CTRL] 버튼을 누른 상태에서 개별 점을 클릭하거나 또는 영역을 확장합니다.

해당 점의 선택이 반전됩니다. 나머지 점의 선택은 그대로 유지됩니다.

- **선택 취소**

다이어그램의 빈 면을 클릭합니다.

- 다중 선택 비활성화**

다이어그램의 조절을 위한 기본 기능을 다시 사용하는 경우 **다중 선택 비활성화** 버튼을 클릭합니다.

Windows 클립 보드에 다이어그램 복사하기

- 다이어그램을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다.
- 컨텍스트 메뉴에서 [다이어그램 복사] 선택합니다.

이제 다이어그램을 임의의 파일에 붙여넣기할 수 있습니다.

152

샘플 리스트 내 다이어그램

곡선 오버레이

하나의 샘플 리스트에 여러 스펙트럼을 함께 표시합니다 :

- 샘플 리스트에서 **곡선 및 데이터 ▶ 적정곡선**를 엽니다.
- 클릭하여 곡선 오버레이를 활성화합니다. 이 아이콘이 보이지 않는 경우 구분줄을 드래그하여 이 영역을 확대합니다.
- 샘플 리스트에서 [CTRL] 또는 [SHIFT] 버튼을 이용해 여러 subsample을 선택합니다.

샘플 리스트 또는 에서 모든 스펙트럼을 표시하려면 클릭합니다.

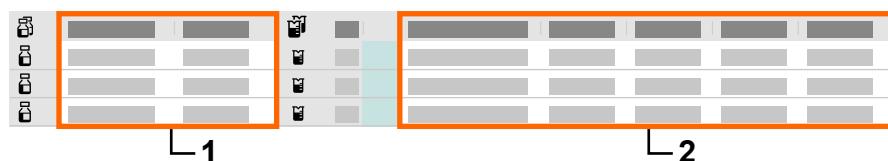
11.4 PREDICT 명령 변수

OMNIS Software는 예를 들어 샘플 데이터, subsample data, method 변수, 명령 변수 또는 시스템 변수 등 다양한 범주의 변수를 제공합니다.

소프트웨어가 자동으로 일부 변수를 생성합니다. 필요에 따라 추가 변수를 생성할 수 있습니다. 변수의 사용 시 그 데이터 타입을 고려해야 합니다(숫자, 텍스트 또는 날짜/시간).

변수는 이후 계산에 사용하고 리포트에서 결과로서 출력하거나 또는 예를 들어 **IF** 명령에서 조건으로서 입력할 수 있습니다.

샘플 작업 영역에는 샘플 데이터(**1**) 및 subsample data(**2**)가 샘플 리스트에 나타납니다 :



샘플 데이터를 생성하려면 샘플 프로파일을 편집합니다.
subsample data를 생성하려면 작업 과정을 편집합니다.

예측 결과를 subsample data로 표시합니다

예시로서 다음 **PREDICT** 명령 변수를 subsample data에 표시해야 합니다
스펙트럼 기록(참조: 17페이지, 2.3.1장):

- 수량화: **Predicted.Quantification.Result.** 명령 이름
관심있는 parameter에 대한 예측값。
- 동일시: **Product.Identification.Result.** 명령 이름
식별된 샘플의 제품 또는 제품분류。 동일시에 실패한 경우 변수는 비어 있습니다.

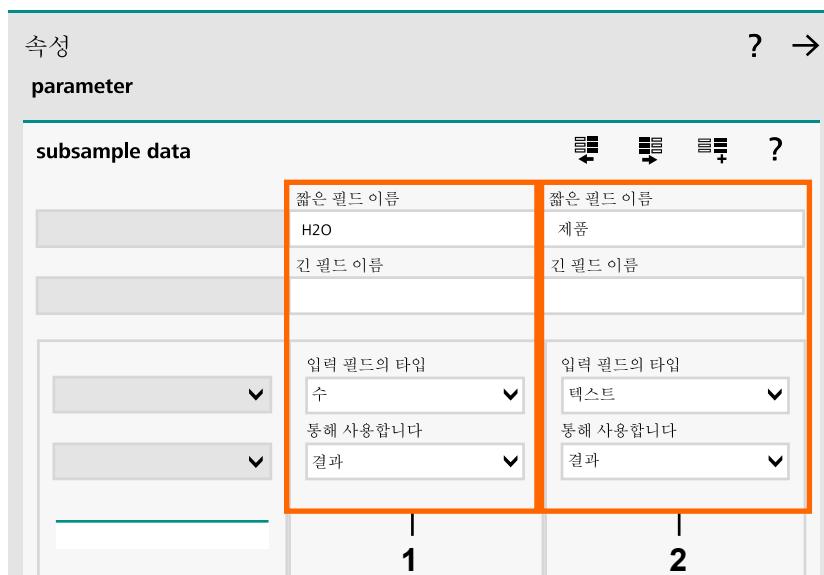
전제조건:

예측 method를 준비하기 위해 작업 과정이 작성되었습니다 [예측을 준비합니다\(참조: 134페이지, 9.1장\)](#).

1 subsample data를 생성합니다

- 관련 작업 과정을 엽니다.
작업 과정 > 클릭하십시오.
- 속성** ► **parameter**를 엽니다.
- 클릭 아이콘을 클릭하여 subsample data 필드를 생성합니다.
 - 짧은 필드 이름** 예측된 결과 또는 측정된 제품에 적합한 이름을 입력합니다.
 - 수량화**: 숫자 데이터 필드를 **입력 필드의 타입** 생성하려면 **숫자** 옵션을 선택합니다.
동일시: 영숫자 데이터 필드를 **입력 필드의 타입** 생성하려면 **텍스트** 옵션을 선택합니다.
 - 어레이는 **CALC** 명령의 결과로 채워져야 합니다. 따라서 **다음으로 사용**에서 **결과** 옵션을 선택합니다.
주의사항: **결과** 입력 필드는 수동으로 편집할 수 없습니다。

수량화 (1) 및 동일시(2)의 예 :



- 작업 과정 저장: 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

! 생성된 subsample data의 변수 이름은 선택한 **짧은 필드 이름**에 따라 달라집니다 :
'**짧은 필드 이름.CurrentSubsampleData**'

! 수량화: 각 샘플에 대해 여러 관심있는 parameter를 예측하는 경우 예측 결과에 대해 복수의 subsample data를 생성합니다.

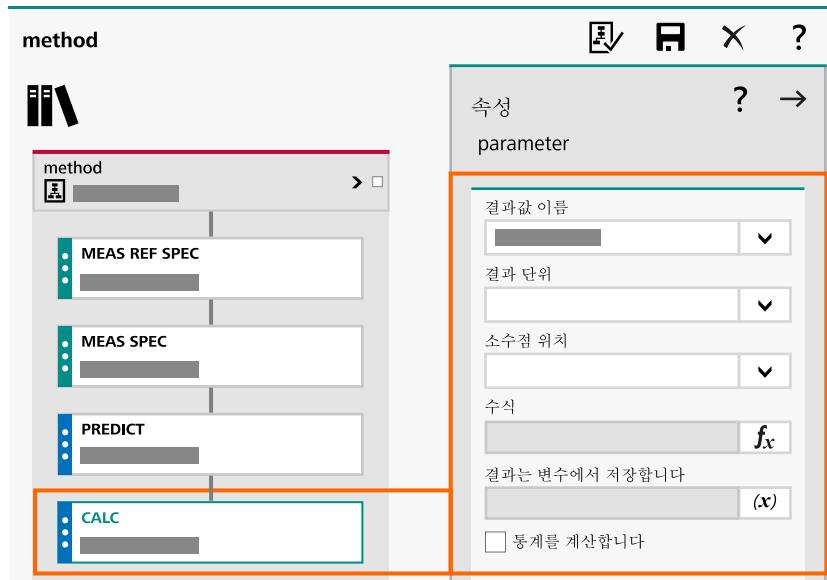
2 예측 결과를 위한 하나의 CALC 명령을 삽입합니다

생성된 subsample data를 **CALC** 명령의 결과로 채웁니다 :

- 관련 method를 엽니다。
- **CALC** 명령을 삽입합니다。
PREDICT 명령 아래에 **CALC** 명령을 배치합니다。

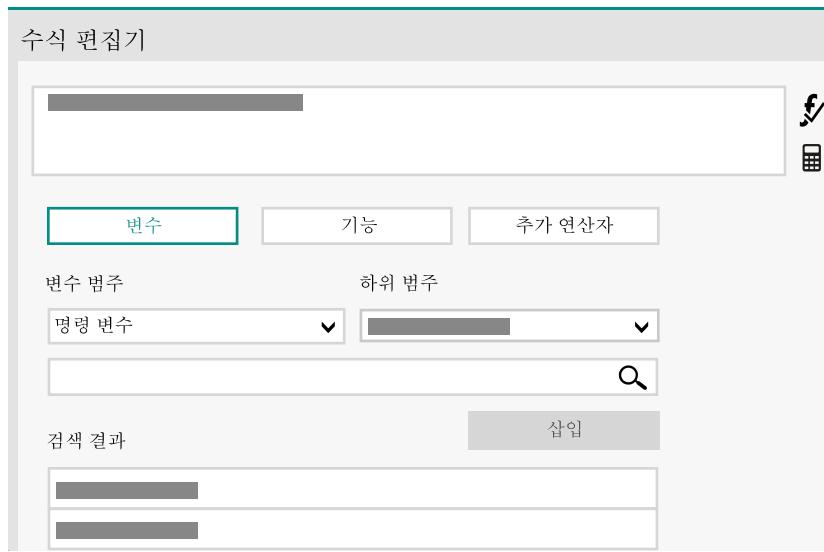
표시할 값을 계산

- **CALC** 명령을 선택하고 **속성 ► parameter** 엽니다。
 - **결과 이름** 예측된 결과 또는 측정된 제품에 적합한 이름을 입력합니다.
 - 수량화: **결과 단위** 및 필요한 **소수점 위치** 수를 입력합니다。



통계 계산 샘플의 여러 subsample에 적용됩니다。 **통계 계산** 비활성화합니다。

- **계산식** 필드에서 f_x 클릭하여 수식 편집기를 엽니다。



- **명령 변수** 변수 범주를 사용하여 수식을 작성합니다。결과 표시의 경우 수식은 단일 PREDICT 명령 변수만 포함합니다 :
 - 동일시 : **Product.Identification.Result.명령 이름**
 - 수량화 : **Predicted.Quantification.Result.명령 이름**
색인이 포함된 모델 계층 구조 변수가 선택된 경우 필요에 따라 최상위 입력 필드에서 예를 들어 다음과 같이 색인을 조정합니다 : '**Predicted.Quantification{2}.Result.명령 이름 모델 계층 구조 - 정량화 모델을 위한 색인(참조: 158페이지, 11.4.1장)**'
- 클릭하여 수식의 유효성을 점검합니다。
- **주의사항**: 예측 결과는 측정의 유효 기간 동안만 생성됩니다。따라서 클릭하여 수식을 계산할 때 **유효하지 않음** 결과가 표시됩니다。
- → 클릭하여 수식 편집기를 닫습니다。

subsample data에서 subsample data를 저장합니다

- **변수에 결과 저장** 필드에서 (**x**) 클릭합니다.
- **subsample data** 변수 범주를 선택합니다。
- 관련 작업 과정을 하위 범주로 선택합니다。
검색 결과 선택한 작업 과정에 정의된 subsample data를 표시합니다。
- 새 생성된 변수를 선택합니다。
선택한 변수가 **변수** 필드에 삽입됩니다。



변수 ?

.CurrentSubsampleData X

변수 범주	하위 범주
subsample data	

검색어를 입력합니다 🔍

검색 결과

.CurrentSubsampleDate
.CurrentSubsampleData

넘겨받습니다 중단

- **적용** 클릭하십시오.

- method 저장: 을 클릭하거나 또는 [CTRL]+[S] 버튼을 누릅니다.

수량화: 각 샘플에 대해 여러 개의 관심있는 parameter가 예측된 경우 각 예측 결과에 대해 하나의 **CALC** 명령을 삽입합니다.

샘플을 분석합니다

1 샘플 리스트 열기

- 샘플 리스트를 닫은 경우 **샘플 ▶ 샘플 리스트**에서 샘플 리스트를 두 번 클릭합니다.

2 샘플 리스트에 아직 분석되지 않은 모든 샘플에 대해 생성된 subsample data에 대한 필드가 표시됩니다 :

샘플 이름	subsample 이름

예측 후 필드에 결과가 표시됩니다.

동일시: 동일시에 실패한 경우 결과 필드는 비어 있습니다.

추가 변수

위의 것과 동일한 방법으로 subsample data에 추가 변수를 표시할 수 있습니다 [예측 \(참조: 18페이지, 2.3.2장\)](#)。

11.4.1 모델 계층 구조 - 정량화 모델을 위한 색인

하나의 모델 계층 구조는 복수의 정량화 모델을 포함할 수 있습니다.

PREDICT 명령 변수가 정량화 모델을 구별할 수 있도록 하기 위해 색인 번호가 사용됩니다.

특정 제품 또는 특정 제품분류와 링크된 첫 번째 정량화 모델에는 색인 1이 부여됩니다. 다른 정량화 모델이 동일한 제품 또는 제품분류와 링크되어 있는 경우 색인이 증분됩니다. 증분은 모델 계층 구조에서 정량화 모델의 순서를 근거로 이루어집니다.

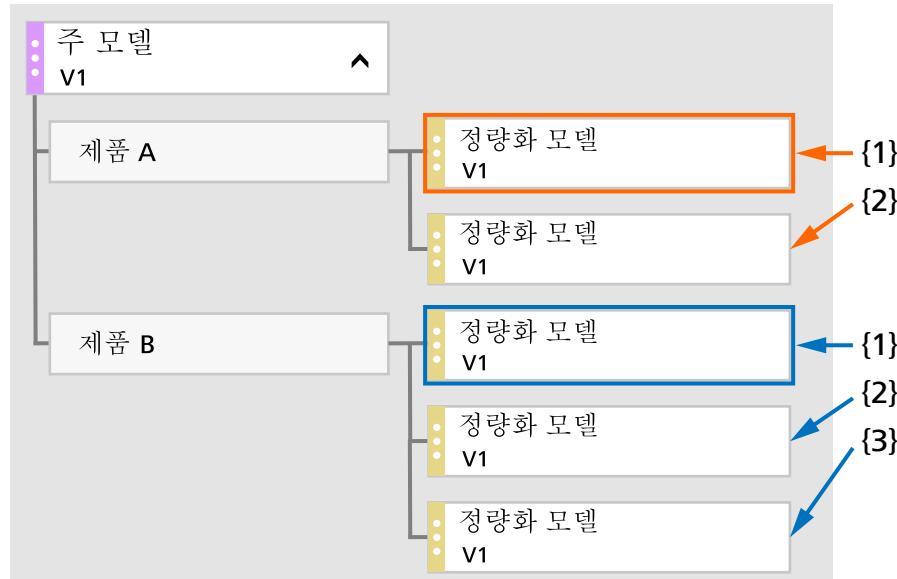


그림 7 하나의 모델 계층 구조에서 정량화 모델을 위한 색인 번호

PREDICT 명령 버전은 색인 번호를 통해 정량화 모델을 참조합니다。

예시: '**Predicted.Quantification{1}.Result**.명령 이름'

샘플이 예측 시 제품 A로 식별되는 경우 제품 A와 링크된 모든 정량화 모델이 사용됩니다. 이런 경우 상기 명령 변수는 제품 A와 링크된 색인 1의 정량화 모델을 참조합니다(그림에서 오렌지색 프레임으로 표시됨)。

샘플이 제품 B로 식별되는 경우 상기 명령 변수는 제품 B와 링크된 색인 1의 정량화 모델을 참조합니다(그림에서 청색 프레임으로 표시됨)。

청색 프레임으로 표시된 정량화 모델을 위해 이 명령 변수가 오렌지색 프레임으로 표시된 정량화 모델과 다른 방식으로 사용되는 경우 **IF** 명령은 편집을 특정 제품 제휴로 제한할 수 있습니다.

11.5 모델을 내보내고 가져옵니다

모델은 다른 OMNIS 설치에서 사용할 수 있도록 내보내고 가져올 수 있습니다.

모델 내보내기

1 모델 가져오기

- 다음 하위 영역 중 하나를 엽니다 :
 - 모델 ► 정량화 모델
 - 모델 ► 기울기 수정/y 절편 수정
 - 모델 ► 식별 모델
 - 모델 ► 정량화 모델
 - 모델 ► 모델 계층 구조
-  클릭하십시오.

내보내기 대화가 열립니다。

2 내보내기 파일 생성

- 기울기 수정/y 절편 수정을 제외한 모든 모델: **내보내기 타입** 선택 합니다 :
 - 모델 **타입 full**은 완전히 작동합니다. 다시 가져온 후에는 편집하고 저장할 수 있습니다.
 - 모델이 게시되면 마지막으로 게시된 버전을 **타입 light** 내보낼 수 있습니다. 이 모델은 예측에만 사용할 수 있습니다.
- 필요에 따라 대상 폴더와 파일 이름을 조정합니다.

i 다음 특수 문자 또는 문자열은 사용하지 말아야 합니다: > < : " / \ | * ? 및 CON, PRN, AUX, NUL, COM1 - COM9, LPT1 - LPT9.

- [내보내기] 클릭하여 내보내기 파일을 생성합니다.

모델이 지정된 대상 폴더로 내보내기됩니다.

모델 가져오기

1 가져오기 대화를 엽니다

- 다음 하위 영역 중 하나를 엽니다 :
 - 모델 ► 정량화 모델
 - 모델 ► 기울기 수정/y 절편 수정
 - 모델 ► 식별 모델
 - 모델 ► 정량화 모델
 - 모델 ► 모델 계층 구조
-  클릭하십시오.

2 파일 열기

- 폴더와 *.opmo 파일 또는 *.osic 파일을 선택합니다.
- [열기]를 클릭합니다.

모델이 OMNIS Software로 가져오기됩니다。

11.6 XDS/DS Analyzer(수량화)를 변경합니다

DS2500 또는 XDS Analyzer에서 전환할 때 XDS/DS Analyzer에 대한 정량화 모델을 생성하는 데 사용되는 스펙트럼 및 기준 parameter를 OMNIS Software로 가져올 수 있습니다. 이 데이터를 사용하여 정량화 모델을 개발할 수 있습니다.

두 번째 단계에서는 기울기 수정/y 절편 수정이 수행됩니다. 이를 위해 OMNIS Software로 삽입된 스펙트럼을 사용합니다. 이러한 스펙트럼에 대한 기준값을 알아야 합니다.

기울기 수정/y 절편 수정을 위해 정량화 모델 개발에 비해 샘플이 적게 사용됩니다 :

- 신뢰할 수 있는 바이어스 추정치를 얻으려면 최소 20개의 샘플이 필요합니다.
- 신뢰할 수 있는 기울기 추정치를 얻으려면 최소 30개의 샘플이 필요합니다.

정량화 모델을 개발

전제조건:

- XDS/DS 스펙트럼이 포함된 스펙트럼 파일(.da)을 사용할 수 있습니다.

- 기준 parameter가 포함된 참조 기준 parameter 파일(cn)을 동일한 폴더에서 사용할 수 있습니다。

1 정량화 모델을 생성 및 이름을 지정

- 모델 ► 정량화 모델**에서 클릭하십시오.
- 정량화 모델의 이름** 입력 필드에 적절한 이름을 입력합니다.

2 스펙트럼 가져오기

- XDS/DS 가져오기** 클릭하십시오.



- 클릭하십시오.
- 가져오기 할 스펙트럼 파일(.da)을 선택합니다.
- [열기]를 클릭하여 선택을 확인합니다.
- [다음] 클릭하십시오.

3 기준 parameter 선택

- 기준 parameter / 단위** 목록에서 기준 parameter를 선택합니다.
- 기준 parameter의 단위** 입력 필드에서 기준 parameter의 단위를 선택합니다。

기준 parameter의 선택된 이름을 갖는 모든 스펙트럼이 정량화 모델에 추가됩니다。

4 자동 또는 수동 모델 개발

모델 개발에는 몇 가지 옵션이 있습니다 :

- OMNIS Model Developer (OMD)**를 사용한 자동 모델 개발: **[OMD 시작]** 클릭합니다.
[장5.2, 자동 모델 개발 - OMD, 쪽 61](#) 계속。
- 수동 모델 개발: **[만들기]** 클릭합니다.
[장5.3, 수동 모델 개발, 쪽 64](#) 계속。

5 자동 또는 수동 모델 개발

i 먼저 샘플 선택을 수동으로 조정한 다음 모델을 자동으로 개발해야 하는 경우 수동 모델 개발을 계속합니다。

- 자동 모델 개발:** **[OMD 시작]** 클릭합니다.
[장5.2, 자동 모델 개발 - OMD, 쪽 61](#) 계속。



- **수동 모델 개발**: [만들기] 클릭합니다.
[장 5.3, 수동 모델 개발, 쪽 64](#) 계속.

6 모델 게시

- 정량화 모델을 게시합니다 [정량화 모델 게시 \(참조: 85페이지, 5.4 장\)](#).

기울기 수정/y 절편 수정에 대한 샘플

각 샘플은 기울기 수정/y 절편 수정을 위해 필요합니다 :

- 수정할 파라미터의 기준값。
- 스펙트럼。
- 각 스펙트럼에 대해 계산된 값。

1 샘플을 수집합니다

- 기울기 수정/y 절편 수정을 위한 물리적 샘플을 정량화 모델 개발을 위한 샘플인 것처럼 수집합니다 [모델 개발을 준비합니다 \(참조: 43페이지, 4장\)](#). 그러나 샘플 수가 적은 경우 충분합니다.

2 스펙트럼 삽입 및 예측을 준비합니다

- 정량화 모델 개발을 위한 샘플인 것처럼 method, 작업 과정, 샘플 프로파일 및 샘플 리스트를 작성합니다 [스펙트럼 분석 준비 \(참조: 44페이지, 4.1장\)](#). 하지만 :
- **method**
method에서 **MEAS SPEC** 명령 다음에 **VESSEL REMOVAL** 명령 다음에 **PREDICT** 명령을 추가합니다.
PREDICT parameter 설정으로 다음을 지정합니다 :
 - **측정 명령의 이름**
 - 가져온 스펙트럼 사용하여 **정량화 모델** 개발되었습니다。

3 스펙트럼을 삽입하고 관심있는 parameter를 예측합니다

- 스펙트럼을 삽입하고 정량화 모델 개발을 위한 샘플인 것처럼 관심 있는 parameter를 예측합니다 [스펙트럼 기록 \(참조: 54페이지, 4.2 장\)](#).

그런 다음 각 샘플에서 스펙트럼, 기준값 및 계산된 값이 있습니다.

여러 관심있는 parameter의 경우 각 샘플은 스펙트럼을 가지고 각 샘플에 대해 기준값과 계산된 값이 있습니다.



기울기 수정/y 절편 수정 만들기

- 기울기 수정/y 절편 수정을 생성합니다. 이를 위해 OMNIS Software로 삽입된 스펙트럼을 사용합니다. 이러한 스펙트럼에 대한 기준값을 알아야 합니다.

[기울기 수정/y 절편 수정\(참조: 86페이지, 5.5장\)](#)

예측

1 예측을 준비합니다

- 예측에 필요한 프로세스를 준비합니다 [예측을 준비합니다\(참조: 134페이지, 9.1장\)](#).

PREDICT 명령에서 정량화 모델 및 해당 기울기 수정/y 절편 수정을 지정합니다.

2 예측을 수행합니다

- 예측을 수행합니다 [예측을 시작합니다\(참조: 141페이지, 9.2장\)](#).

i 분석 수행은 검사 샘플을 사용하여 모니터링해야 합니다. 제어 샘플은 분광 method 및 기준 method를 사용하여 분석됩니다. 두 method의 결과를 비교할 수 있습니다.

11.7 OMNIS NIR Analyzer에 대한 워크플로우

OMNIS NIR Analyzer를 사용하여 샘플을 분석하기 위해 OMNIS Software는 다음과 같은 작업을 수행합니다 :

- 장비 준비 :
 - 장비 구성
 - 파장 보정 및 검증
 - 장비 성능 테스트
- 보정 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다
- 보정 샘플의 기준값을 삽입합니다
- 모델을 개발합니다
- 관심있는 parameter를 예측합니다
- 장비 성능 테스트: 필요에 따라 반복합니다.

다음 부분에서 OMNIS Software의 관련 워크플로우를 보여 줍니다.

장비 준비

스펙트럼을 삽입하기 전에 장비를 준비해야 합니다. 무엇보다도 파장 보정을 수행해야 합니다.

다음 [그림 8](#)에서는 파장 보정이 예시적으로 설명됩니다。 이 method는 단일 명령을 사용하여 설명합니다。

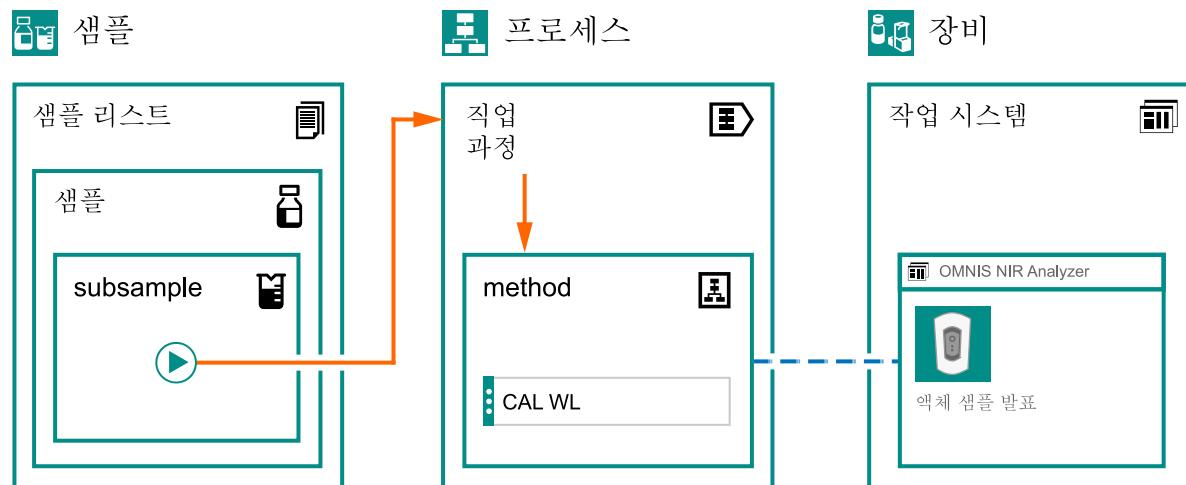


그림 8 장비설정



OMNIS Software의 링크。



method는 작업 시스템에 할당된 상태입니다。

샘플 작동 범위에서 샘플이 포함된 샘플 리스트가 포함되어 있습니다。 샘플에서 subsample이 포함되어 있습니다。 subsample에서는 하나의 작업 과정이 할당합니다。

일반적으로 샘플은 실제 샘플을 분석하는 데 사용됩니다。 그러나 이 경우 샘플은 파장 보정을 수행하는 데 사용됩니다。 해당 subsample이 시작되는 경우 다음 단계가 수행됩니다 :

1. subsample은 할당된 작업 과정을 시작합니다。
2. 작업 과정은 포함된 method를 실행합니다。
3. method는 **CAL WL** 명령을 실행합니다。 명령은 method에 할당된 작업 시스템에서 실행됩니다。

작업 시스템에서 OMNIS NIR Analyzer 장비의 실험 장비가 포함됩니다。 장비는 파장 보정을 수행합니다。 보정 data가 장비에 저장됩니다。

기준값 또는 제품 이름을 삽입합니다

모델을 생성하려면 각 보정 샘플 및 검증 샘플에 대해 기준값(수량화) 또는 제품 이름(식별)을 수집해야 합니다。 검증을 위해서는 개별 샘플이 포지티브 또는 네거티브로 분류되는지를 알고 있어야 합니다。

수량화의 예

다음 [그림 9](#)에는 예를 들어 샘플의 수분 함량과 같은 관심있는 parameter에 대한 기준값의 기록이 설명되어 있습니다。

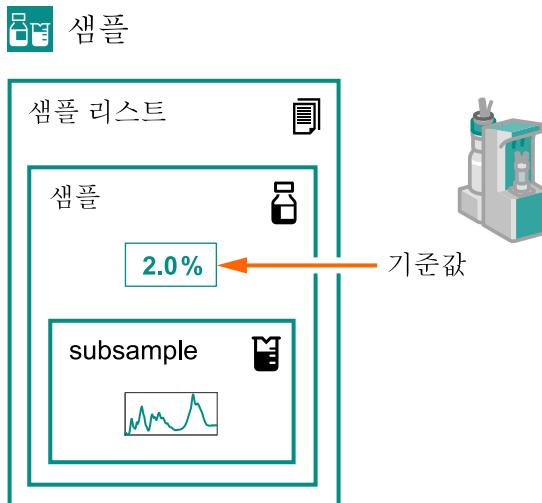


그림 9 기준값을 삽입합니다

관심있는 parameter는 예를 들어 적정 method를 사용하여 측정됩니다. 측정값은 기준값으로 사용됩니다.

샘플 리스트의 각 샘플에 대한 기준값이 해당 입력 필드에 입력됩니다.

보정 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다

모델을 생성하려면 각 보정 샘플과 검증 샘플에 대해 스펙트럼을 기록해야 합니다.

다음 [그림 10](#)에는 스펙트럼의 기록의 개략적 설명이 표시되어 있습니다.

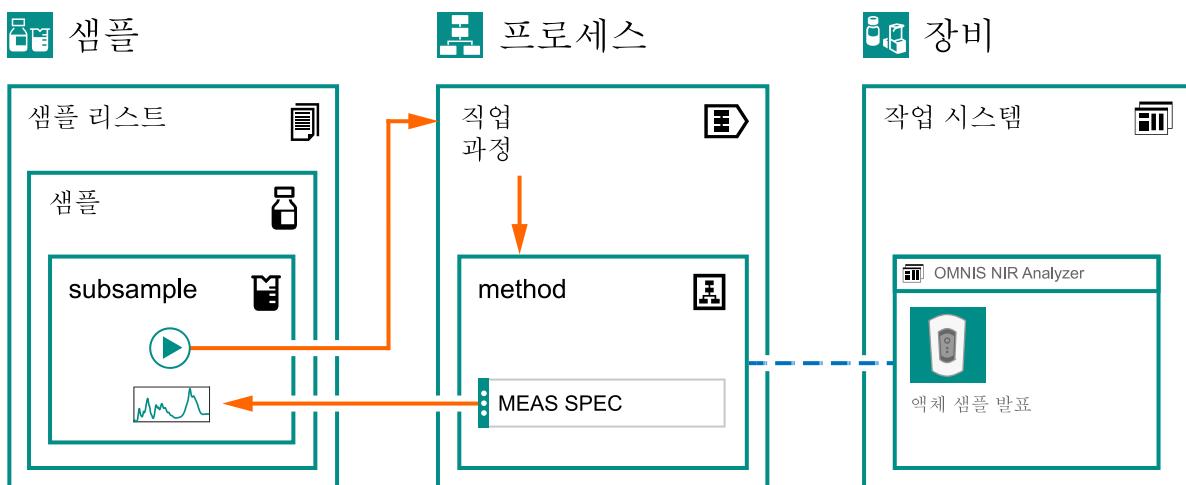


그림 10 보정 샘플의 스펙트럼 기록



OMNIS Software의 링크。



method는 작업 시스템에 할당된 상태입니다.



샘플 작동 범위에서 보정 샘플이 포함된 샘플 리스트가 포함되어 있습니다. 각 샘플에서 subsample이 포함되어 있습니다. 각 subsample에서 하나의 작업 과정이 할당합니다.

subsample이 시작되는 경우 다음 단계가 수행됩니다 :

1. subsample은 할당된 작업 과정을 시작합니다.
 2. 작업 과정은 포함된 method를 실행합니다.
- method는 **MEAS SPEC** 명령을 실행합니다. 명령은 method에 할당된 작업 시스템에서 실행됩니다。

작업 시스템에서 실험 장비(예를 들어 **Liquid Sample Presentation**)가 포함됩니다. 실험 장비는 스펙트럼을 캡처하여 OMNIS Software로 전송합니다. OMNIS Software는 스펙트럼을 subsample data에 저장합니다。

모델 개발

수량화: 스펙트럼 및 기준값에서 정량화 모델이 **OMD** (OMNIS Model Developer)를 통해 자동으로 또는 수동으로 생성됩니다。

식별 : 식별 모델은 보정 샘플의 스펙트럼과 제품 이름을 사용하여 생성됩니다。

검증 : 보정 샘플의 스펙트럼에서 검증 모델이 만들어집니다。

수량화의 예

다음 [그림 11](#)에는 정량화 모델의 수동 개발을 위한 단계가 설명되어 있습니다.

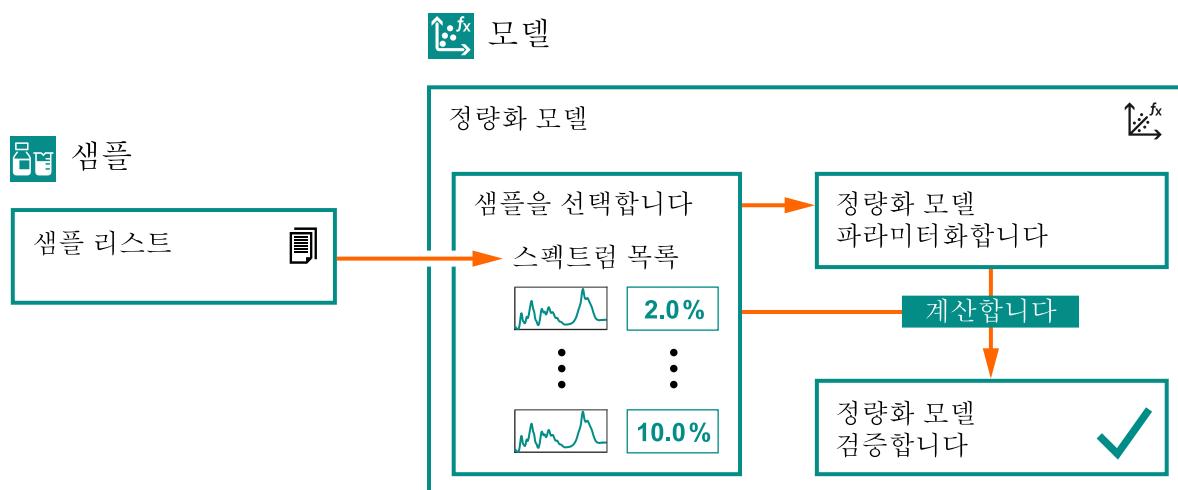


그림 11 모델을 개발합니다(수량화의 예)

먼저 기준값을 포함한 샘플이 스펙트럼 목록으로 전송됩니다. 그런 다음 모델을 3 프로세스단계로 개발합니다 :

1. **샘플 선택** 프로세스 단계를 통해 특이값을 감지하고 검증 스펙트럼을 설정하고 교차 유효성 검사 방식을 지정할 수 있습니다.
2. **정량화 모델 파라미터화** 프로세스 단계에서 스펙트럼에 데이터 전처리를 적용하고 파장범위를 정의할 수 있습니다.



3. 모델을 계산한 후 **정량화 모델 검증** 프로세스 단계에서 모델이 요구 사항을 충족하는지 여부를 평가합니다.
이전 단계를 조정하여 모델을 최적화할 수 있습니다. 적합한 모델이 식별되는 경우 **개시**할 수 있습니다. 그런 다음 계시된 모델을 사용하여 알 수 없는 샘플을 예측할 수 있습니다.

예측

예측 시 모델은 알 수 없는 샘플의 스펙트럼을 사용합니다. 모델에 따라서 다음 사항을 예측할 수 있습니다 :

- 관심있는 parameter (수량화)
- 제품 제휴 또는 검증 결과 (식별)
- 정량화의 결과 (검증)

수량화의 예시 : 다음 [그림 12](#)에는 관심있는 parameter의 예측이 설명되어 있습니다.

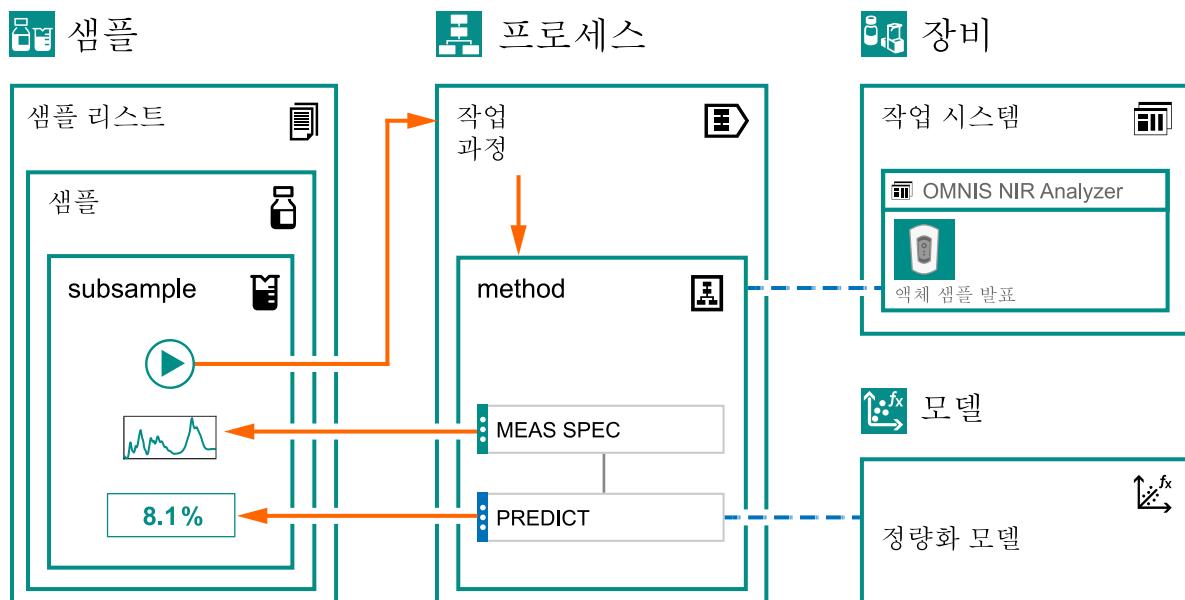


그림 12 관심있는 parameter를 예측합니다(정량화의 예)



OMNIS Software의 링크。



method는 작업 시스템에 할당된 상태입니다.



PREDICT 명령은 모델을 지정합니다。

샘플 작동 범위에서 분석할 준비가 된 샘플 리스트가 포함되어 있습니다. 각 샘플에서 subsample이 포함되어 있습니다. 각 subsample에서 하나의 작업 과정이 할당합니다.

subsample이 시작되는 경우 다음 단계가 수행됩니다 :

1. subsample은 할당된 작업 과정을 시작합니다.



2. 작업 과정은 포함된 method를 실행합니다。 method에서 최소 2개의 명령이 포함되어 있습니다 :

- a. 측정 명령

MEAS SPEC 명령은 샘플의 스펙트럼을 삽입합니다。 명령은 method에 할당된 작업 시스템에서 실행됩니다。

작업 시스템에서 실험 장비(예를 들어 **Liquid Sample Presentation**)가 포함됩니다。 이 장비는 스펙트럼을 캡처하여 OMNIS Software로 전송합니다。

- b. 예측

PREDICT 명령에서 측정 명령과 모델이 선택됩니다。 모델은 측정 명령으로 삽입된 스펙트럼을 평가합니다。 그 결과에 예를 들어 8.1%의 수분 함량이 예측됩니다。