



Application Note AN-RS-031

# 的RMID模型建

## Mira Cal P 和 ModelExpert

混合了主成分分析(PCA)、准无限参数和理的材料模型非常。每个模型都必格的建、估和,然后才能投入日常使用。通常,即使有富的人也需要几天的才能完成。Mira P化了材料的。Mira P具有短、明的用工作流程、直的成果和的操作,是最的RMID工具之一。Mira Cal

### 介

ModelExpert是一个集成到Mira Cal P中的函数,它使用用提供的集和集本化模型参数。此例程迭代192个

P的ModelExpert是可靠的工具,ModelExpert可自定义方法的最佳模型参数。只需收集集和集数据,ModelExpert就会化本分析。使用Mira P和ModelExpert,即使是非技用也可以在很短的内得更好的果。

参数合,以保将最佳模型用于客采。

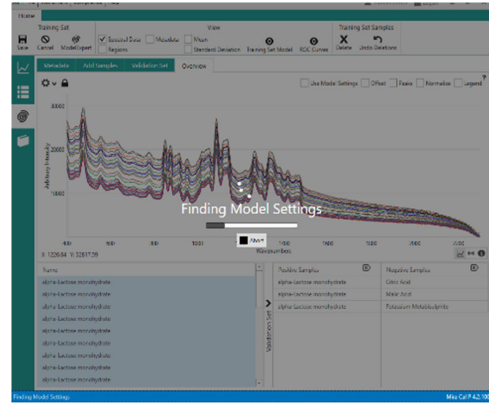
## 描述

ModelExpert充分体现了工作特征(ROC)曲线的。ROC曲线是机器学习模型的一个组成部分。ROC方法根据曲线下面积(AUC)得分进行排名。除了剔除在置信区内生假性/

性的合外,ModelExpert排名包括于些合表于其他合的相关信息。

## 方法

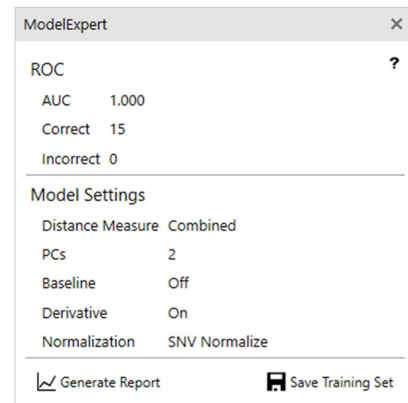
要使用ModelExpert功能,首先在Mira Cal P中建立一个新的集。ModelExpert位于菜单中的集下。ModelExpert后,会自动数据行所有可能的模型组合(例如,归一化、基除、主要元),同时“找模型置”(1)。



1. ModelExpert例程期的Mira Cal P屏幕截。

## 果

ModelExpert果示在出窗口中(2)。此窗口了生成的ModelExpert置。可以生成PDF告,其中包含有模型置、ROC曲和本以及相p的更多信息。“保存集”后,所有化的模型参数都将用于的集和集。



2. ModelExpert果窗

的来,ModelExpert功能是一使用客数据生成最佳参数和本数据理的而透明的方法,只需在Mira Cal P中几下

鼠即可。Metrohm Raman致力于RMID提供、高效和准的使用方法。

## CONTACT

Metrohm AG  
Ionenstrasse  
9100 Herisau

info@metrohm.com

## 器配置



### MIRA P Advanced

瑞士万通快速拉曼分析 (MIRA) P 是一款性能大的手持式拉曼光,可用于各材料的快速无定和,例如物有效成分和形。MIRA P 小而固,配了瑞士万通的ORS技。MIRA P 符合 FDA 邦法 21 章第 11 款的定

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