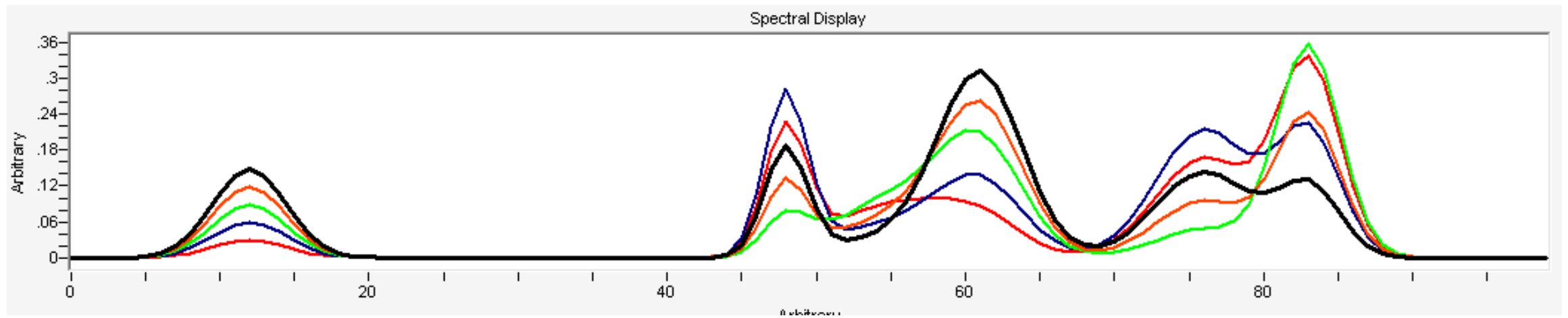


ごく簡単なスペクトルにPLS定量モデルの作成

(3成分の混合物で、それぞれの成分スペクトルピークがオーバーラップ)



ステップ 1

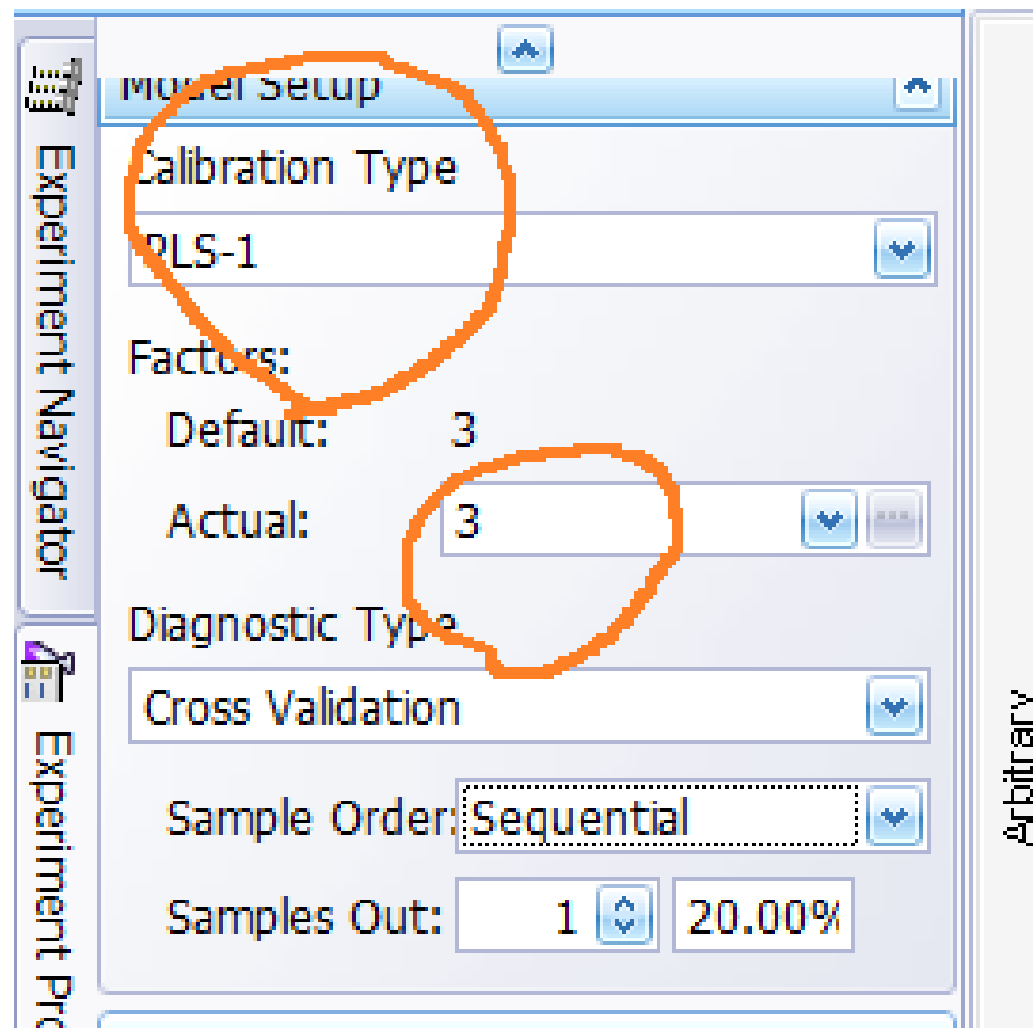
検量（トレーニング）データのインポート 濃度比（Yデータ）の入力

name	File	Folder	Memo	Type	A	B	C
Good1	Good1.spc	C:\Users\OSAMU\AppData\Loca...	GRAMS IQ Tutorial - Synthetic Mixture Spectra with ...	Calibration	0.1	0.35	0.55
Good3	Good3.spc	C:\Users\OSAMU\AppData\Loca...	GRAMS IQ Tutorial - Synthetic Mixture Spectra with ...	Calibration	0.2	0.45	0.35
Good5	Good5.spc	C:\Users\OSAMU\AppData\Loca...	GRAMS IQ Tutorial - Synthetic Mixture Spectra with ...	Calibration	0.3	0.1	0.6
Good7	Good7.spc	C:\Users\OSAMU\AppData\Loca...	GRAMS IQ Tutorial - Synthetic Mixture Spectra with ...	Calibration	0.4	0.3	0.4
Good9	Good9.spc	C:\Users\OSAMU\AppData\Loca...	GRAMS IQ Tutorial - Synthetic Mixture Spectra with ...	Calibration	0.5	0.3	0.2

ステップ 2
検量モデルの選択
(ここでは、PLS-1)

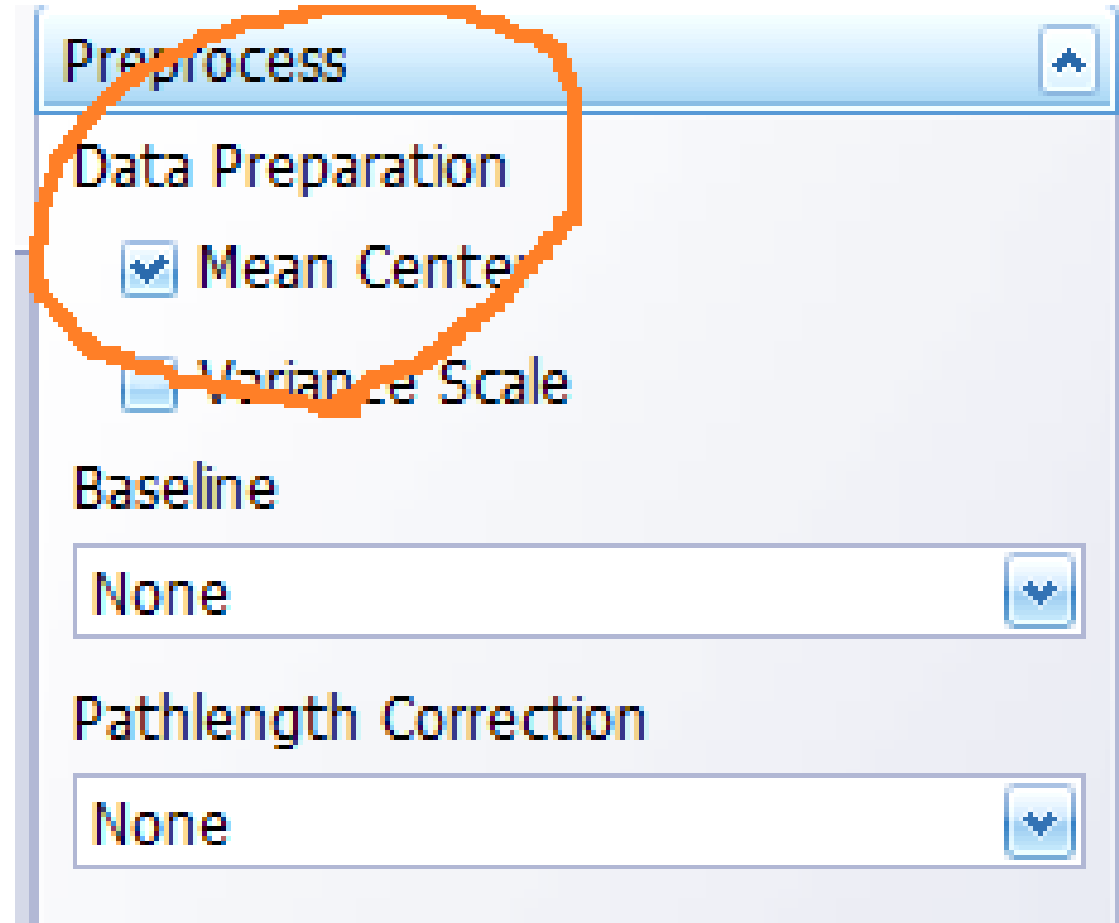
モデルの因子数の指定
(ここでは、3)

モデルの診断ツールの
選択
(ここではCross-
Validation)



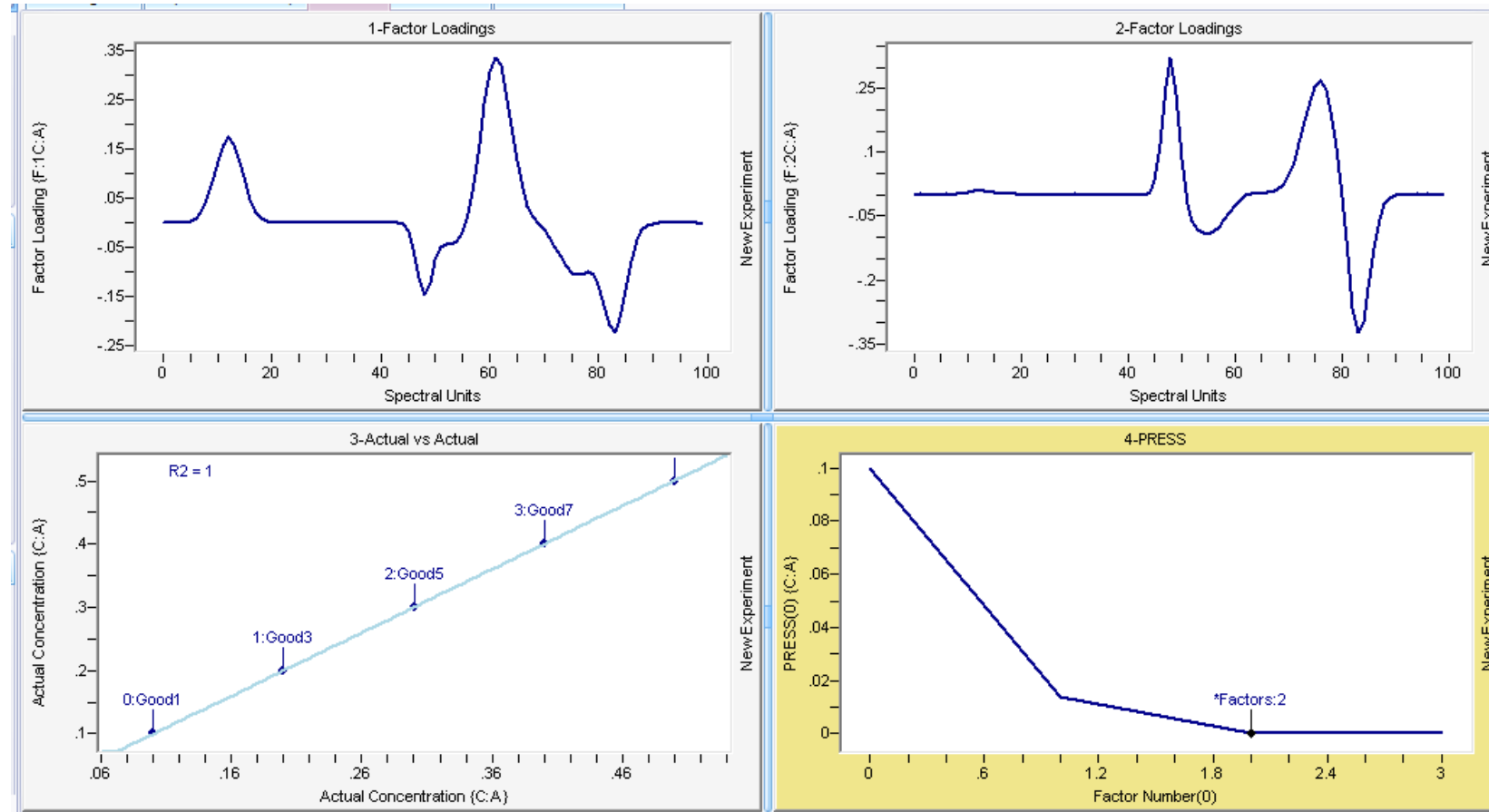
ステップ 3

プリプロセスの設定
(ここでは、一番よく
使われるMean
Centerを選択)



ステップ 4

プリプロセスの設定（ここでは、一番よく使われる Mean Center を選択）



ここで、検量モデルとして保存すでは、濃度の予測を実行できます。

* 精密なモデル作成には、因子数の再確認、外れ値のチェック、プリプロセス手法の試行錯誤、トレーニングデータの追加などタスクを伴います。