



Application
WORX

Vereinfachte NIR-Modellentwicklung



ZEUTEC

made
in
Germany



Alle Vorteile im Überblick

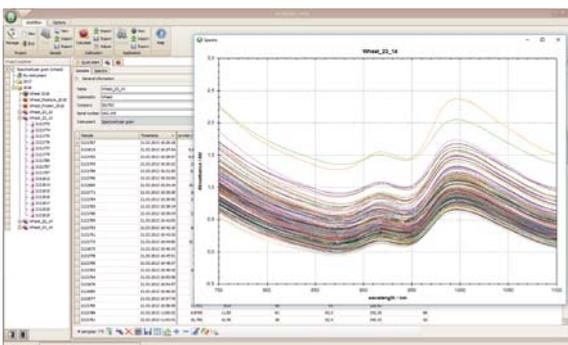
Application worx ist eine chemometrische Software, die zur Modellentwicklung (Kalibrierung) für die NIR Spektroskopie entwickelt wurde.

Kalibrierungsmodelle sind notwendig, um aus dem Nahinfrarotspektrum einer Probe auf deren eigentliche chemische Beschaffenheit schließen zu können.

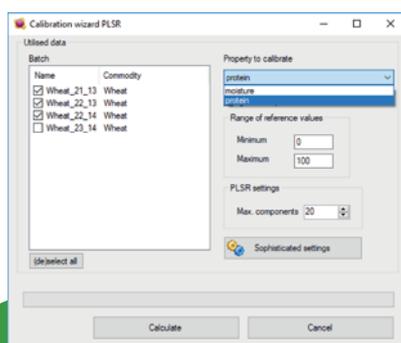
In der Regel ist große Erfahrung und Expertenwissen notwendig, um anhand der Spektren bekannter Referenzproben eine solche NIR-Kalibrierung mittels chemometrischer Algorithmen zu berechnen. Genau in diesem Punkt differenziert sich **Application worx** von ähnlichen Software-Paketen, durch sein strukturiertes Design, das einzelne Arbeitsschritte klar vorgibt. Übersichtliche Wizard-Dialogfenster geben verständliche Hilfestellung und ermöglichen so selbst dem Laien eine eigene multilineare Regression (MLR) oder Partial-Least-Square-Regression (PLSR) - Kalibrierung zu erstellen. Dabei bietet **Application worx** die Option das Modell automatisiert sukzessive bzw. iterativ zu verbessern. Dennoch kann auch der Experte seine wertvollen Erfahrungen jederzeit in das zu entwickelnde Modell mit einfließen lassen.

Abschließend wird für ein zu analysierendes Produkt eine Anwendung mit Modellen für verschiedene Eigenschaften zusammengestellt, die dann mit einem NIR-Spektrometer zeitgleich und schnell gemessen werden können.

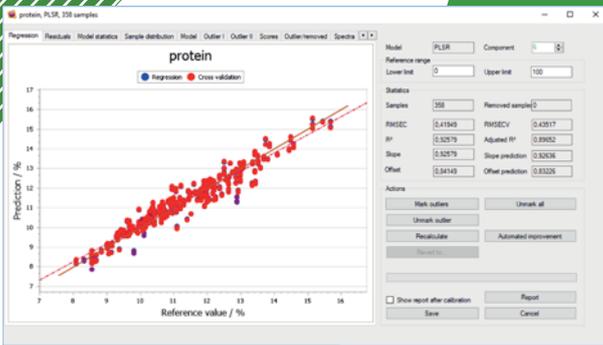
Eigenschaften



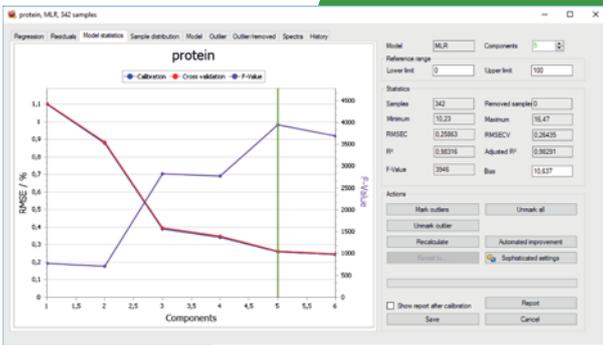
- Klar strukturierte Bedienoberfläche
- Einfacher Import von spektralen Daten aus Instrumentdateiformaten oder JCAMP-DX
- Chemische Referenzwerte können aus CSV-Dateien eingelesen und von Hand editiert werden
- Daten werden in einer MySQL-Datenbank gespeichert (lokal oder über das Intra-/Internet)



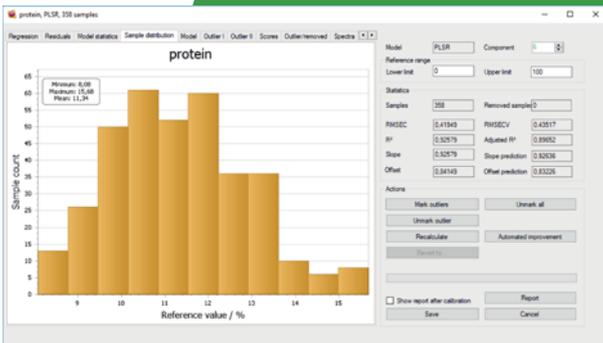
- Wizard geführte Modellkonfiguration
- Mehrere Messserien können kombiniert werden
- Referenzwertebereich einschränkbar
- Berechnung der Modelle mithilfe von MLR oder PLSR
- Verschiedene Methoden zur Datenaufbereitung verfügbar, z.B. Glättungen und Ableitungen



- Wizard führt vollständige Kombinationssuche für MLR aus
- Für jeden Faktor wird das beste Ergebnis automatisch ausgewählt



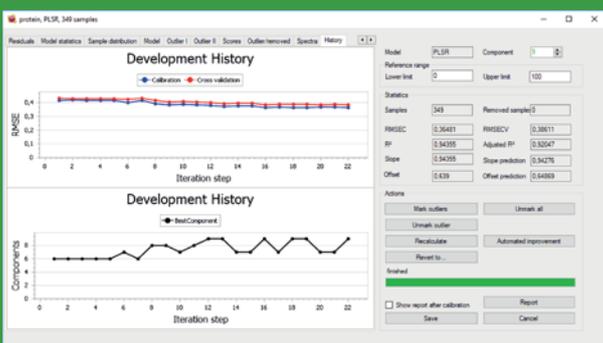
- Statistische Daten (z.B. RMSEC, RMSECV, Fischer-Wert) unterstützen den Anwender bei der Wahl des optimalen Modells



- Histogramm der Probenverteilung ermöglicht Verbesserung des Referenzwertepools



- Der Experte kann Ausreißerstatistiken zur individuellen Modelloptimierung nutzen
- Für PLSR-Modelle stehen Score-Plots zur Verfügung



- Schnelle automatisierte Modellverbesserung basierend auf Ausreißererkennung
- Vollständige Historie der Modellentwicklung verfügbar
- Einfache Rückkehr zu vorherigen Entwicklungsschritten möglich

Technische Daten

Systemvoraussetzungen

MS Windows 7 / 8 oder 10

Lieferumfang

Awx-USB-Dongle mit Installations- und Hilfedateien. Der Dongle ist notwendig, um die Software zu starten.

Kompatible Instrumente

SpectraAlyzer, Kernelyzer, Olivas Gold und andere

Software-Funktionen

Organisation der Spektren und chemischen Referenzdaten, Modellentwicklung, Modellanpassung, Zusammenstellen von Applikationen.

Bestellnummer

Awx Artikelnummer

10509

ZEUTEC Opto-Elektronik GmbH

Friedrich-Voß-Straße 11
24768 Rendsburg
Germany

(+49) 4331 - 136650
moreinfo@zeutec.de
www.spectraalyzer.com

ZEUTEC



Application
WORX