

отклонений, расстояния внутри модели и прочие показатели должны быть согласованы с уровнем принятия решений, представленным в процедуре валидации.

Метод анализа должен быть валидирован.

Валидация метода качественного анализа. Валидация метода призвана продемонстрировать его пригодность для целей анализа.

Валидация метода проводится на проверочном наборе объектов, не участвовавших в построении метода, и предполагает проверку специфичности, чувствительности и устойчивости (робастности).

Чувствительность показывает, какая часть объектов проверочного набора, схожих с объектами библиотеки, правильно распознается как «свои».

Специфичность показывает, какая часть объектов проверочного набора, отличных от библиотечных, правильно распознается как «чужие».

Особое внимание уделяется результатам классификации объектов, спектры которых визуально схожи со спектрами объектов библиотеки, но отличаются от них по композиции или химической структуре. Такие образцы должны правильно определяться как «чужие».

Устойчивость показывает, что незначительные изменения условий (например, температура, влажность воздуха, вибрации, температура образца, степень уплотнения материала, глубина погружения зонда, толщина слоя и т.д.) не влияют на результаты и надежность идентификации или квалификации.

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ

Разработка калибровочной модели. При разработке модели устанавливается зависимость изменения интенсивности поглощения или отражения в спектре образцов от изменения свойств и/или состава веществ. При этом регистрируют спектры образцов с известными значениями их состава и/или их свойств, подтвержденных аттестованными методами. Так как хемометрические алгоритмы не допускают экстраполяции, необходимо, чтобы область калибровочных концентраций была не менее ожидаемого