

диапазона анализируемых концентраций или других количественных характеристик. Калибровочные образцы должны быть по возможности равномерно распределены внутри диапазона рабочих концентраций.

Регистрацию спектров проводят при соблюдении параметров эксперимента, факторов, влияющих на результаты измерений и первичной обработки, которые предварительно оптимизированы для всех анализируемых объектов и сохраняются постоянными при последующих измерениях.

Калибровочную модель оптимизируют при помощи подходящего способа предварительной обработки спектров, выбора спектральной области и математического алгоритма.

*Предварительная обработка спектров.* Проводят так же, как описано в разделе «Качественный анализ».

*Анализ данных.* Для построения калибровочной модели может использоваться любой обоснованный математический алгоритм. Так как в области БИК диапазона наблюдается сильное перекрывание полос поглощения, количественный анализ проводят преимущественно хемометрическими алгоритмами, например такими, как метод проекций на латентные структуры (ПЛС, англ. PLS), метод регрессии на главные компоненты (РГК, англ. PCR) и другими.

*Валидация калибровочной модели.* Валидация модели калибровки предполагает демонстрацию ее пригодности для решения поставленной цели. При этом должны быть определены следующие валидационные характеристики: специфичность (селективность), линейность, рабочий диапазон концентраций (аналитическая область), правильность, прецизионность и устойчивость (робастность).

При построении калибровочных моделей с помощью хемометрических методов анализа качество калибровки оценивается по среднеквадратичному остатку калибровки (*RMSEC*) и среднеквадратичному остатку прогноза (*RMSEP*).