

В библиотеку включают спектры веществ, соответствующих предъявляемым требованиям, качество которых подтверждено фармакопейными или другими аттестованными методами.

Для учета возможных вариаций свойств каждого вида анализируемых объектов регистрируют спектры нескольких серий (партий). Регистрацию спектров проводят в схожих условиях измерений и выполняют одинаковую предварительную обработку. Выбранная предварительная обработка включенных в библиотеку спектров сохраняется неизменной при последующих измерениях.

*Методы предварительной обработки спектров.* Рекомендуется проводить предварительную обработку спектров с целью повышения информативности получаемых результатов и уменьшения влияния спектральных вариаций. Обработка первичных данных может включать вычисление первой или второй производной, нормализацию, мультипликативную коррекцию рассеивания и другие методы или их комбинации. При выборе методов предварительной обработки спектров следует учитывать, что они могут привести к потере информации или появлению ошибок-артефактов.

*Анализ данных.* Сравнение спектров испытуемых образцов при качественном анализе проводится с индивидуальными или усредненными спектрами в библиотеке, в том числе с помощью различных математических методов.

Библиотека может использоваться для построения алгоритмов классификации. Возможно использование разных алгоритмов, например, метода главных компонент (МГК), комбинированного с кластерным анализом, метода SIMCA (soft independent modeling of class analogy – независимого моделирования аналогий классов), а также других алгоритмов, как включенных в математическое обеспечение БИК-спектрометров, так и разработанных третьей стороной. Надежность используемого метода должна быть проверена. Например, коэффициент корреляции, сумма квадратов