

FOSS

**利用
近红外仪器定标全球
定标的最佳实践**

2018年5月
fossanalytics.com

ANALYTICS BEYOND MEASURE

利用全球模型 定标近红外仪器的 福斯最佳实践

在饲料生产厂进行近红外(NIR)光谱检测时，必须进行可靠且综合的定标，以适应不同季节和供应商的原料的自然变化。然而，要自己建立这些综合定标方法，可能需要多年的开发时间获取必要的参考实验数据。

相比之下，现成的定标则提供了一个更快的选择。在某些情况下，您只需要安装并直接使用这些定标。在其他一些情况下，必须根据您的原料和样品，进行一些微小的所谓的“偏差调整”。即使这样，定标也可以为您节省很多时间，而且只需要点

击一下鼠标按钮，就可以使用最新的网络软件，远程进行偏差调整。

至少从时间方面考虑，现成的定标是一个很有吸引力的选择。但是，如果定标需要支付费用，不需要自己做参比测试值得吗？另外，如果您有了这些定标，该如何验证它们，并让它们在您的仪器上运转起来呢？

我们将进一步介绍现成定标的真正价值，以及如何使用它们。

目录

1. 利用ANN和网络支持 - 典型场景
2. 来自现场的案例故事
3. 根据ISO校准要求进行可靠的定标
4. 利用在线技术支持，有效实施饲料定标的六个步骤

利用ANN和网络支持

福斯全球ANN饲料定标是为近红外饲料分析仪提供的现成定标。这些定标涵盖了各种饲料和饲料成分。它们基于超过50,000个光谱数据集，参考了超过300,000个湿化学值，因此在现成的参考数据方面提供了巨大的价值。



优势包括：

- 采样和参比分析更少 - 现在，只有检查定标时需要进行参比分析
- 采购更灵活，现在您可以轻松更换供应商，因为潜在的原材料变化已经包括在全面的ANN数据集中。
- 操作更快速，一次定标就可以覆盖各种不同的样品，操作员不必经常改变样品类型

您确定需要的ANN定标后，下一步就是使用训练有素的应用专家提供的服务，他们可以通过安全的网络软件访问您的仪器和数据。

ANN定标

- 人工神经网络(ANN)是一种基于人脑神经结构的标准模型。
- 福斯从上世纪90年代就开始开发ANN定标模型
- 用大型数据集进行定标可以覆盖不同的季节、不同的地理位置以及不同的品种/变种。例如，福斯的蔬菜副产品定标包括超过6,700个样品的数据。
- 用于FOSS NIRS DS2500分析仪定标的数据库基于超过50,000个近红外测试，引用了超过300,000个湿化学值。



第2章

ANN加网络支持 — 典型场景

以下场景说明了结合相关支持的现成选项的价值。

只有仪器的方法

一家饲料公司的实验室经理确定，她需要一台近红外分析仪为她的日常工作提供帮助。其中包括对动物（家禽、猪、牛、兔子）饲料以及用于生产这些饲料的原料，如小麦、黑麦、玉米、豆粕、蒸馏谷物和菜籽粕的分析提供支持。

她很高兴地打开新的近红外仪器，但她还需要安装一些定标，然后才能使用。

她开始进行一些定标开发工作，但很快就发现这需要花费很长时间。设备供应商试图提供帮助，但缺乏有关饲料应用和样品类型的知识。最后，经理做了大量解释，但并没有得到什么有用的帮助。

一个特殊的挑战是从头开发定标所涉及的湿化学测试的数量。对脂肪或纤维等进行一系列测试需要花费大量时间。而且，因为她不断在定标中添加数据，使得定标保持最新就成了一场与时间的战争。同时，正常的日常操作也持续不断。

最终，她花了一些时间，决定转到另一种支持网络并提供现成定标的近红外解决方案。

支持网络的仪器和现成定标方法

新的解决方案提供了用于检测植物饲料成分、复合饲料和湿青贮饲料（玉米、苜蓿和草）的定标，它们经过证实可以立即节省时间。一些现成校准仍然需要做些小调整，但这些调整很方便，她需要做一些测试来支持偏差调整，使用一式三份湿化学测试运行相同的样品，使用平均值与近红外光谱进行比较。然后，在远程在线工作的应用专家的帮助下设置偏差，这样可以避免旅行和等待时间。

然后，应用支持专家帮助验证校准，同样是从他的桌面访问所需的数据集。

最后，通过网络将经过偏差调整和验证的定标数据上传到仪器。一切就绪后，专家到现场监督仪器启动，向用户提供提示和现场培训。

通过支持网络的更新不断改进可靠的校准

应用支持专家可以通过网络监督所有工作的执行情况，并在配料波动较大时进行一些偶尔需要的持续调整。例如，这可能是由于蒸馏器的谷物供应商不一致，可能会要求对每个供应商进行偏差调整。任何类似调整都通过网络软件发出。与仪器同步需要几分钟时间，然后操作员就可以开始使用了。



发挥近红外的优势

现在，实验室经理可以很好地利用她最初投资近红外的决定了。不必花更多的时间在定标开发上，实验室可以通过更快地控制产品基本参数更好地支持饲料加工厂，并且不会在不合格的情况下让产品发出去。

这种场景可能不适合所有情况，但是细节是从饲料行业的真实案例中提取出来的。显然，这个商业案例很好地利用了现成的定标，然后利用网络支持随时进行本地调节和性能监控。

第3章

在开始前根据ISO校准要求对性能进行验证

开始使用现成校准前，您需要确保定标与您具体选择的原材料和成品一致。您的技术支持联系人可以为您做这项工作，请参考下一节。

您需要对自己生产的样品进行定标验证。

验证可以确保：

- 1 您对结果有信心。对验证进行独立审查，确认定标供应商为您的特定样品所做的工作。
- 2 定标有效性的文档记录，记录供应商和客户的绩效。

ISO定义的近红外管理最佳实践

作为在饲料生产中改进近红外使用方法的全球倡议的一部分，ISO技术委员会ISO/TC 34（食品产品）分委员会SC 10（动物饲料）制定了有关如何在饲料中使用近红外的指导意见。该指导意见最初于2010年制定，并于2017年8月进行了更新。

该指导意见提供了验证饲料定标的全球最佳实践。ISO 12099对验证定标模型规定了什么？

定标和初始验证：

使用前，应通过独立的测试组对定标方程进行本地验证，测试组应代表要分析的样本总体。为测定偏差、斜率和标准预测偏差 (SEP)，至少需要20个样品。应对已知会影响或预计可能会影响测量结果的每个样品类型、组成/参数、温度和其他因素进行验证。定标对变化，即验证中使用的样品类型、范围和温度，是有效的。

进行验证时，应该有足够数量的代表性样品，覆盖包括如下方面的变化：

- a) 主要和次要样品成分的组合和组成范围
- b) 对饲草、饲料原料和谷物的季节性、地理性和遗传性影响
- c) 处理方法和条件
- d) 存储条件
- e) 样品和仪器温度
- f) 仪器变化（即仪器之间的差异）

根据ISO定标的要求，初始验证似乎更重要。为了更好地了解实际涉及的内容，我们求助于专家。

第4章

利用在线技术支持， 有效实施饲料定标的 六个步骤

Maciej Socjusz是一位 福斯应用专家，多年来一直致力于饲料应用的 近红外仪器定标。

下面是他快速成功实施定标的6个步骤。

1) 首先确保可以在线访问测量结果和参比数据

确保仪器可以连接到网络，如FossConnect (链接)。这样才能与工作快速的支持人员相互访问，不影响日常操作。

2) 在开始使用近红外仪器前进行验证

这可能听起来很明显，但如果被忽视，就会推迟实施。如果能够在验证过程中看到要求的完整数据集，专家就可以进行相关的统计分析，以确定（例如）什么需要进行偏差调整以及什么是异常值和错误。

3) 及时获得建议，开一个好头

应用专家在安装过程中或在安装后立即进行用户培训非常重要。训练有素的用户可以从一开始就遵循认可的标准和程序，并且不会进行其他可能难以评估或参考的测试和比较。这与福斯服务进行有效协作提供了坚实的基础。

4) 在采样过程中关注关键的原材料和参数

按照ISO标准的要求，验证定标必须使用至少20个样品。如果定标包括多个样品类型（如所有植物成分）和最多6个参数，20个样品将只能覆盖很少样品类型。因此，建议从最关键的原材料和参数开始。同样，让样品覆盖参数的变化范围也很重要。

5) 使用仪器反馈选择样品进行参比分析

使用定标时，如果不确定结果的有效性，福斯仪器将会向您发出异常值警告。异常值说明样品类型不在校准范围内，或者说明它只是一个错误样品。如果不在校准范围内，应通过参考化学方法对相关样品进行检测，以检验近红外结果是否正确。如果异常值数量较多，福斯将为定标创建热修复补丁。如果验证显示单个样品或参数有问题，则可能需要根据样品对全球定标进行调整。

6) 在稳定操作状态下，使用网络继续进行随机抽样检查

初始调整后，定标是稳定的，只需要通过随机样品组每年进行一次验证。同样，远程访问是一种很好的途径，可以帮助应用专家区分仪器、操作员或定标问题。同样，数据上传和重新格式化很快，不会中断操作员的工作。定期检查可以确保仪器始终保持最新状态，因此，如果出现实际问题，确定和修复就会更容易、更快速，而不用从对性能的回溯分析开始。

