



UCal Software

Desarrollo de calibraciones
y
Gestión de Bases de Datos



UCal

- Calibración y Software de gestión de bases de datos
- UCal ideado por el Dr. John Shenk, el creador del software ISI
- UCal desarrollado para las necesidades de la Industria Agrícola, Alimentaria y de Piensos y Forrajes.



UCal

- Uso sencillo e intuitivo
- Puede usarse para desarrollar calibraciones en múltiples plataformas de instrumentos
- Fácil calibración y manejo de ficheros
- Automatizado
 - Múltiples constituyentes desarrollados a la vez
 - Detección y eliminación automática de anómalos
- Simple estructura de ficheros

Estructura de ficheros

- Fichero .SVF
 - Contiene Espectros y datos de laboratorio simultáneamente
- Fichero.PRD
 - Fichero sencillo que contiene Ecuación, Componentes Principales y Scores (ISI usa 3 ficheros separados)



Manejo de Datos

- Admite múltiples formatos de ficheros
 - .JDX, .NIR, .CAL., .SPC
 - Conversión sencilla a fichero .SVF
- Sencillo manejo de datos
 - Creación de ficheros
 - Importar / Exportar Espectros



Manejo de Datos

- Sencillo manejo de cosntituyentes
 - Importar / Exportar datos de Excel
 - Histogramas de concentración de constituyentes
- Poderoso Interface de gráficos
 - Dibujo de espectros
 - Dibujo de espectros tratados matemáticamente
 - Dibujo de sustracción de espectros
 - Dibujo de múltiples ficheros simultáneamente



Ucal Program - [CGM Cal Set 6-21-10.SVF]

File Transfer Calibrate File Info Samples Constituents Product file Monitor Plot Print Window Help

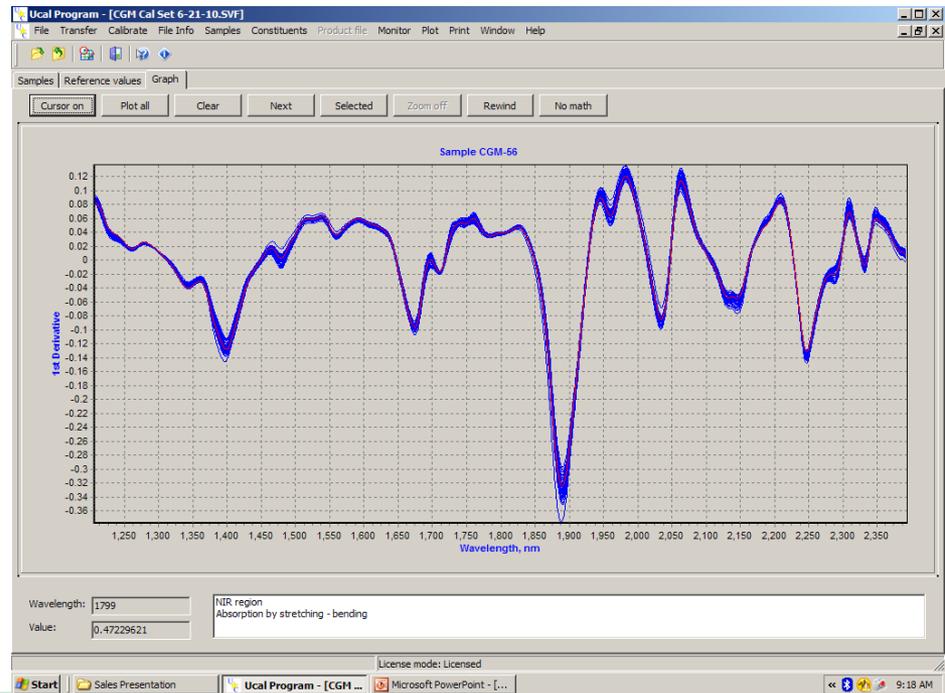
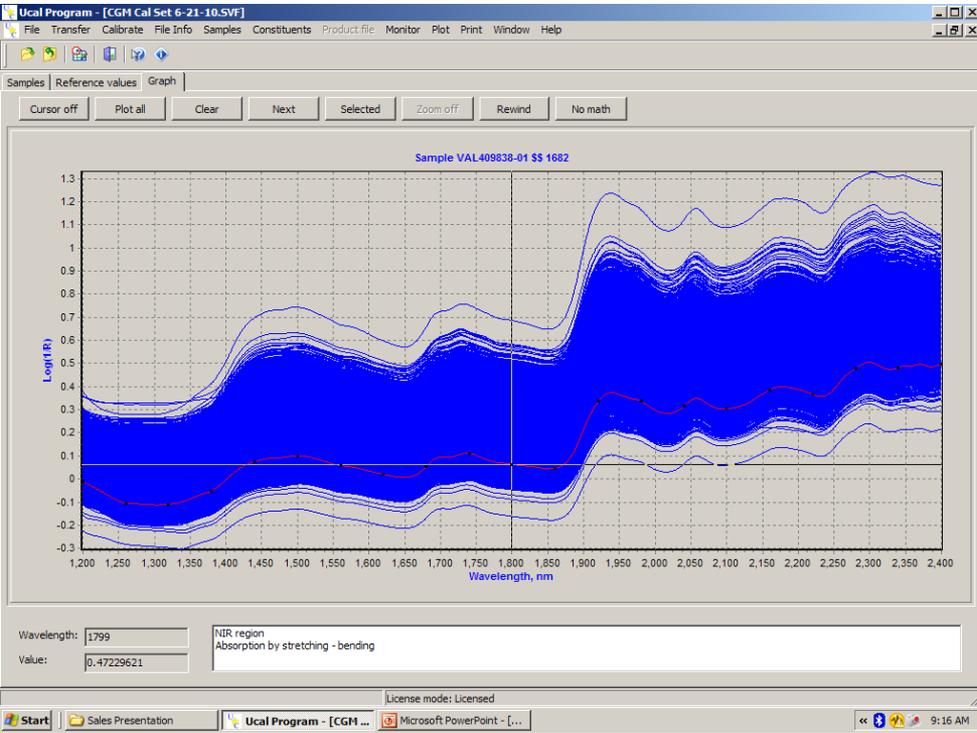
Samples Reference values Graph

#	Sample	Sample ID1	Sample ID2	Sample ID3	PROTEIN	Oil	MOISTURE	Fiber	Ash
1	CGM-1				57.940	8.740	11.690	0.000	0.000
2	CGM-2				56.520	8.220	10.790	0.000	0.000
3	CGM-3				55.280	11.210	9.740	0.000	0.000
4	CGM-4				59.210	9.700	10.760	0.000	0.000
5	CGM-5				64.530	6.590	8.310	0.000	0.000
6	CGM-6				63.230	6.260	9.540	0.000	0.000
7	CGM-7				60.720	9.450	10.360	0.000	0.000
8	CGM-8				61.500	10.130	9.630	0.000	0.000
9	CGM-9				58.810	7.500	9.690	0.000	0.000
10	CGM-10				58.620	10.010	8.440	0.000	0.000
11	CGM-11				57.460	10.080	10.670	0.000	0.000
12	CGM-12				57.370	9.500	11.060	0.000	0.000
13	CGM-13				60.310	8.910	10.430	0.000	0.000
14	CGM-14				60.070	5.140	9.870	0.000	0.000
15	CGM-15				56.080	3.950	10.080	0.000	0.000
16	CGM-16				59.400	4.580	9.390	0.000	0.000
17	CGM-17				58.160	8.000	10.150	0.000	0.000
18	CGM-18				59.430	7.200	10.790	0.000	0.000
19	CGM-19				58.560	5.060	9.670	0.000	0.000
20	CGM-20				60.180	7.710	10.560	0.000	0.000
21	CGM-21				57.750	8.840	10.980	0.000	0.000
22	CGM-22				59.690	4.230	10.490	0.000	0.000
23	CGM-23				63.290	6.720	10.900	0.000	0.000
24	CGM-24				59.380	5.030	9.390	0.000	0.000
25	CGM-25				58.510	6.980	11.100	0.000	0.000
26	CGM-26				60.520	7.700	11.000	0.000	0.000
27	CGM-27				62.940	5.470	9.190	0.000	0.000
28	CGM-28				64.250	5.910	10.850	0.000	0.000
29	CGM-29				61.960	5.270	11.180	0.000	0.000
30	CGM-30				58.840	5.570	9.830	0.000	0.000
31	CGM-31				61.160	6.650	10.810	0.000	0.000
32	CGM-32				62.650	6.190	10.640	0.000	0.000
33	CGM-33				55.940	4.980	10.910	0.000	0.000

License mode: Licensed

Start Sales Presentation Ucal Program - [CGM ... Microsoft PowerPoint - [...]

9:15 AM



Estandarización

- UCal proporciona algoritmos de estandarización para transferencia de bases de datos y calibraciones
- Fichero de transferencia
 - Convierte una base de datos completa para que se asemeje a si hubiese sido generada en otros instrumentos
- Concepto Master y Esclavo
 - Convierte un espectro para que se asemeje a si hubiese sido generada en un instrumento diferente
 - Mantiene una red de instrumentos

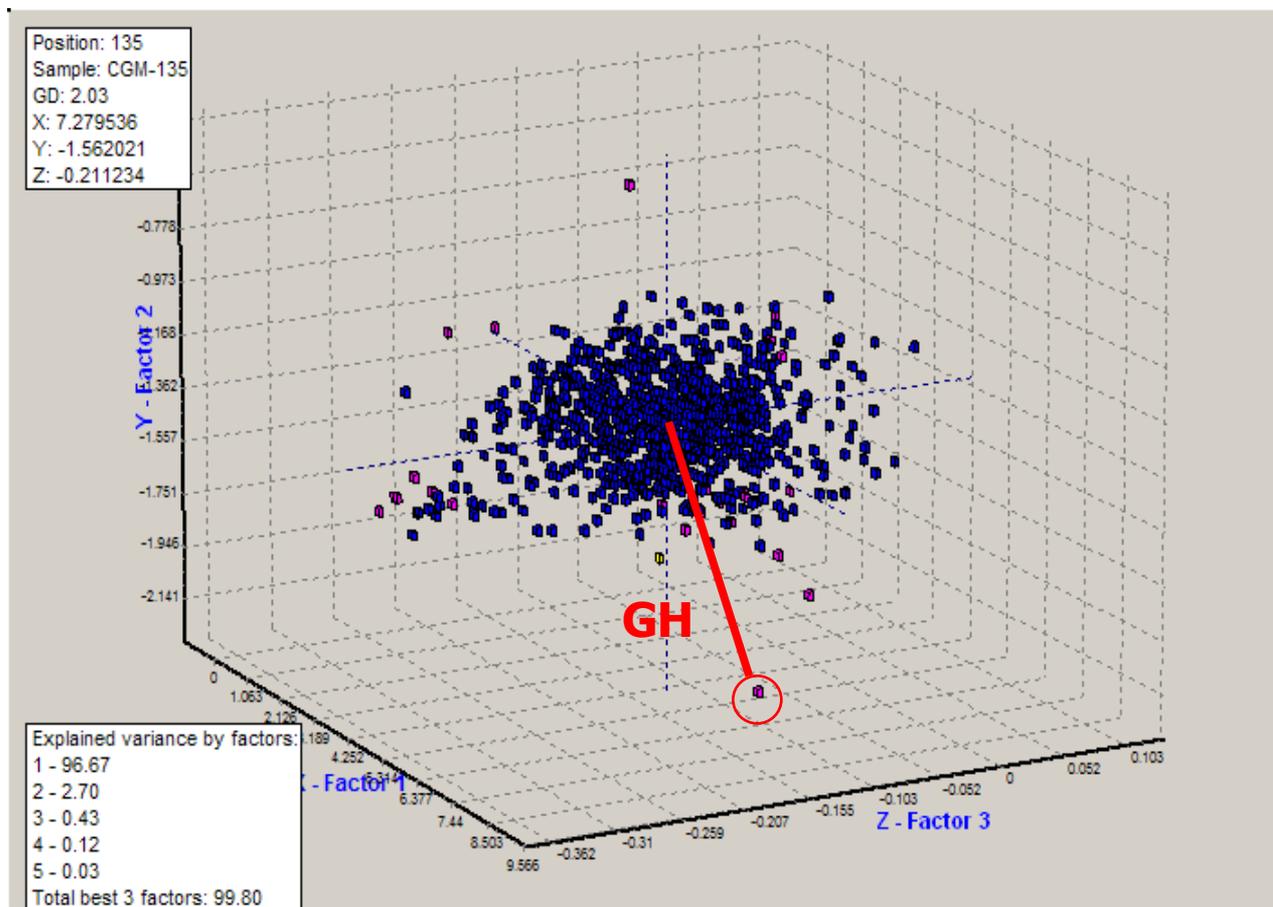


Concepto de distancia de vecindad

- Bases de datos de UCal estructuradas usando las distancias de vecindad
- Usa PLS en lugar de PCA
 - PCA Basado en espectros únicamente
 - PLS Basado en relaciones entre espectros y constituyentes
- Las bases de datos son construídas por constituyentes en contraposición al PCA
- La adecuada construcción de bases de datos permiten calibraciones mas precisas.

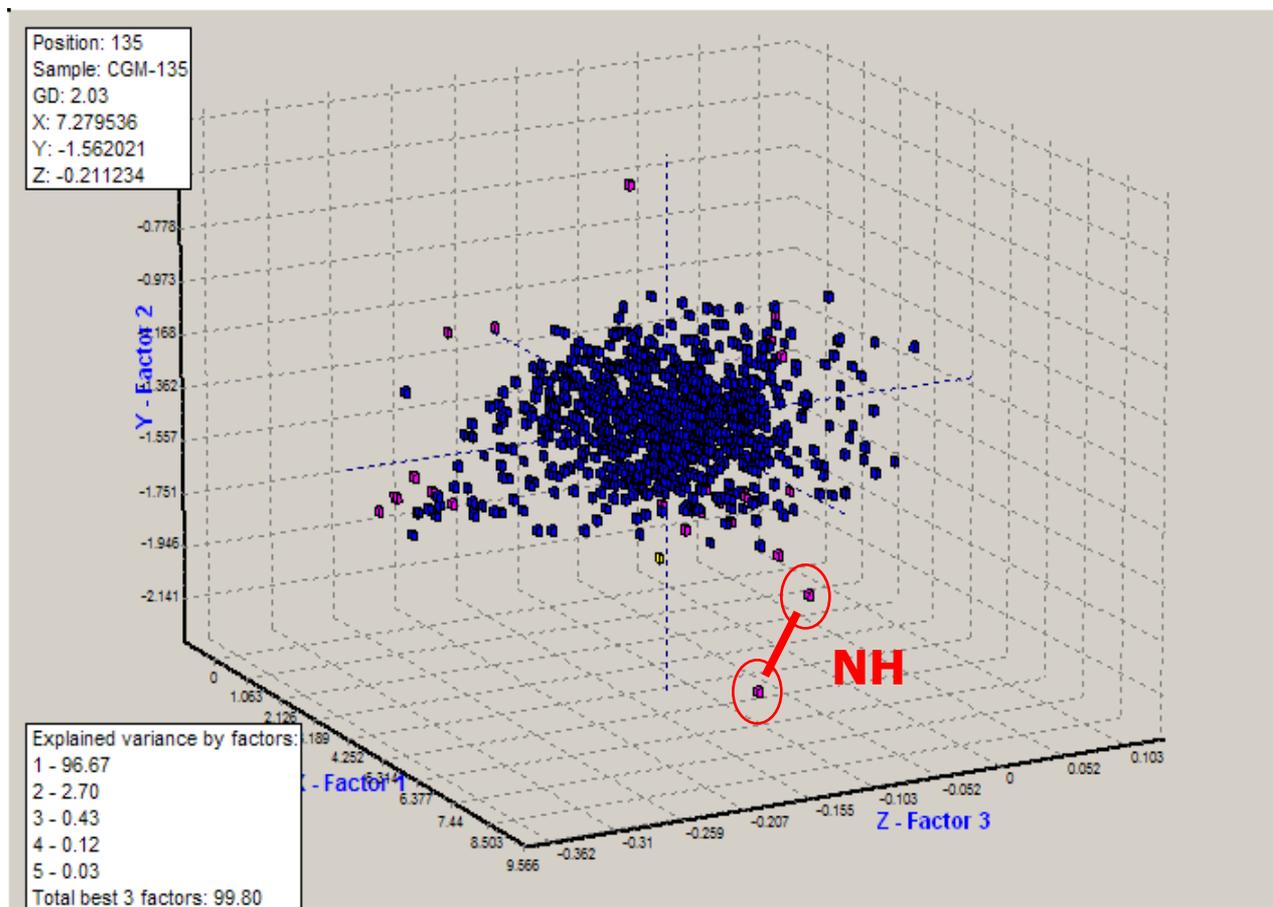
Anómalos espectrales de UCaI

Global H (Distancia M) – Distancia entre un espectro y la población de la calibración



Anómalos espectrales de UCaI

Neighborhood H – Distancia entre un espectro y su vecino más cercano





UCal – Desarrollo de calibraciones

- Calibraciones PLS optimizadas
- Potentes tratamientos matemáticos
 - Derivadas
 - SNV y Detrend
 - Multiplicative Scatter Correction (MSC)
- Fichero MIN (minimización, como fichero ISI Rep) para eliminar variación no deseada causada por tamaño de partícula, T^a de la muestra, múltiples instrumentos, etc.

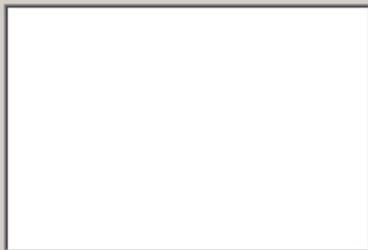


UCal – Desarrollo de calibraciones

- Interface de una única y sencilla pantalla
- Calibraciones de múltiples constituyentes desarrolladas simultáneamente.
- Detección y eliminación automática de anómalos espectrales (H) y químicos (T).
- Fichero individual de calibración (.prd) para predicción (3 ficheros en ISI)

Store New Base File

Base File Constituents



Regression Progress

Status : Ready

-
-
-
-
-
-
-
-
-
-

Ucal Options

Regression Selections

Regr. Type Min Weighting
 Throw-Out Passes Missing Data Value
 CV Groups Moisture Basis of Ref Values
 Max Factors Factor Adjustment

Neighborhood Specifications

Expansion Threshold
 Neighborhood Size
 Condense to a Percent
 Condense to a Number

Math Processing

SNV/Detrend
 Derivative Math
 Deriv Order
 Deriv Gap
 Deriv Smooth

Wave Specifications

	Range	Initial Trim
First Wpt	<input type="text" value="650.0"/>	<input type="text" value="650.0"/>
Last Wpt	<input type="text" value="2600.0"/>	<input type="text" value="2600.0"/>
Increment	<input type="text" value="1.0"/>	

Wave Segment Pre-Removes

	First W	Last W
Seg 1	<input type="text" value="0000.0"/>	<input type="text" value="0000.0"/>
Seg 2	<input type="text" value="0000.0"/>	<input type="text" value="0000.0"/>

Outlier Limits

T Limit GD Limit

Set Current Folder: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Corn Gluten Meal

Base File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Corn Gluten Meal\cgm.SVF

Expansion File:

Min File:

Validation File:

Product File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Corn Gluten Meal\cgm.prd

New Base File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Corn Gluten Meal\cgmr.SVF

Store New Base File

Base File Constituents About

- PROTEIN [655]
- Oil [149]
- MOISTURE [359]

Calibrate

Return

Re-Calibrate OFF

Regression Progress

Status: Ready

- Regression Options
- Regression
- Predictions
- Rejections
- Condense
- Factor Plot
- Prediction Plot
- Calc. Variables
- Advanced Options
- Help

```

Begin on 29.06.2010 at 09:48:10
Constituent Pass Keep/Rj Factors MinSED SEC Rsqd SECV Rsqd (CV) GDave NND ave ExpNND SD (Ref) PrPower
B PROTEIN 2 612/43 09 0.000 0.498 0.960 0.518 0.956 1.000 0.414 0.712 2.494 5.009
B Oil 2 143/6 07 0.000 0.451 0.880 0.498 0.849 1.000 0.514 0.868 1.305 2.893
B MOISTURE 2 337/22 08 0.000 0.274 0.933 0.295 0.913 1.000 0.402 0.719 1.054 3.851
Calibration Sequence Completed.
REGR Report Written to C:\Unity\Feed Databases\CGM\Corn Gluten Meal\cgm_REGR.TXT
Calculations Are Completed.
End on 29.06.2010 at 09:49:23
    
```

Return Clear Regression Display

Set Current Folder: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal

Base File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal\vcgm.SVF

Expansion File: [Empty]

Min File: [Empty]

Validation File: [Empty]

Product File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal\vcgm.prd

New Base File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal\vcgmr.SVF

Store New Base File

Base File Constituents About

PROTEIN [655]
Oil [149]
MOISTURE [359]

Calibrate

Return

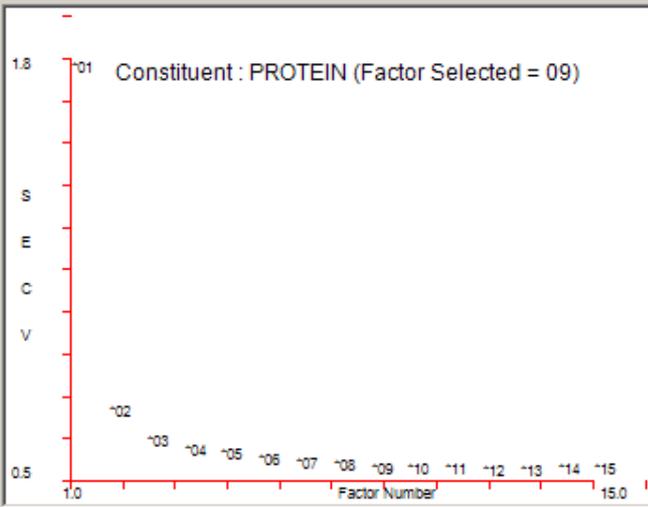
Re-Calibrate OFF

Regression Progress

[Progress bar]

Status: Ready.

- Regression Options
- Regression
- Predictions
- Rejections
- Condense
- Factor Plot
- Prediction Plot
- Calc. Variables
- Advanced Options
- Help



Select Constituent: **PROTEIN|0**

Plot Selected Constituent

Filename: **factortpt**

Write to File

Outgoing Delimiter: **Tab**

```

PROTEIN|09|0|0
*01|1|1|000.7922
*02|2|2|000.7008
*03|3|3|000.6033
*04|4|4|000.5779
*05|5|5|000.5640
*06|6|6|000.5472
*07|7|7|000.5342
*08|8|8|000.5283
*09|9|9|000.5182
*10|10|10|000.5164
*11|11|11|000.5135
*12|12|12|000.5120
*13|13|13|000.5102
*14|14|14|000.5141
*15|15|15|000.5147
Oil|07|0|0
*01|1|1|000.9732
*02|2|2|000.6515
    
```

Set Current Folder: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal

Base File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal\vcgm.SVF

Expansion File: [Empty]

Min File: [Empty]

Validation File: [Empty]

Product File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal\vcgm.prd

New Base File: C:\Unity\Feed Databases\CGM\Com Gluten Meal\vcgmr.SVF

Store New Base File

Base File Constituents

About

PROTEIN [655]
Oil [149]
MOISTURE [359]

Calibrate

Return

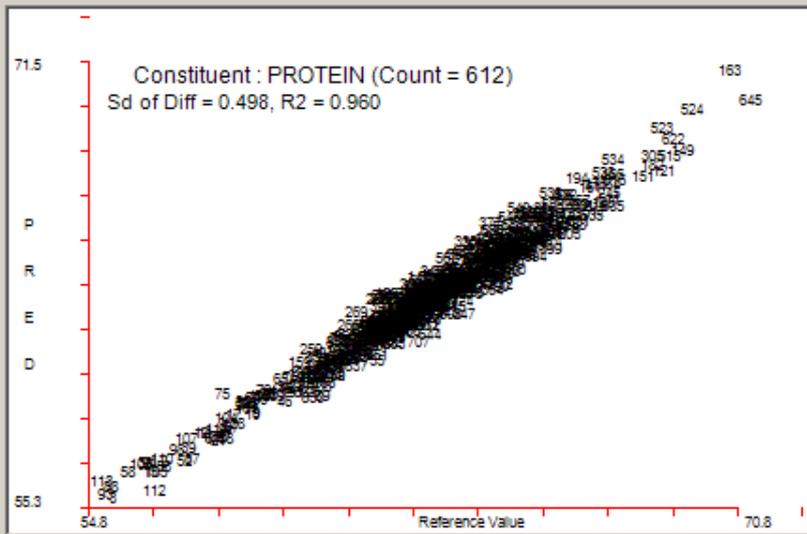
Re-Calibrate OFF

Regression Progress

[Progress bar]

Status: Ready

Regression Options | Regression | Predictions | Rejections | Condense | Factor Plot | Prediction Plot | Calc. Variables | Advanced Options | Help



Select Constituent

PROTEIN|0

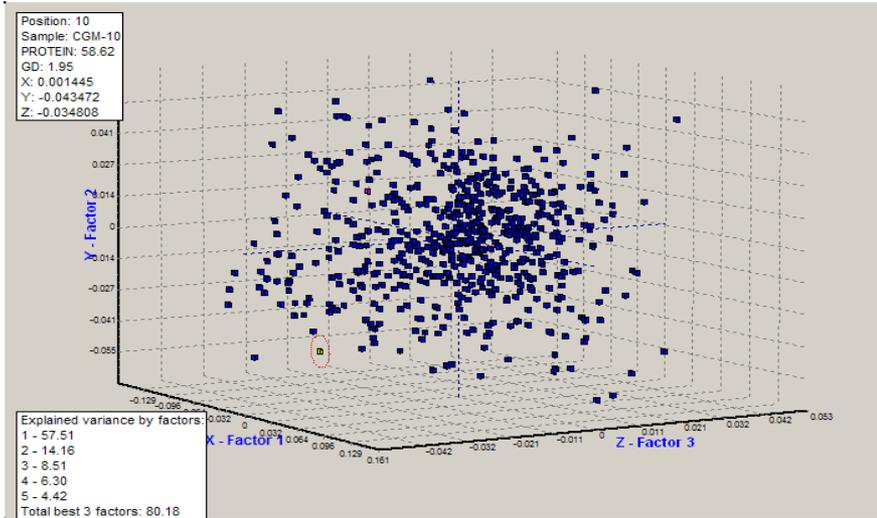
Plot Selected Constituent

File Name: predgraphrpt

Write to File

Outgoing Delimiter: Tab

PROTEIN|02|0|0
1|1|CGM-1|57.94|58.21209
2|2|CGM-2|56.52|56.76458
3|3|CGM-3|55.28|55.32189
4|4|CGM-4|59.21|59.38906
5|5|CGM-5|64.53|64.76934
6|6|CGM-6|63.23|62.41912
7|7|CGM-7|60.72|60.98665
8|8|CGM-8|61.5|61.64342
9|9|CGM-9|58.81|58.56043
10|10|CGM-10|58.62|58.4717
11|11|CGM-11|57.46|57.797
12|12|CGM-12|57.37|57.8027
13|13|CGM-13|60.31|60.15929
14|14|CGM-14|60.07|60.13847
15|15|CGM-15|56.08|56.31219
16|16|CGM-16|59.4|59.4586
17|17|CGM-17|58.16|58.49675
18|18|CGM-18|59.43|59.49271
19|19|CGM-19|58.56|58.77755
20|20|CGM-20|60.18|59.94578



Dibujos PLS 3D por constituyente



Dibujos de Loadings de calibración



UCal – Desarrollo de calibraciones

- Algoritmo de Condensado de bases de datos
 - Emplea las distancias de vecindad para mediar muestras en la población, eliminar redundantes y mejorar la estructura de la base de datos
 - Usa PLS en lugar de PCA por lo que el condensado es por constituyentes y no solo por el espectro
 - PCA Basado solo en espectros
 - PLS Basado en espectros y su relación con los constituyentes



UCal – Estructura de las bases de datos

- Emplea distancias de vecindad para optimizar la selección de muestras para el desarrollo de calibraciones.
- Las nuevas muestras para la calibración son seleccionadas por constituyente
 - Ahorra en costes de química analítica al solo analizar el constituyente específico necesario para mejorar la base de datos.



UCal - Calibraciones

- Las calibraciones UCal pueden aplicarse a varias plataformas de instrumentos usando el algoritmo de estandarización
 - Unity
 - NIRSystems 5000 and 6500
 - Mas en el futuro



InfoStar / UScan

- Motor de predicción para uso de calibraciones UCal
- Para SpectraStar, se denomina InfoStar 3.10 y es suministrado en el PC integrado de todos sus equipos.
- Para unidades NIRSystems 5000 o 6500, el software UScan permite el empleo de calibraciones UCal
- UScan opera encima del software de rutina ISI, enmascarándolo temporalmente.
- Los anómalos NH son marcados y el espectro es almacenado por cada constituyente para mejorar la construcción de la base de datos.
- Soporte para ficheros de estandarización
- En el futuro nuevas plataformas



UScan

Current Product: hay testing
Adapter/Cup Type: ISI Ring Cup (Red Position)
Platter Movement: Continuous - CW

07/23/2009 01:49:01

Scan Sample

Select Product

Options

Exit Stop Ref

Uscan

Name/ID

Comment

Uscan-Unreleased V0.0.15

Analyze Sample
View Spectrum
History
Edit Defaults
Model SS2500

Product

- Consortium Alfalfa Hay
- Consortium Grass Hay
- Consortium Mixed Hay
- Unity Grass Hay
- Consortium Haylage
- Consortium Corn Silage
- unground

Sample Name	36	GH	NH	Gh,Nh,Rang
PROTEIN	11.3132	1.313	0.8681	PxP
ADF	29.6958	2.299	1.6873	wXP
NDF	50.0269	3.288	2.6414	PxP
dNDF48	29.6466	1.625	1.1339	PxP
ASH	5.9725	0.439	0.3327	PxP
CA	0.3291	0.831	0.0628	PxP
P	0.2757	1.081	0.2838	PxP
K	1.5462	1.191	0.6664	PxP
MG	0.1332	1.763	0.9802	PxP
DM	99.7771	0.833	0.3921	PxH

Calibration Maintenance
ChemStar
Hide

Copyright 2009 Unity Scientific, LLC. All Rights Reserved. Connected

Ready for New Sample

Reference Expires in 27 Minute(s)

07/23/2009 01:45:38

	Date	Time	Product	Name	Comment	Property 1	Value 1
44	7/21/2009	10:22:36 PM	hay testing	1			
45	7/21/2009	10:23:32 PM	hay testing	1			
46	7/21/2009	10:24:32 PM	hay testing	1			
47	7/21/2009	10:25:27 PM	unground	1			
48	7/21/2009	10:26:13 PM	unground	1			
49	7/21/2009	10:27:13 PM	hay testing	1			
50	7/21/2009	10:28:09 PM	hay testing	1			

Resumen

- Sencillo
- Automatizado
 - Múltiple constituyentes simultáneamente
- Puede usarse en diferentes plataformas
- Concepto de distancia de vecindad y condensado de bases de datos
- De uso muy familiar para clientes ISI