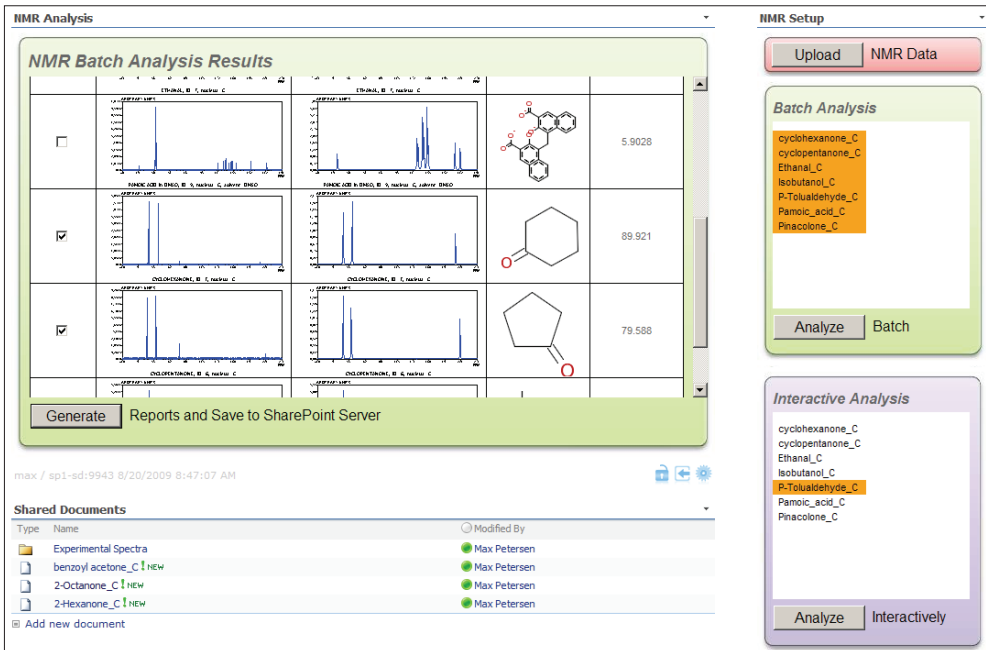


ANALYTICAL INSTRUMENTATION COLLECTION

Analytical Instrumentation Collectionを使用すると、分析実験質で生成したデータにPipeline Pilotからアクセスして、解析データの処理を合理化やレポートの生成、また結果を他の部門と簡単に共有できます。

ANALYTICAL INSTRUMENTATION COLLECTION によって、次のことを実現できます。

- ・ 解析評価の結果を組織内で効果的に共有
- ・ 解析データ分析のベストプラクティスを把握
- ・ 反復的なデータ処理やデータ分析のタスクを合理化
- ・ エンドユーザーの多様なニーズに合わせて簡単にカスタマイズ可能なレポートを自動生成することにより、作業量を軽減
- ・ 独立した個別のデータを統合して、共同研究環境を構築



The screenshot displays the HMR Analysis software interface. The main window is titled "HMR Analysis" and contains a "NMR Batch Analysis Results" table. The table has columns for checkboxes, NMR spectra plots, chemical structures, and numerical values. The first row is unchecked, the second is checked, and the third is checked. Below the table is a "Generate Reports and Save to SharePoint Server" button. At the bottom left, there is a "Shared Documents" section with a list of files and their modification dates.

On the right side, there is an "HMR Setup" panel. It includes an "Upload NMR Data" button, a "Batch Analysis" section with a list of chemical names (cyclohexanone_C, cyclopentanone_C, Ethanal_C, Isobutanol_C, P-Tolualdehyde_C, Pamoic_acid_C, Pinacolone_C) and "Analyze" and "Batch" buttons. Below that is an "Interactive Analysis" section with the same list of chemical names and "Analyze" and "Interactively" buttons.

NMR データ処理を行うシンプルなインターフェースは、Microsoft SharePoint をはじめとする Web ベースのポータル環境に導入できます。これにより、高速データ処理による応答時間の短縮や、ドキュメント リポジトリ システムの統合によるデータ共有といったメリットを享受できます。

ANALYTICAL INSTRUMENTATIONの コンポーネント

読み取りおよび書き込み: このコレクションでは、JCAMPDX、SPC、RheoML、AniMLといったオープンスタンダードをサポートしています。また、ブルカーNMRやバリアンNMRといった、装置固有のデータ形式を読み取ることもできます。スペクトルはJCAMP-DXまたはXMLベースの形式で保存できます。

計算および操作: 次のような一般的なデータ処理をサポートしています。

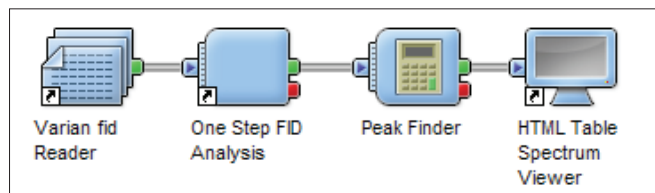
- ・ ピーク同定
- ・ ピーク積分
- ・ 線幅分析
- ・ バックグラウンド検出と除去
- ・ スペクトルの補完、打ち切り、スケール、平滑化
- ・ スペクトルの減算
- ・ 汎用的フーリエ変換

NMR用の機能は次のとおりです。

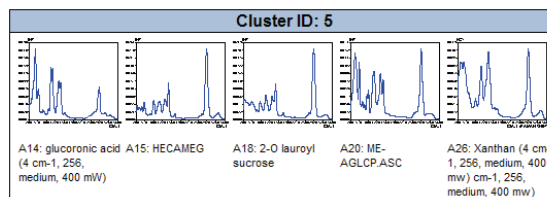
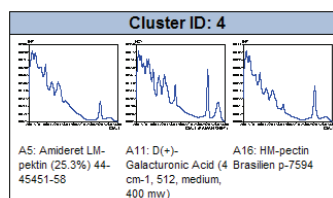
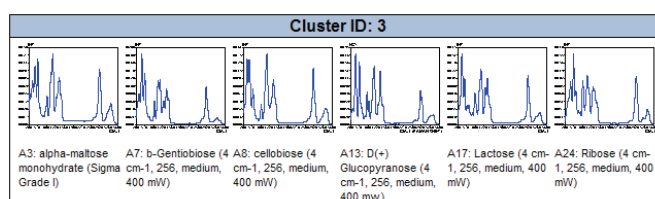
- ・ FIDを化学シフトに変換するワンステップFID分析。このコンポーネントでは、フーリエ変換、デフェーシング、参照の各処理を行います。
- ・ Modgraph NMRpredict の統合を利用して、化学構造 (C₁₃ およびプロトンの化学シフトをサポート) からNMRスペクトルを生成。

検索および相似性: このコレクションでは、重み付けをした相互相関、スピアマンの順位相関係数、ピアソンの相関係数を使用して、スペクトルの相似性を計算できます。この機能により、相関行列を生成してクラスタリングアプリケーションを可能にしたり、一連のスペクトルに対する単体スペクトルの類似性をランク付けしてデータベース マッチングなどのアプリケーションが構築できます。

可視化およびレポート作成機能: スペクトルをレポートに簡単に表示できます。軸の変更、ピーク表示、ラベル付け、スケール変換も可能です。ピークテーブルなどのその他のデータも、簡単に生成してレポートに含めることができます。



標準的な、NMR分析シーケンスを実行するPipeline Pilotのプロトコル: まず、未加工のバリアン装置データを読み取ります。続いて、フーリエ変換、デフェーシング、参照の各処理を行い、この未加工データを化学シフトに変換します。最後に、ピークが検知され、レポートされます。



Analytical Instrumentation Collection を使用すれば、クラスタリングやパターンマッチング処理などの相似分析を行えます。

Pipeline Pilotの詳細については、次のURLを参照して下さい。

<http://accelrys.com/products/pipeline-pilot>