

# ANALYTICAL INSTRUMENTATION COLLECTION

## データシート

Analytical Instrumentationを使用すると、分析実験質で生成したデータにBIOVIA 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 によって、次のことを実現できます。

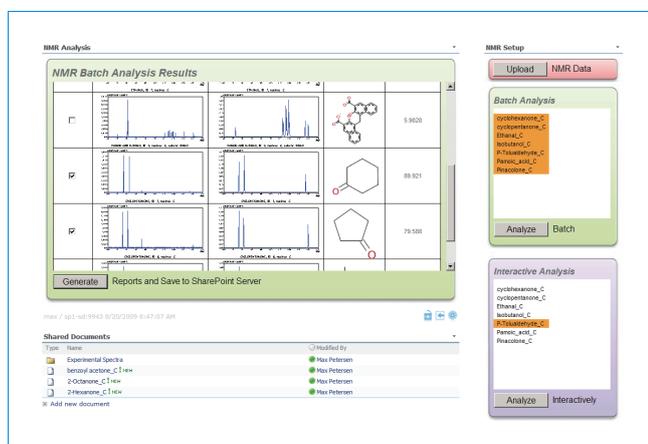
- 解析評価の結果を組織内で効果的に共有
- 解析データ分析のベストプラクティスを把握
- 反復的なデータ処理やデータ分析のタスクを合理化
- エンドユーザーの多様なニーズに合わせて簡単にカスタマイズ可能なレポートを自動生成することにより、作業量を軽減
- 独立した個別のデータを統合して、共同研究環境を構築

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、スケーリング、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、ディフェーシング、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 (C<sub>13</sub> 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。



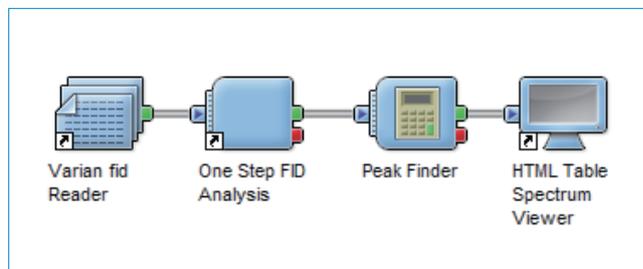
NMRデータ処理を行うシンプルなインターフェースは、Microsoft SharePointをはじめとするWebベースのポータル環境に導入できます。これにより、高速データ処理による応答時間の短縮や、ドキュメントリポジトリシステムの統合によるデータ共有といったメリットを享受できます。

### ANALYTICAL INSTRUMENTATIONの コンポーネント

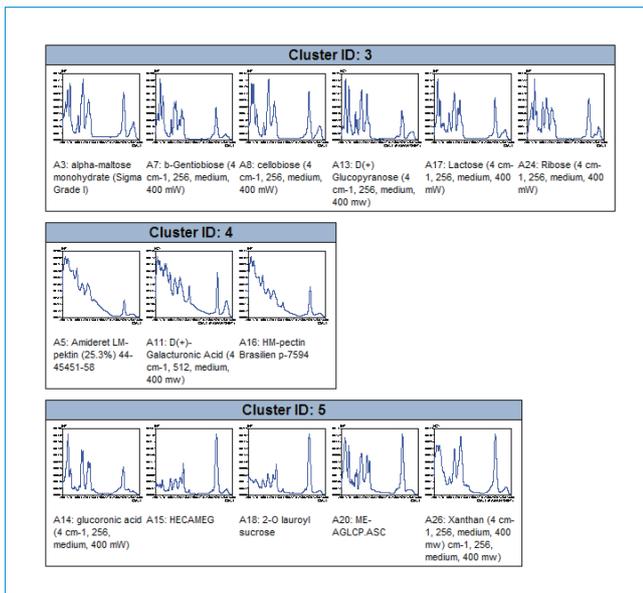
読み取りおよび書き込み: このコレクションでは、JCAMPDX、SPC、RheoML、AniMLといったオープンスタンダードをサポートしています。また、ブルカーNMRやバリアンNMRといった、装置固有のデータ形式を読み取ることもできます。スペクトルはJCAMP-DXまたはXMLベースの形式で保存できます。

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BIOVIA 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、ディフェーシング、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。

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、[www.3ds.com](http://www.3ds.com)（英語）、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja)（日本語）をご参照ください。



©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEOVIA, EXPLERD, 3D VIRA, 3DSWIM, BIOVIA, および INETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の登録商標または商標です。その他のブランド名や製品名は、各所有者の商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、事前にその承認が必要となります。