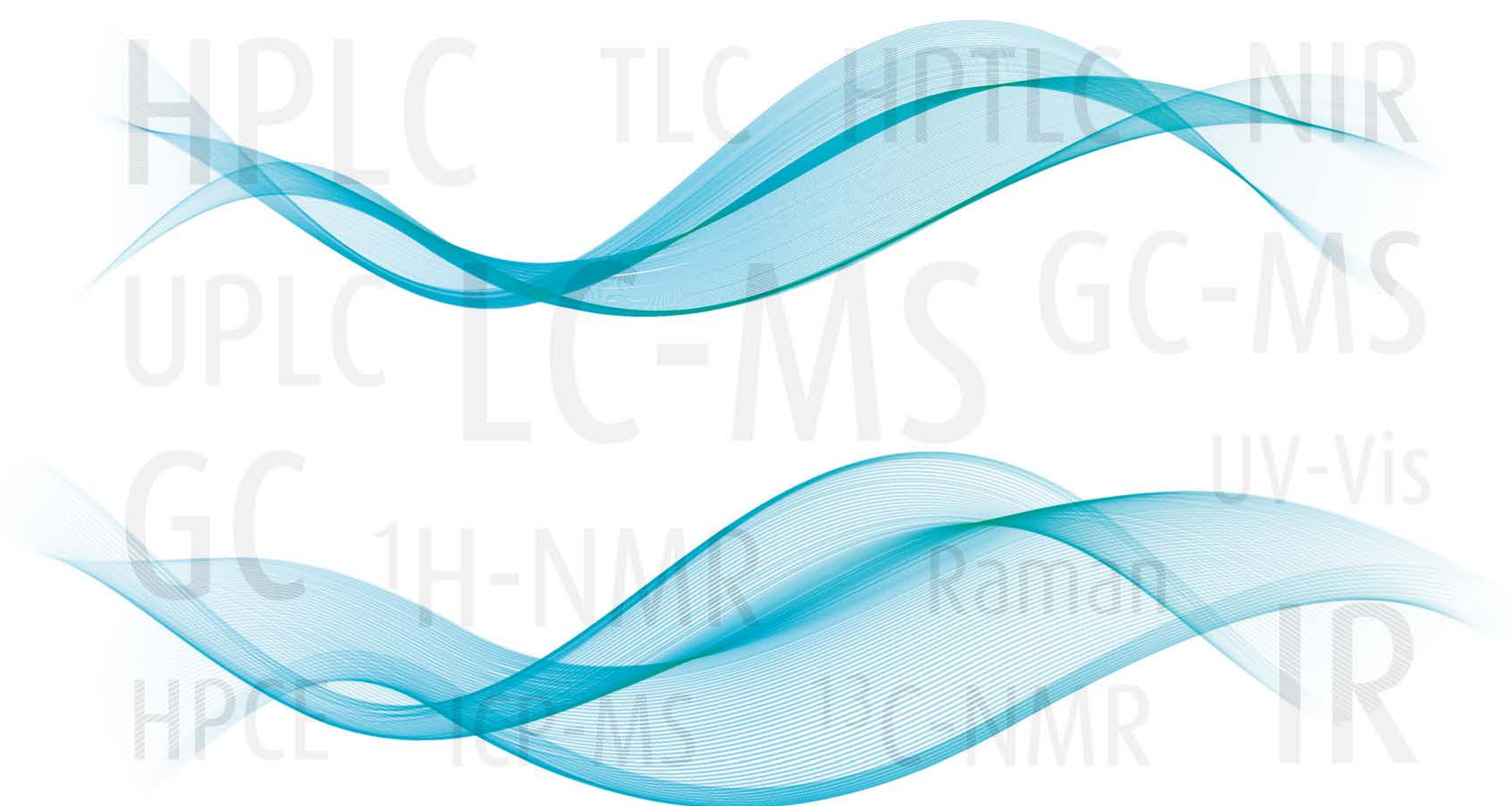
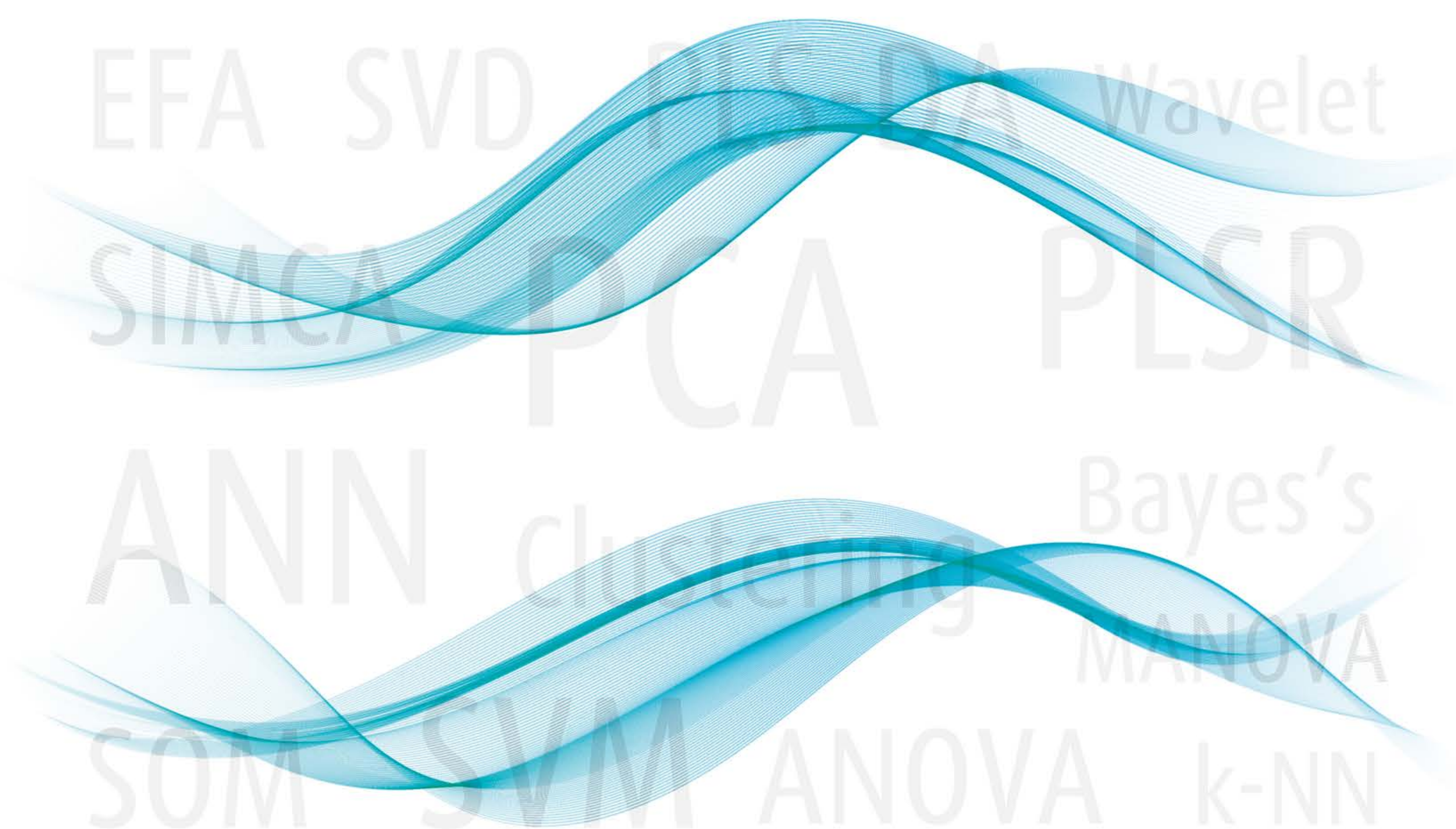


ChemPattern™ 谱蕴™

—— 先进化学计量学与化学指纹图谱系统解决方案软件



複雜體系大數據分析的解決之道



ChemPattern 简介

ChemPattern™谱蕴™先进化学计量学及化学指纹图谱系统解决方案软件为复杂体系高通量、高内涵解析，产品过程控制，定性、定量质量评价和特征剖析，以及各类信息学、组学研究和数据挖掘等任务提供一站式解决方案。

ChemPattern™软件首次实现了仪器分析与化学计量学解析这两大分析化学核心应用系统的紧密衔接与架构融合。其通过标准数据接口技术提供常用的色谱、质谱和光谱法所获得的各类高维、高分辨海量数据的高通量前处理以及多组分同步含量测定功能，并采用高性能数值计算和大规模数据可视化技术平台，全面提供对包括多元校正、多元统计分析、回归建模、模式识别、数据挖掘、人工智能等在内的丰富的化学计量学与化学指纹图谱分析的应用支持。并且同时满足实验室信息管理系统(LIMS)及电子数据和电子签名法案(FDA 21 CFR part 11)的规范要求。

化学计量学简介

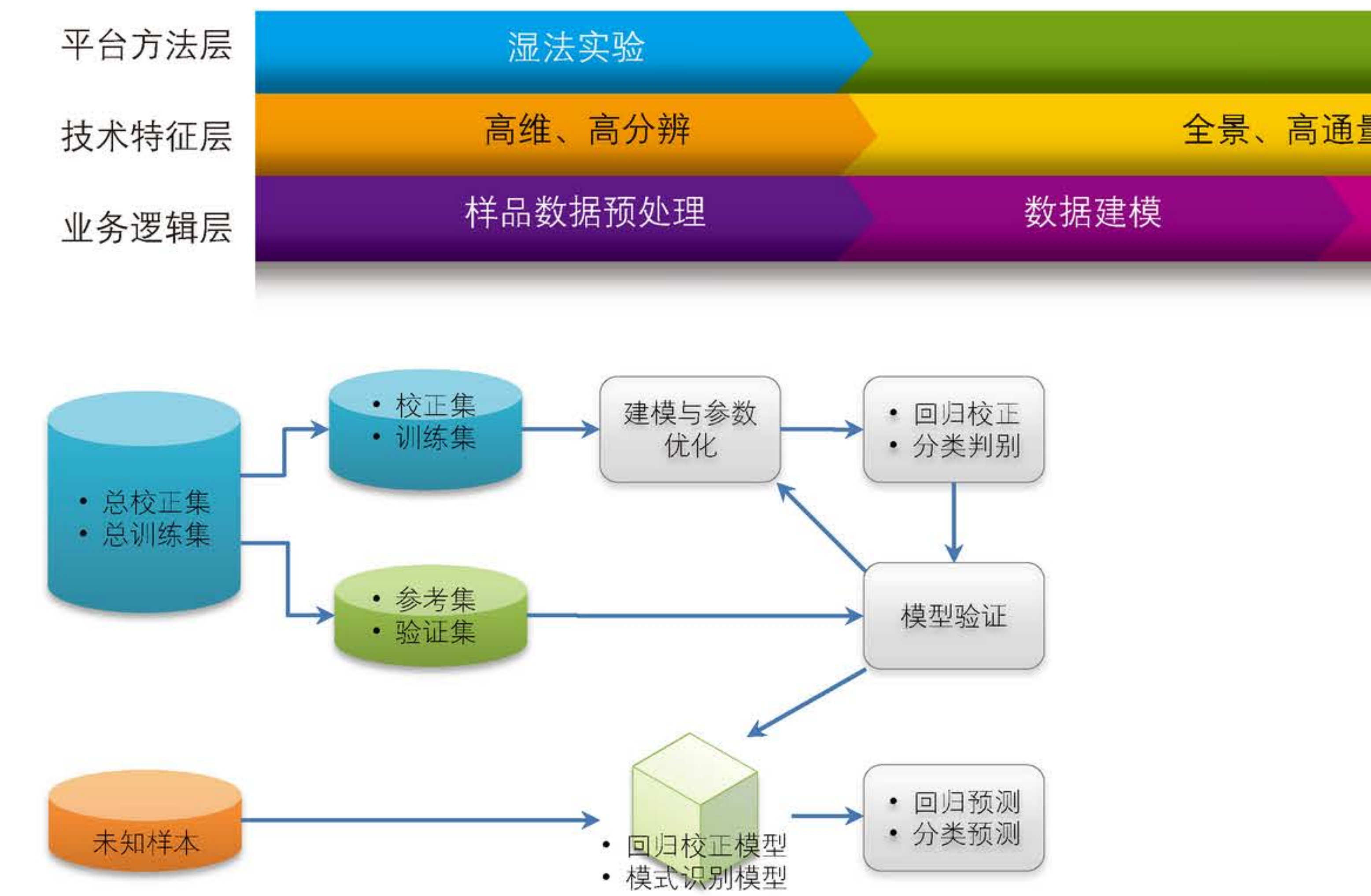
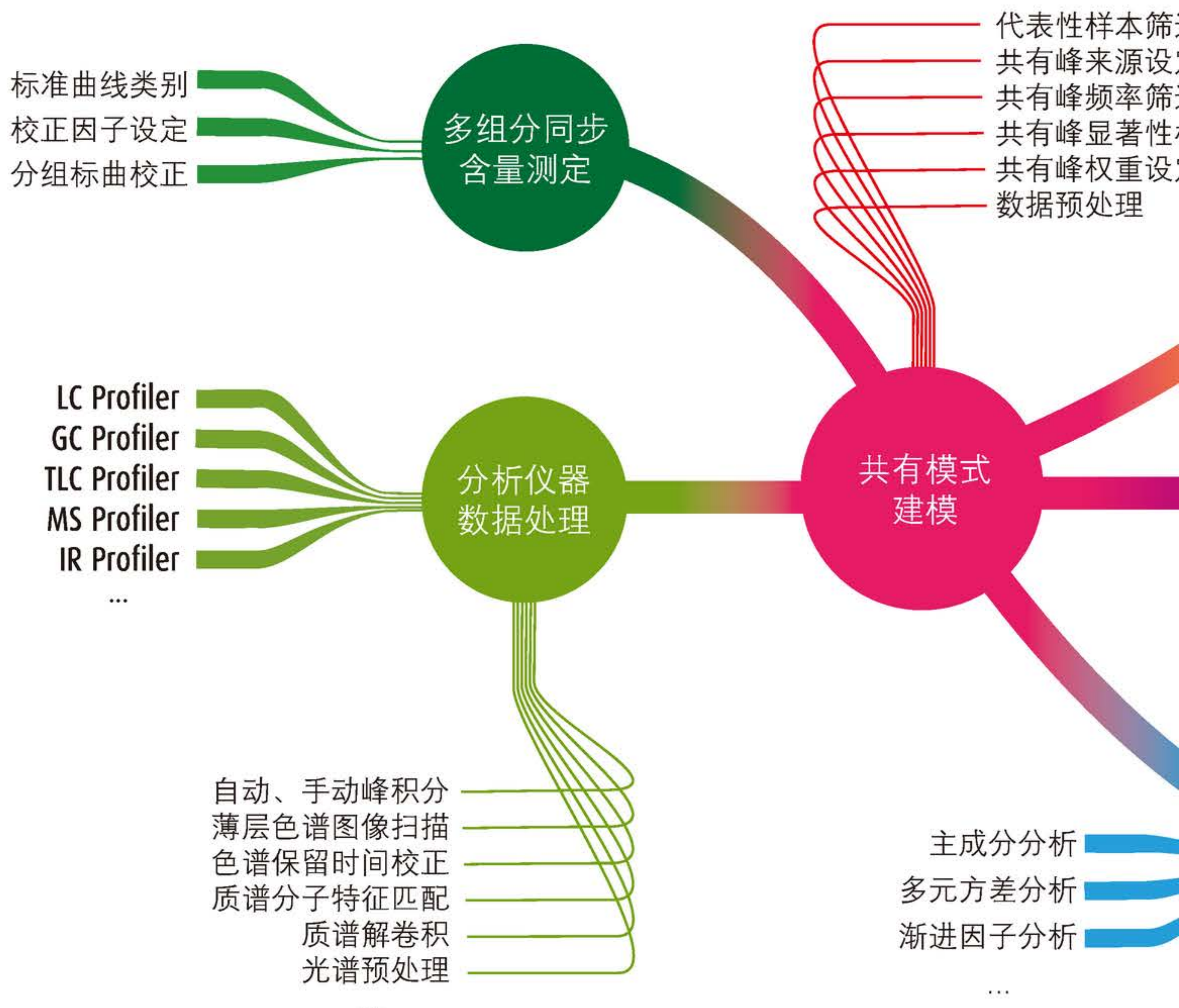
作为一门内涵丰富的化学分支学科和新兴的多学科交叉领域，化学计量学的目标是通过计算机科学、数学和统计学理论与方法，优化化学量测过程与实验设计，并从化学量测数据中最大限度地提取有价值信息。分析化学学科目前所正在经历的第 3 次变革，就与化学计量学的诞生与发展有着密切的联系。

相对于经典的化学与物理分离(湿法实验)，化学计量学可将分析对象所表征的复杂混合信息从数学维度进行彻底的“分离”，从中提取和归纳与研究对象内涵与本质规律紧密联系的关键信息(干法实验)。化学计量学的研究内容涵盖了化学量测的全过程，从而为化学的各个分支学科提供了解决问题的新思路和新方法。在化学学科的众多领域，学术界和产业界都从这项新方法和新工具的应用中受益良多，详细领域和典型应用见下表所示，不一而足。

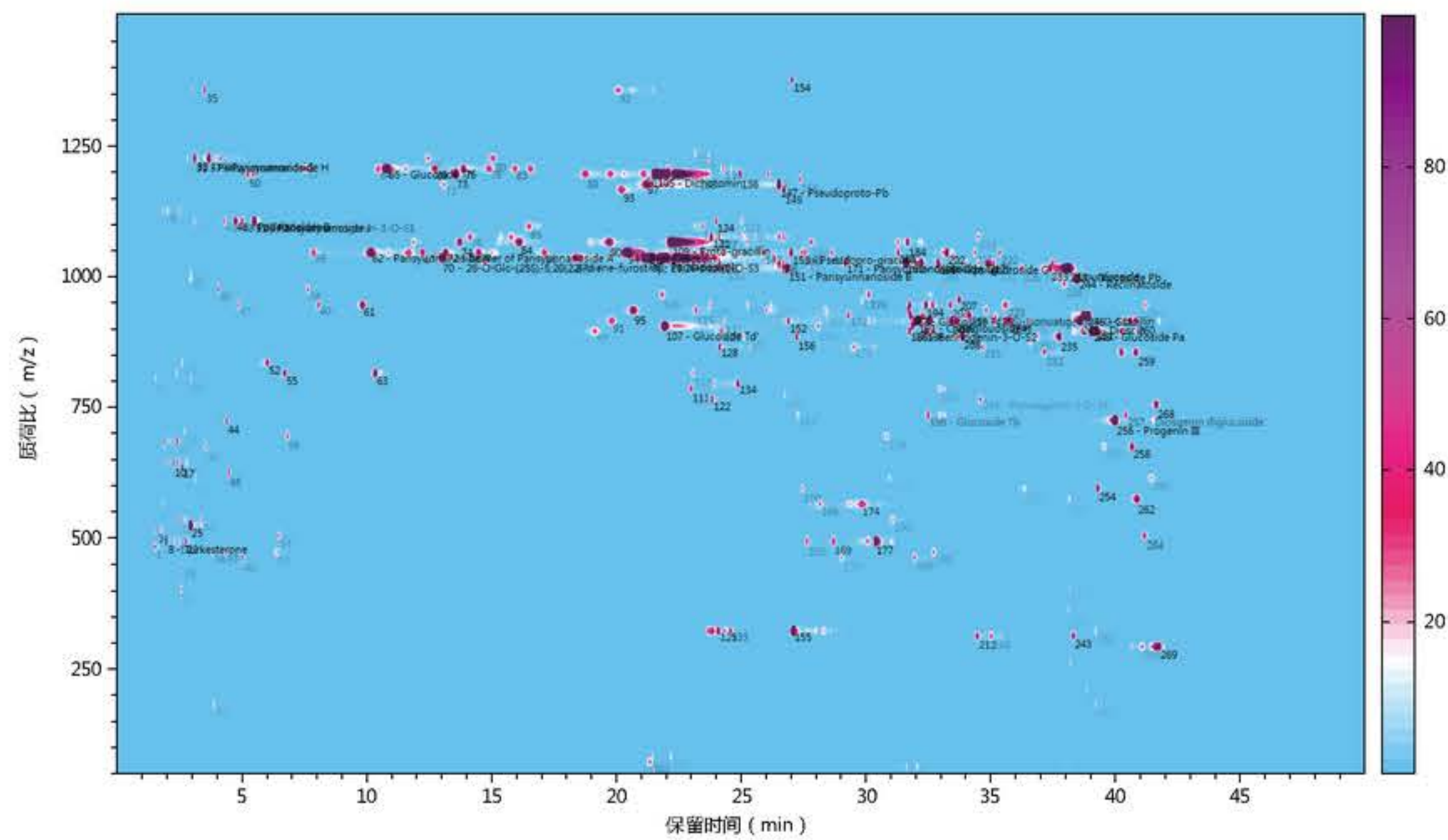
分支学科	典型应用
中药与天然药物	药材、饮片及中成药真伪优劣鉴别与质量评价、化学指纹图谱分析、物质基础研究、定量谱效学分析
化学药	有关物质分析、原料药及中间体快速鉴别、构效关系研究
生物制品	肽图指纹谱分析、蛋白质结构研究
代谢组学	药理、毒理、生理、病理的代谢指纹谱与轮廓分析、代谢特征模式与通道寻找等
食品化学、农产品化学	食品安全快速筛查、违法违禁添加检测、产品质量控制与鉴别、原料及添加剂分析、风味特征剖析、香精香料分析
环境化学	污染物分析、有害物监测、污染事故快速检测
石油化工	轻质油、润滑油、渣油、生物柴油的油品分析、油页岩分析、污染源（溢油源）鉴别
化学化工	商业化学品剖析、高聚物鉴别、合成过程控制
临床医学	疾病代谢组学、癌症早期诊断
珠宝及考古	古颜料、玉石、陶瓷等的辨伪、断代、断源及文物保护
法医学	毒品、管制药物、爆炸物、犯罪现场及火场痕量物分析
司法鉴定	纸张、染料、油墨、墨水、圆珠笔油来源及书写时间鉴别



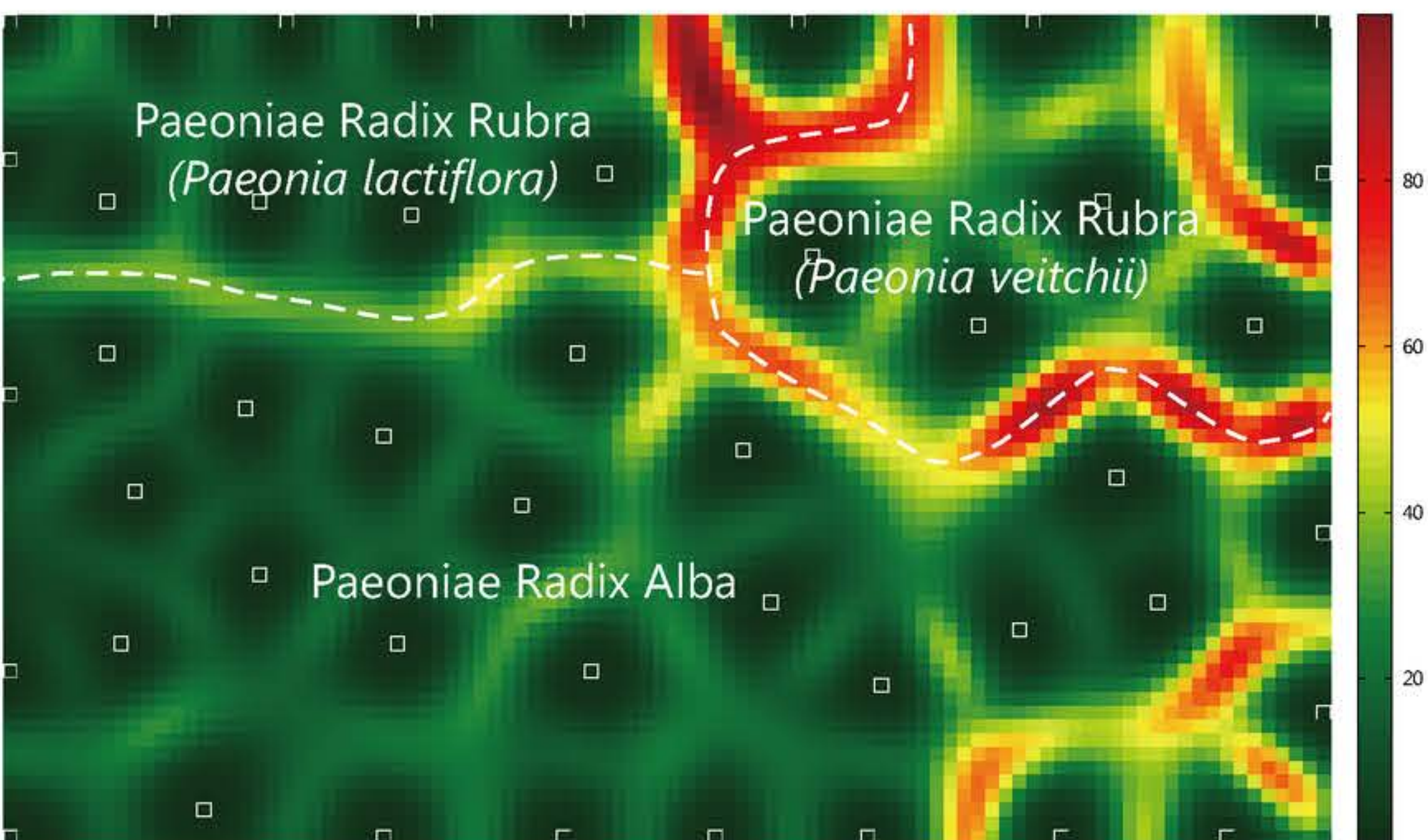
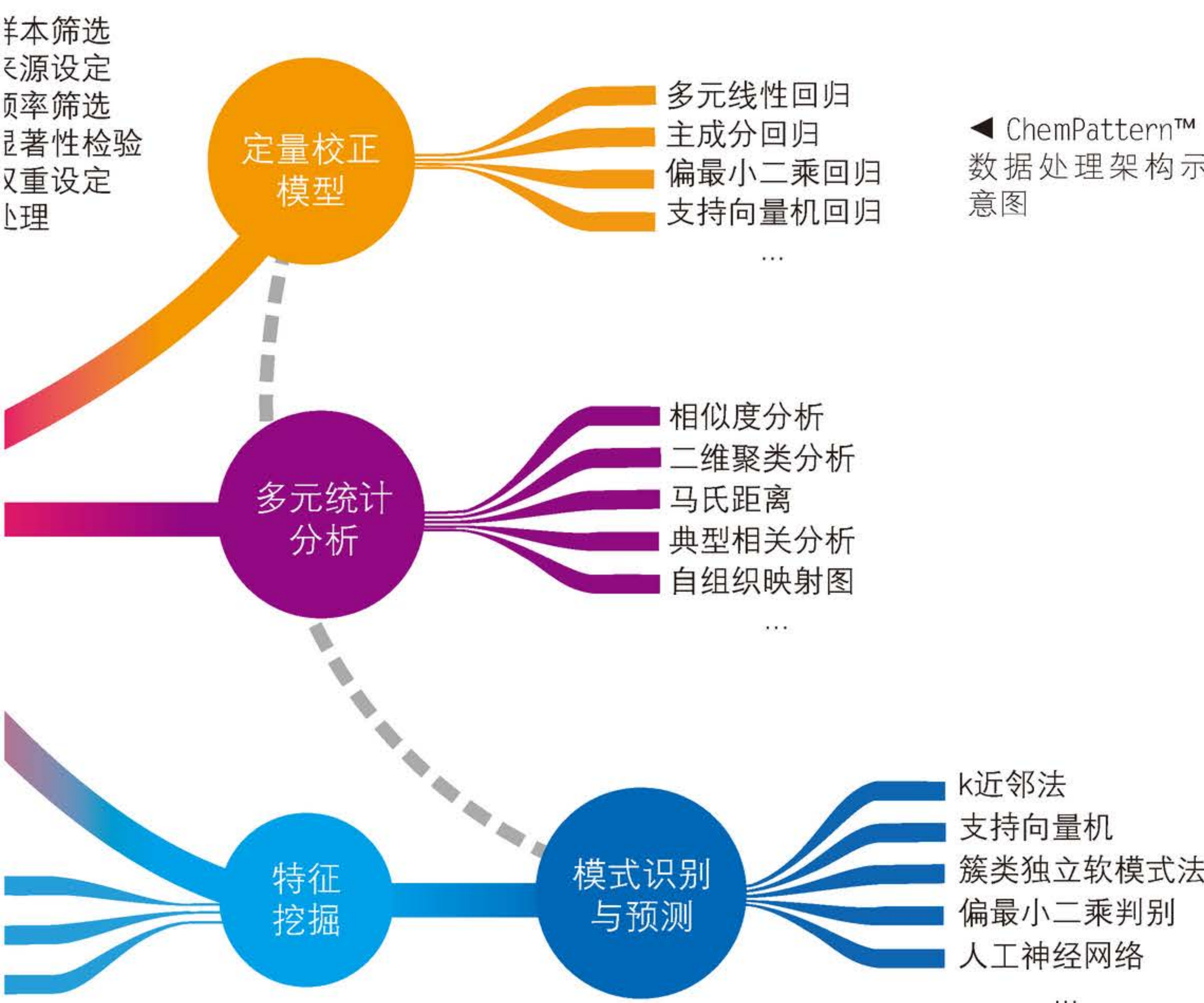
▲ ChemPattern™ 先进化学计量学及化学指纹图谱系统解决方案软件图形用户界面示例



▲ ChemPattern™ 中的回归建模与模式识别流程图



▲ 药用植物重楼 (*Paris Polyphylla* var. *Yunnanensis*) 皂苷提取物的 UPLC-QTOF-ESI MS 数据的 ChemPattern™ 解卷积结果。共检测到置信度 >0.95，相对峰高 >1.0% 的化合物超过 150 个。



复杂分析体系

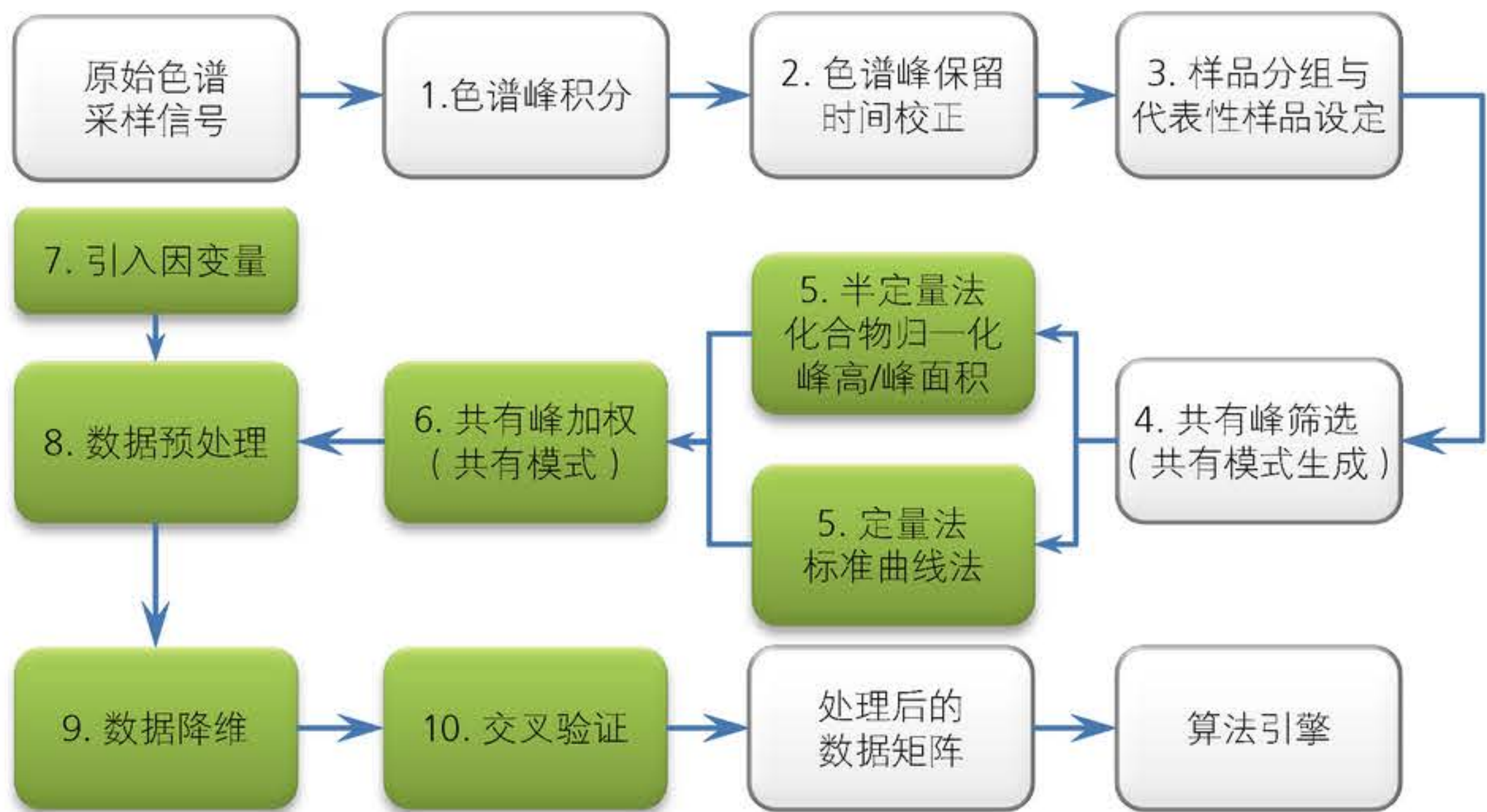
分析化学中的复杂体系具有多样性、不确定性和基质效应等诸多特点。自然界中常见的各类分析化学研究对象大都属于部分待测组分和干扰物性质未知的灰色复杂体系，体现在构成组分种类和数量上的复杂性，以及相互之间作用关系的多元化与非线性等特征上。因此如何针对复杂混合体系对象开展行之有效的信息提取、模式识别、数据挖掘，以及全面质量评价等众多化学应用中的复杂实际问题，始终驱策着化学计量学的理论与方法的快速发展。

分析化学与大数据科学

分析化学本质上是一门与数据分析息息相关的量测和信息科学。随着现代仪器分析技术的快速发展，分析化学正迎来“大数据时代”的到来。譬如采用各类高维、高分辨分析化学仪器如色谱联用技术，单个复杂样品可获得高达 GB 规模的海量数据。而采用经典分析化学方法却无法利用并势必丢弃其中绝大部分的宝贵信息。其次，如何将种类繁多的各大类分析仪器所获得的分析对象不同层面的散在和无序状态的化学量测数据实施有机整合与信息挖掘，也是当前分析化学工作者们的关注热点。因此目前针对复杂体系开展分析的瓶颈问题已然从分析仪器的硬件条件制约逐渐过度到对高内涵大数据分析技术及其工具软件的迫切需求，这已成为当前分析化学各分支学科所共同面临的紧迫任务。

化学指纹图谱技术简介

化学指纹图谱技术是指采用色谱、质谱、光谱和波谱特别是联用技术对灰色复杂体系中所有相关待测特征组分开展的以定性、定量化学计量学分析为基础的“全景式”复杂体系高通量及高内涵分析技术的统称。伴随着现代分析化学学科的飞速发展，对复杂体系的解析进入高维、高内涵的崭新阶段，这使得人们对研究对象本身的复杂性和多样性有了新的更全面的认识。指纹图谱分析技术不同于经典分析方法之处在于它不再从一个“点”（少数指标性化合物或最大吸收波长所代表的标量）而是从某一个“面”（特定条件下的整体组分信息表征的多维矩阵）对对象进行表征与分析。这种从“特写模式”到“全景模式”的刻画方式的转变，体现了由经典的“微观分解”研究思路向现代“宏观模型”分析策略的演进和理念上的改变，为现有相关检测技术和标准的不断提高提供了有力保证。



▲ ChemPattern™ 中柱色谱法的化学计量学数据预处理流程示意图

▲ ChemPattern™ 的自组织映射神经网络分析 U 矩阵示意图。可观察到示例中各样品在化合物组成方面体现出的复杂和精细的模式差异。

复杂体系跨平台仪器分析系统解决方案

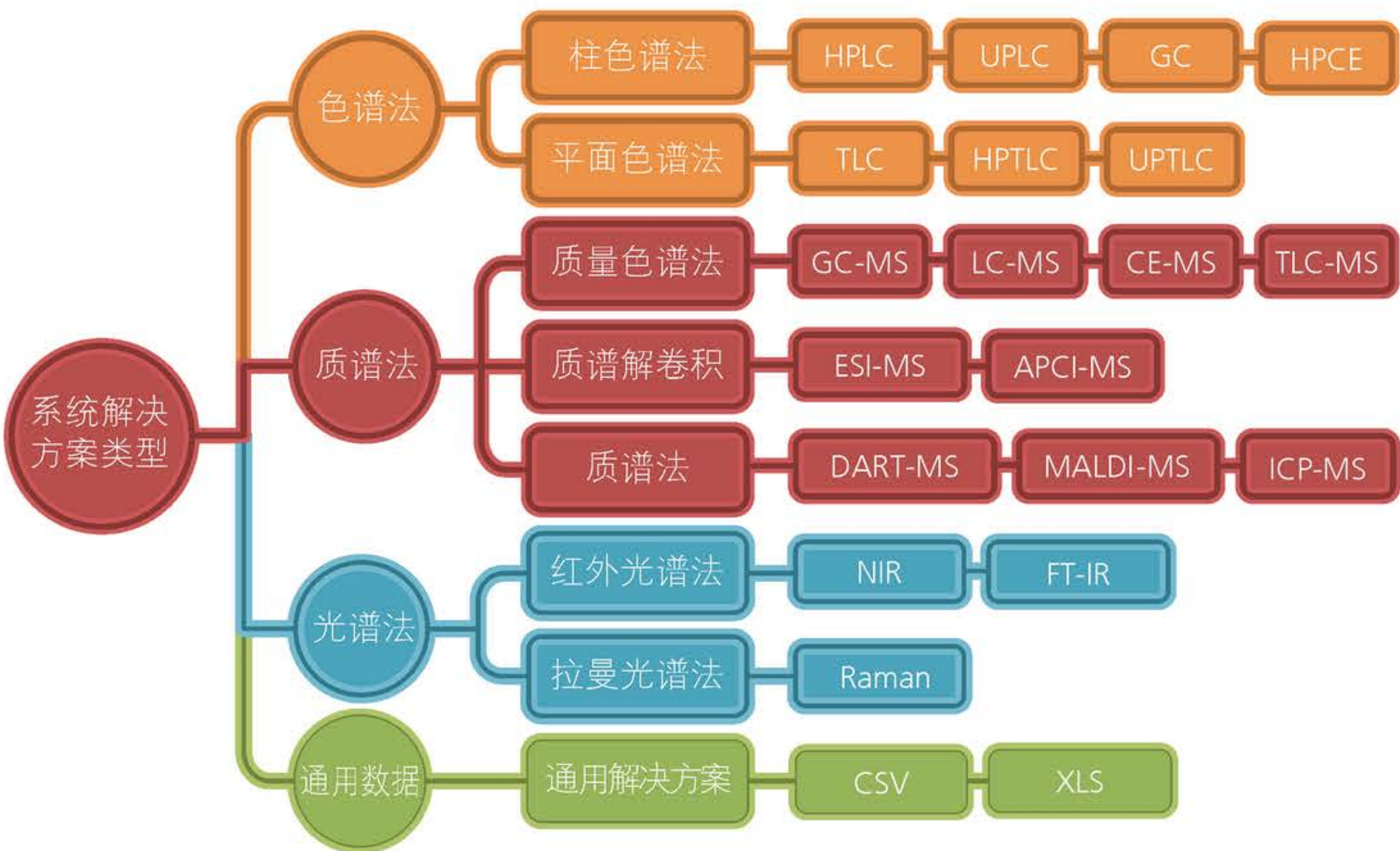
分析仪器系统解决方案

ChemPattern™所拥有的跨仪器种类的分析化学数据共平台定量分析技术，可提供包括色谱、质谱及光谱等仪器种类在内的分析化学数据的一站式处理与分析解决方案。该系统通过通用数据接口技术实现了仪器分析的湿法实验环节与数据分析的干法实验环节的无缝联接，并针对不同分析仪器的特点分别提供相应的信号处理、校正等工作站软件功能。该系统的应用同时解决了如何对分析仪器所获取的持续呈几何级增长的高维高分辨海量数据进行高效分析处理，以及不同类型及型号的分析仪器所测得数据、模型的迁移和共平台综合比对分析这两个化学计量学所关心的核心问题，并采用标准化的操作方式对各类分析仪器的复杂体系数据处理和分析全过程加以规范。

色谱法系统解决方案

ChemPattern™为常用色谱法提供种类丰富的信号处理及校正功能，其部分特点如下：

- 色谱峰保留时间校正功能提供对色谱峰各类复杂的保留时间漂移和峰重叠情况进行高效和准确的自动与手动校正；
- 含量测定具备外标法校正因子和分组校正等功能，适用于大样本集、多数据来源的复杂体系样品的多组分同步含量测定；
- 多元的共有模式建模参数确保整个共有峰筛选过程完全以统计学方式进行。



▲ ChemPattern™所支持的分析仪器系统解决方案类型

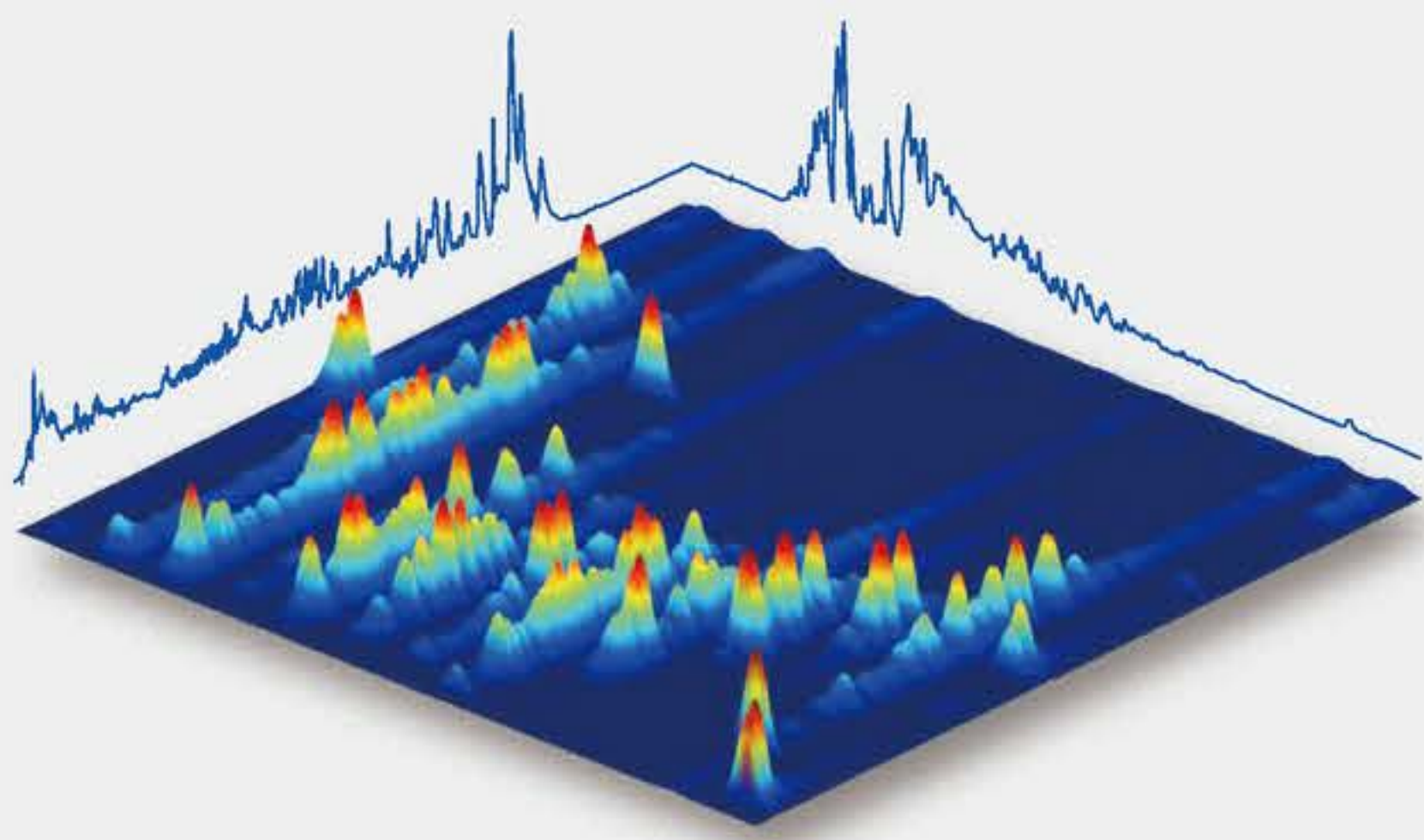
12.011 LC Profiler 高效液相色谱数据处理系统

12.012 GC Profiler 气相色谱数据处理系统

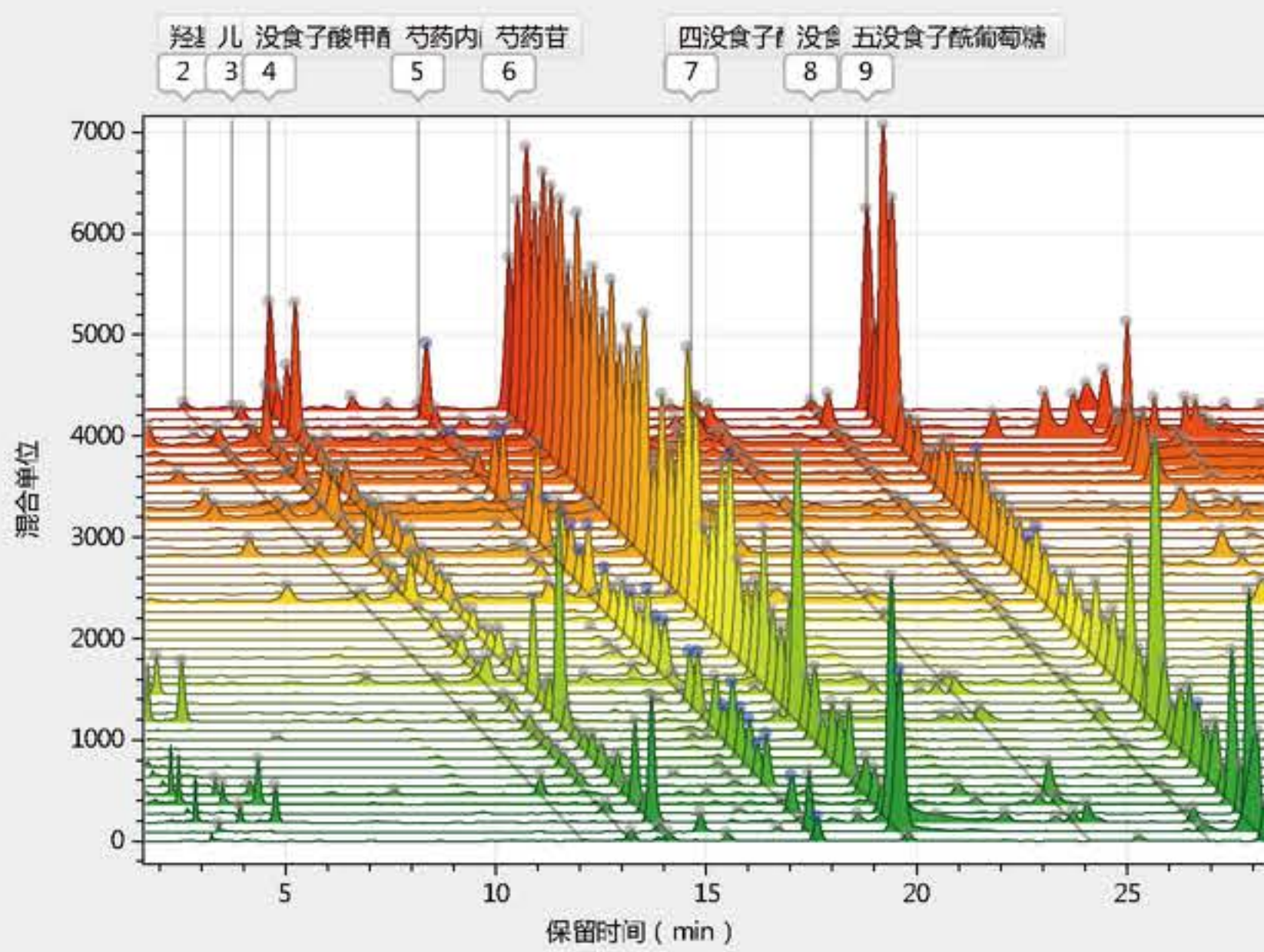
- 支持 ASCII、ANDY (AIA)、J-CAMP 及 XLS 等数据格式
- 适用于 HPLC、UPLC、GC 及 HPCE 图谱分析
- 图谱批量自动积分、手动积分、去背景、平滑、合成及剪裁
- 支持外标法、加校正因子的外标法等多组分同步含量测定方法包括标准品定义、分组校正、校正因子自动及手动生成等功能
- 2D 及 3D 谱图叠加、谱图运算、保留时间校正、共有模式建模

12.013 TLC Profiler 薄层色谱数据处理系统

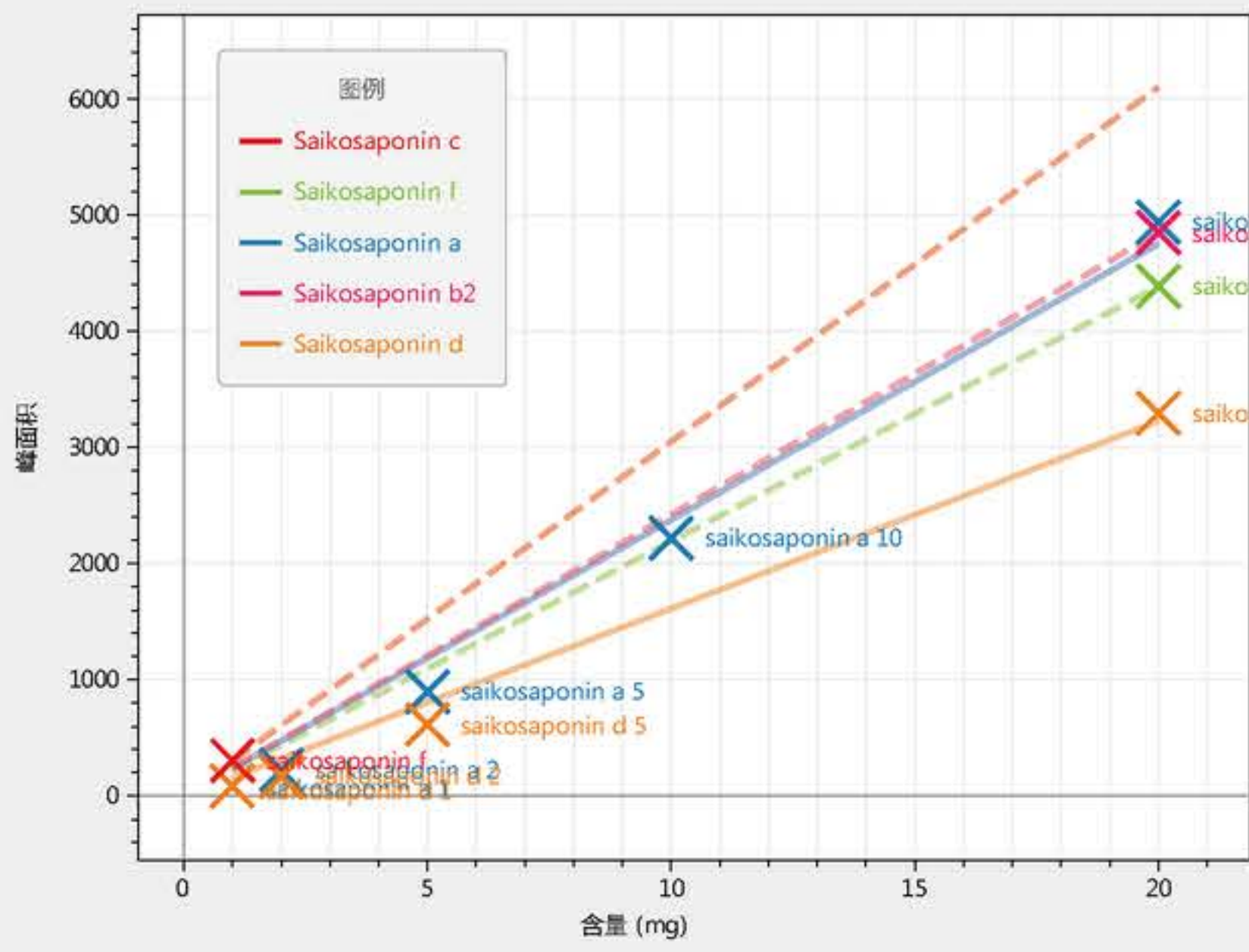
- 支持最高 16 位颜色通道的高动态范围色谱图像 (TIFF 格式)
- 图谱点样轨道自动定位及数字图像轮廓扫描与积分，同样适用于生物自发光显影及凝胶电泳图谱的定量评价



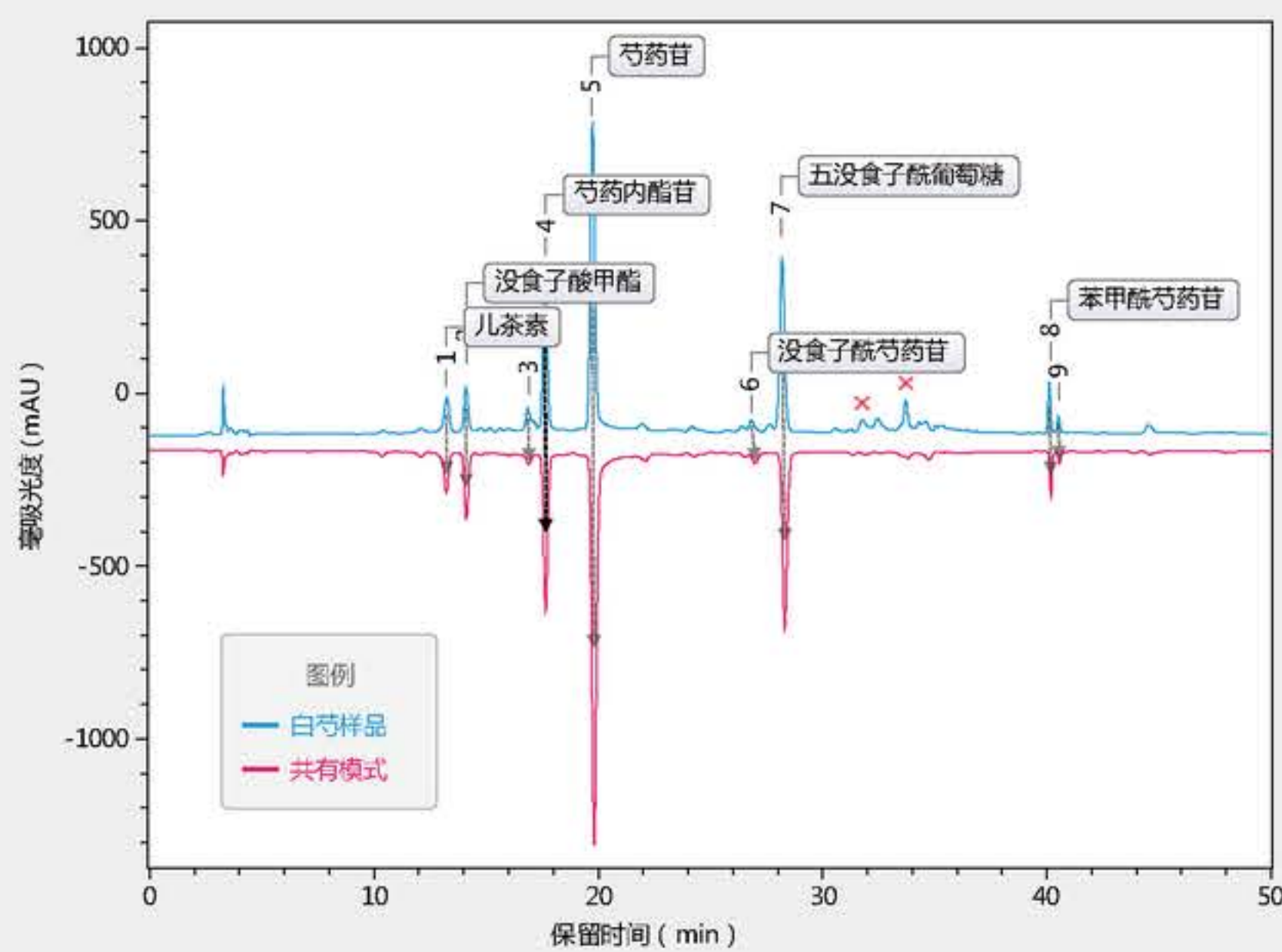
▲ LC Profiler LCxLC数据3D视图



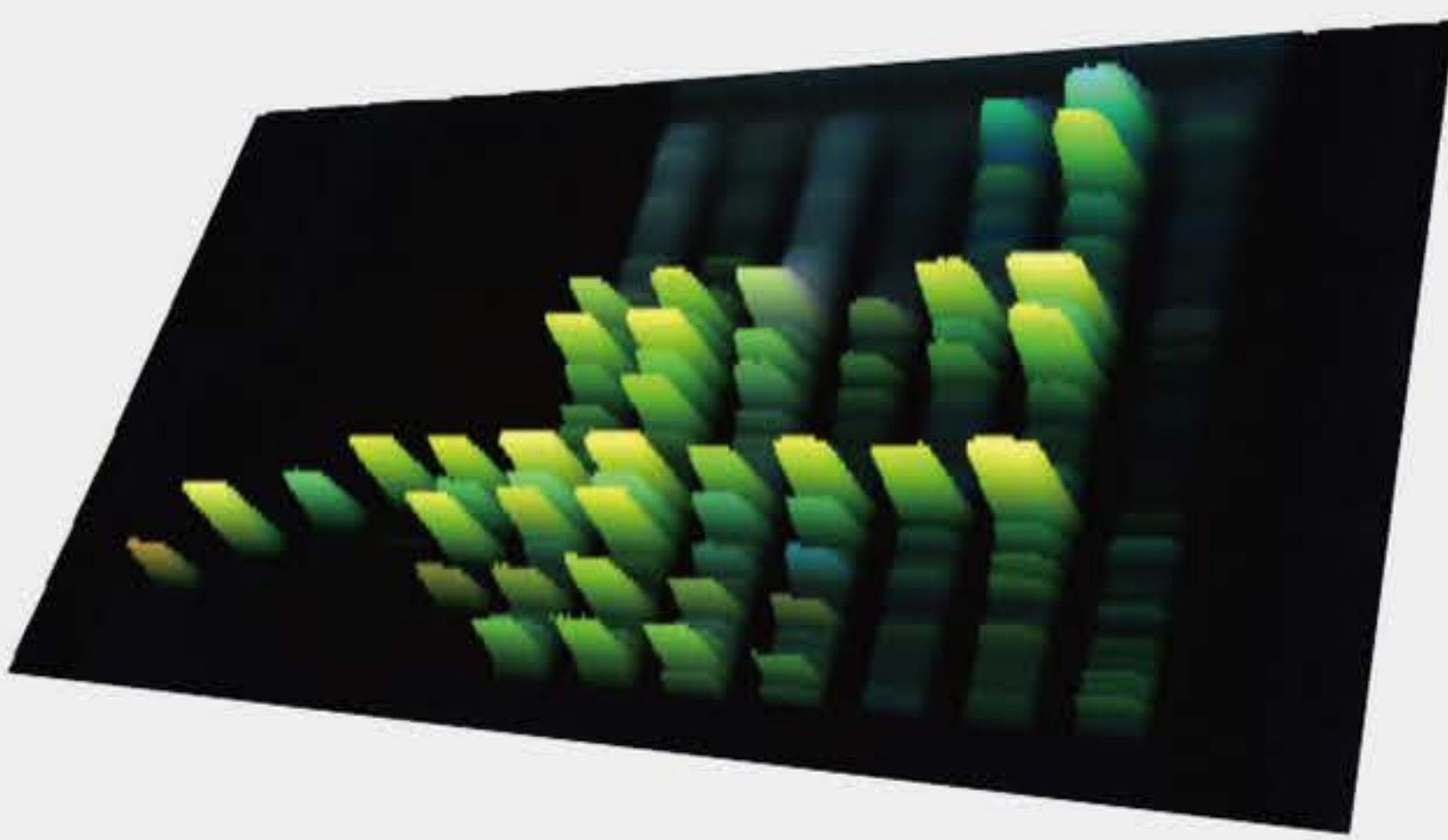
▲ LC Profiler样品保留时间校正视图



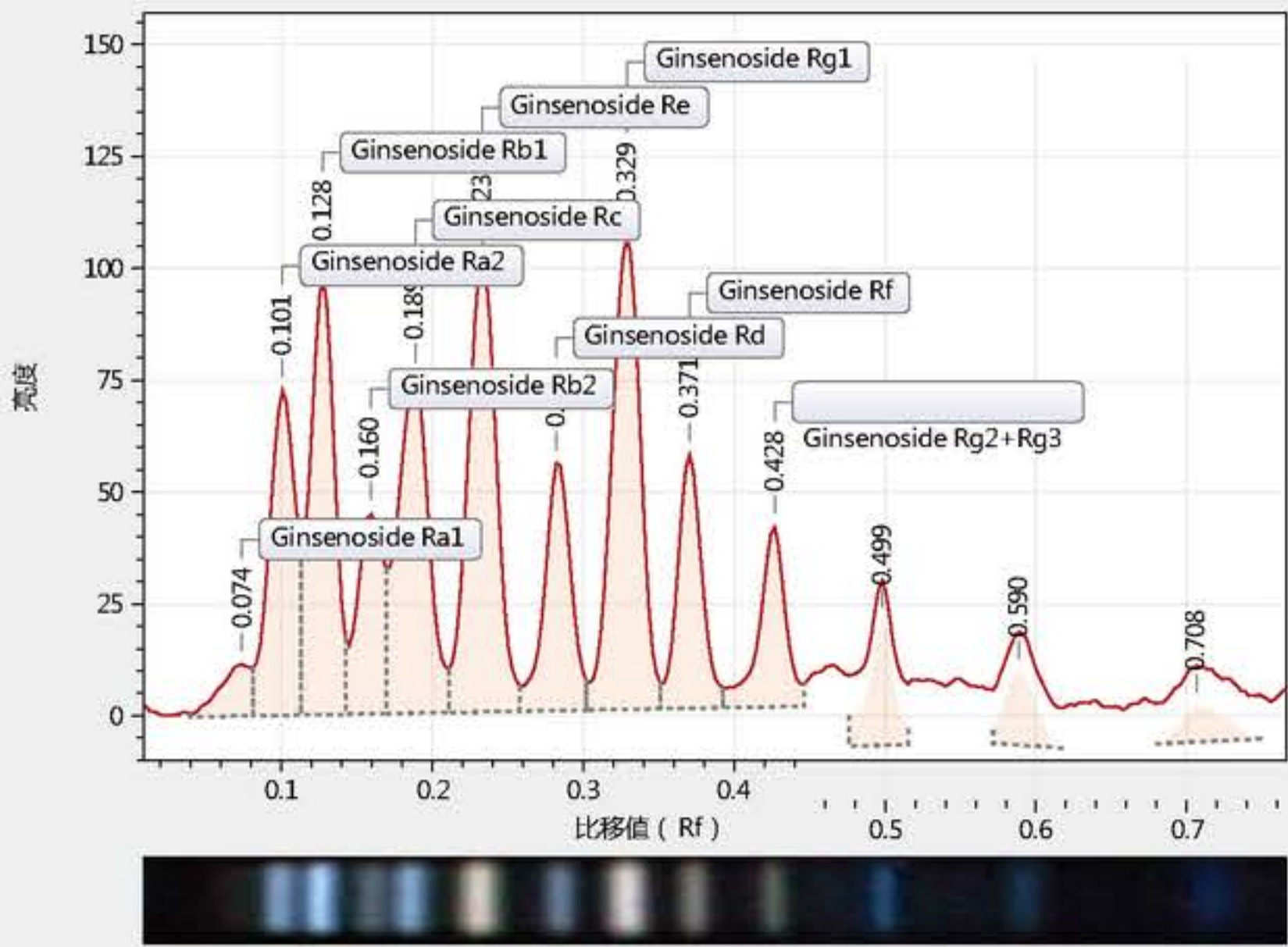
▲ LC Profiler加校正因子的外标法含量测定



▲ LC Profiler样品共有峰归属视图



▲ TLC Profiler薄层色谱图3D视图



▲ TLC Profiler样品数字扫描轮廓图

质谱法系统解决方案

质谱法特别是色谱-质谱联用技术是开展复杂体系样本分析不可或缺的重要手段，所获取的高维高分辨数据对于复杂体系质量控制与研究都极具价值。ChemPattern™对不同离子源的质谱联用技术如 ESI-MS, DART-MS 及 ICP-MS 等所代表的各型数据提供广泛和深入的数据处理支持,其部分特点如下:

- 质谱解卷积。该功能将 GC-MS 的解卷积功能扩展到信息更为复杂的 LC-MS 应用中。经过高度优化的快速解卷积算法可兼容各种质量的质谱数据(不同分辨率和采样频率等)。
- 分子特征匹配。其综合采用化合物的质谱与色谱信息对解卷积色谱峰进行样品间的自动对齐,从而实现化合物的快速精确匹配。
- 质谱共有模式。根据代表性样品质谱图生成的共有模式可进行基于质谱图的精确匹配,适用于 DART-MS 及 ICP-MS 等数据的深入分析。

12.021 TIC Profiler 质谱质量色谱数据处理系统

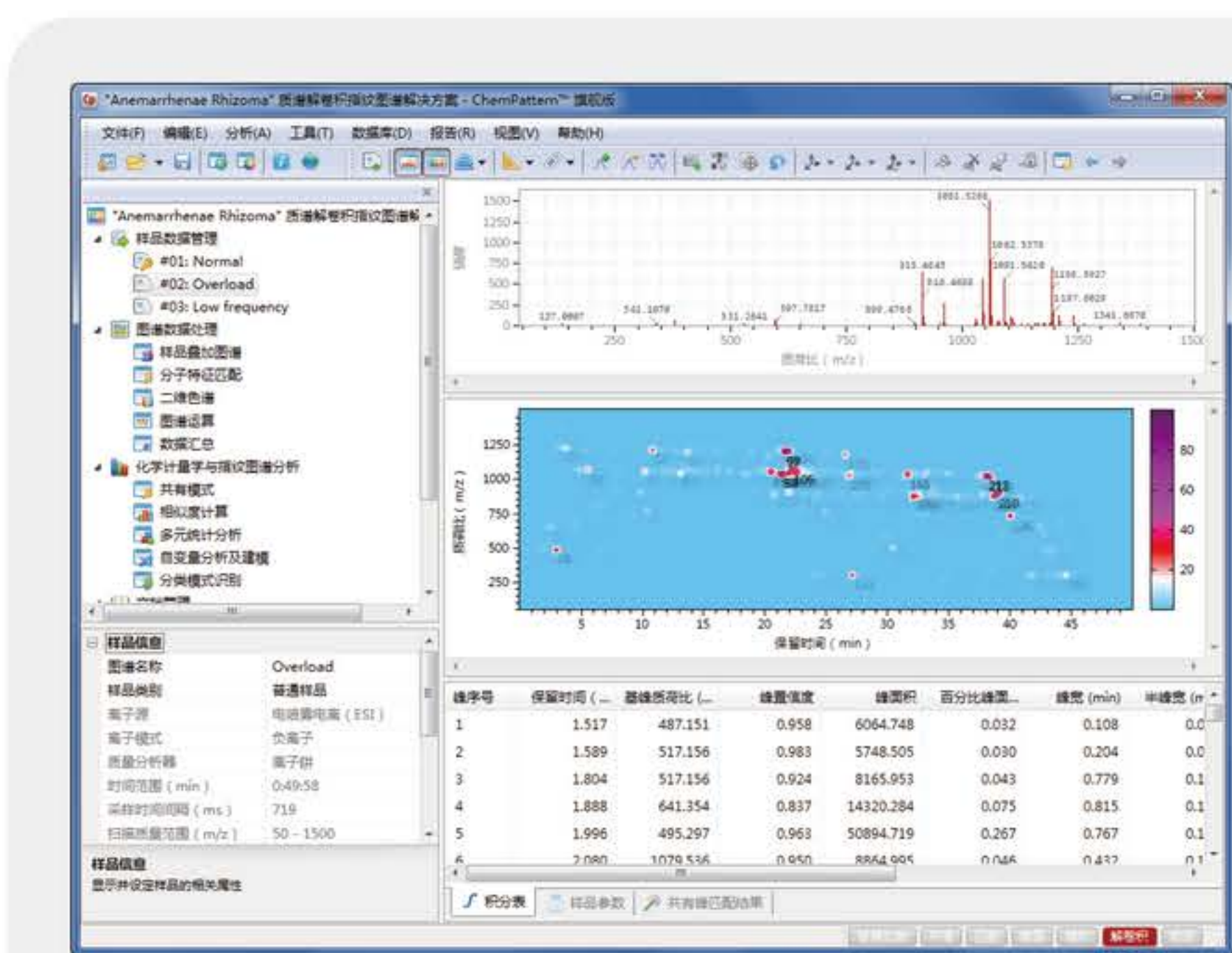
- 支持 MS ANDY (AIA) 数据格式
- 适用于各类高中低分辨率的 GC/MS 及 LC/MS 等样品数据分析
- 图谱批量自动积分、手动积分、去背景及剪裁功能
- 生成 EIC、BPI、XIC 等质量色谱图、平均质谱图、质谱热图等
- 支持外标法、加校正因子的外标法等多组分同步含量测定方法
- 包括标准品定义、分组校正、校正因子自动及手动生成等功能
- 2D 及 3D 谱图叠加、谱图运算、保留时间校正、共有模式建模

12.022 MS Profiler 质谱解卷积数据处理系统

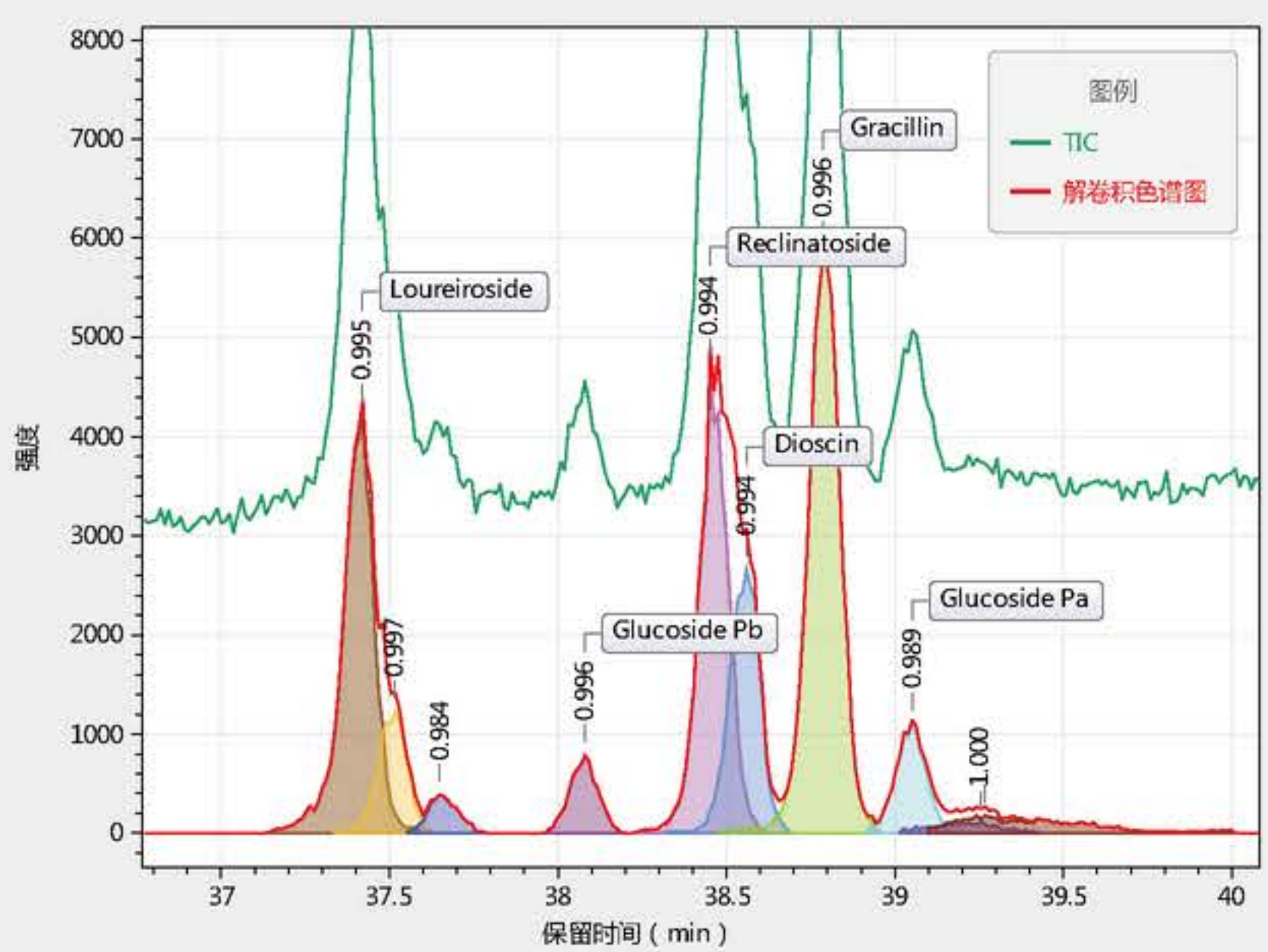
- 适用于采用软电离离子源的 LC/MS、CE/MS 及 TLC/MS 分析
- 基于峰模型技术的质谱解卷积功能,用于重叠色谱峰精确解析
- LC/MS 谱图典型解卷积用时<10s, 同位素峰及加合离子识别
- 分子特征匹配、解卷积化合物命名、解卷积共有模式建模功能

12.023 DART Profiler 质谱数据处理系统

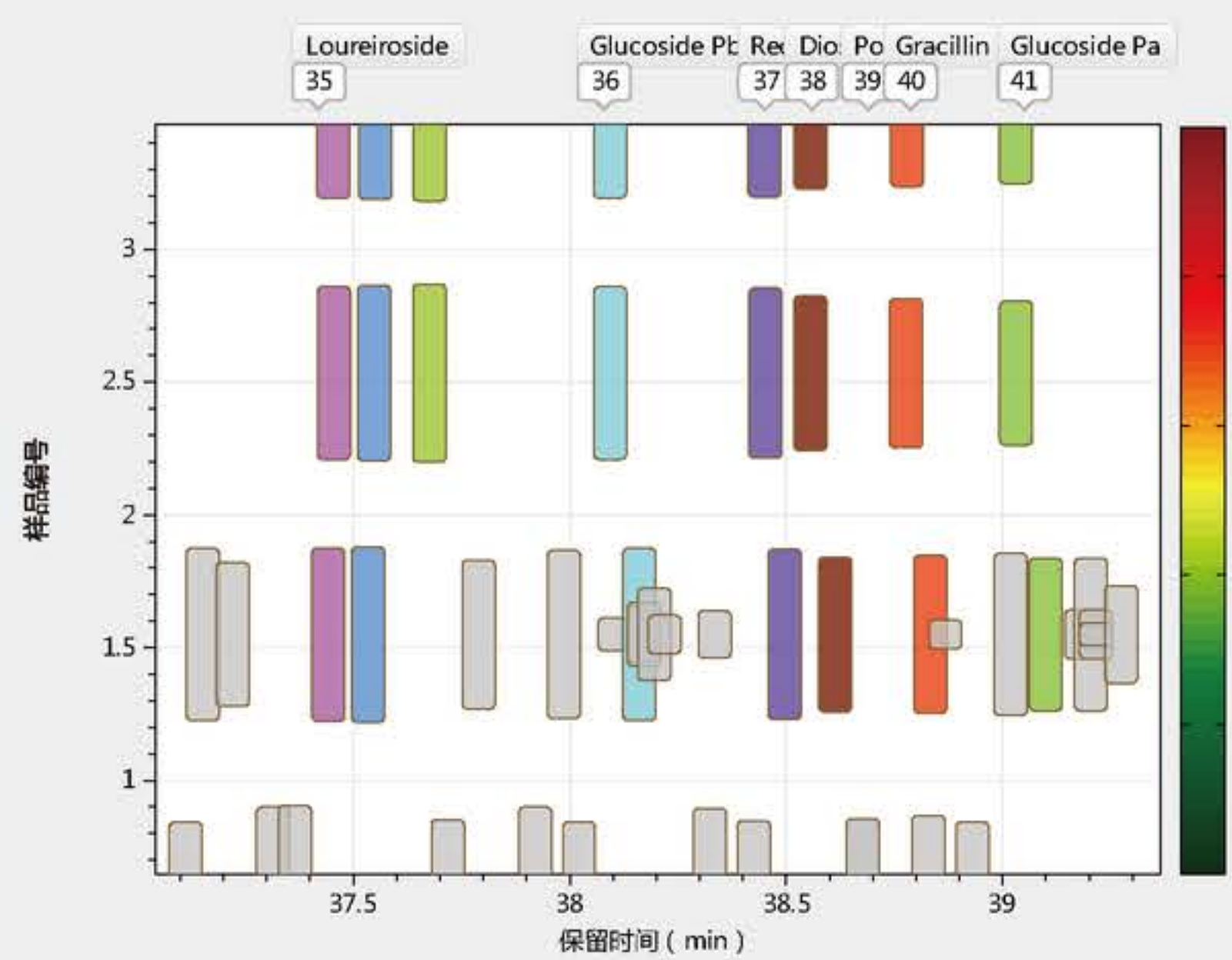
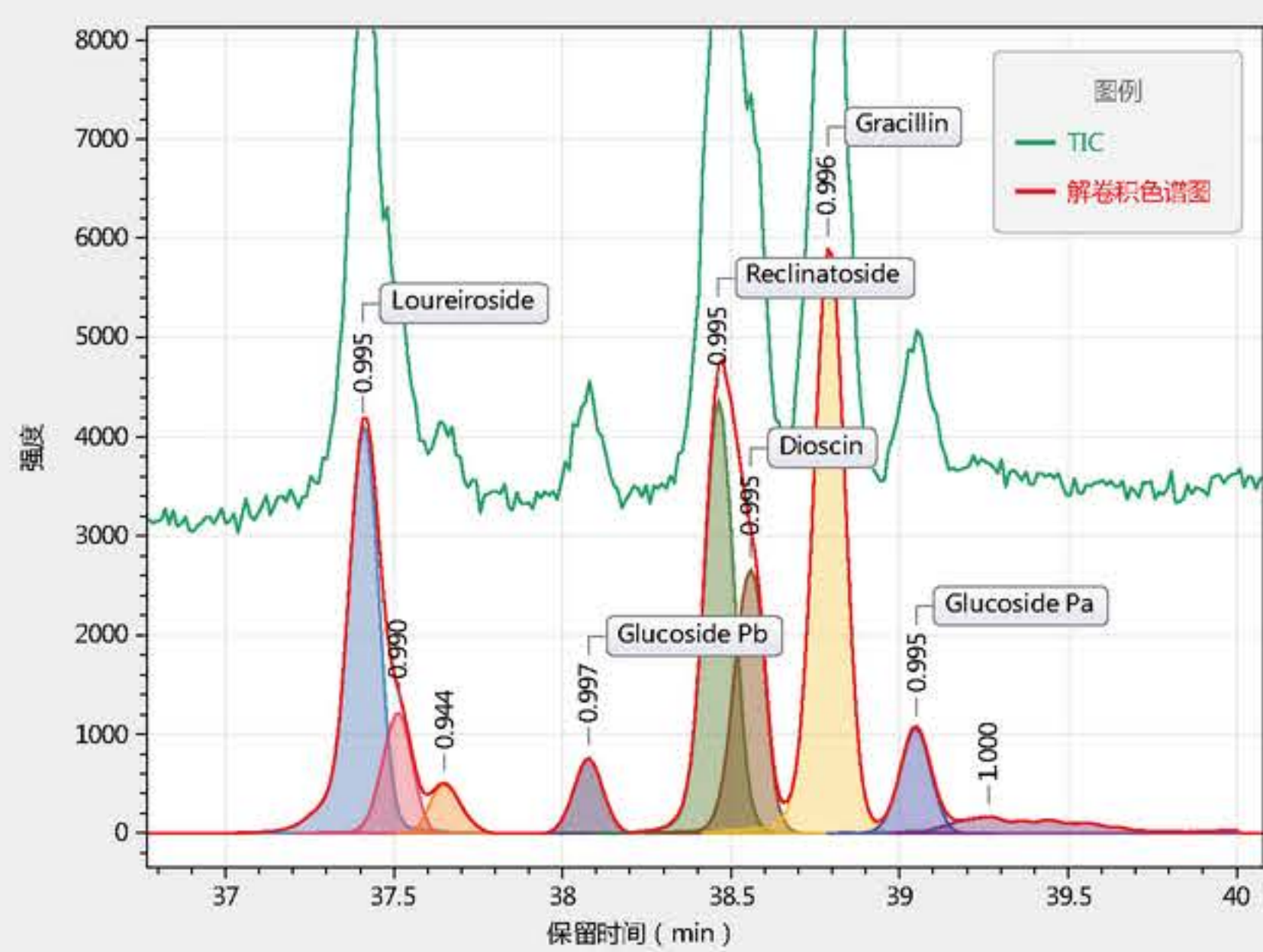
- 适用于 DART-MS, MALDI-TOF-MS, 及 ICP-MS 质谱法等
- 质谱指纹图谱匹配、质谱指纹图谱共有模式建模功能



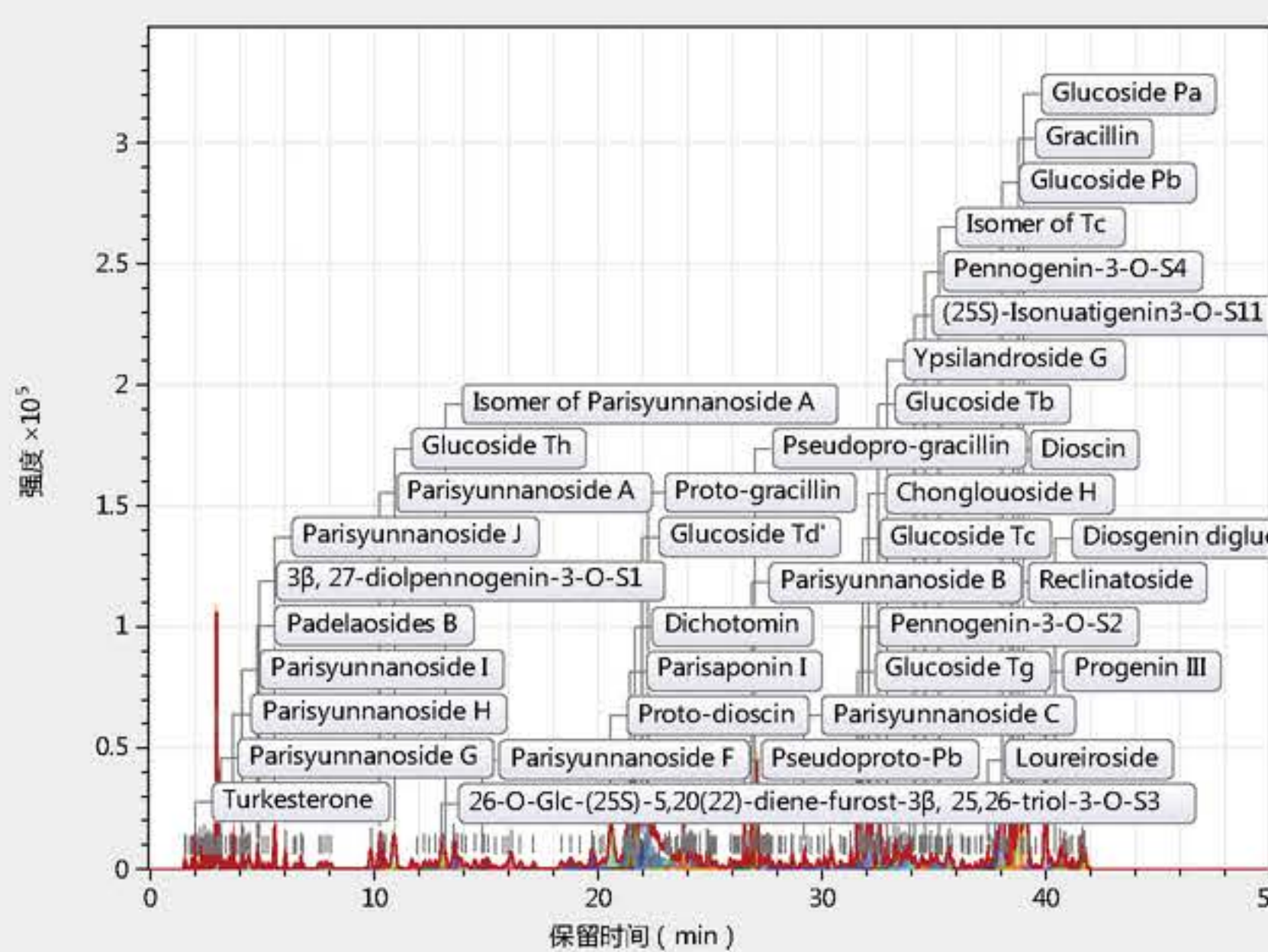
▲ MS Profiler质谱总离子流色谱图视图



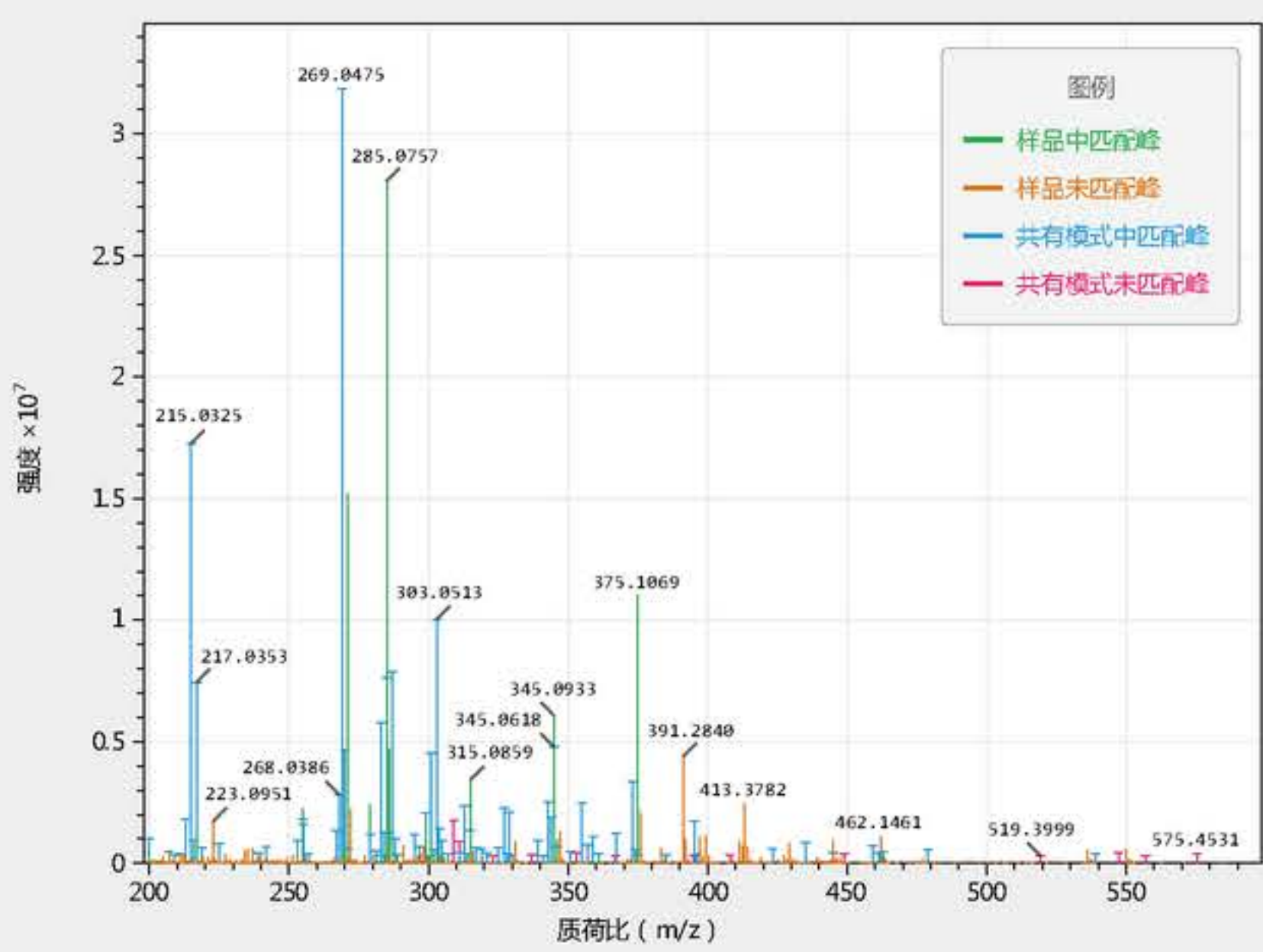
▲ MS Profiler质谱解卷积结果示意图 (显示各峰置信度以及右图的数据平滑后的校正保留时间)



▲ MS Profiler质谱解卷积分子特征匹配视图



▲ MS Profiler解卷积质谱共有模式示意图



▲ MS Profiler的DART及ICP质谱样品匹配视图

光谱法系统解决方案

以多元校正定量分析为代表的光谱分析技术是化学计量学的重要组成。ChemPattern™对以近红外为代表的光谱法数据处理提供系统支持,并充分支持复杂体系分析样品的光谱在线分析和快速无损分析功能。

化学计量学通用系统解决方案

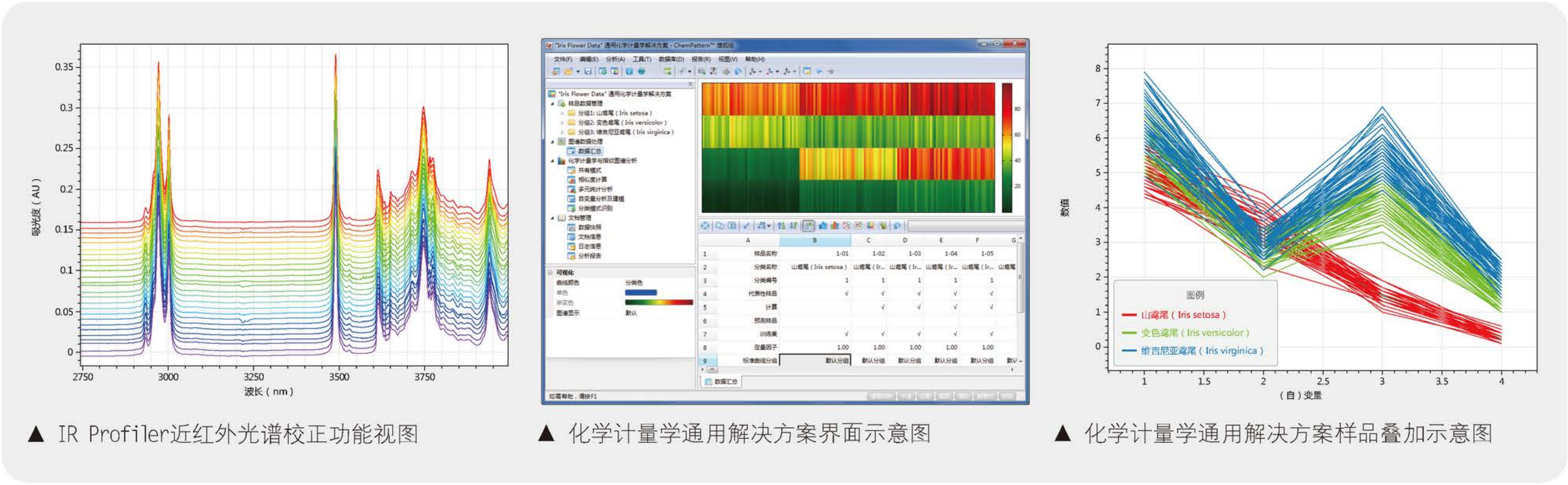
通过通用解决方案,可针对软件未涉及的任何分析仪器数据类型开展化学计量学分析。

12.031 IR Profiler 红外光谱数据处理系统

- 兼容 ASCII / JCAMP / XLS 数据格式
- 适用于红外、近红外及拉曼光谱分析
- 吸收 / 透射模式转换、求导、平滑、MSC / SNV 基线校正等
- 多元校正与定量分析、红外光谱匹配、红外光谱共有模式生成

12.041 ChemProfiler 化学计量学通用数据处理系统

- 兼容 ASCII / XLS 数据格式
- 适用于任意类型的分析化学、统计学及化学计量学数据分析



化学计量学分析

ChemPattern™的化学计量学解析过程与仪器分析步骤密切相关，并完全满足开展定量分析的要求。分析过程系统集成了包括自变量筛选、数据预处理、数据降维，以及交叉验证等在内的一系列数据解析流程。各类核心算法均经过参数优化设计，易于操作掌握，通常只需点击几下鼠标即可获得详尽的交互式图表计算结果。具体功能组成介绍如下。

数据预处理

样品的原始采样数据通常需要经过信号提取、校正和规范化等必要处理后方能生成符合化学计量学分析要求的数据内容。在 ChemPattern™中上述操作可方便地按需要分 10 个步骤独立执行。

多元统计分析

多元统计分析亦称多变量数据分析，其能够同时综合处理分析样本的全部自变量以及与之相关的多个因变量，进而获得变量间的联系和数据结构等信息，因而显著区别于以个别变量为研究对象的经典统计学方法。

聚类分析

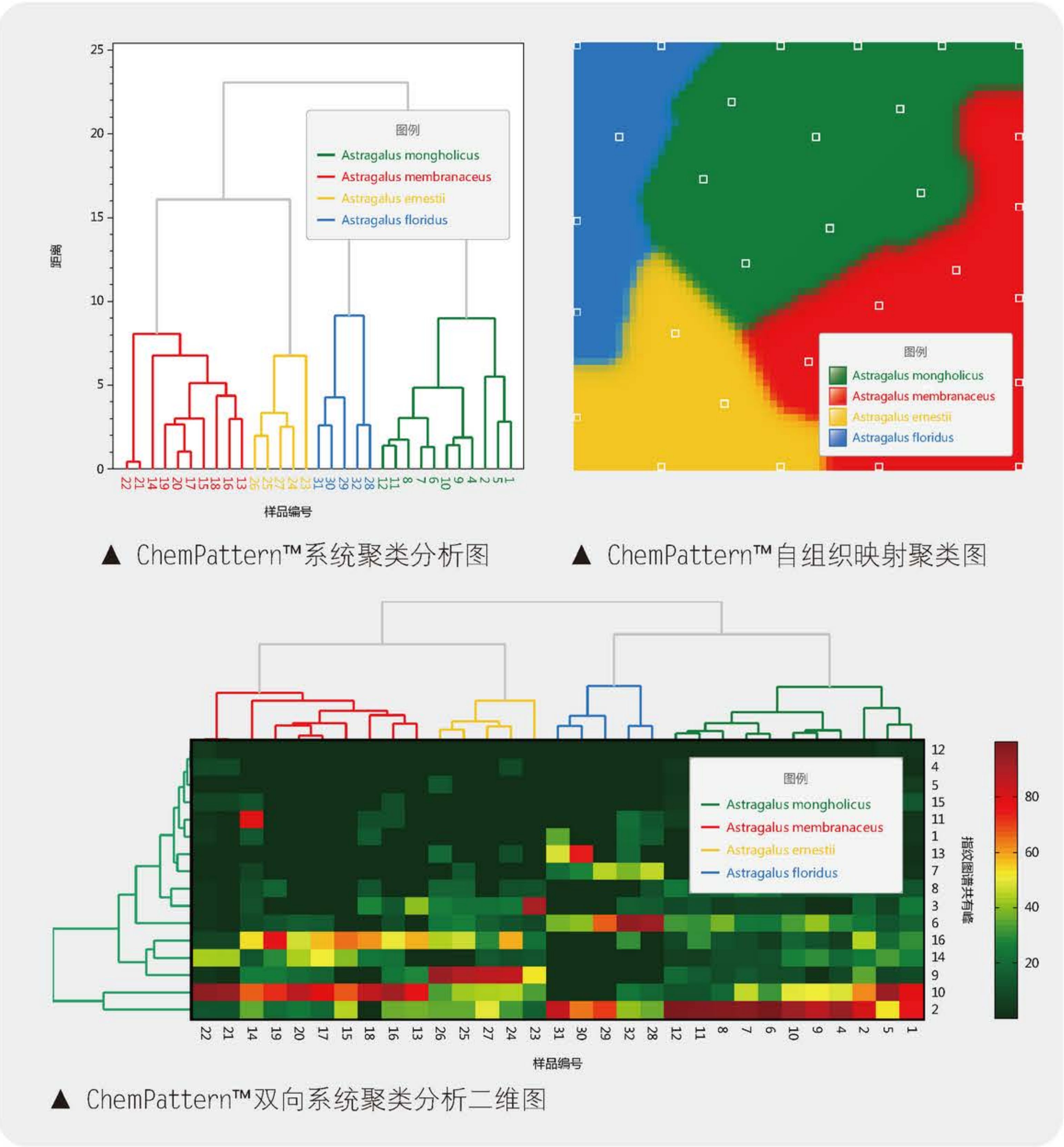
多元统计中的聚类分析方法在分析化学与化学计量学中有广泛应用。ChemPattern™提供单向和双向系统聚类分析，以及基于人工神经网络的自组织映射非线性聚类分析等多种方法。

相似度分析

相似度算法是对用于评价构成样本的向量或矩阵之间相似程度的一大类算法的统称，其在信息学相关领域有着广泛的应用。ChemPattern™对其中普遍应用的以及体现化学指纹图谱相似度评价特点的多种算法提供支持。

10.023 ChemPattern™ Ultimate 谱蕴™ 先进化学计量学及化学指纹图谱系统解决方案软件

- 高性能多线程并行数值计算平台和先进化学计量学解析功能
- 支持海量数据的批量处理、分析、可视化以及结果交互图表输出
- 共有模式建模、多元统计、模式识别、人工智能、数据挖掘功能
- 支持的多元统计分析：主成分分析、偏最小二乘回归、多元线性回归、多元方差分析、双向系统聚类、自组织映射人工神经网络等
- 支持的模式识别技术： k 最近邻法、偏最小二乘判别、支持向量机、簇类独立软模型法、自组织映射人工神经网络等，及交叉验证功能
- 支持的相似度算法：夹角余弦、相关系数、欧氏距离、马氏距离等
- 包括 11 种数据预处理算法、数据降维功能、共有模式拟合等功能



回归建模

回归分析是对在自变量与因变量相关性计算的基础上建立回归方程,即回归预测模型的一类方法的统称。回归分析在化学计量学中具有广泛的应用,是仪器分析中含里测定所使用的核心方法,包括标准曲线法及多元校正定量模型等,对此 ChemPattern™ 提供了广泛使用的多元线性回归与偏最小二乘回归方法。

化学模式识别

ChemPattern™ 先进的化学模式识别功能提供对分析化学中复杂体系样本进行分类、估计和预测的功能。其包括各类有监督和无监督学习算法、训练集与测试集设定,建模参数优化配置、模型质量评价等在内的详尽功能。在算法方面所提供的 6 种方法各具特色,代表了该类技术在化学计量学领域的最新进展。

定量谱效分析

ChemPattern™ 所提供的包括多组分同步含量测定技术在内的定量分析方法为化学计量学特别是定量谱效分析提供了有力保证,并进一步实现了不同类型分析化学数据的共平台定量分析的目的。

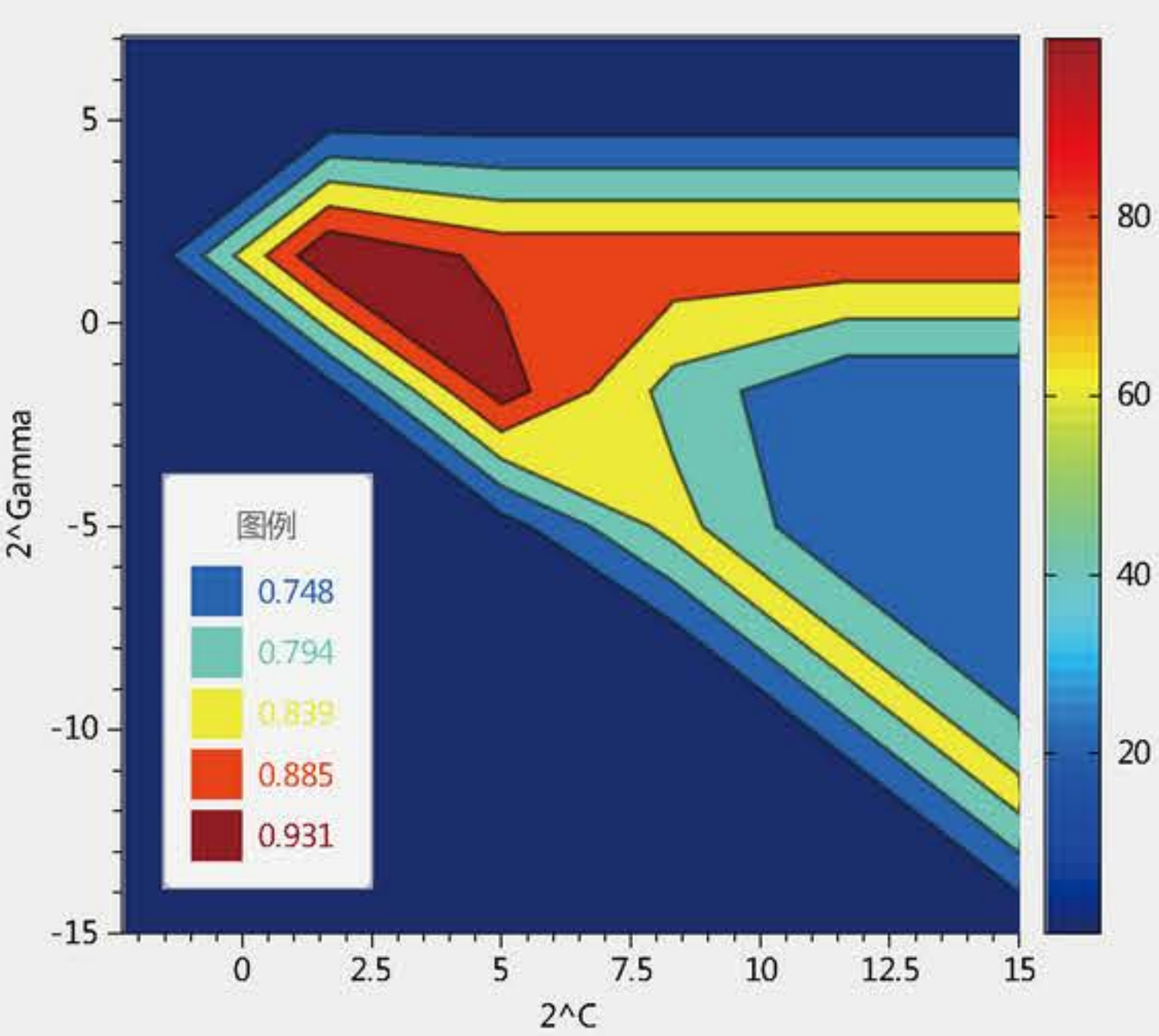
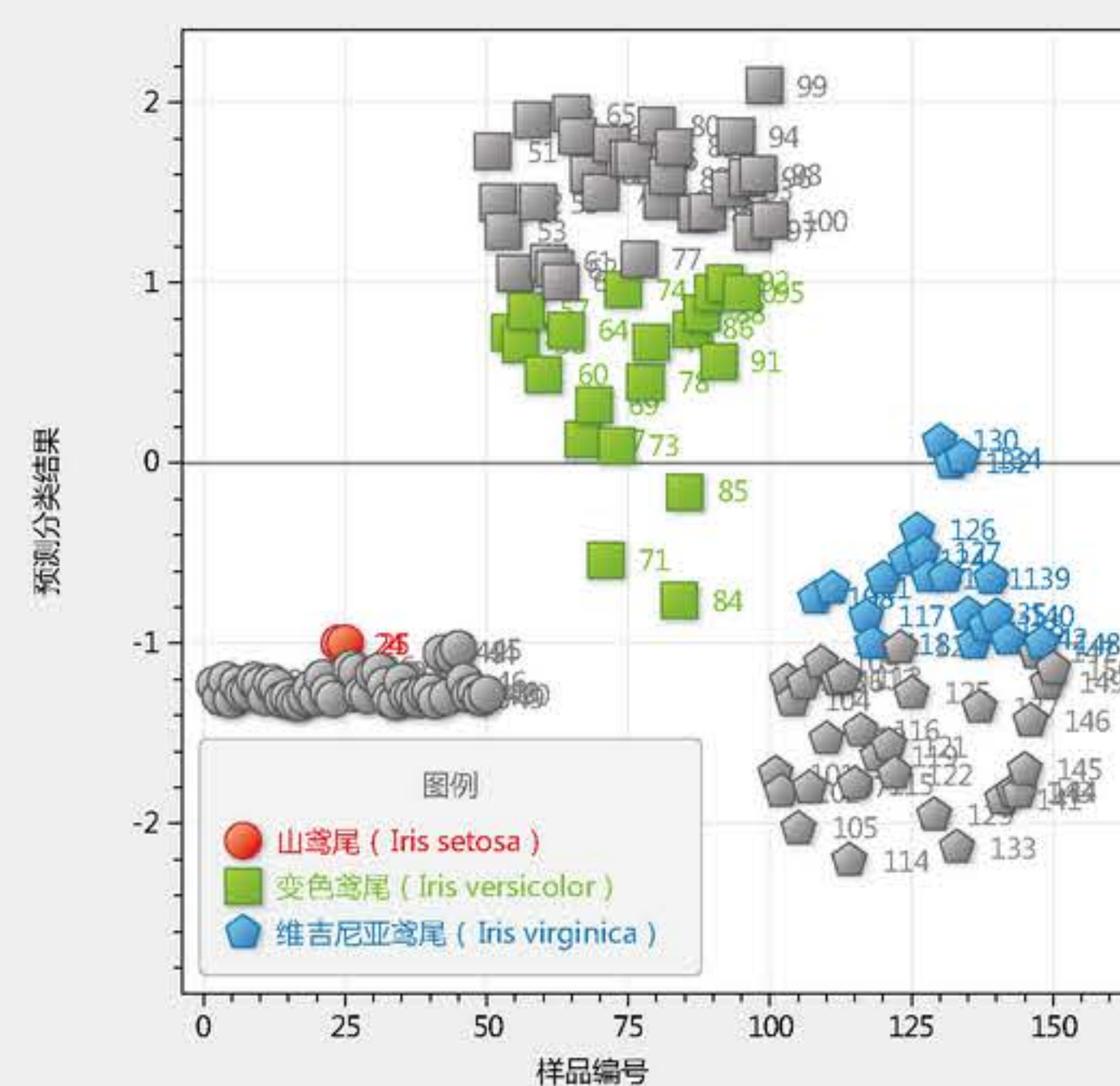
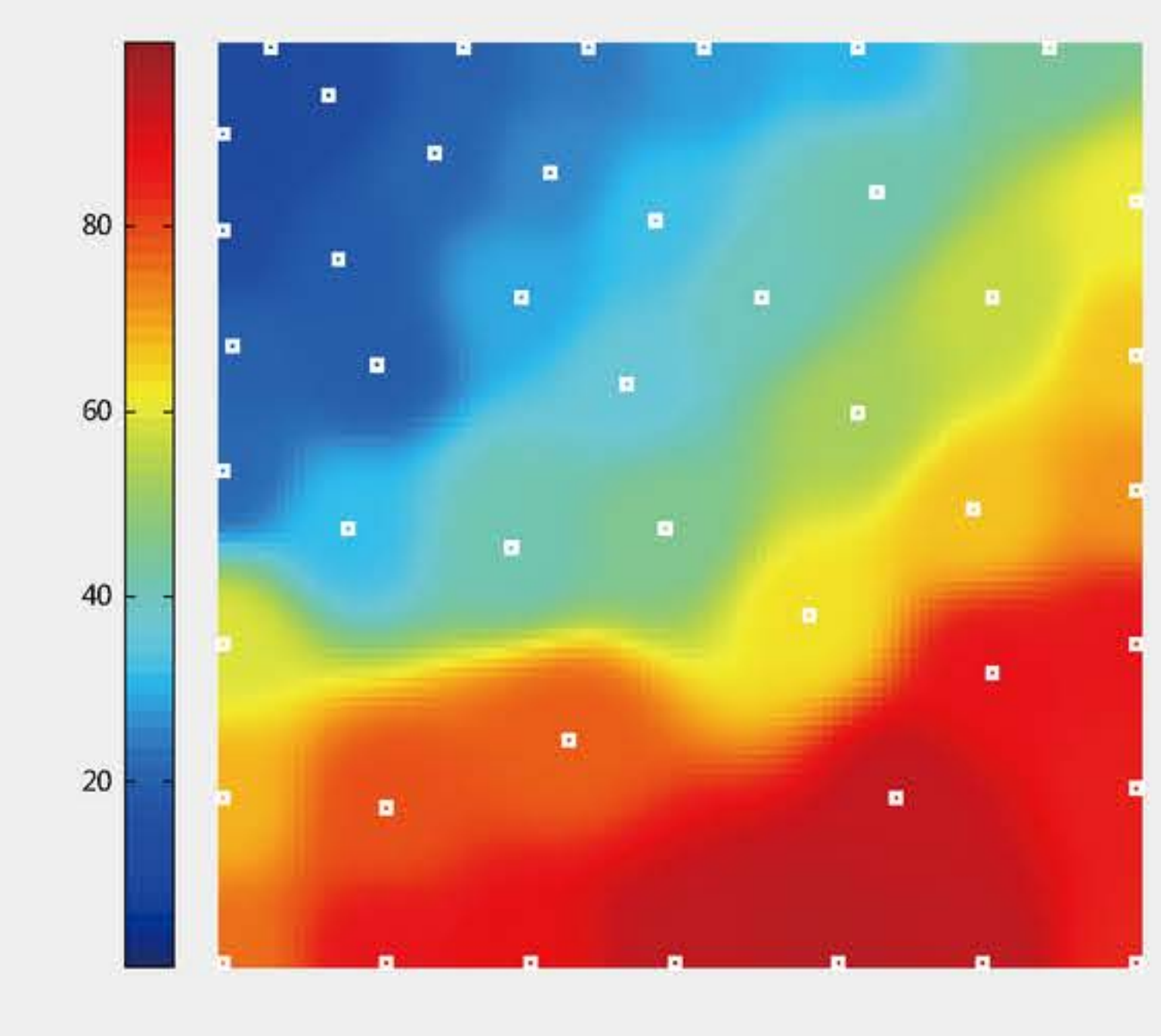
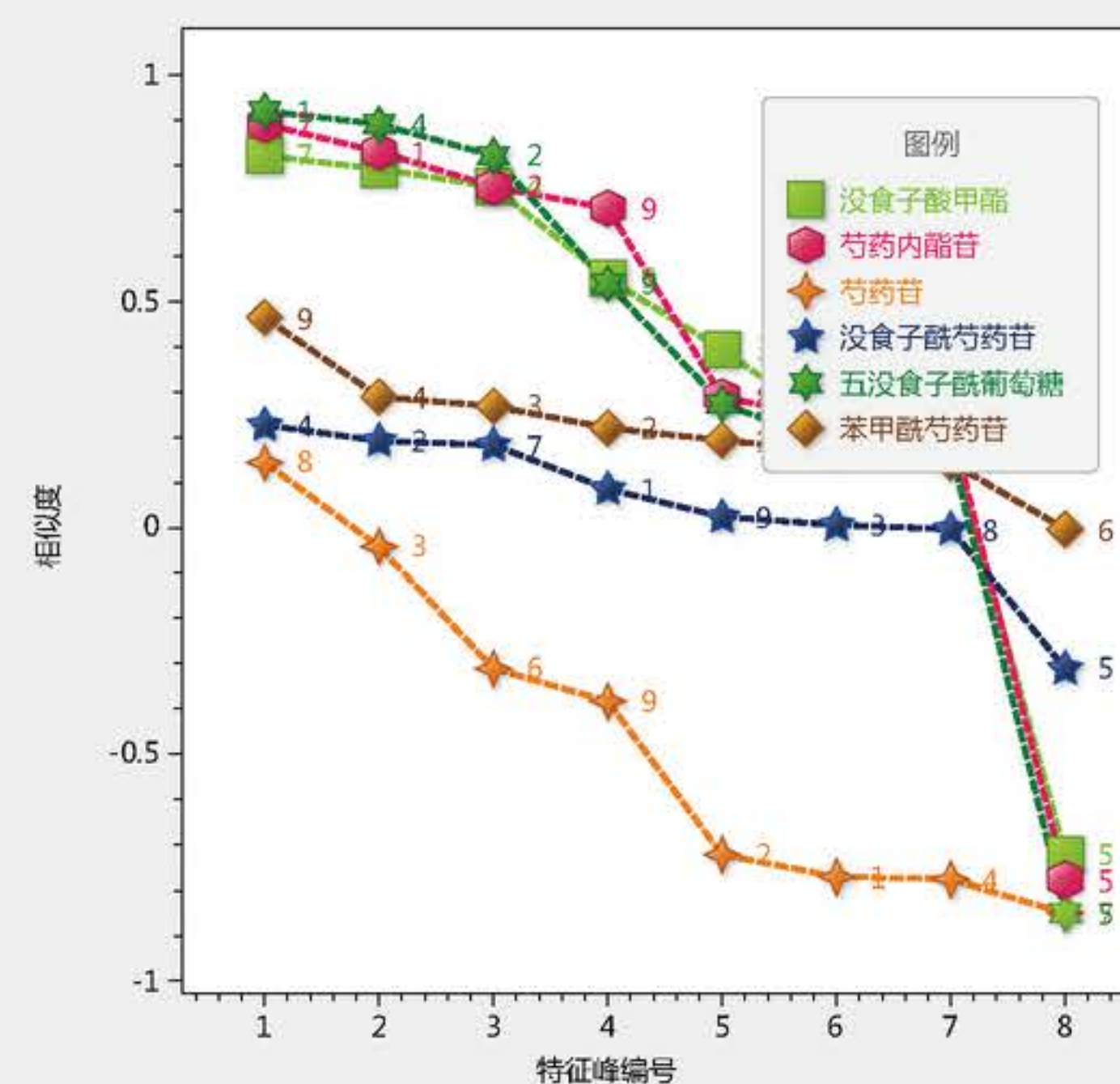
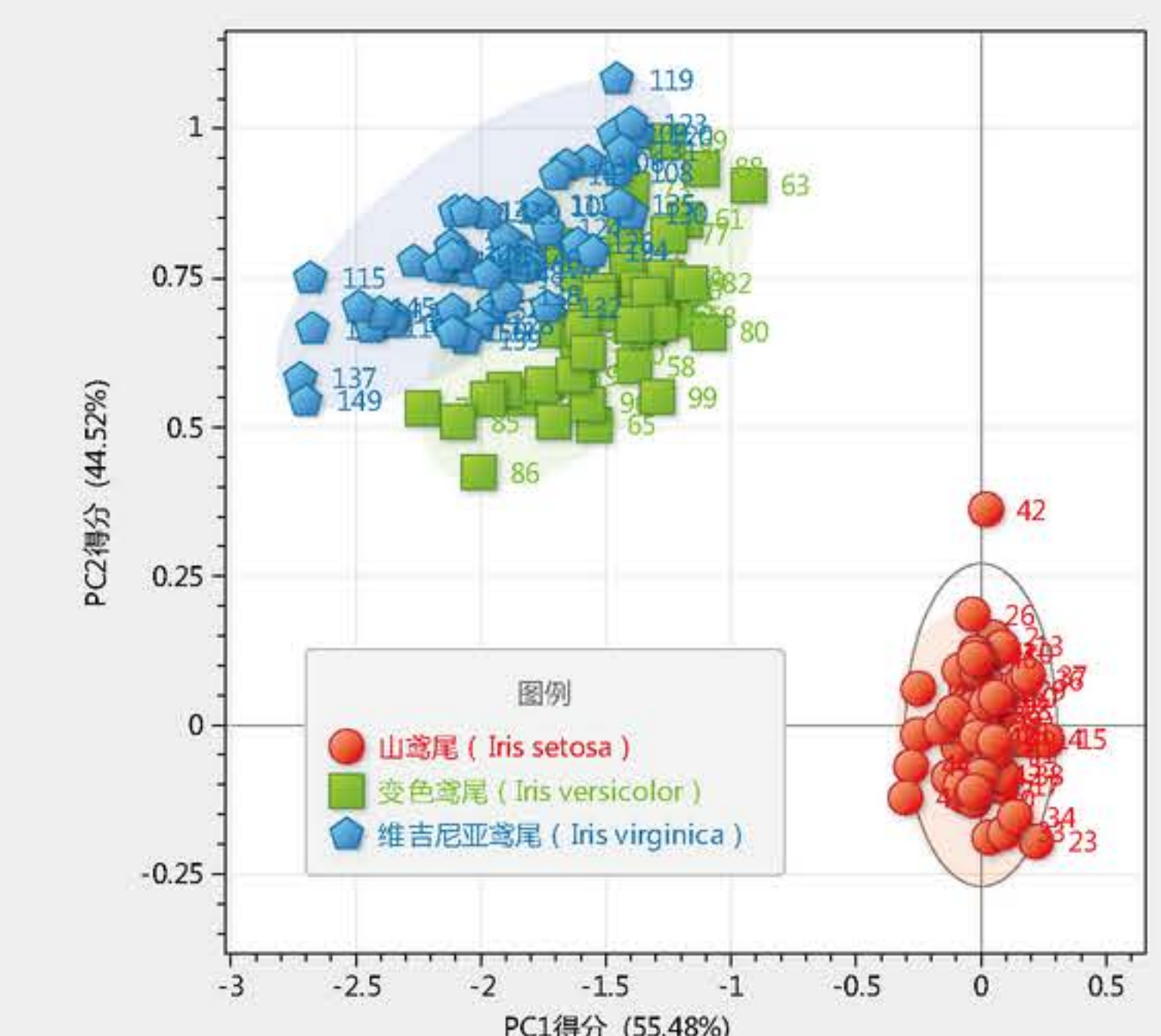
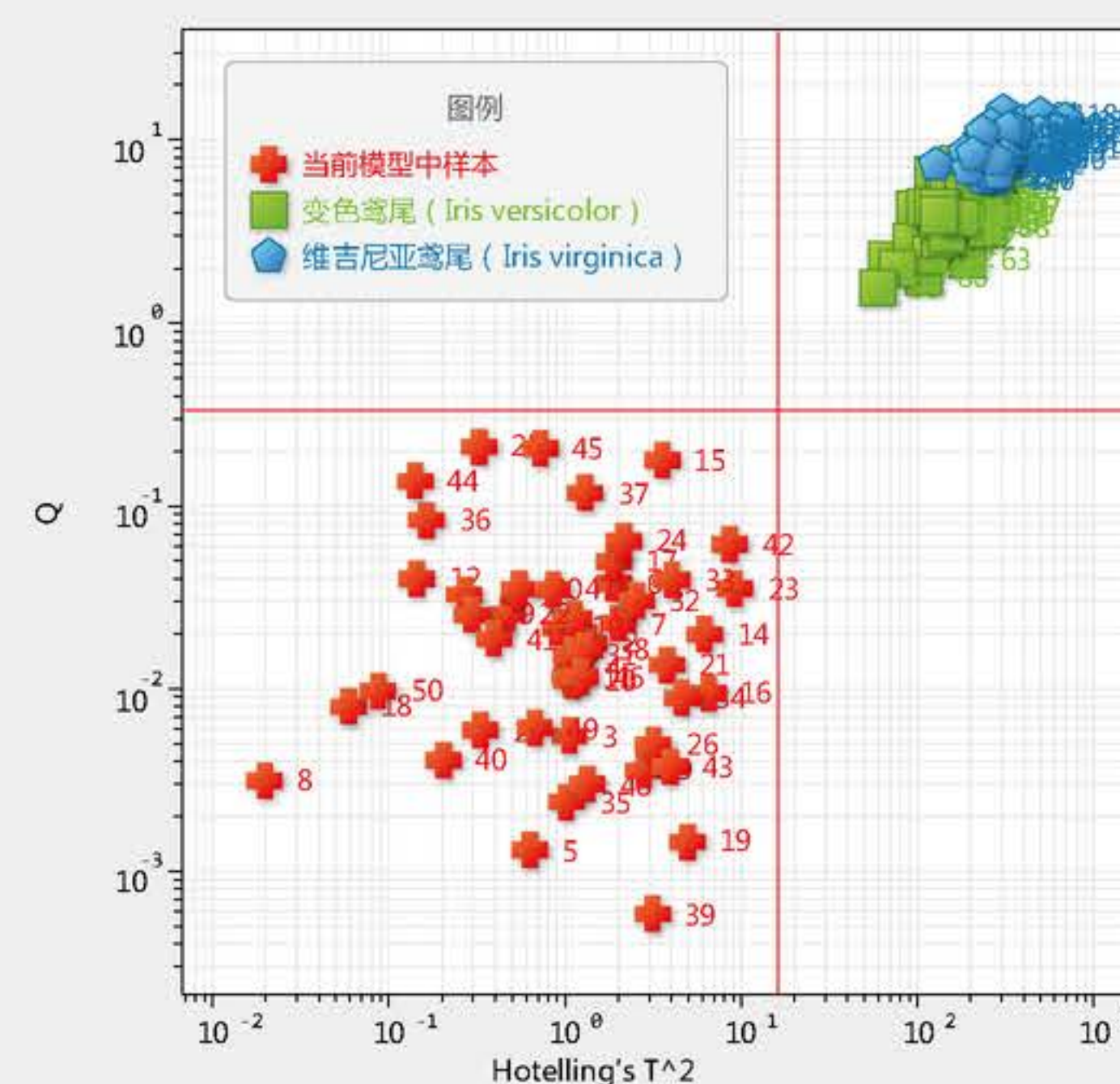
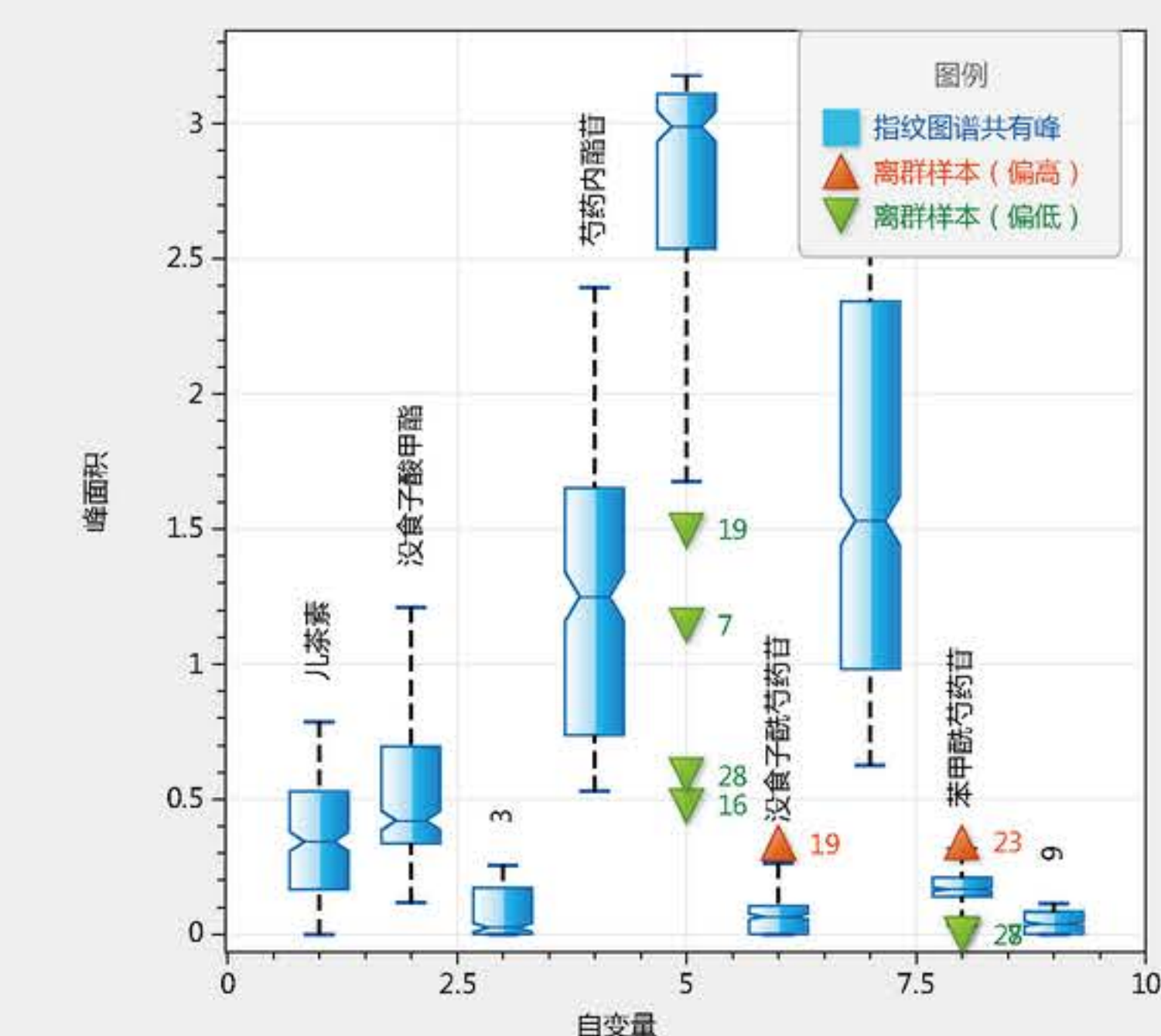
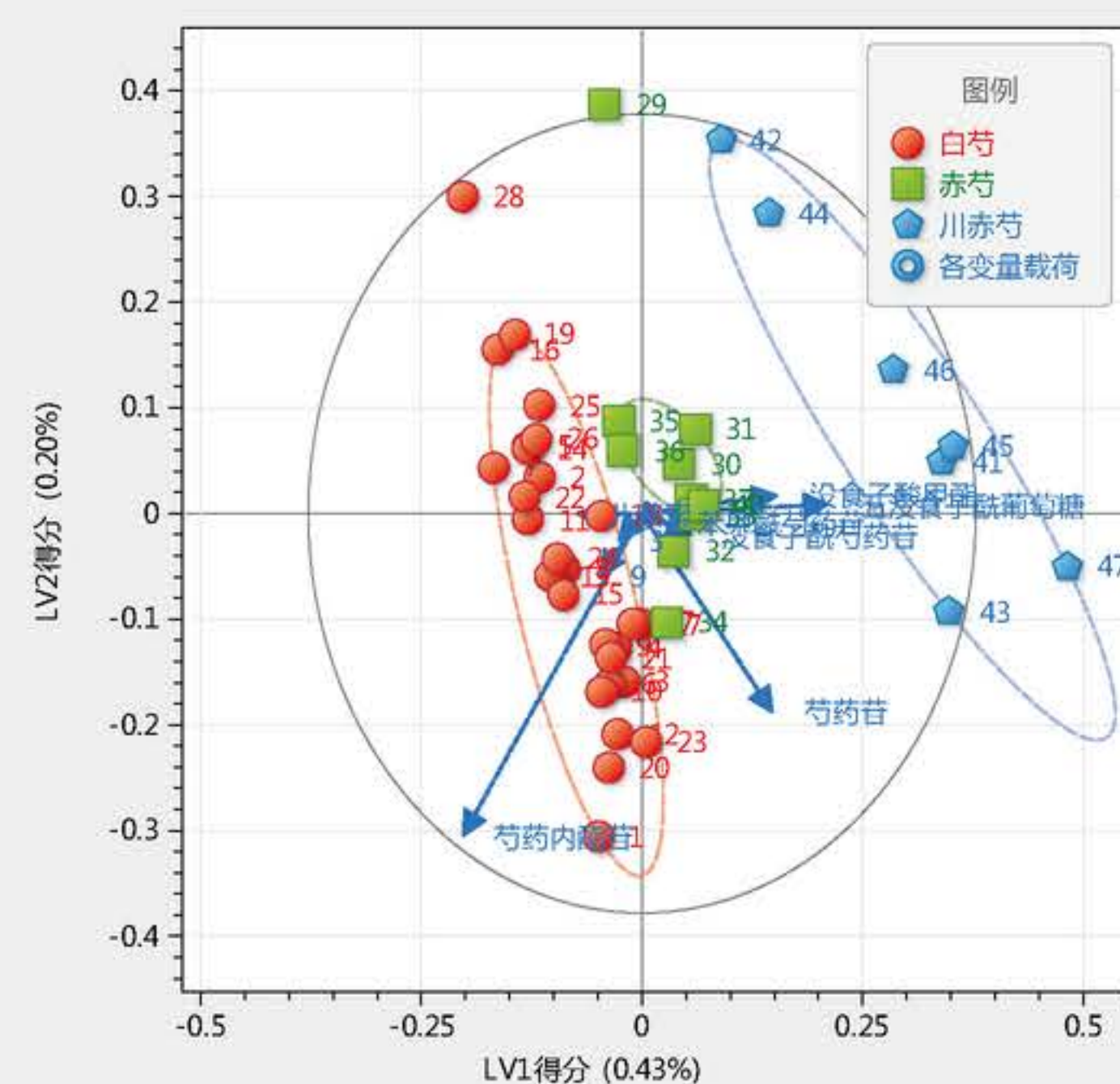
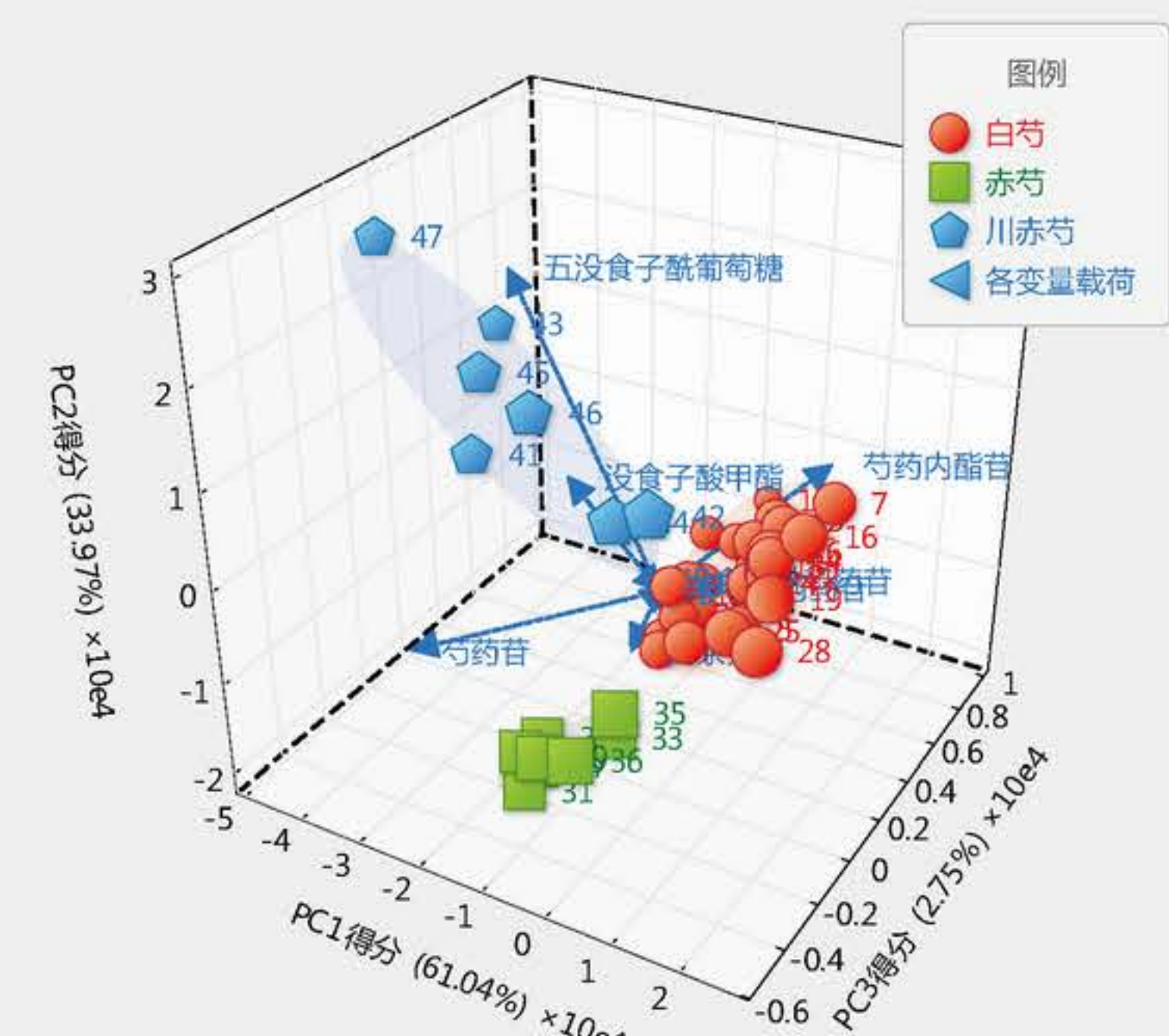
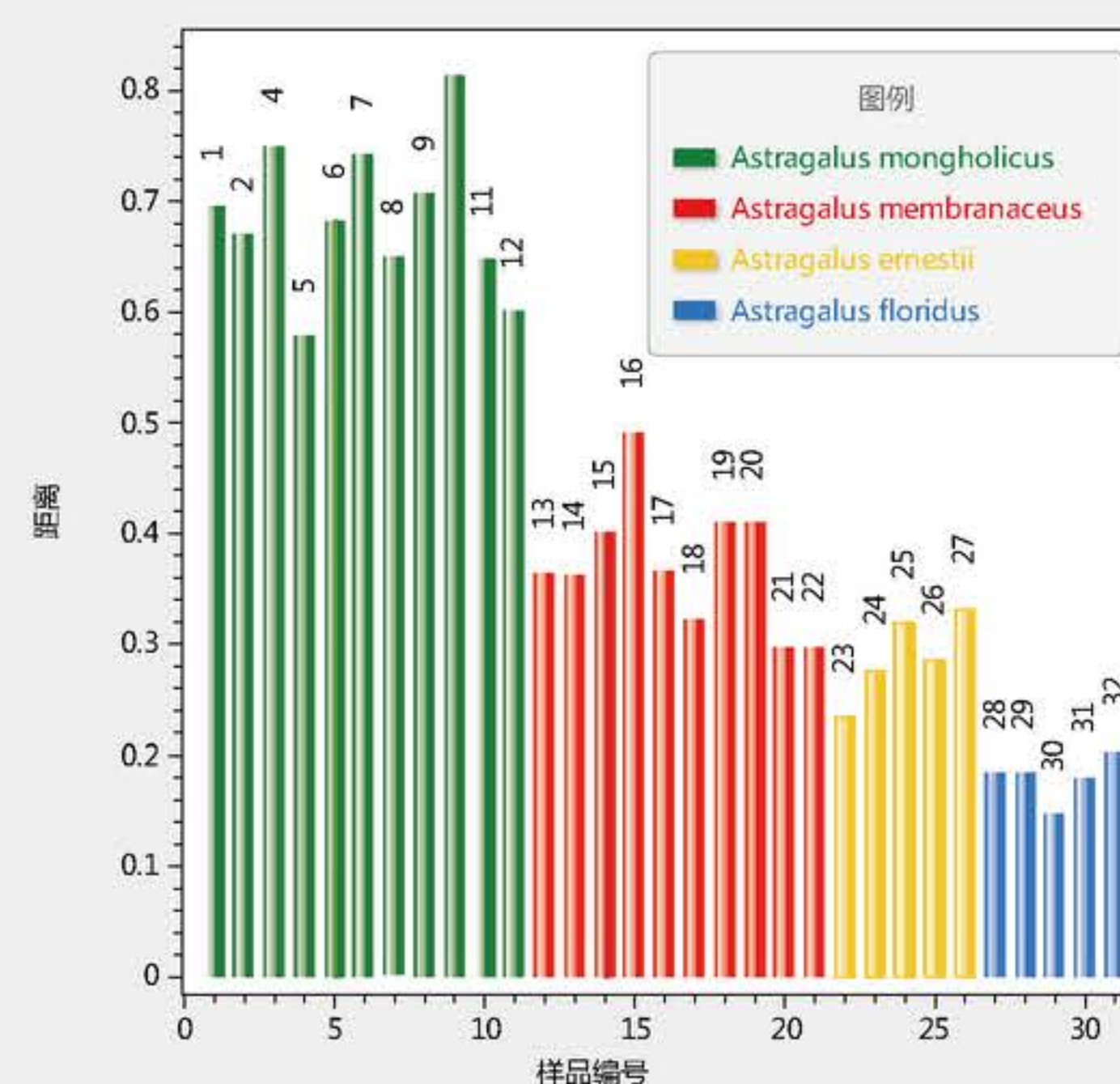
支持向量机与人工神经网络

ChemPattern™ 对于近年来所涌现出的机器学习领域的先进技术给予全面的化学计量学支持,包括支持向量机,以及人工神经网络为代表的人工智能等技术。这些方法在复杂体系分析中均展示了较好的适用性和优异的性能。

高内涵分析与数据挖掘

ChemPattern™ 化学计量学分析过程充分利用分析仪器高维数据所携带的全部有效信息,包括化合物性质、组成、分类等特征,并结合样本量化指标量测,从自变量分析、回归预测、分类判别等多重角度对样本进行深度数据挖掘,最终可获得过去采用传统数据分析方法所无法获知的关于复杂体系的内在质量、组成结构,以及演化规律等在内的各类丰富信息。

右图从左至右,从上至下依次为: 1、相似度分析柱状图; 2、PCA (主成分分析) 得分与载荷三维散点图; 3、PLS-DA (偏最小二乘判别) 得分与载荷散点图; 4、自变量箱状统计图; 5、SIMCA (簇类独立软模式法) 子模型判定限对数散点图; 6、SIMCA 子模型投影散点图; 7、自变量相关性趋势图; 8、SOM (自组织映射人工神经网络) 组分权重热图; 9、SVM (支持向量机) 子分类器支持向量散点图; 10、SVM 参数网格优化搜索结果等高线图。



10.025 ChemProfiles™分析仪器数据管理系统

- 色谱、质谱、光谱等海量分析化学数据管理、存储及检索功能
- 符合实验室信息管理系统 (LIMS) 要求
- 符合电子数据和电子签名法案 (FDA 21 CFR part 11) 要求
- 用户权限管理、数据电子签名、有效性校验、操作日志等功能
- 采用多线程工作方式, 支持批量样品设置, 以及编辑处理流程
- 用户报告支持自定义内容及格式, 所见即所得方式的打印预览

非线性编辑系统

- 分析结果同步更新, 对分析过程中各步骤的参数变化即时反馈
- 分析结果及图表动态交互式显示输出, 并可添加为静态快照

大规模数据可视化

- 多种分析仪器的海量数据及复杂统计图表的高质量可视化渲染
- 2D/3D 色谱和质谱图, 支持层叠、镜像、布尔、导数, 及剪裁等方式
- 统计图表包括 2D/3D 散点图、聚类图、直方图、等高线图 etc 十余种

数据快照与原始数据视图

- 数据快照功能支持图表排版、出版级质量的图表编辑生成
- 最大 4x4 布局的快照显示, 支持快照存取和后期编辑处理
- 所有图形及表格均可输出到 Word、Excel、PowerPoint 等软件
- 原始数据视图提供样品原始数据和输出结果的检索与再分析
- 所有类型的数据均可输出到任何第 3 方分析软件做继续处理

多国语言与数据库支持

- 用户界面、结果输出及分析报告均支持中、英等语言动态切换
- 支持自定义解决方案数据库, 提供数据加密、分类及检索功能

软件支持信息

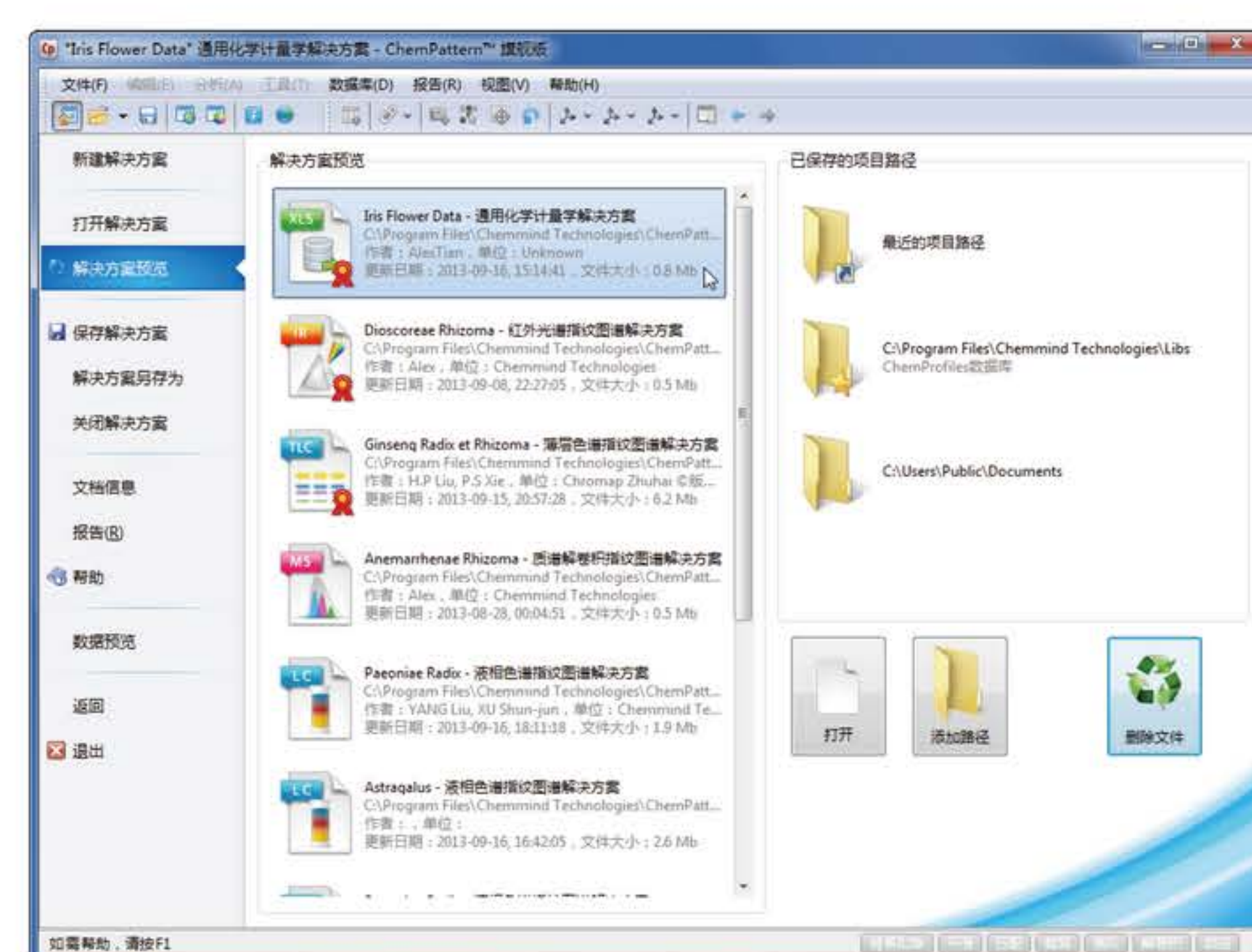
- 300 页彩色铜版纸产品手册、安装手册及化学计量学白皮书
- 不同仪器类型及分析化学分支领域的解决方案参考示例文档
- 软件可运行于 Windows XP/Vista/7/8 操作系统, 部署升级方便

应用领域

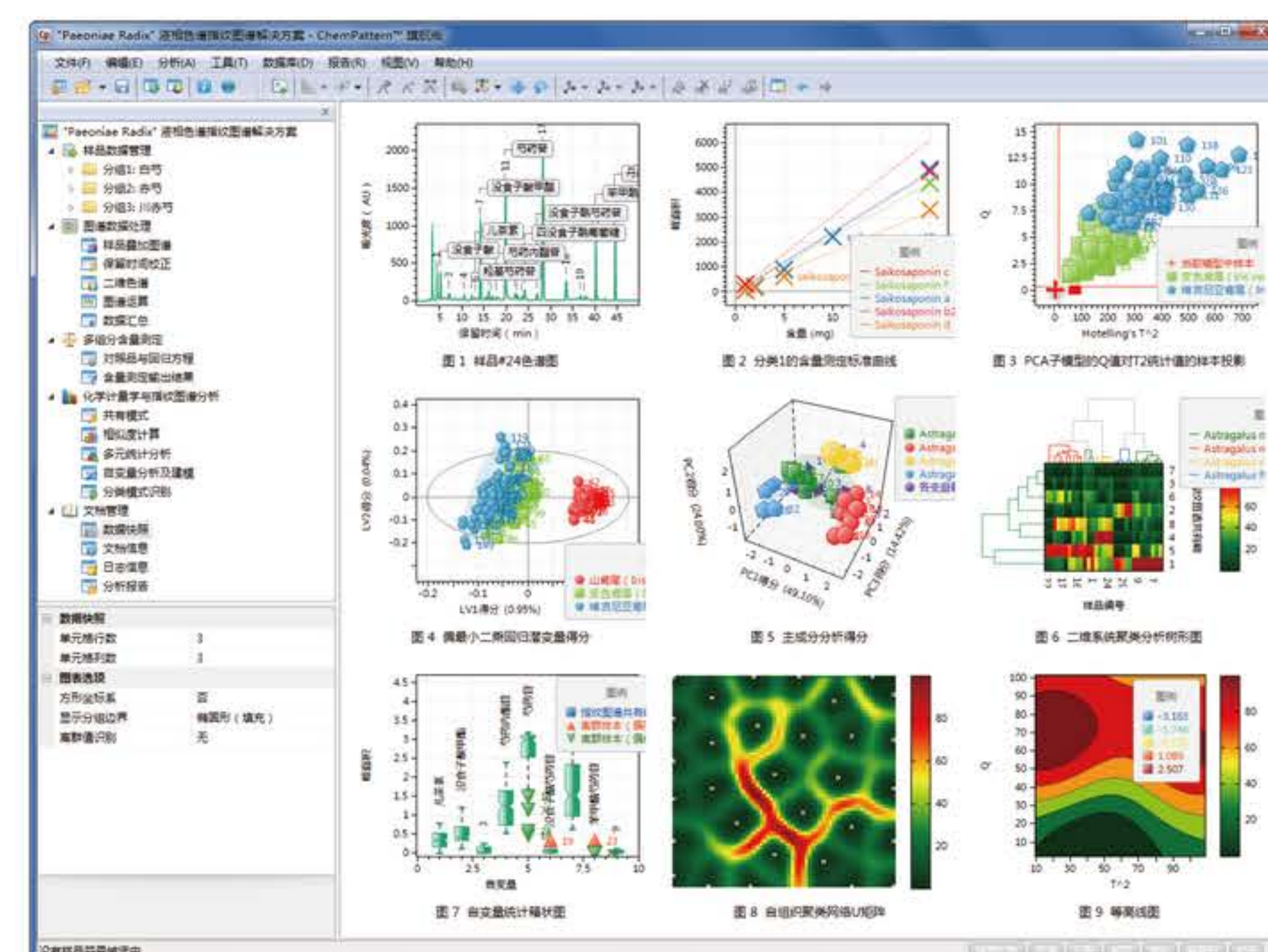
ChemPattern™ 先进化学计量学及化学指纹图谱系统解决方案软件可广泛应用于中药、化药、生物制剂、临床医学、食品、农产品、烟草、白酒、香精香料、石油化工、检验检疫、环境以及司法鉴定等相关分析化学分支领域。



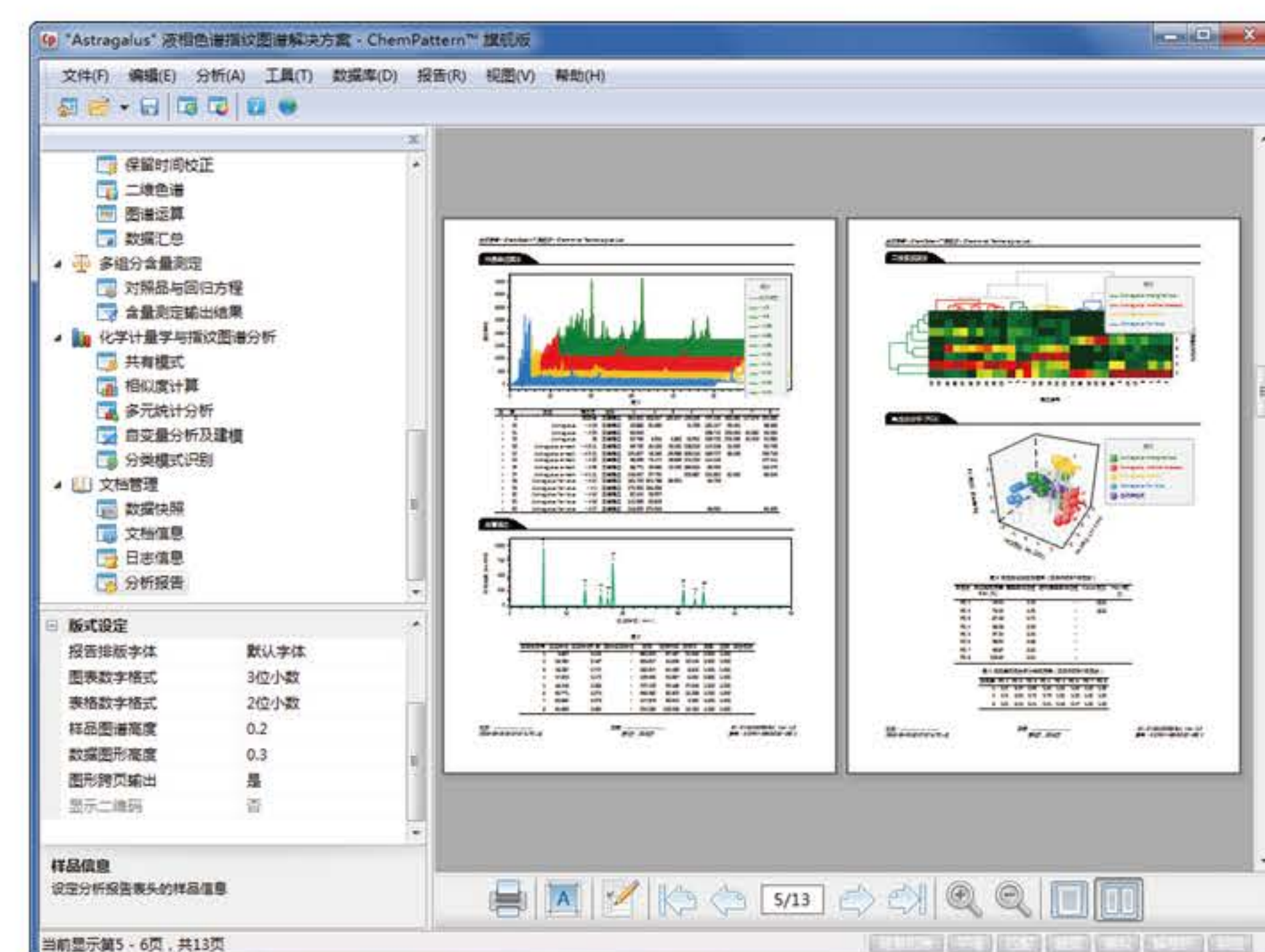
▲ LIMS/21 CFR part 11 用户登录界面



▲ 解决方案摘要预览及数据管理



▲ 数据快照管理及排版界面



▲ 自定义分析报告及打印预览



ChemPattern™
Advanced Chemometrics Solution

© 2012-2013 Chemmind Technologies. Chemmind and ChemPattern are registered trademarks of Chemmind Technologies Co., Ltd. Beijing.
Art.No. 103.01 v1.0, 2013年10月印于北京

科迈恩 (北京) 科技有限公司

中国 (海淀) 留学人员创业园
北京市海淀区上地信息路26号
中关村创业大厦400室

邮编: 100085
电话: +86 (10) 6298 7717
E-mail: info@chemmind.com

www.chemmind.com

Chemmind™
TECHNOLOGIES

創領智慧化學

全国免费服务热线

400-010-6001