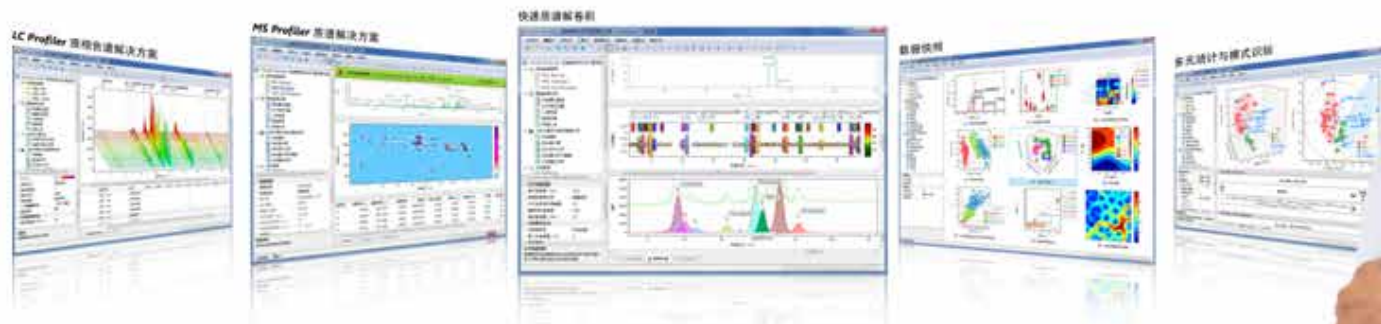


ChemPatternTM

先进化学计量学系统解决方案软件



科迈恩（北京）科技有限公司
2013.12.24



身为分析化学家的您是否在复杂体系分析过程中面临下列问题？

- n 面对UPLC、HRMS等高分辨仪器所生成的高维、高通量海量数据，由于缺乏得心应手的数据分析工具，导致样本中蕴藏的大量珍贵信息不是被丢弃就是被束之高阁
- n 实验室缺乏数学、统计学及计算机科学等交叉学科人才，面对纷繁冗杂的实验数据无法开展前沿的大数据分析，导致与激动人心的高质量研究成果失之交臂
- n 实验室拥有色谱、质谱、光谱及核磁共振仪等各类丰富仪器，但缺乏可兼容各种仪器数据类型的一站式管理和数据挖掘系统，导致所积累宝贵数据的再利用和结果深入整合存在困难
- n 面对不断增长的实验数据，在当前手工的数据整理和预处理等过程中消耗了过多的精力，同时过程缺乏规范化，操作极为繁琐且易出错
- n 您的分析工作涉及各类复杂或极端复杂样品，对于目前针对部分目标性化合物的常规定性、定量分析手段，您深感其对于复杂体系的全面评价，以及质量和安全评估而言力有不逮

提纲

1. 天然药物领域的复杂体系化学计量学研究
2. 分析化学学科的巨大变革
3. ChemPattern简介
4. 仪器分析解决方案简介
5. 化学计量学简介
6. 系统功能简介
7. 应用实例
8. 关于我们

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

天然药物领域的复杂体系
化学计量学研究

应用实例1 - 淫羊藿药材基源鉴别



▲ 淫羊藿 *Epimedium brevicornum* 原植物图



▲ 淫羊藿 *Epimedium brevicornum* 药材外形图



▲ 箭叶淫羊藿 *E. sagittatum* 药材外形图

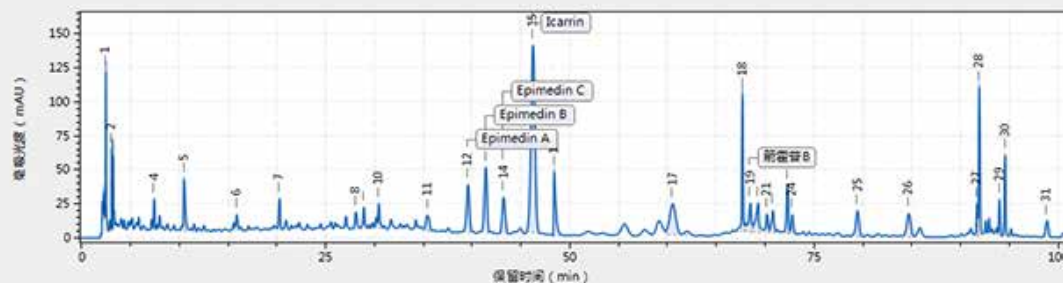


▲ 柔毛淫羊藿 *E. pubescens* 药材外形图

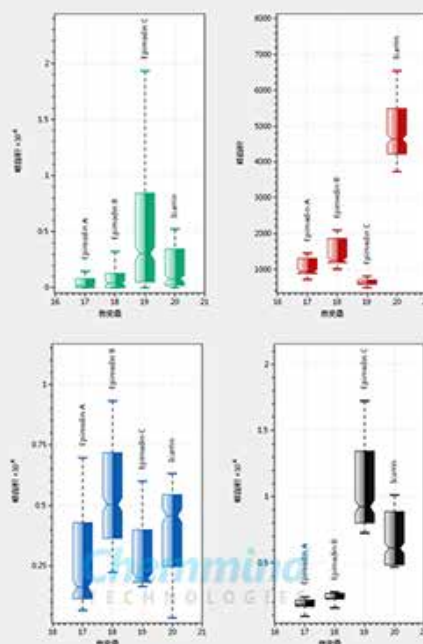


▲ 朝鲜淫羊藿 *E. koreanum* 药材外形图

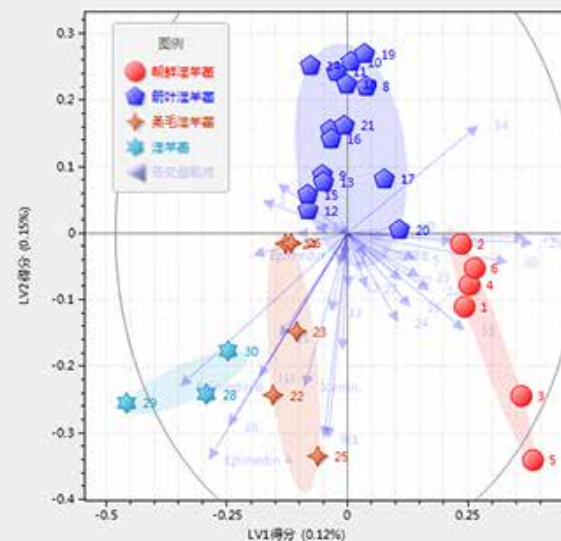
应用实例1 - 淫羊藿药材基源鉴别2



▲ 朝鲜淫羊藿 *E. koreanum* 药材色谱指纹图谱



▲ 箭叶淫羊藿、朝鲜淫羊藿、淫羊藿及柔毛淫羊藿中主要淫羊藿苷类化合物含量统计分析图

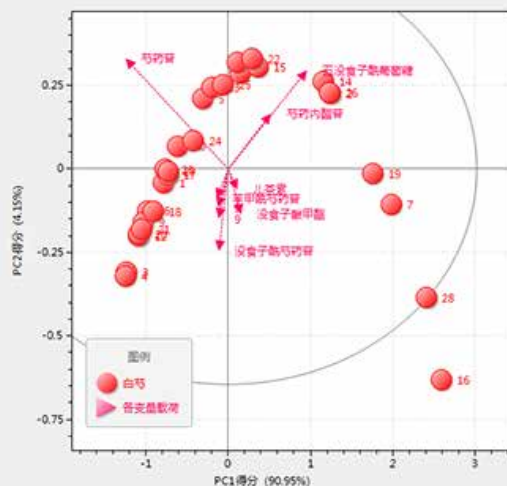


▲ 中国药典所收载的箭叶淫羊藿、朝鲜淫羊藿、淫羊藿及柔毛淫羊藿色谱指纹图谱的PLS-DA偏最小二乘判别分析结果。得分与载荷叠加图中显示在化合物种类和整体指纹图谱相似的前提下，不同来源的淫羊藿药材的化合物指纹特征存在显著差异和可用于基源鉴别的成分特征性规律。

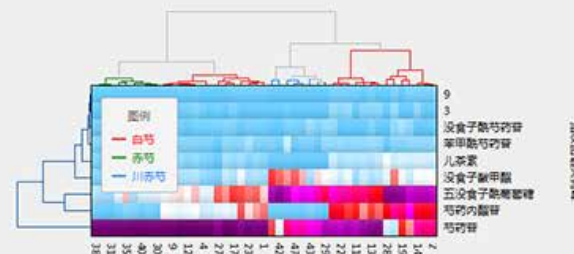
应用实例2-白芍饮片质量控制



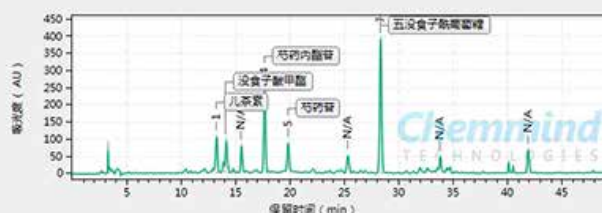
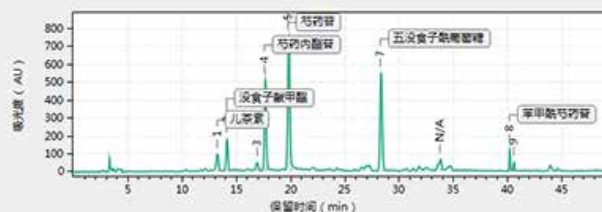
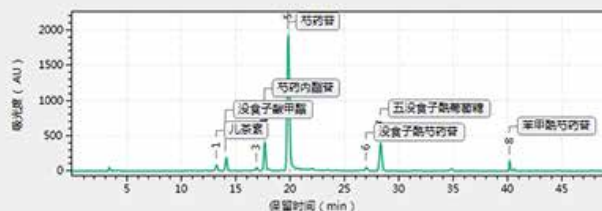
▲ 白芍药材外形图及芍药(*Paeonia lactiflora*)显微特征图



▲ 白芍药材色谱指纹图谱PCA主成分分析得分与载荷叠加图。显示随着炮制时间的增加，白芍饮片中的芍药苷含量和挥发性成分逐渐减少，同时芍药内酯苷等人工次生产物含量增加。随着时间的延长，进一步产生了其它小分子人工次生代谢产物。

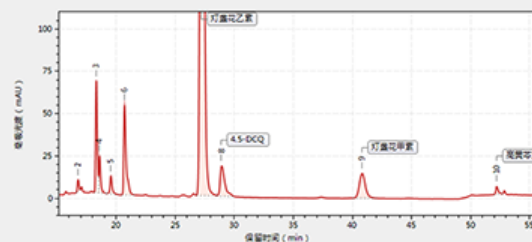


▲ 白芍、赤芍及川赤芍药材的色谱指纹图谱双向聚类分析图

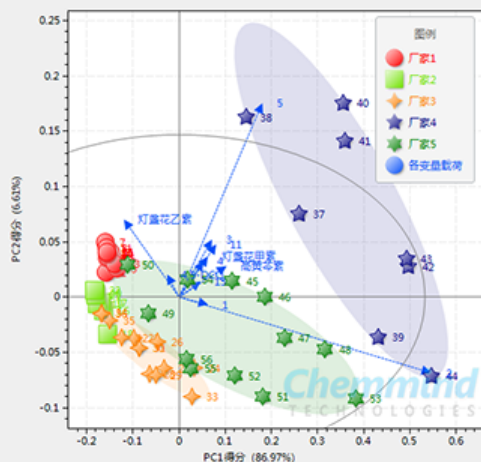


▲ 不同炮制工艺参数对白芍饮片成分影响的色谱指纹图谱示意图

应用实例3 - 灯盏花素注射液有关物质分析

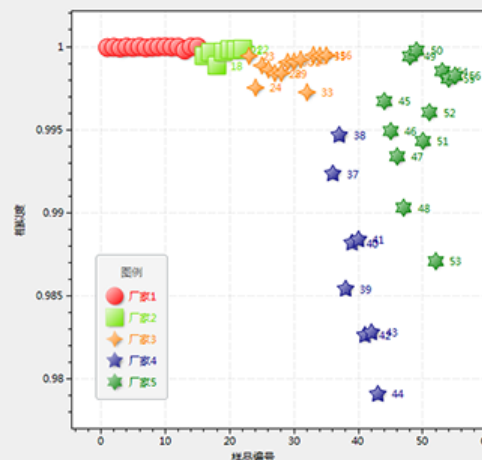


▲ 灯盏花素注射液 (5mL规格) 及其色谱指纹图谱局部 (右图)

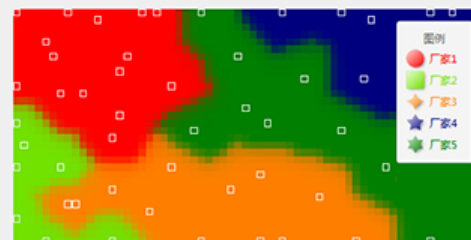


▲ 5个不同厂家灯盏花素注射液 (5mL规格) 色谱指纹图谱的主成分分析结果。显示在相似度高度一致 (>0.98) 的前提下, 各厂家产品的有关物质特征显示出显著和有规律的差异。此外一些厂家不同批号产品的投影分布范围相对较大, 提示主要成分含量, 以及生产工艺或质量控制相对其它厂家存在差距。

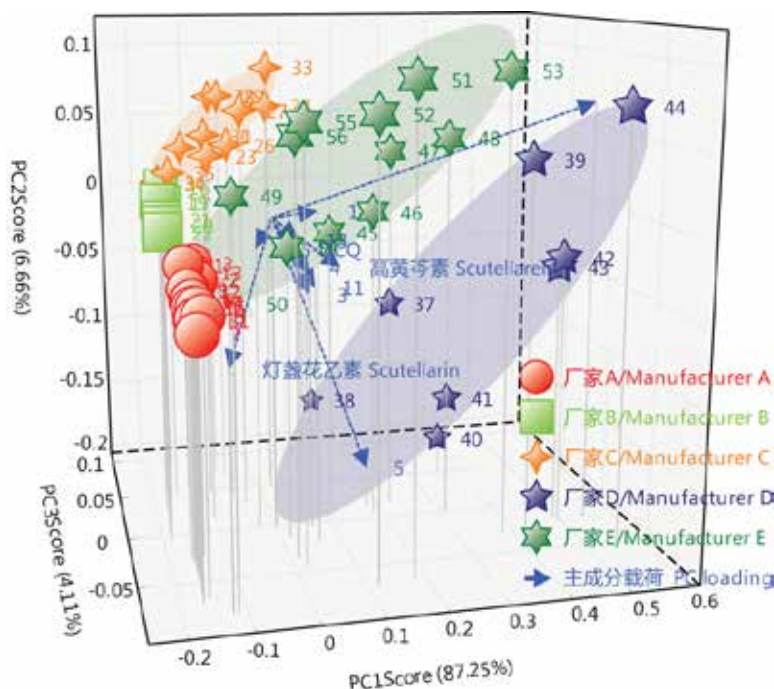
► 5个不同厂家灯盏花素注射液 (5mL规格) 色谱指纹图谱的自组织投影人工神经网络聚类分析结果。



▲ 5个不同厂家灯盏花素注射液 (5mL规格) 色谱指纹图谱夹角余弦相似度分析结果

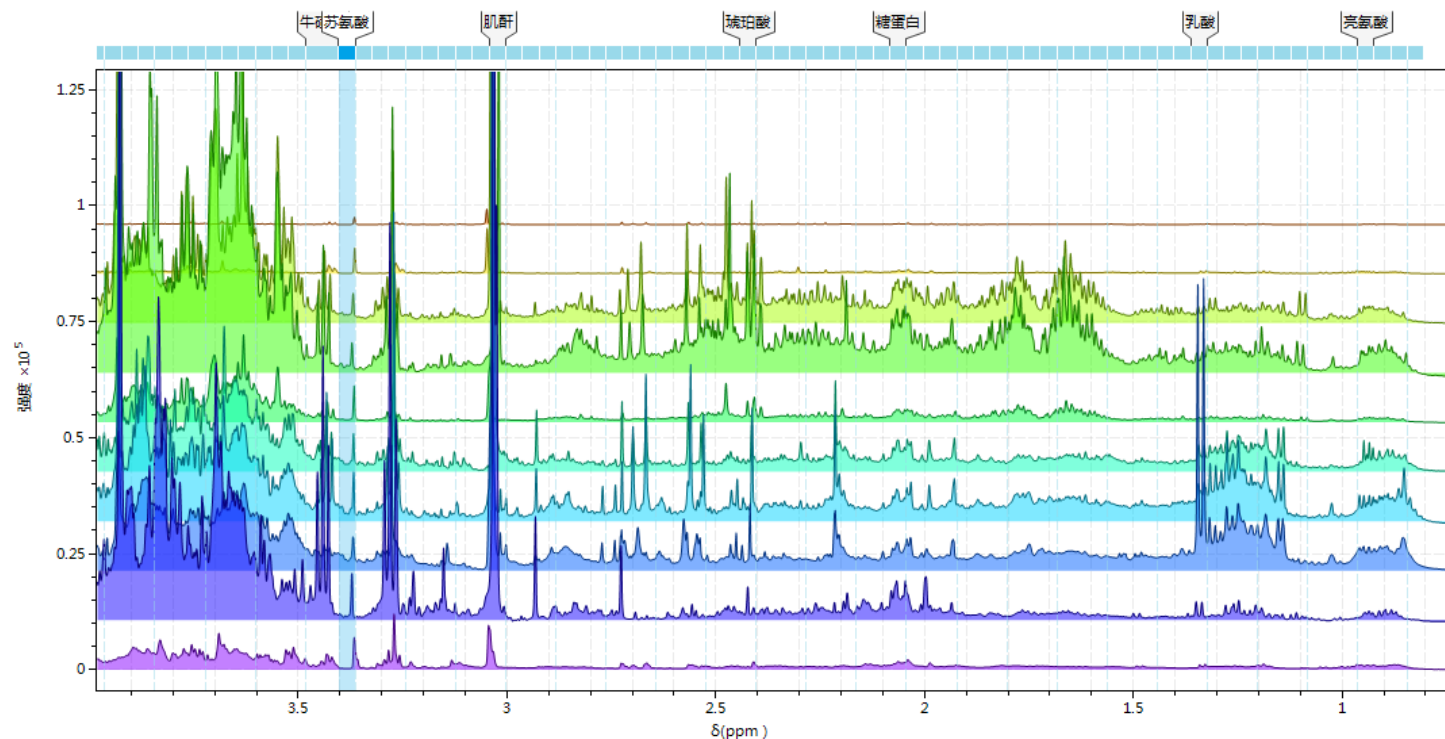


应用实例3 - 灯盏花素注射液有关物质分析



进一步分别采用KNN及SVM对样品的模式识别进行了考察，通过留一法交叉验证和网格搜索优化建模参数。结果显示最终所建立模型的正确识别率均为100%，可用于未知样品的预测。

应用实例4 - 中药饮片血清代谢组学分析



空白组、模型组和对照组的模式识别与差异分析

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

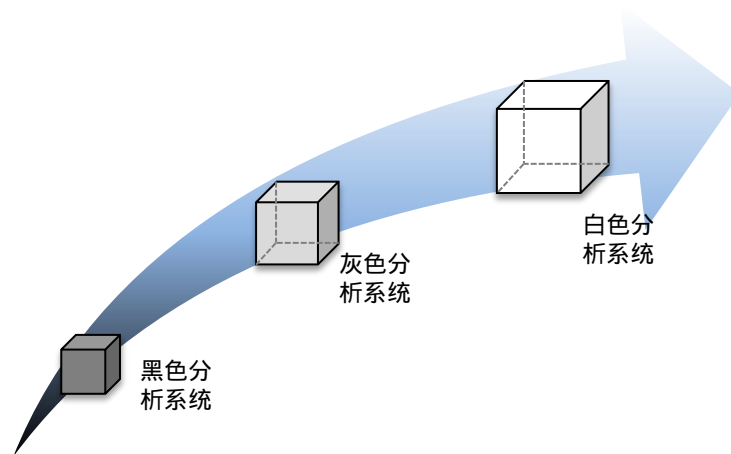


分析化学学科的巨大变革

第3次变革 - 1 复杂体系分析

1、复杂体系分析

复杂体系具有多样性、不确定性和基质效应等特点。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。



复杂体系分析所涉及领域

- ü 临床医药
- ü 代谢组学
- ü 食品安全
- ü 烟草白酒
- ü 环境监测
- ü 石油化工
- ü 国土安全
- ü 等等



第3次变革 - 2大数据分析和干法实验

- 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。
- 分析化学正迎来“大数据时代”的到来。譬如采用高维、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。
- 先进数据分析技术的采用已成为当前分析化学各分支学科所共同面临的紧迫任务。

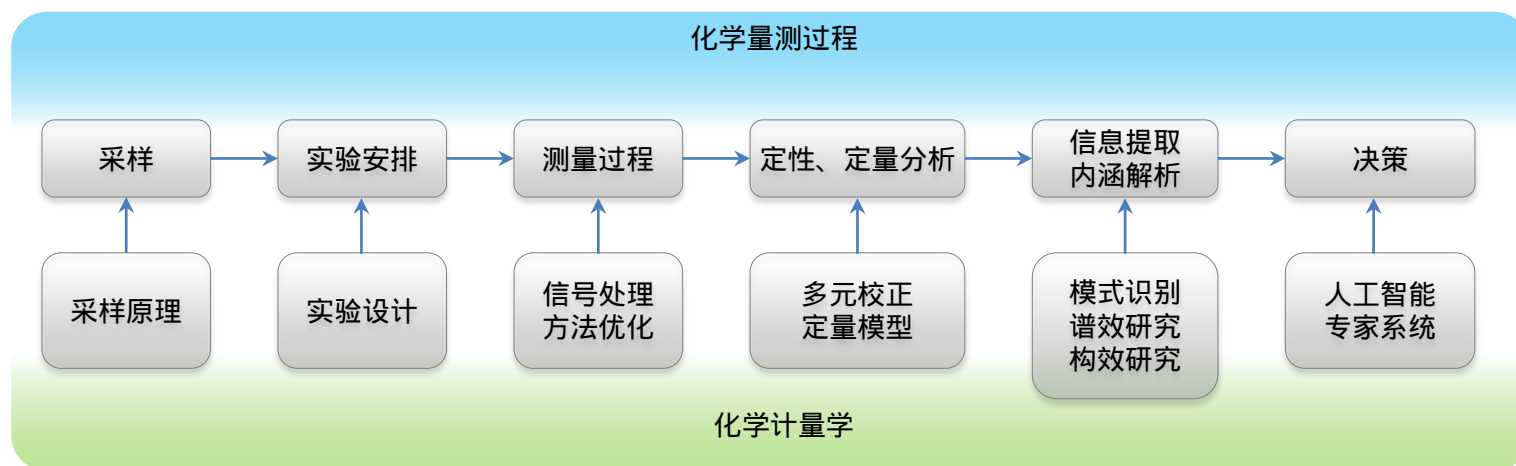
第3次变革 - 3跨仪器平台数据整合

- 当前种类繁多的各类分析仪器数据格式兼容困难，汇总及管理困难
- 各类仪器所获得的化学量测数据呈散在和无序状态，还未形成有机深入整合，不利于数据挖掘
- 定量模型的跨仪器传递和维护在复杂体系分析中显得更为必要

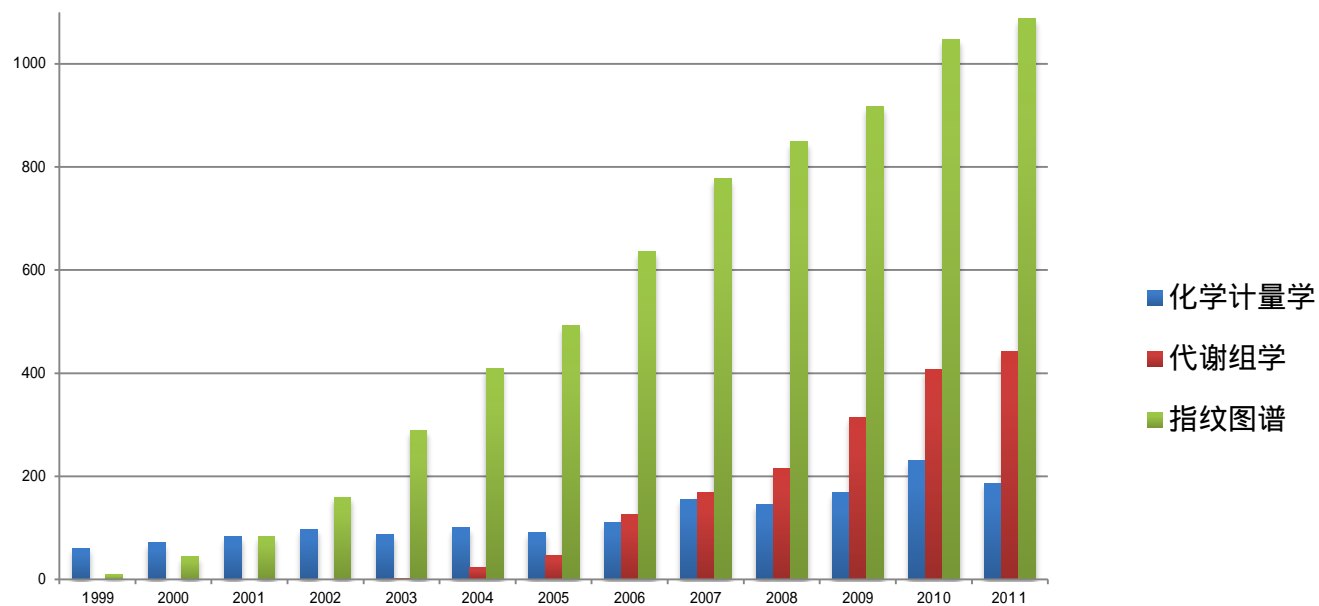
化学计量学

- 作为一门化学分支学科，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巨大变革，就与化学计量学有着密切的联系。
- 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）

化学量测过程与化学计量学的关系



化学指纹图谱技术



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



CHEMPATTERN简介

ChemPattern简介

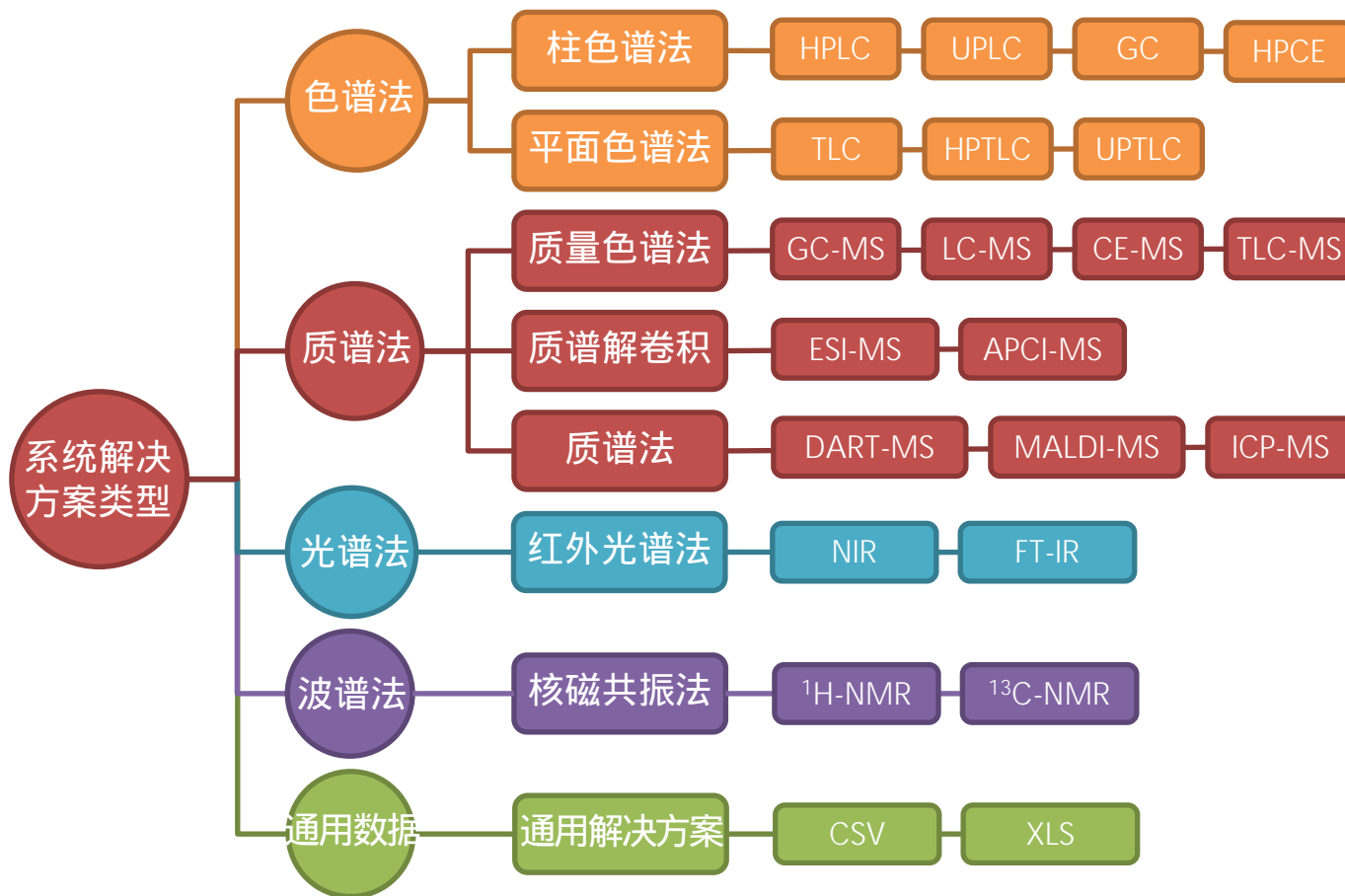
复杂体系的一站式的解决方案系统解决方案

- ü 复杂体系高通量、高内涵解析
- ü 产品定性、定量质量评价和过程控制
- ü 化学指纹图谱分析
- ü 代谢组学分析
- ü 非目标分析
- ü 快速无损分析
- ü 替代对照品法含量测定
- ü 有关物质分析与肽图分析
- ü 大数据挖掘

复杂体系跨仪器平台分析系统解决方案

- | 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架构融合
- | 通过标准数据接口技术提供常用的色谱、质谱、光谱和核磁共振波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

ChemPattern所支持的分析仪器类型



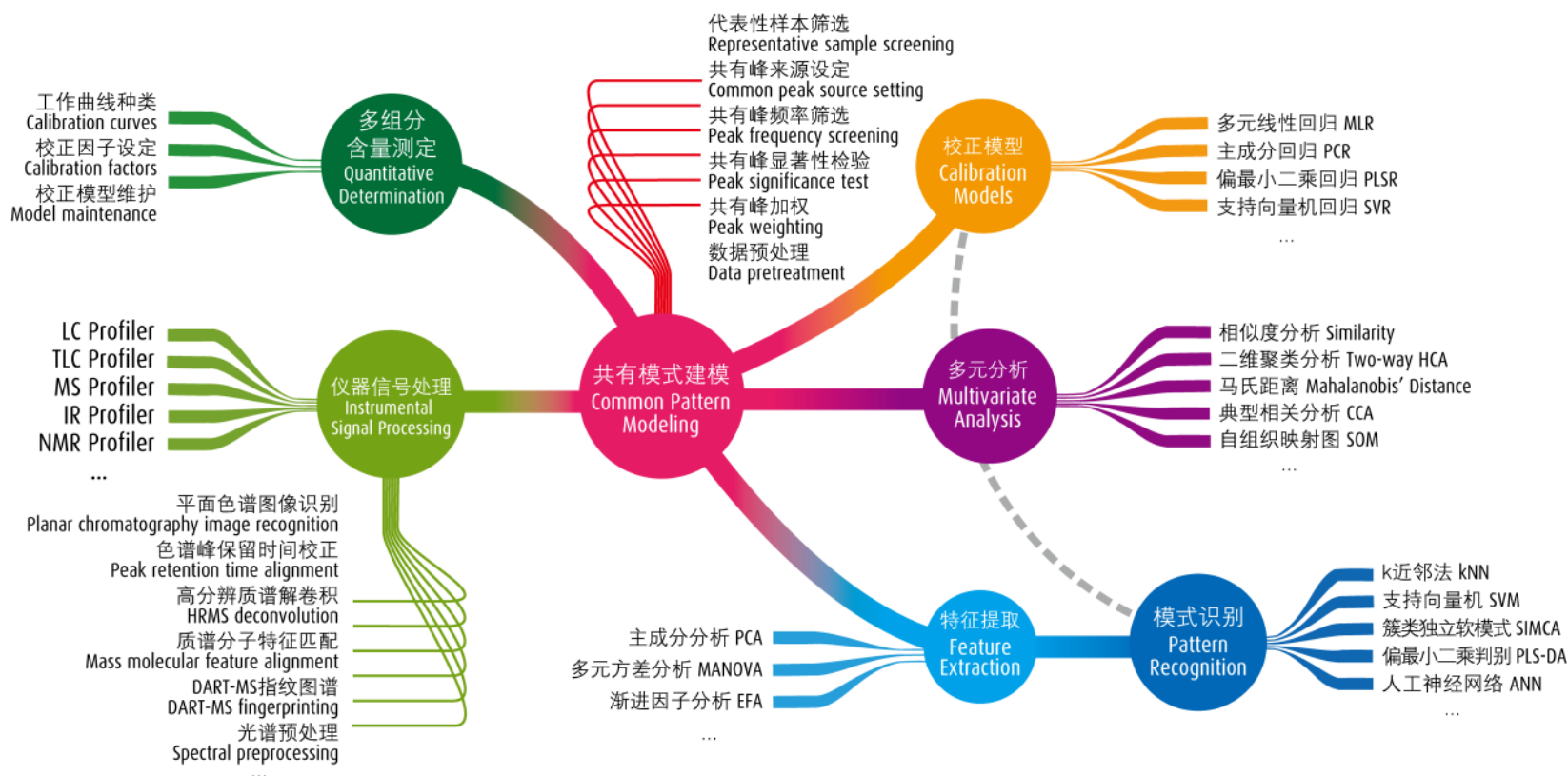
复杂体系先进质量控制系统解决方案

- 可为真伪优劣快速鉴别、食品及药品安全筛查与风险评估，以及评价性抽样等各类定性鉴别和定量分析等日常分析工作和检测任务提供技术支撑平台。
- 通过采用ChemPattern复杂分析体系质量控制技术，可对整个生产环节的产品内在质量加以全面和深入分析，可在现有标准的基础上进一步提高产品的质量及可控性，对于完善生产企业工艺流程、提高生产过程监控管理水平等方面都具有显著的促进作用。
- 软件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。

复杂体系大数据分析系统解决方案

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。

ChemPattern设计架构图



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

LC PROFILER
柱色谱法解决方案

柱色谱法解决方案

适用于

- 高效液相色谱法 (HPLC)
- 超高压液相色谱法 (UPLC/RRLC)
- 高效毛细管电泳法 (HPCE)
- 气相色谱法 (GC)

新建解决方案界面



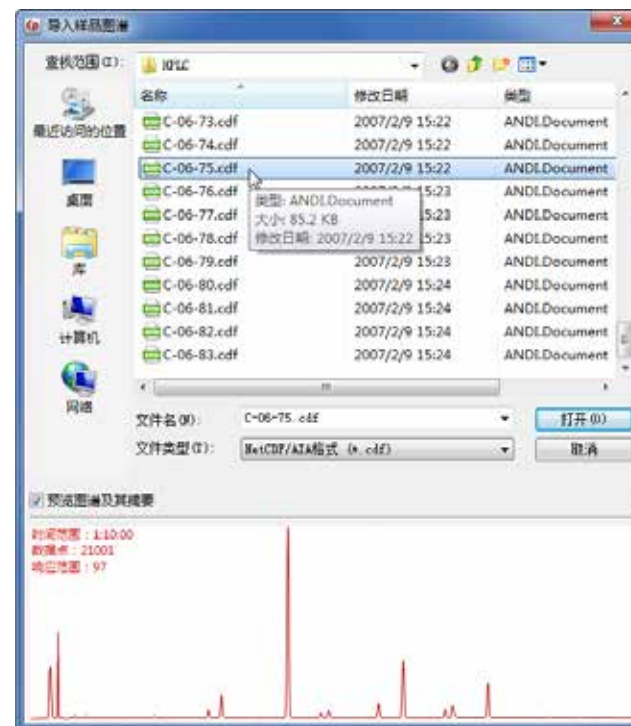
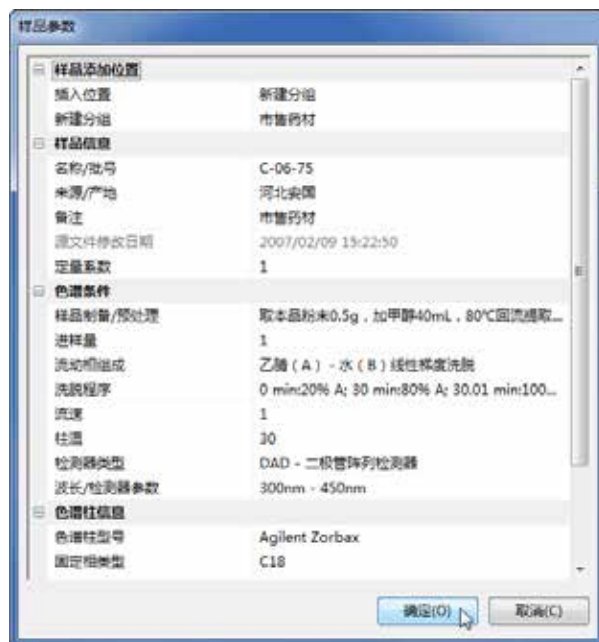
柱色谱解决方案功能组成

- 样品数据输入输出接口
- 样品属性设定及分组*
- 样品视图及编辑*
- 图谱数据处理
- 图谱比对分析*
- 指纹图谱共有模式*
- 保留时间校正*
- 多组分同步含量测定*

*:ChemPattern特有功能

样品导入

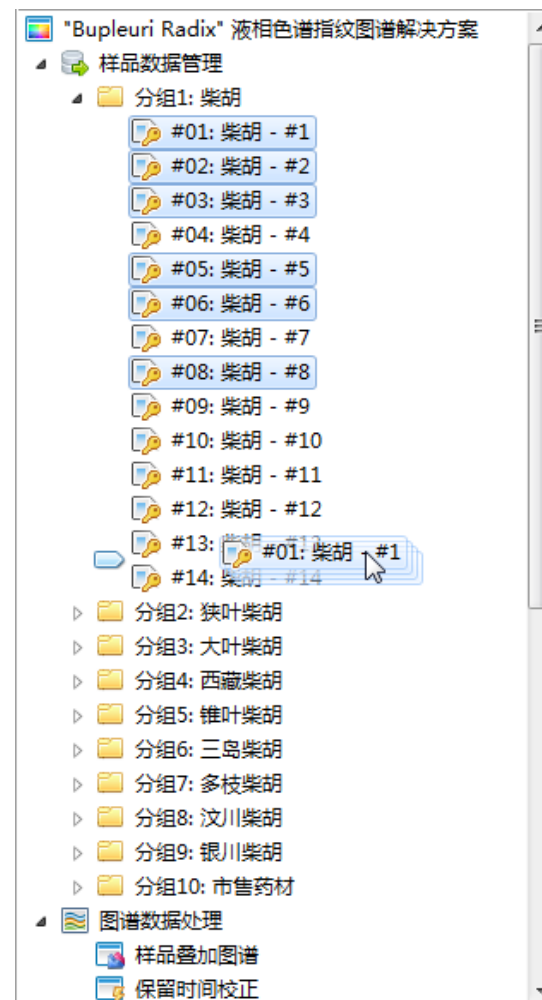
- 支持CSV及ANDY (AIA) 格式，兼容所有主流色谱工作站导出数据
- 符合LIMS管理系统要求



样品属性设置及分组

ChemPattern提供丰富实用的样品管理功能：

- 样品所属分类设定
- 样品所属的校正曲线分组
- 代表性样品、化学对照品属性设定
- 是否在叠加比较图中进行显示
- 是否参与化学计量学计算
- 是否参与模式识别训练
- 等等





图谱数据处理及操作

- 去背景
- 自动积分、手动积分
- 剪裁
- 平滑
- 合成

所有图谱操作均支持批处理模式

图谱合成

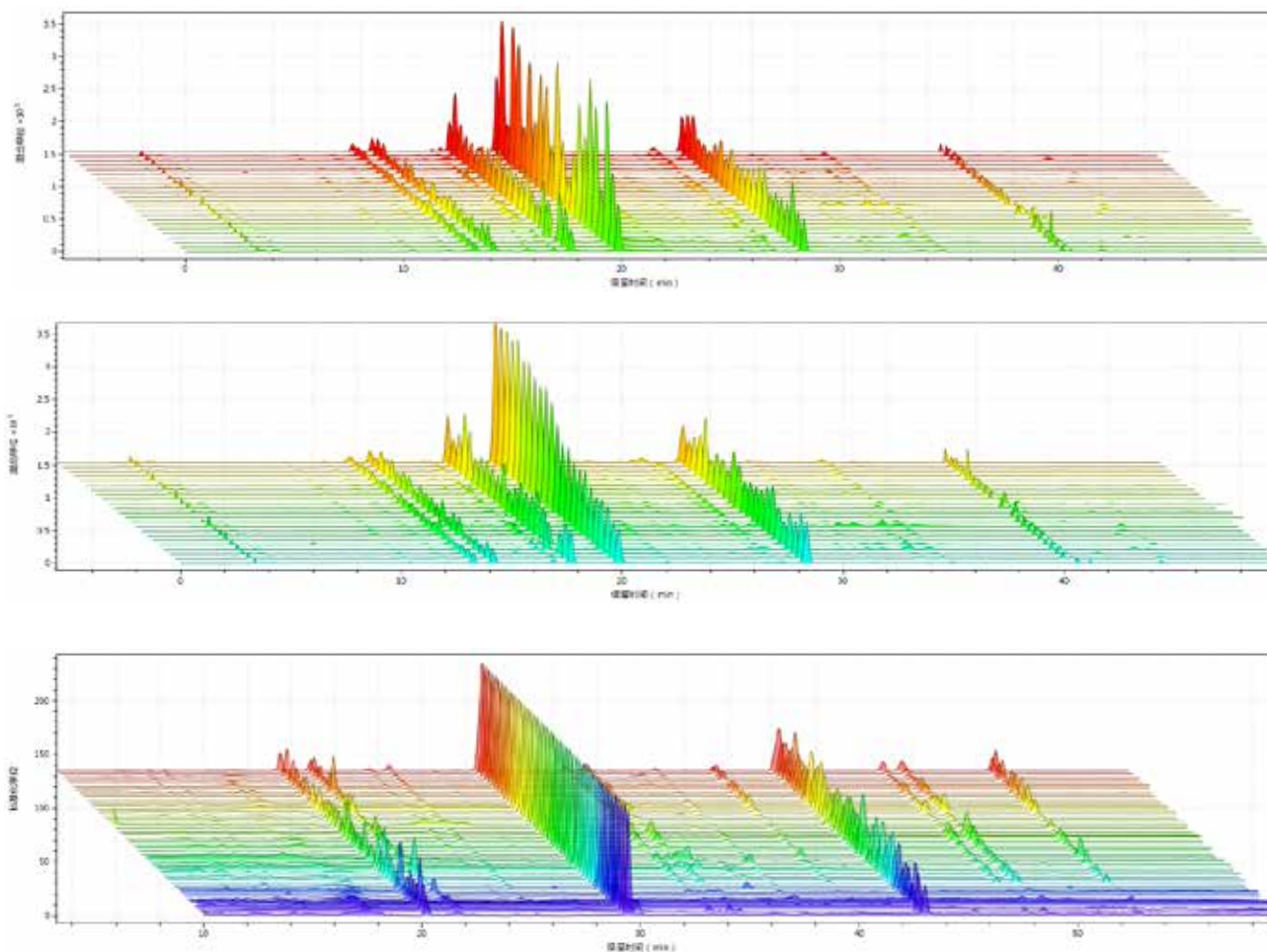
图谱合成可起到数据整合与模拟分析的目的，具有一定的实用价值：

- 将样品的多个波长下的测定图谱合并为一张图谱进行分析；
- 将样品针对不同类型化合物所分别测定的图谱串联作为一张图谱进行分析；
- 对双样法等重复测定的样品图谱求其平均谱；
- 将不同来源样品之间按比例进行计算机模拟勾兑。

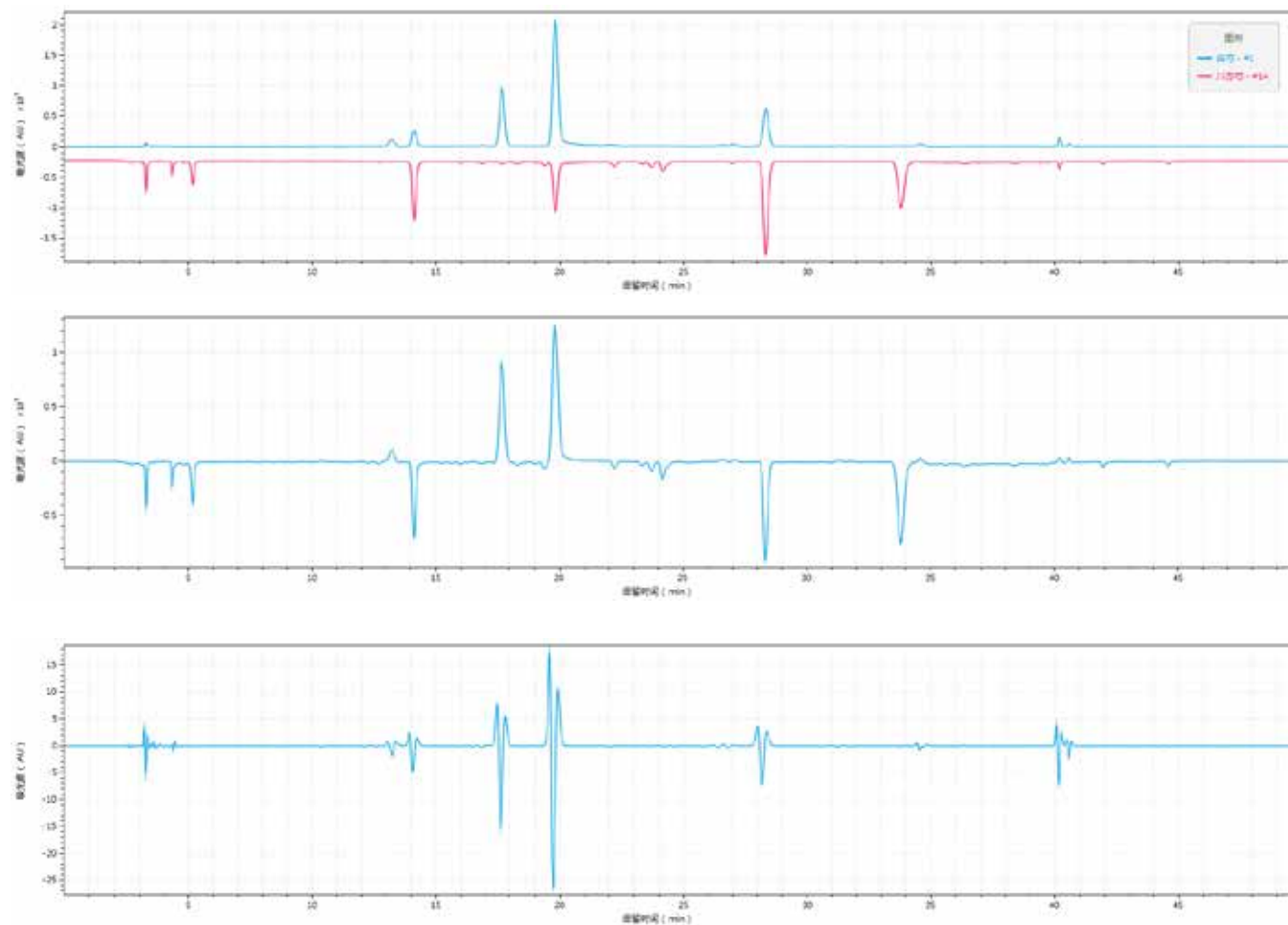
图谱比对分析

- 叠加图比对
- 图谱运算
- 二维色谱图

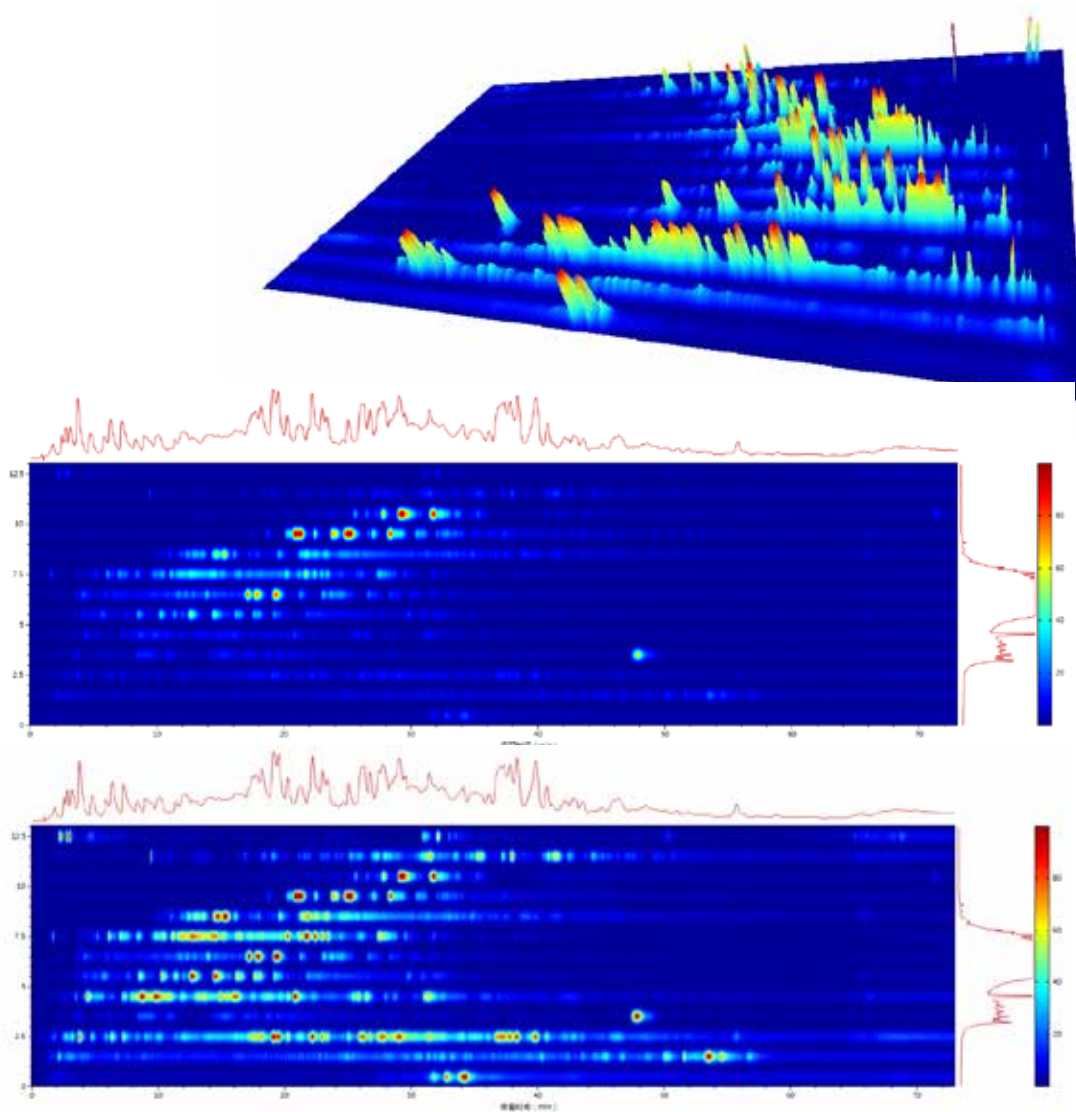
图谱叠加分析



图谱运算

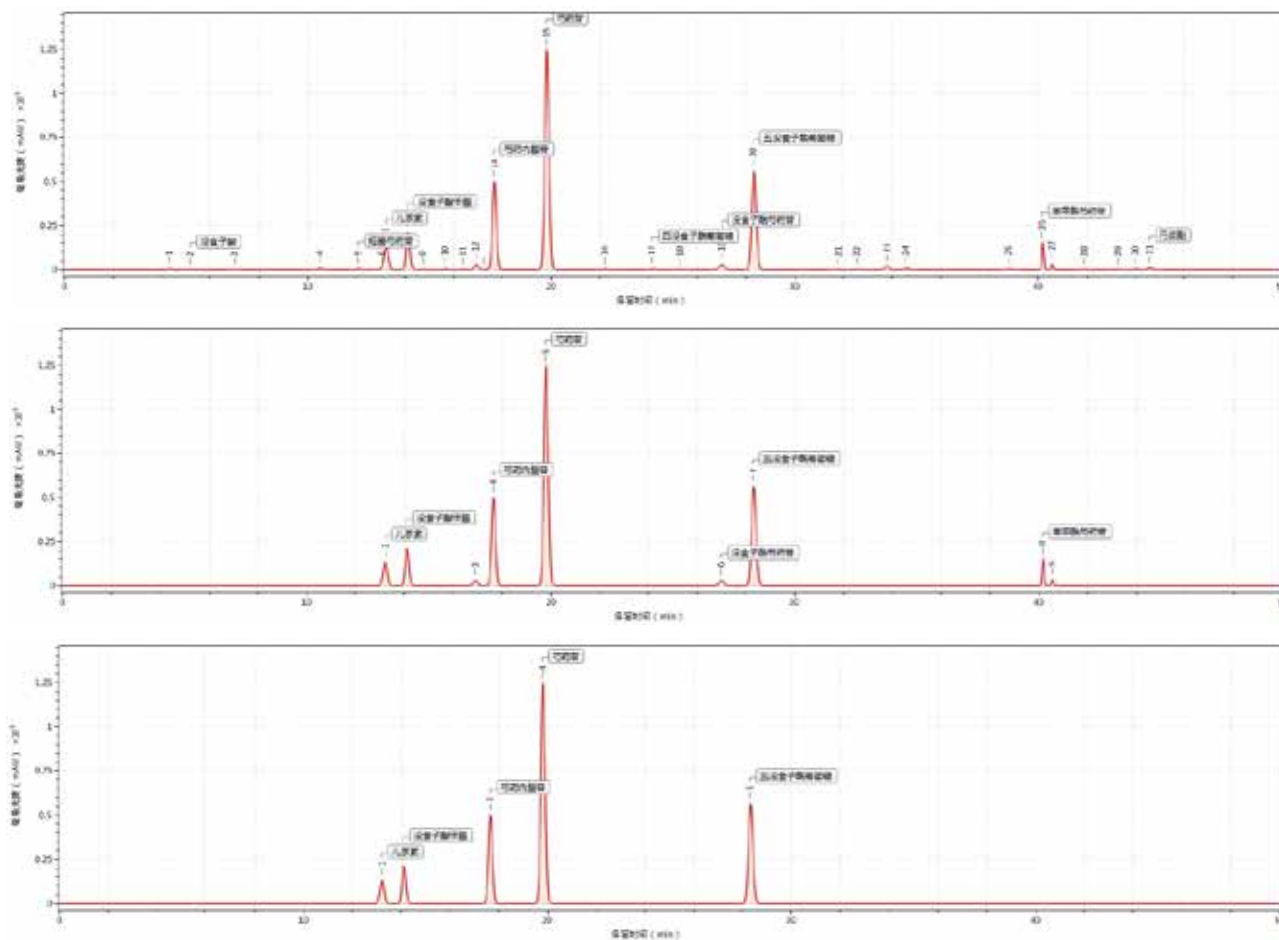


二维色谱图

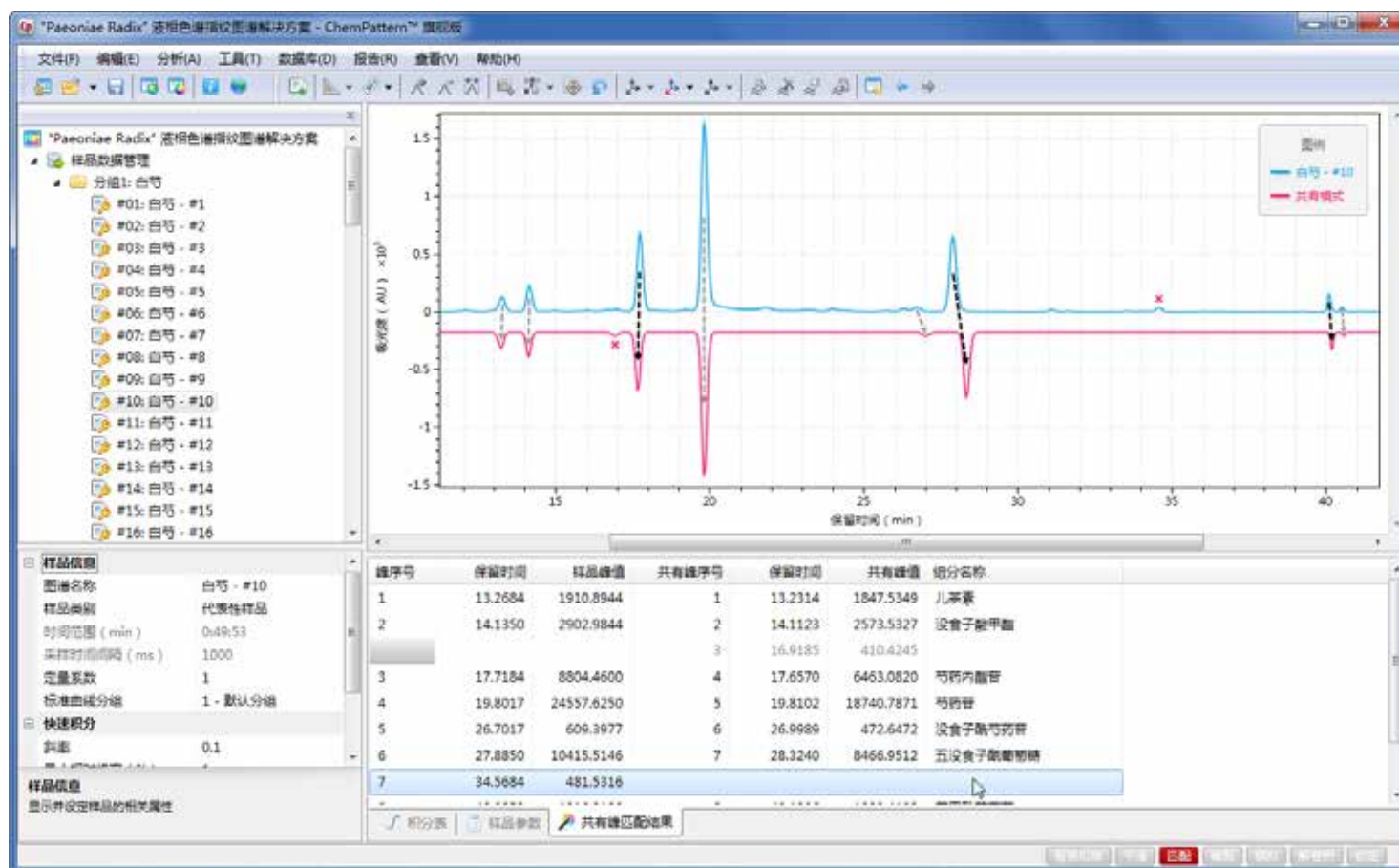


担子菌类马勃科药用植物
马勃 (*Laiosphaera fenzi*)
的LC × LC液相色谱图。图
中二维图谱设定为：数据
预处理：无（上图）、自
动缩放（下图）；色谱峰
显示：等高线；图谱显示
方式：2D；显示一维色谱
图：是。

指纹图谱共有模式生成



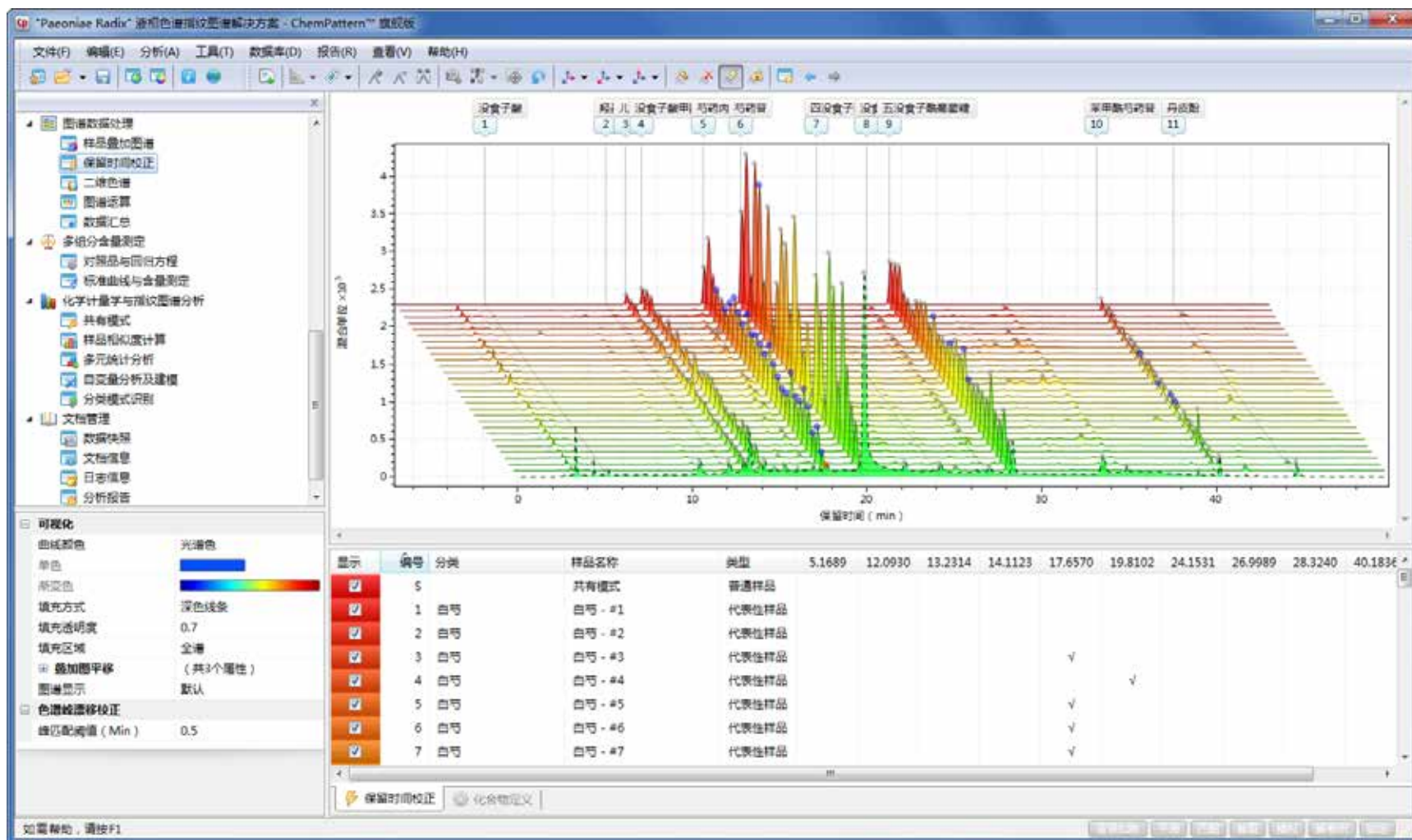
共有峰匹配结果视图



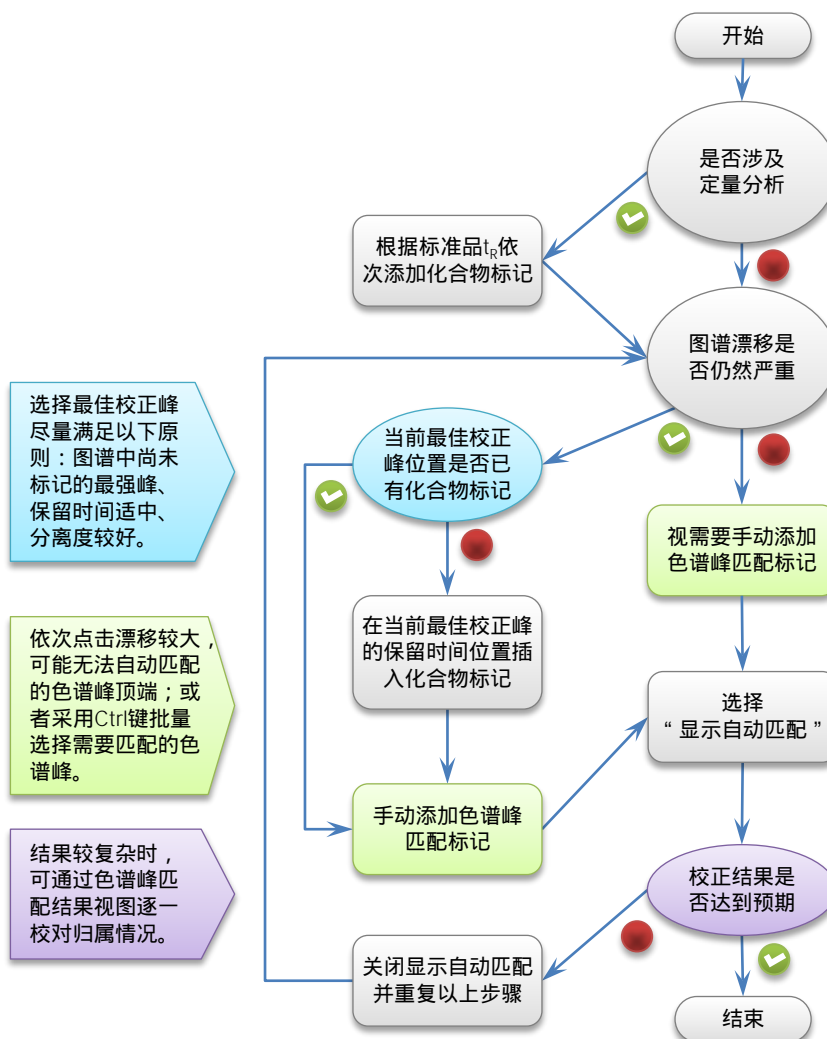
保留时间漂移校正（色谱峰对齐）

- 校正过程以软件自动模式匹配为核心，支持分段渐进校正模式，并辅以利用各类分析化学相关数据（内外标、光谱、质谱数据等），以及结合背景知识与经验判断等综合手段的人工校正，从而在最大程度上克服了色谱指纹图谱数据在化合物种类、样品性质和色谱条件等方面所体现的灰箱状态和不确定性。
- 该校正基准的可参比性和灵活性还体现在其基于特定的色谱保留时间而非囿于图谱中具体的共有峰的存在与否，因此不受样品图谱中色谱峰和共有峰发生是否变化的影响，还可以将所添加的任何保留时间位置为基准进行特殊情况下的峰校正

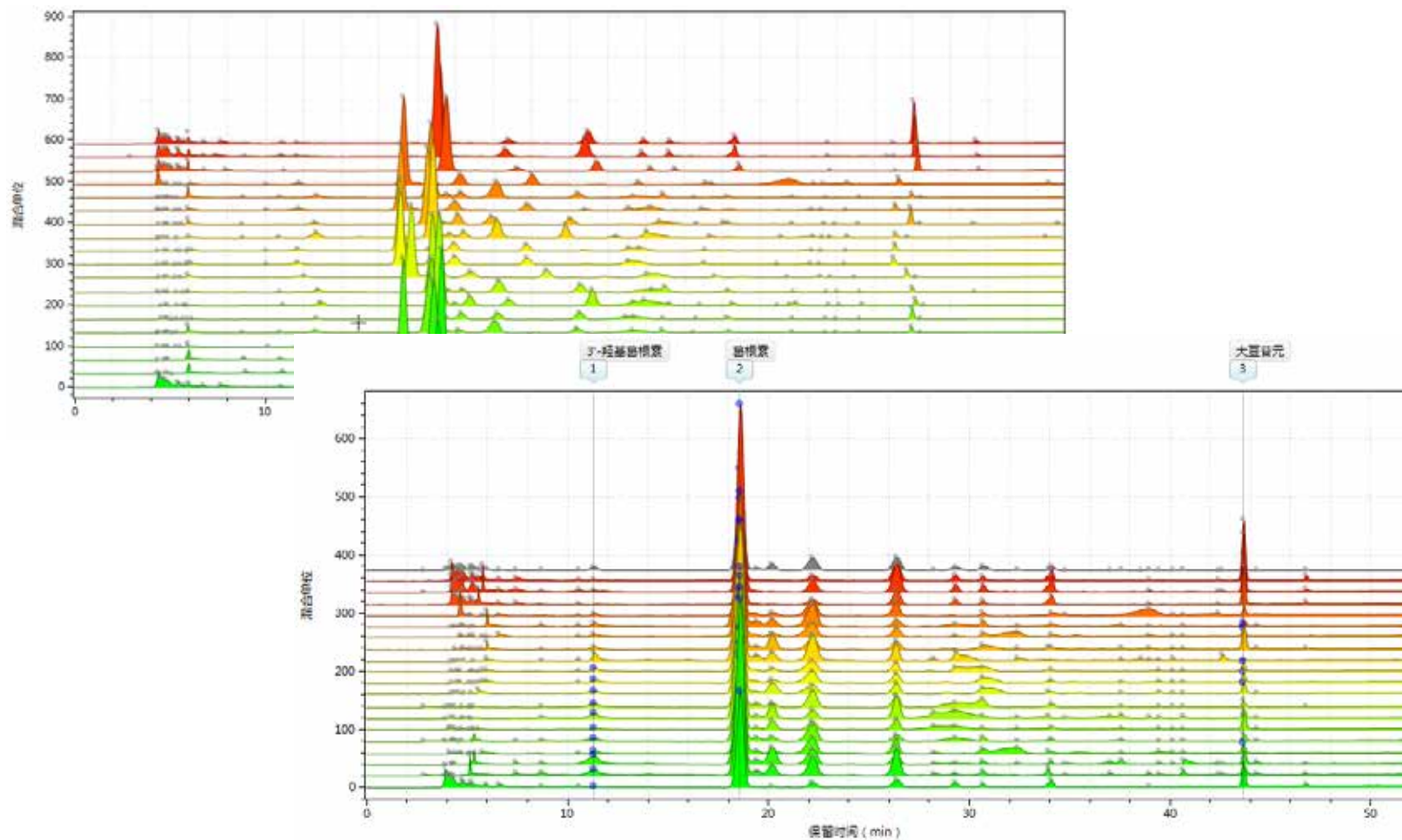
保留时间漂移校正界面



色谱峰保留时间校正流程



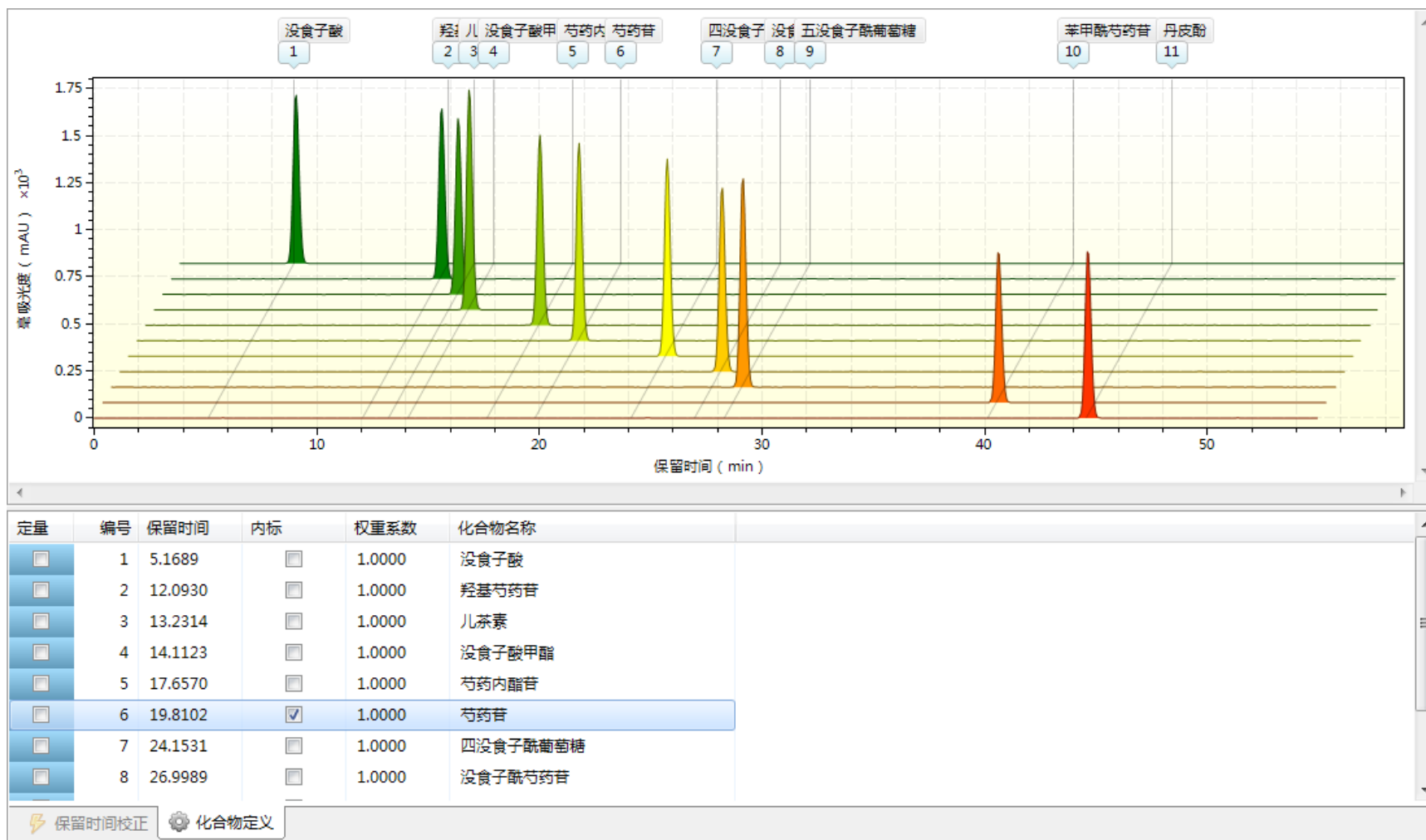
校正过程示意图



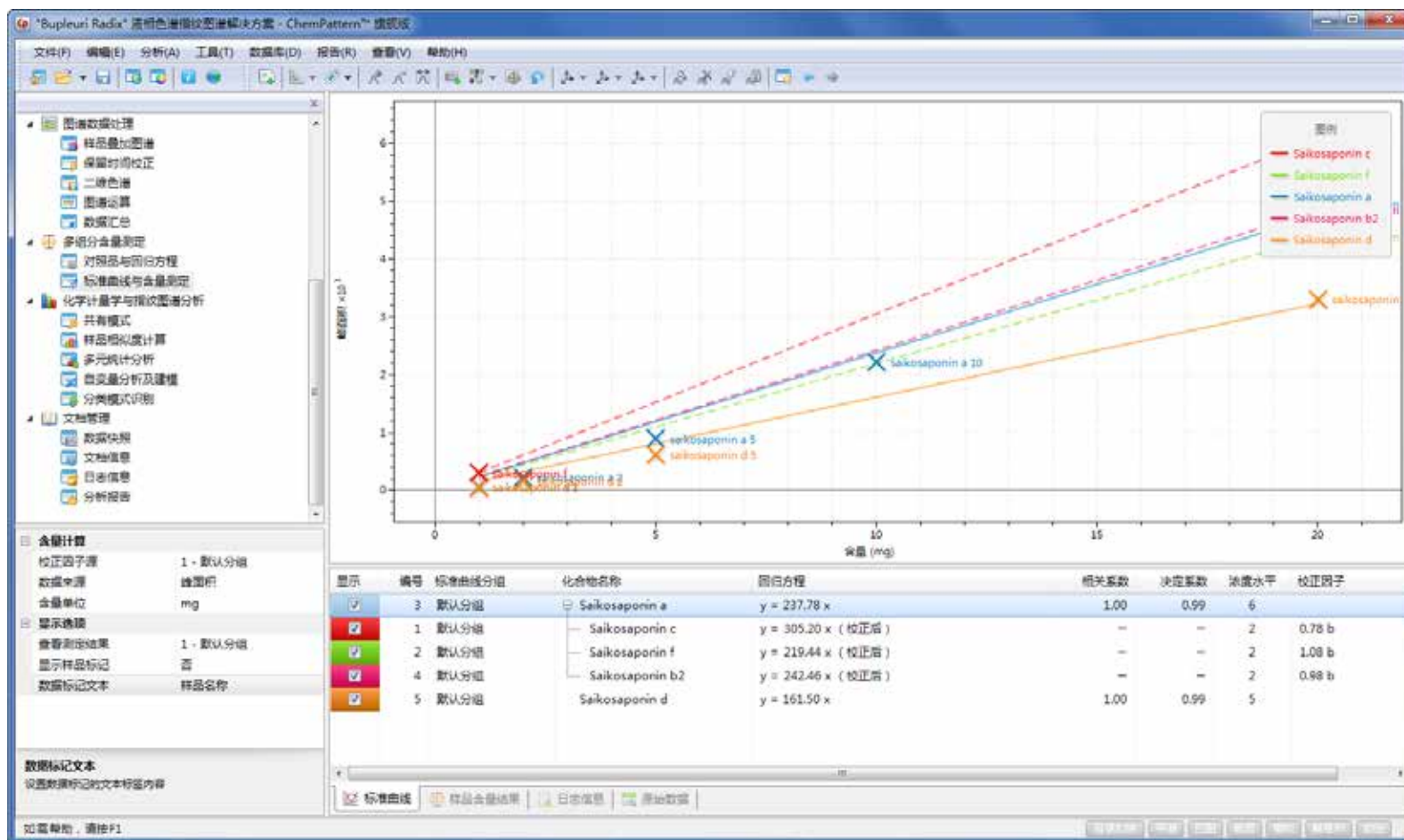
柱色谱法含量测定

- 提供对液相、气相、薄层色谱以及质谱的含量测定支持
- 提供外标法，以及加校正因子的外标法（“一测多评”）
- 支持用于区分和计算来自不同分析实验所获得样品数据和工作曲线时的“标准曲线分组”含量计算模式
- 加校正因子的外标法支持校正因子的手工设定或自动生成，以及“父（外标物）、子（待测物）工作曲线”的含量计算方法。含量计算结果可直接用于化学计量学分析
- 方法符合《中国药典》2010年版色谱法含量测定技术要求
- 界面较好的用户体验，提供数据交互显示，以及分析报表功能

含量测定：化合物定义



含量测定：结果输出界面



ChemPattern™ 谱蕴™

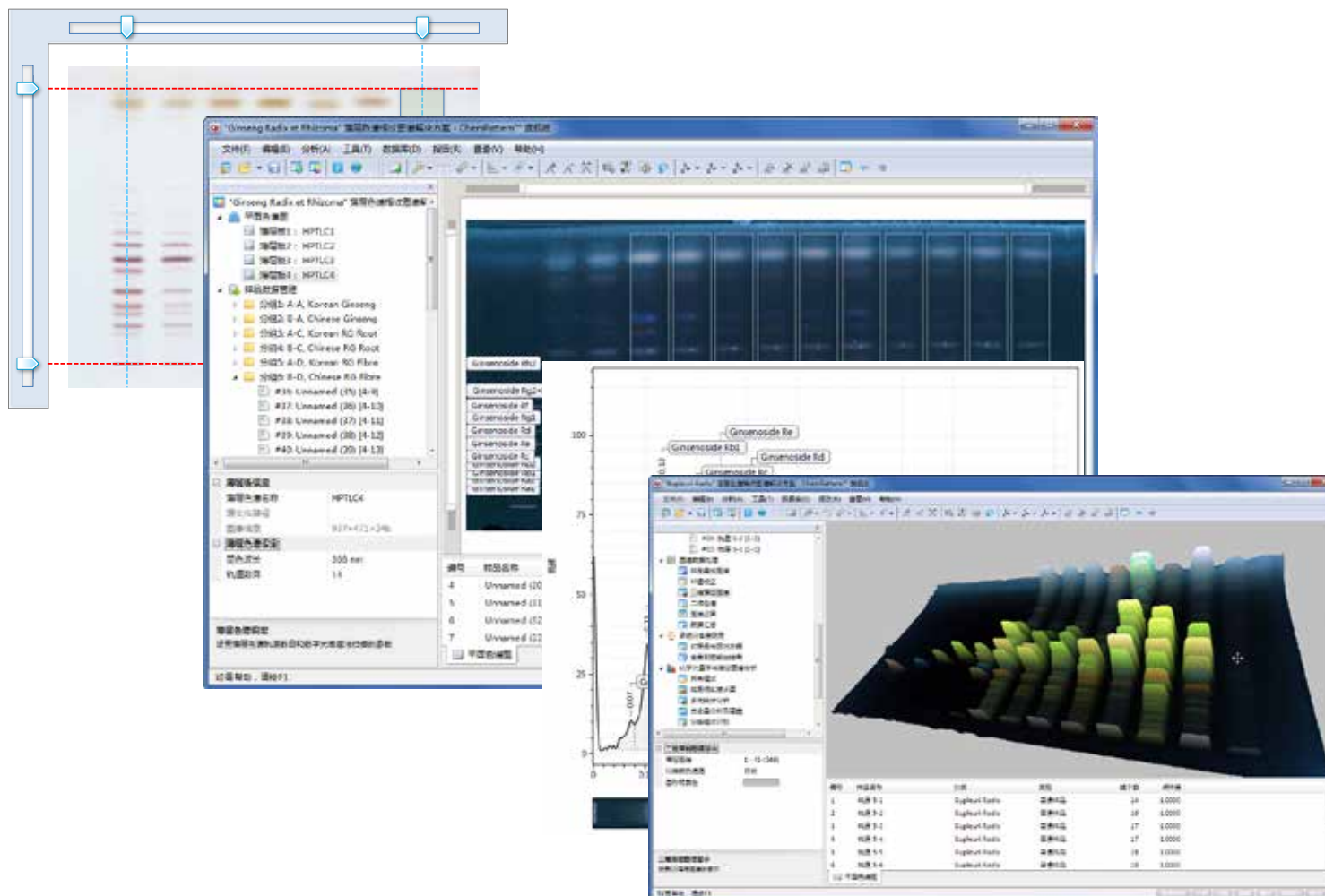
先进化学计量学与化学指纹图谱系统解决方案软件

TLC PROFILER
平面色谱解决方案

平面色谱解决方案特点

- 唯一提供薄层色谱指纹图谱分析的软件
- 支持12位（4096灰阶）颜色通道格式图像
- 样品轨道自动定位
- 数字图像轨道扫描
- 分析流程完全兼容柱色谱法解决方案

平面色谱解决方案界面简介



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

MS PROFILER
质谱解决方案

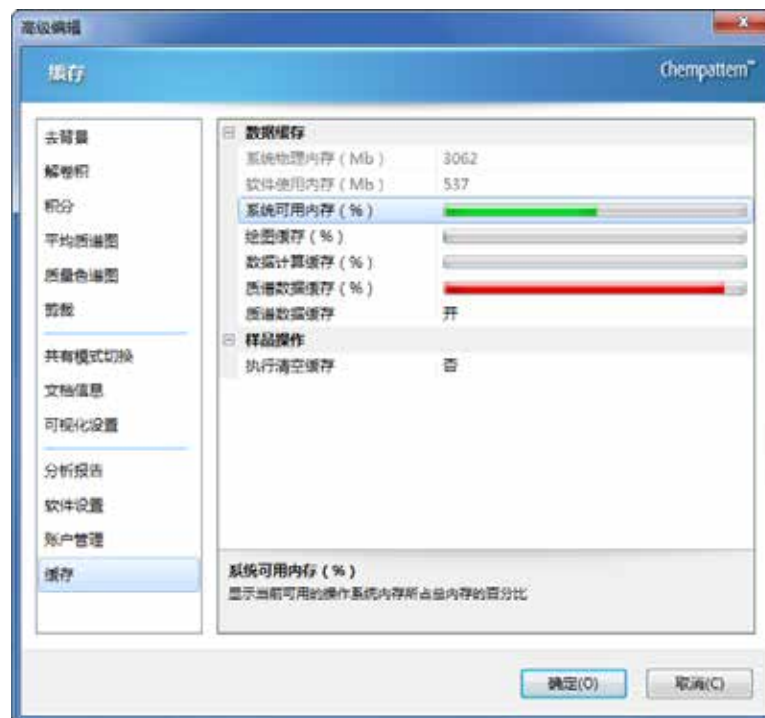
不同质谱解决方案比较

- 质量色谱法。该方法主要用于液质和气质联用技术对以总离子流图为代表的质谱图的定性、定量分析。该方法主要针对总离子流图、提取离子流图等相对简单的质谱分析，而不涉及较深入的质谱数据解析和处理；
- 质谱解卷积法。该方法适用于高分辨液质联用以及气质联用数据的深入处理分析。所提供的质谱解卷积技术可自动解析共流出化合物的色谱重叠峰，并给出解卷积后的结构碎片和准分子离子峰内在的质谱信息。
- 质谱法。该方法适用于以DART-MS（直接实时分析质谱）和ICP-MS（电感耦合等离子体质谱）等为代表的以质谱数据表征的复杂样品混合组分信息。

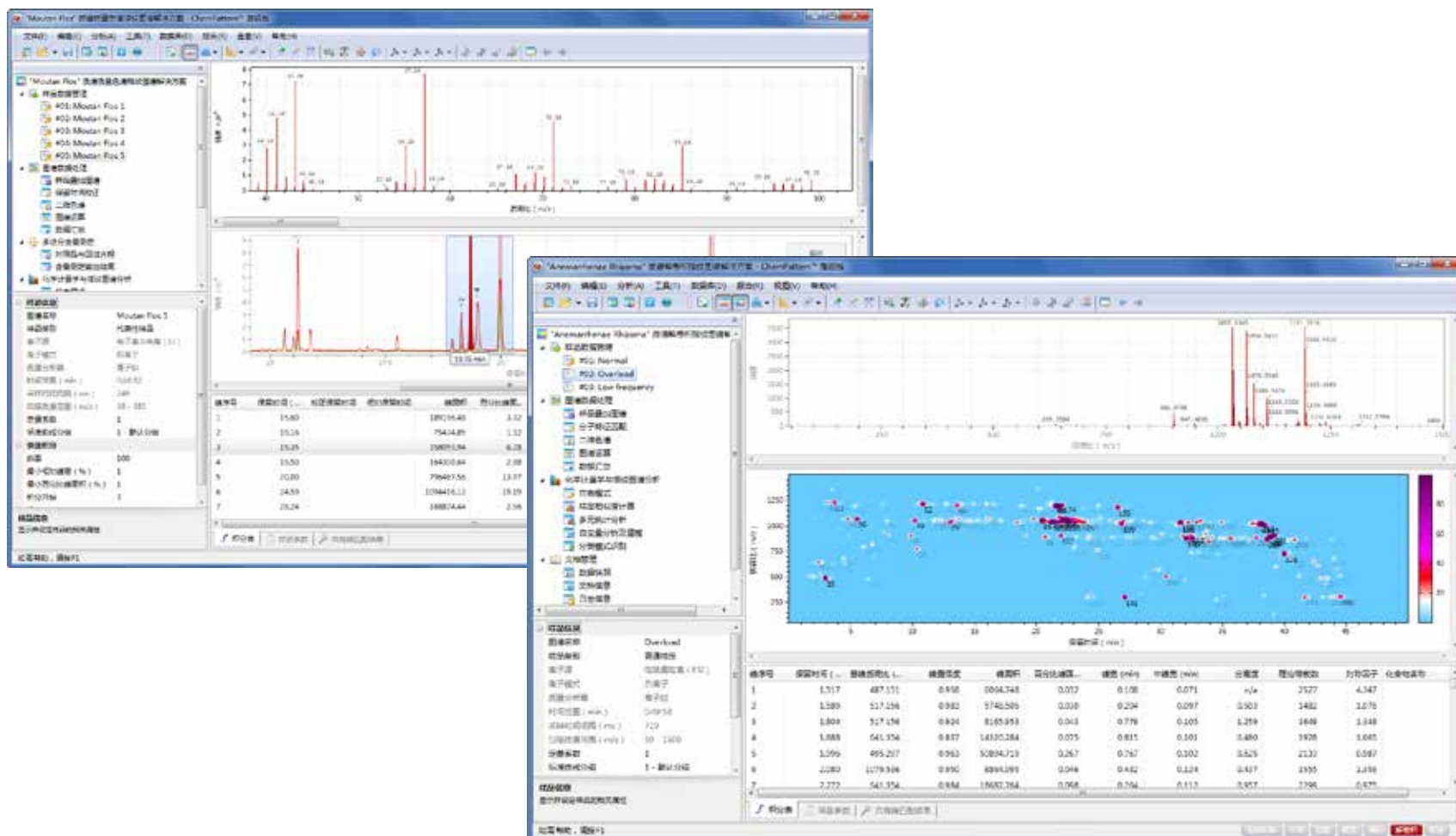
质谱解决方案基本功能及操作

- ü 质谱（总离子流色谱图）背景扣除
- ü 质谱（总离子流色谱图）裁剪
- ü 平均质谱图
- ü 质量色谱图（TIC、BPI、XIC等）
- ü 质谱热图（等高线图）
- ü 质谱缓存
- ü 质谱解卷积
- ü 质谱解卷积峰共有模式及质谱共有模式

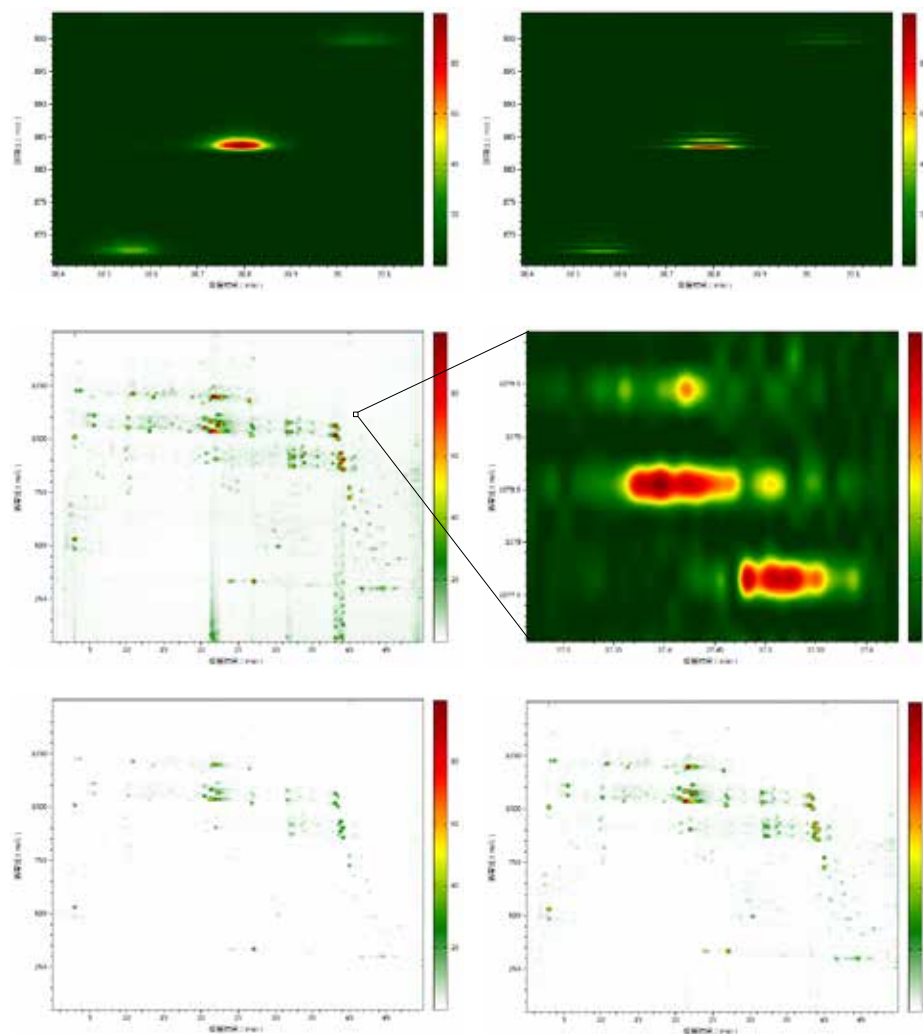
质谱缓存管理



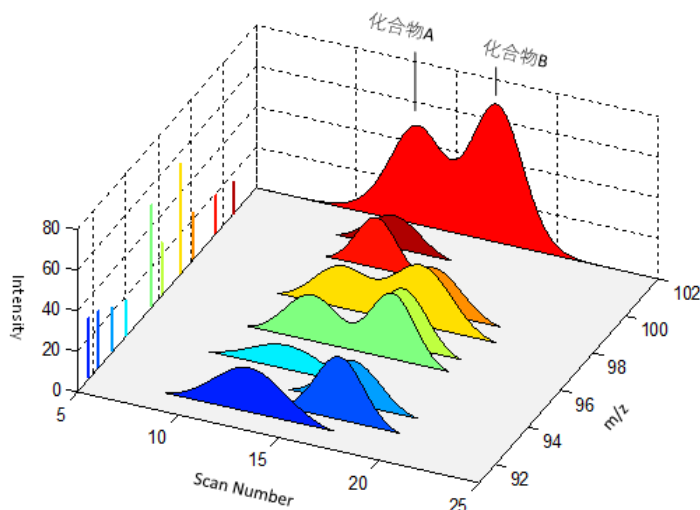
质谱总离子流色谱图视图



质谱热图（等高线图）

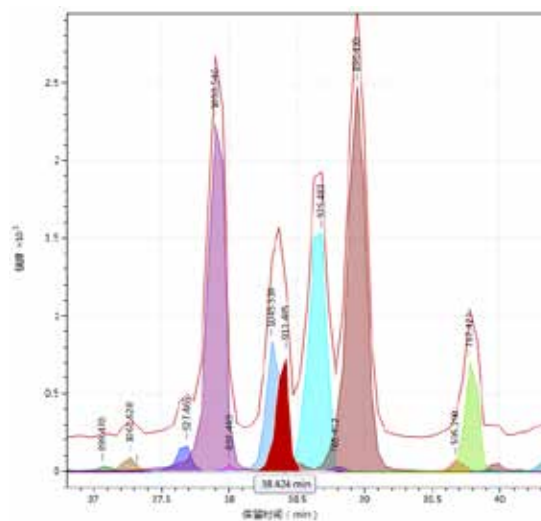
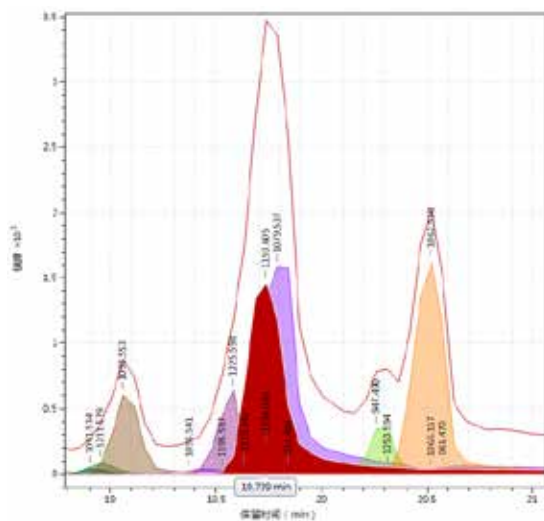
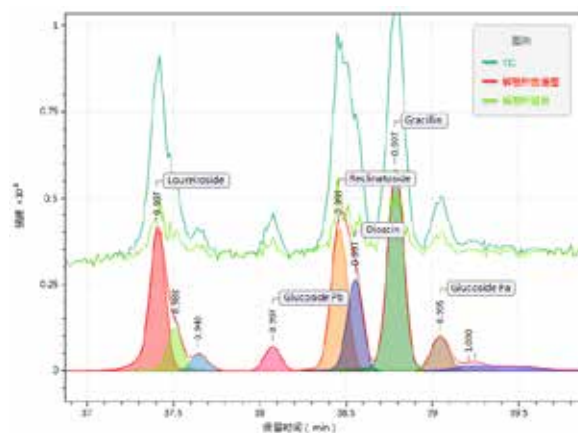
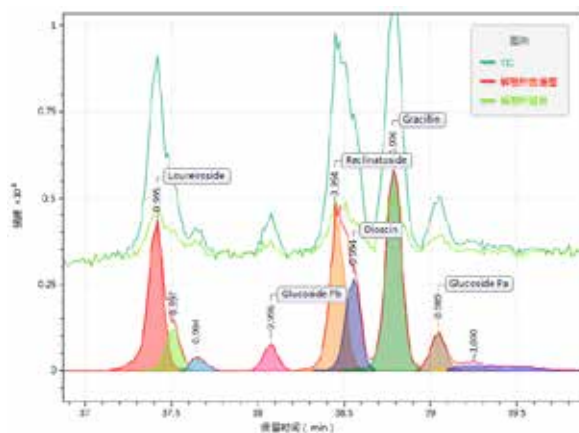


质谱解卷积原理



- 最早用于低分辨GC-MS数据
- LC-MS中本底碎片离子的噪音干扰的强度和范围都较大
- LC-MS的分辨率通常更高
- LC-MS的分析结果的重现性相对较差
- 无商品化的标准谱库
- 综上所述，LC-MS数据的解卷积所要比GC-MS复杂的多，但所获得信息也丰富的多。

质谱解卷积



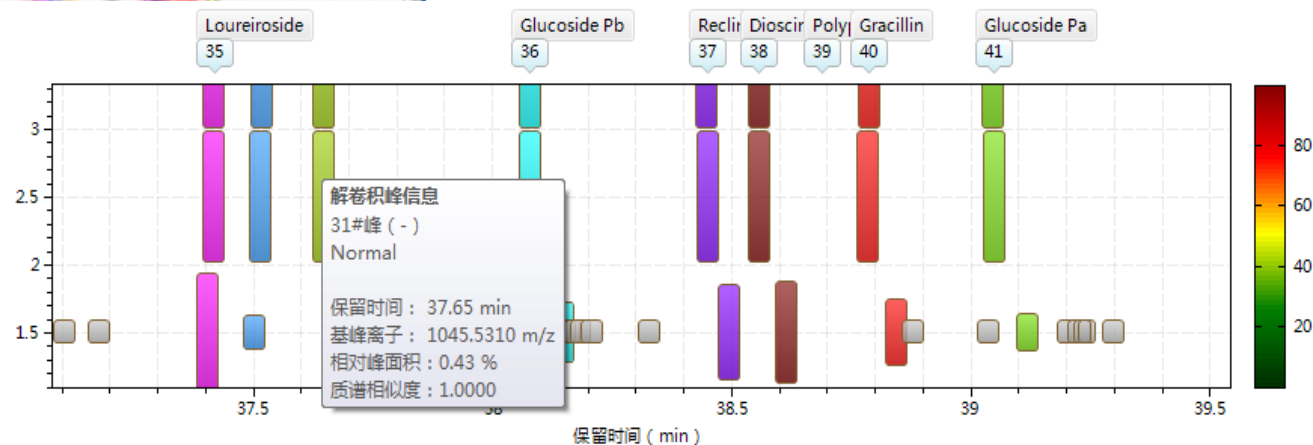


分子特征匹配技术原理

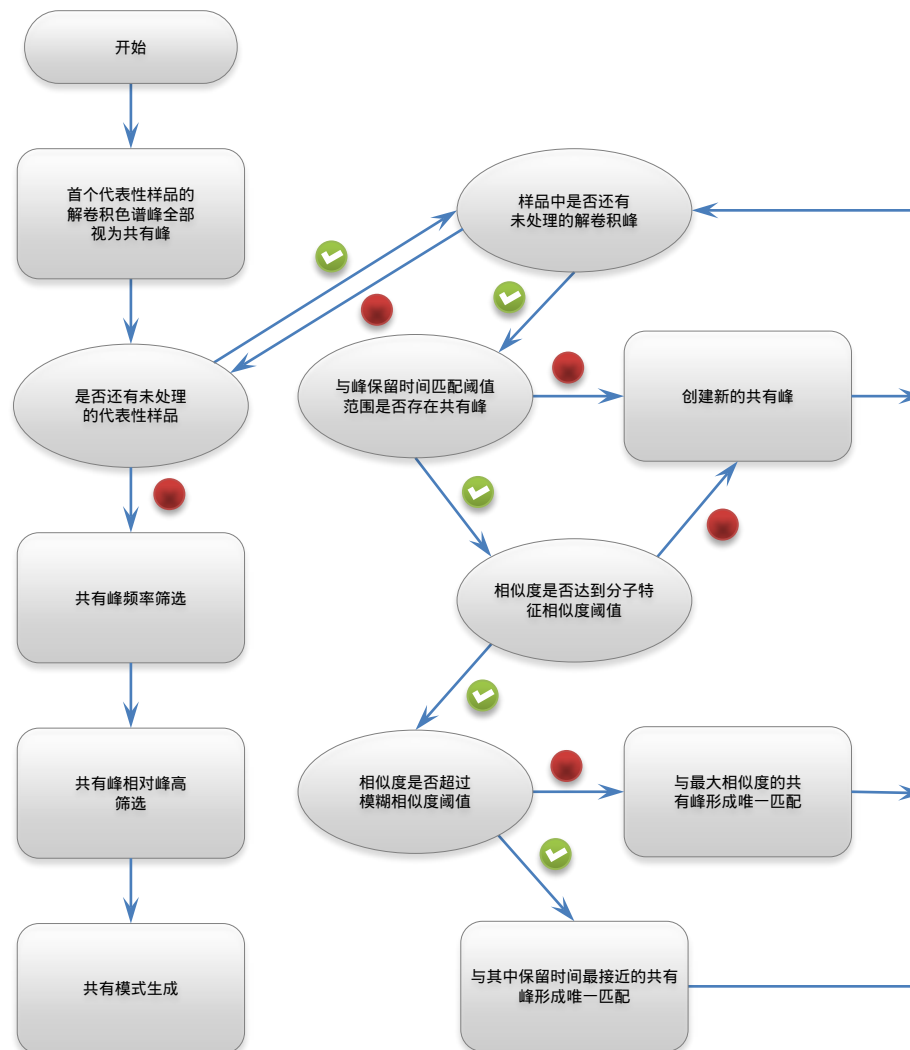
根据色谱保留时间和解卷积质谱结果，通过匹配参数自动地建立不同样品图谱间化合物准确的一一对应关系。

匹配功能等同于柱色谱解决方案中的保留时间校正，但匹配过程基于解卷积“纯”色谱峰而非原始的色谱峰，并且基本不受出峰顺序的影响。

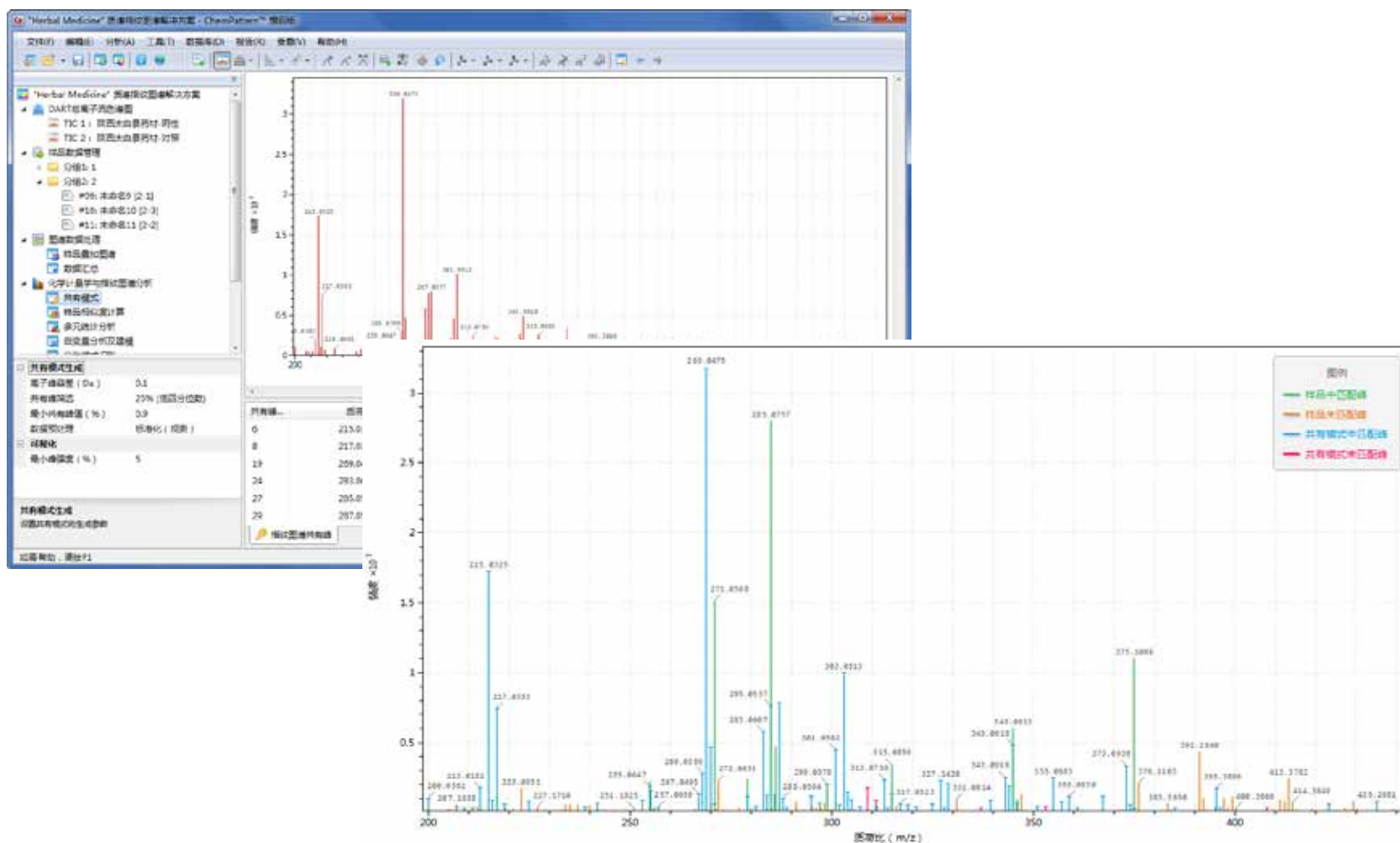
分子特征匹配视图



分子特征匹配流程图



质谱共有模式及样品匹配视图

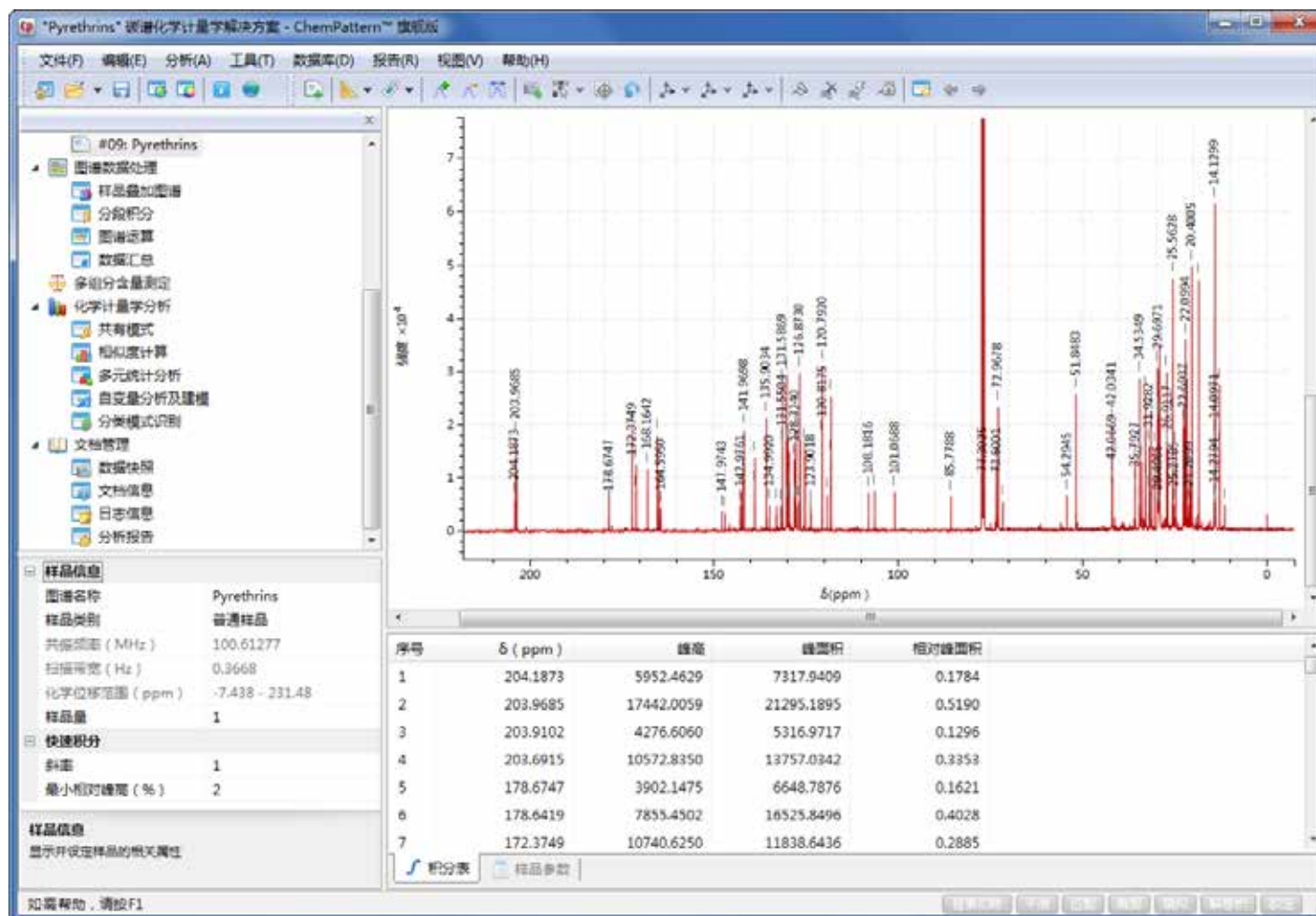


ChemPattern™ 谱蕴™

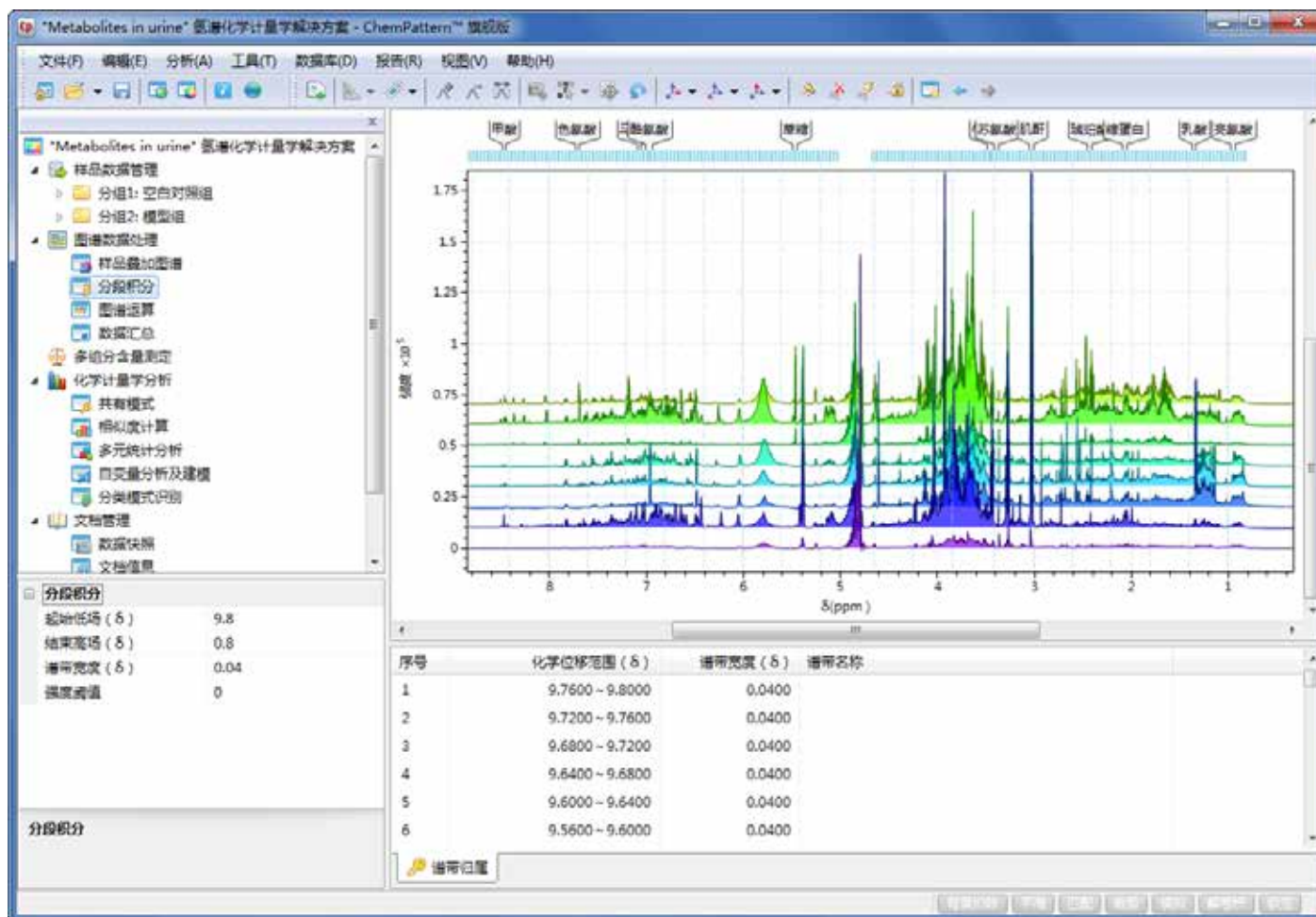
先进化学计量学与化学指纹图谱系统解决方案软件

NMR PROFILER
核磁共振波谱解决方案

NMR样品波谱显示



NMR分段积分界面

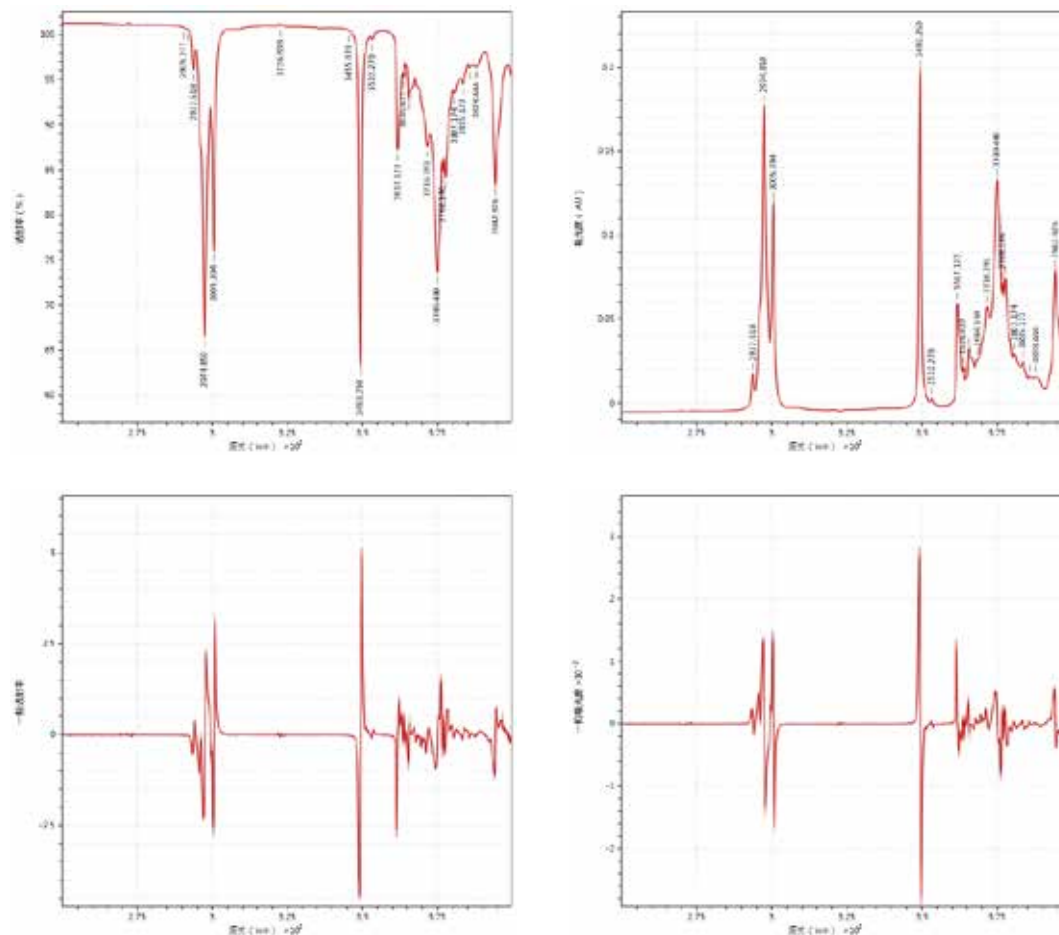


ChemPattern™ 谱蕴™

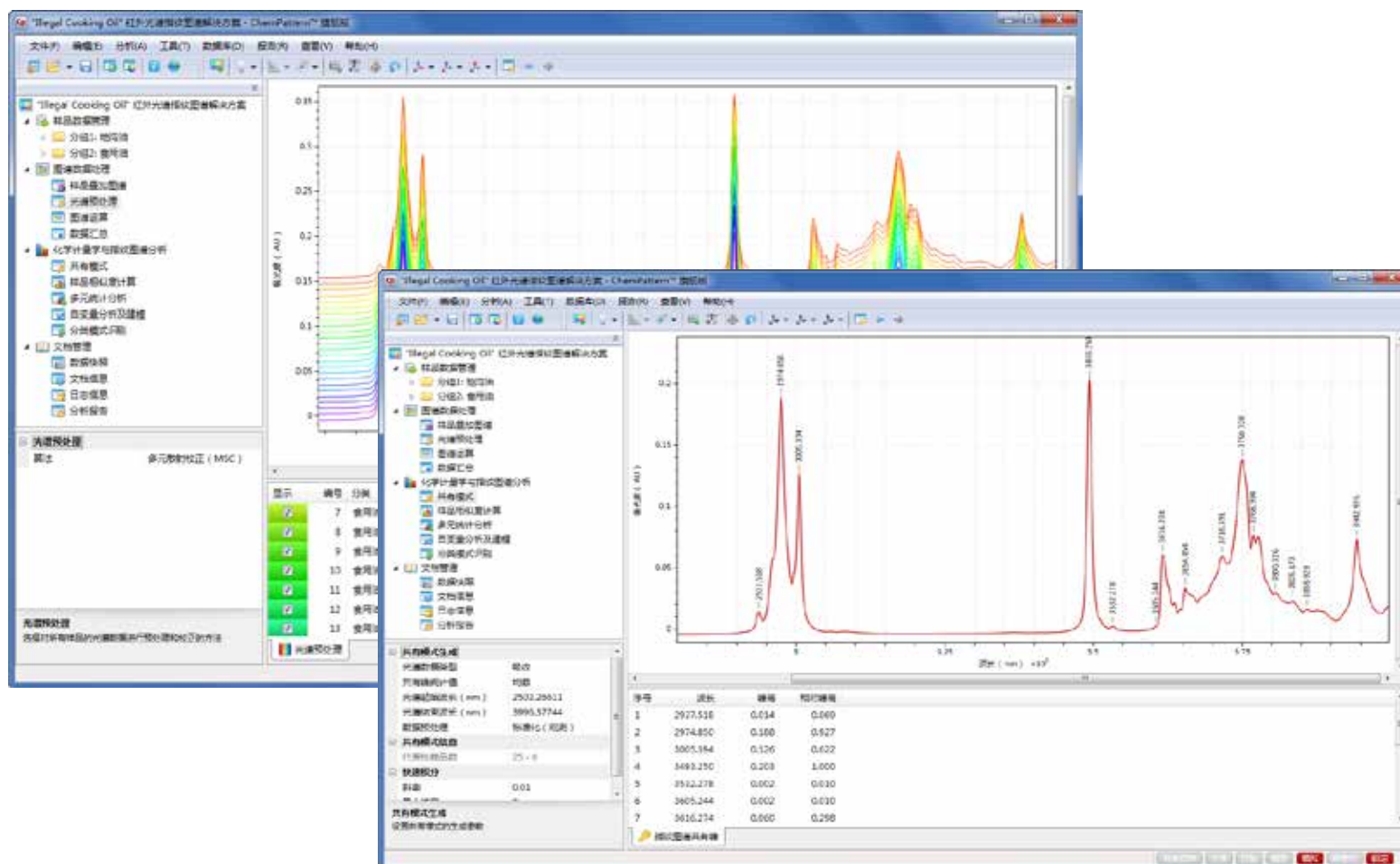
先进化学计量学与化学指纹图谱系统解决方案软件

NIR PROFILER
近红外光谱解决方案

NIR样品光谱显示模式示例



NIR光谱校正及共有模式界面



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



化学计量学功能简介

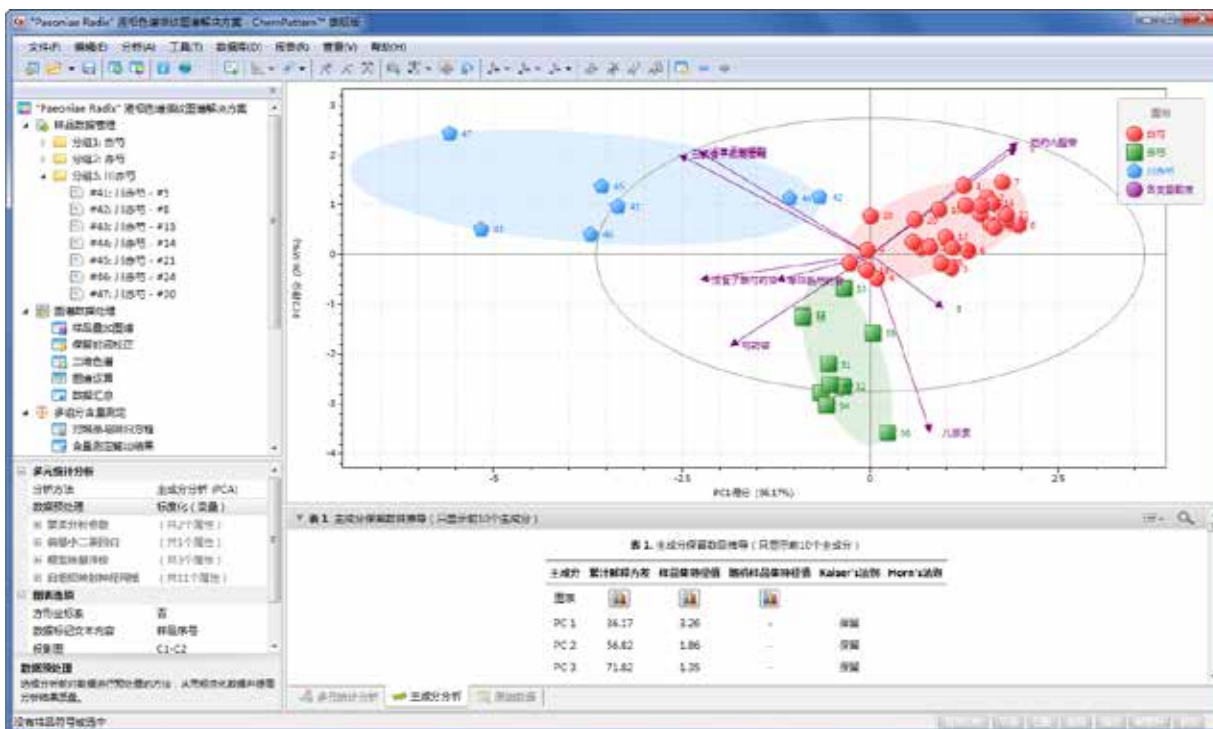
ChemPattern化学计量学系统的特点

1. Analyst for analyst
2. 不需具备和掌握化学计量学专业知识
3. 标准化的数据分析流程（管道），无需编程
4. 非线性编辑功能
5. 数据静态快照功能
6. 详细的输出结果和丰富的图表交互功能
7. 出版级质量的图表生成及排版
8. 符合LIMS及21 CFR PART 11要求



“ Analyst for analyst ”

极佳的用户体验



不需具备和掌握化学计量学专业知**识**。算法及流程经过高度优化，仅需点击几次鼠标，即可获得详细和深入的数据分析结果

算法引擎数据处理管道

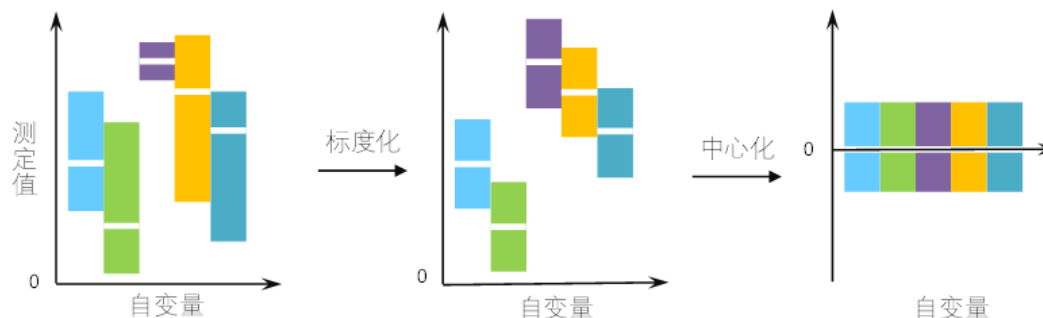
- 数据预处理
- 数据降维
- 相似度分析
- 多元统计分析
- 回归建模
- 模式识别
- 人工神经网络
- 支持向量机
- 交叉验证

算法引擎数据处理管道示例

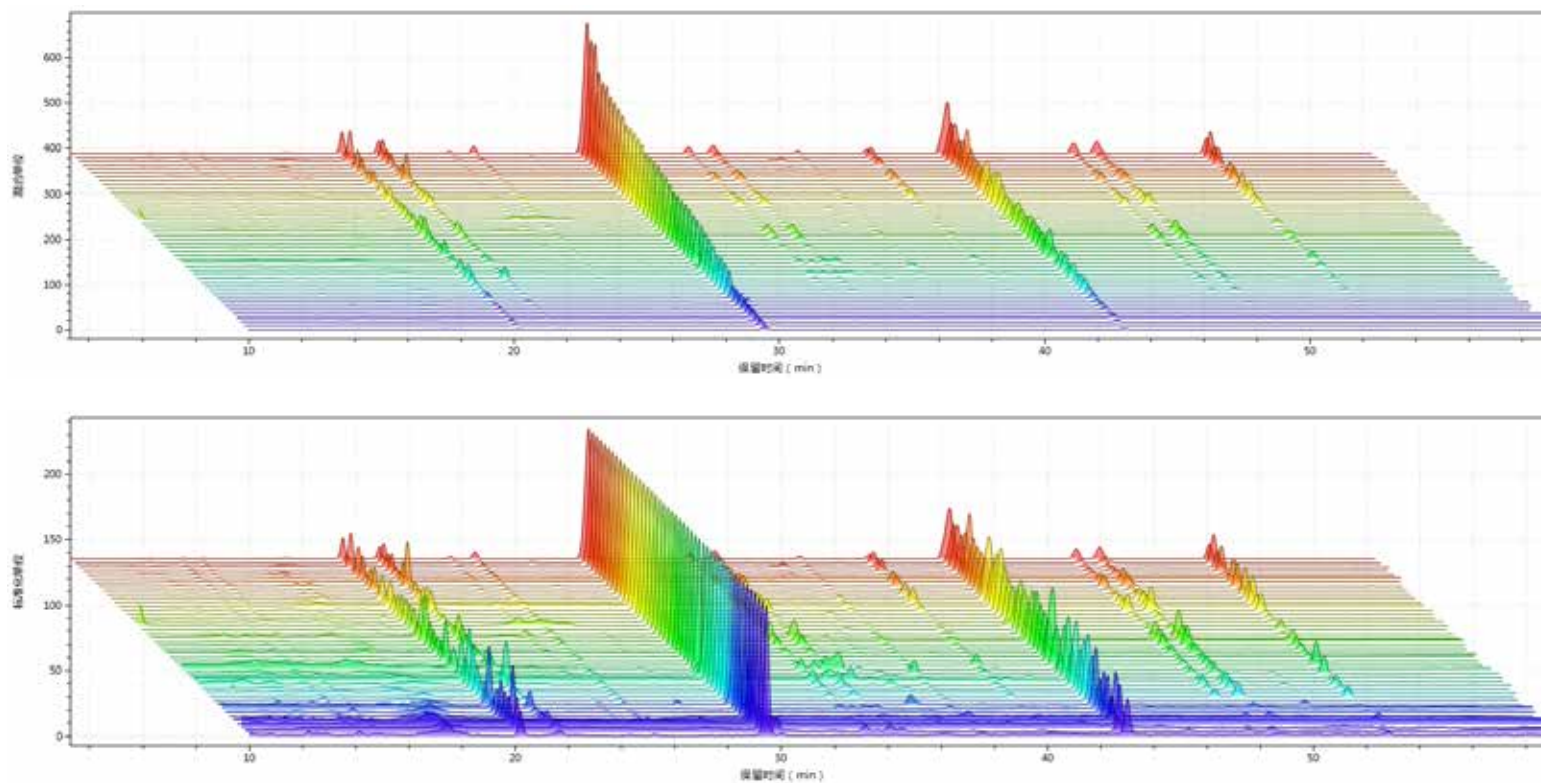


数据预处理

- 消除各样本在自变量强度及范围上差异，使得数据具有标准的变化幅度或范围，同时保留自变量的相对比值信息
- 数据预处理即可针对样本进行，也可针对变量进行。
- 对数据进行变换，以使自变量或因变量符合线性相关，或使样本符合正态分布。



数据预处理示例



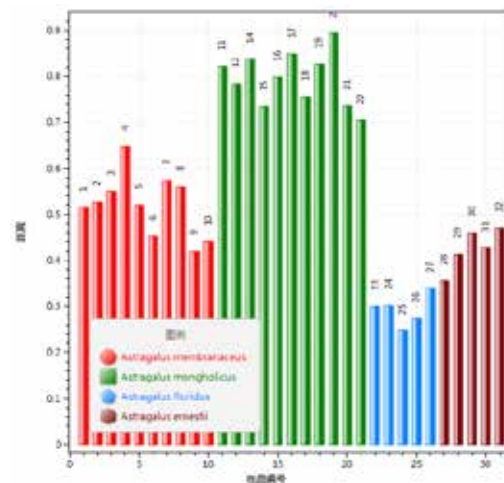
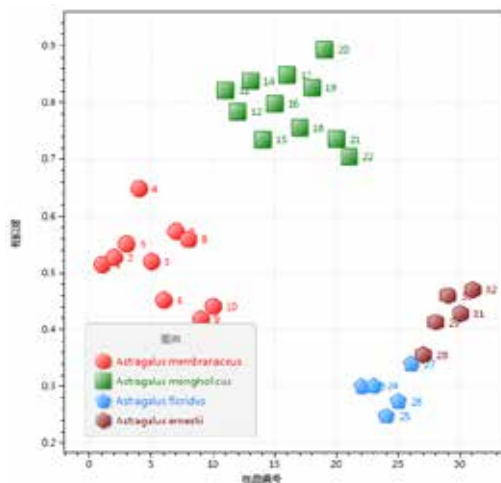
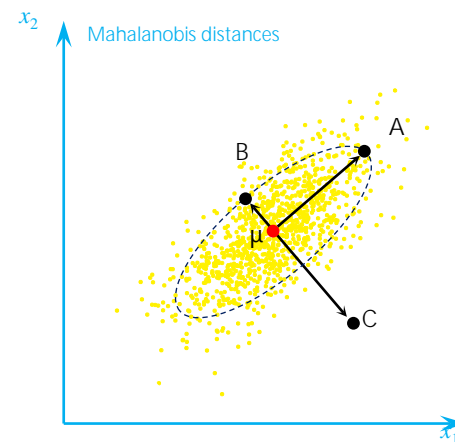
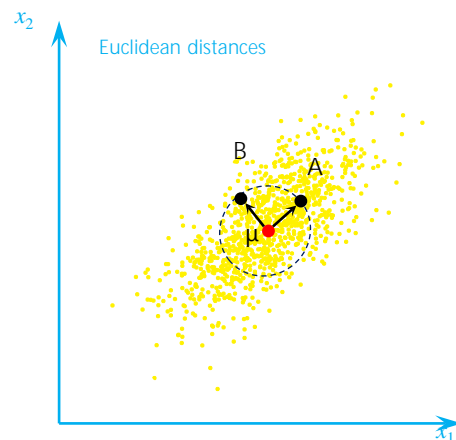
数据降维

将高维空间内的样本原始数据投射到低维空间，同时又尽量保留对象原始信息的数据预处理方法，即采用少量的自变量组合（强特征）来重新描述样本，从而替代原有的冗余和随机自变量。

- 特定分析方法要求自变量数目小于样本数目；
- 消除自变量之间的共线性，提高数据质量和；
- 改善高维数对于分析的不利影响（维数灾难；
- 加快特定算法耗时的迭代运算过程；

相似度分析

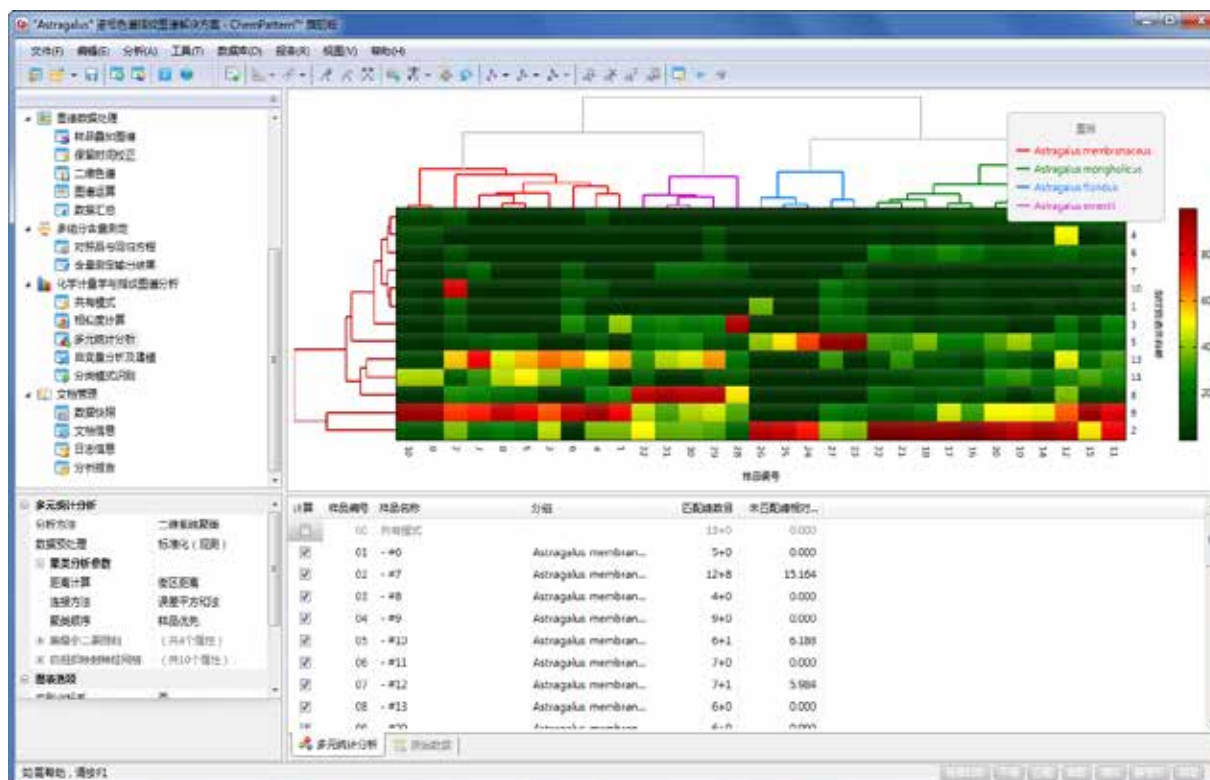
- 夹角余弦
- 相关系数
- 重叠率系数
- 欧氏距离
- 马氏距离
- 等等



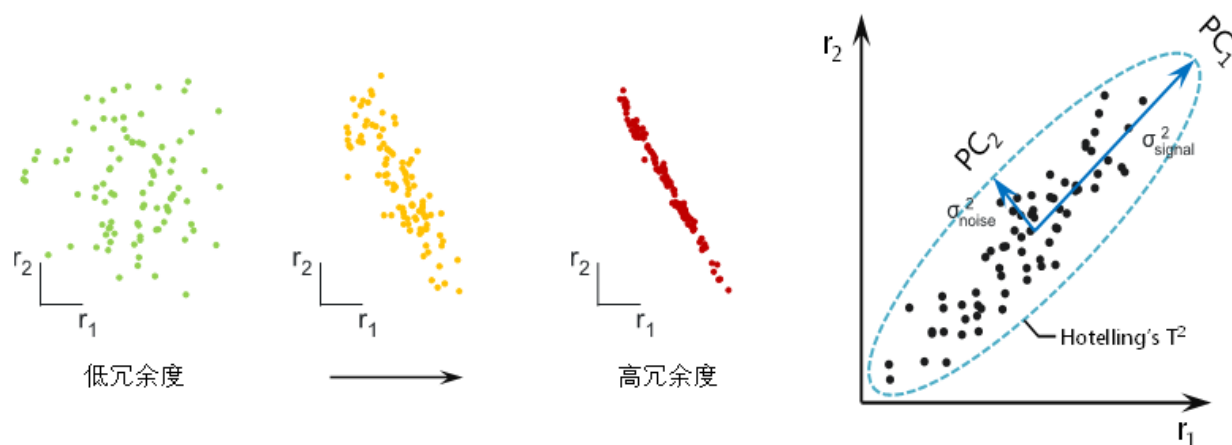
多元统计分析

- 多元统计分析：对复杂体系样本的内在规律和关键变量进行综合解析。提供的方法包括系统聚类分析、主成分分析、偏最小二乘判别、单向多元方差分析、自组织映射聚类；
- 自变量分析：开展对自变量的统计分析，并结合因变量进行回归建模与预测。提供的方法包括误差图和箱线图、方差分析、相关性矩阵等。

多元统计分析 - 双向聚类分析

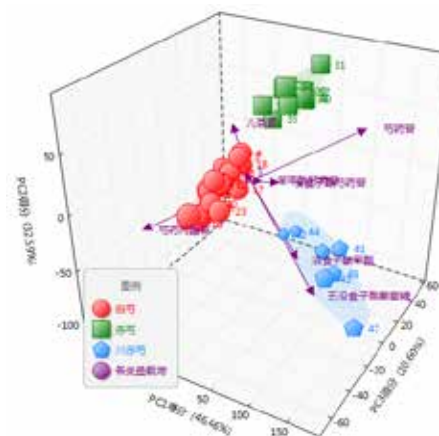
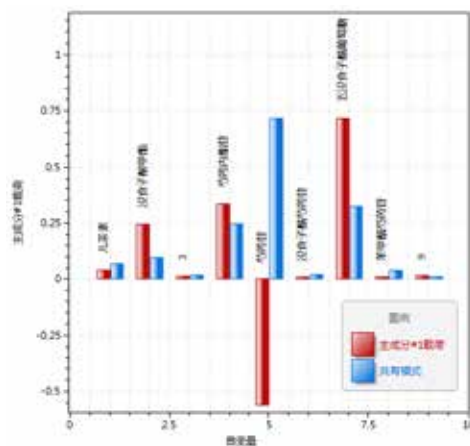
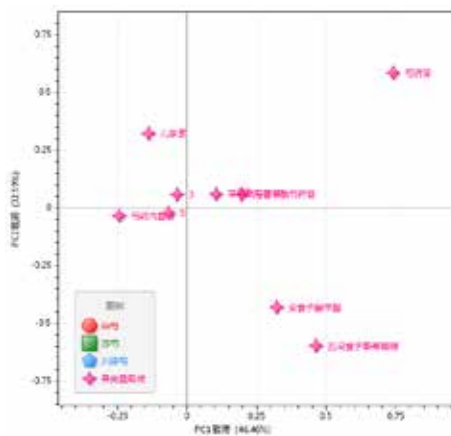
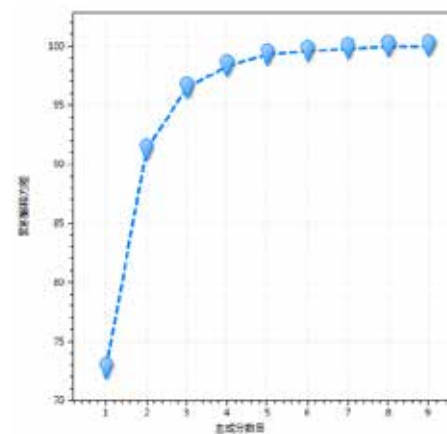
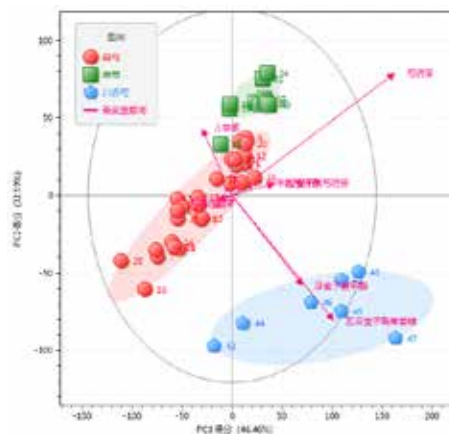
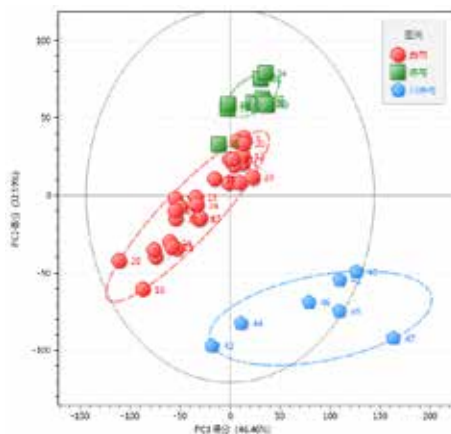


多元统计分析 - 主成分分析原理

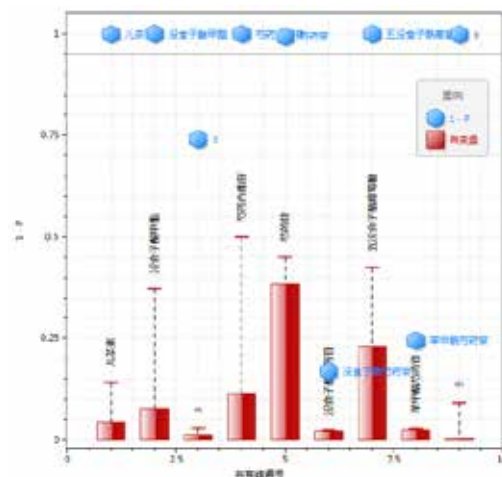
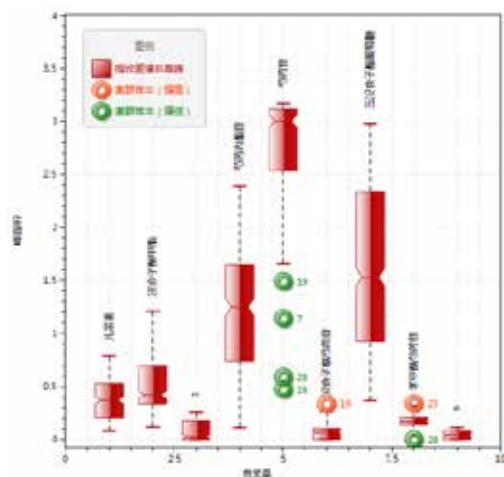
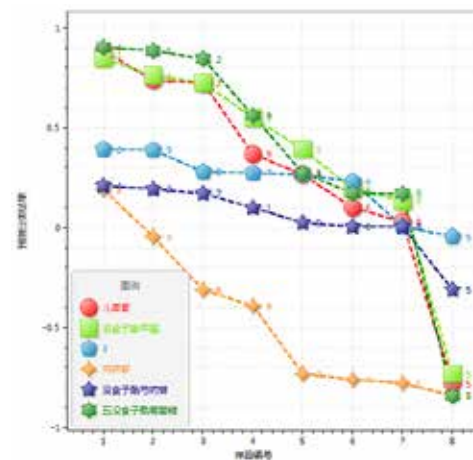
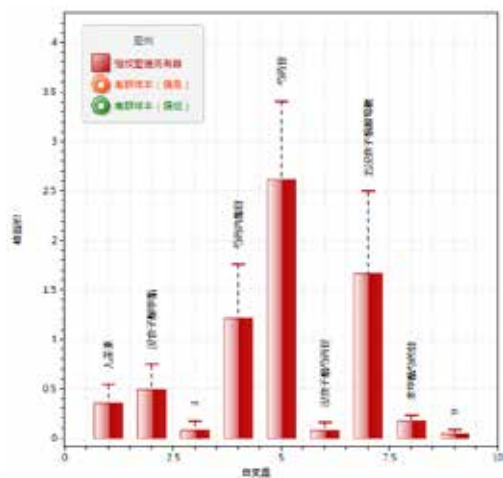


$$A = U S V^T \rightarrow A = U S V^T$$

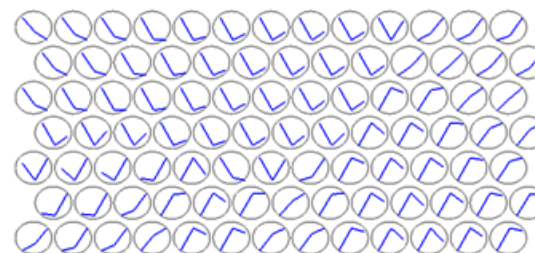
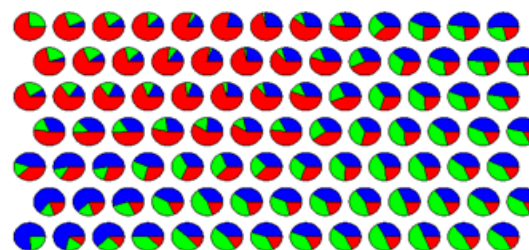
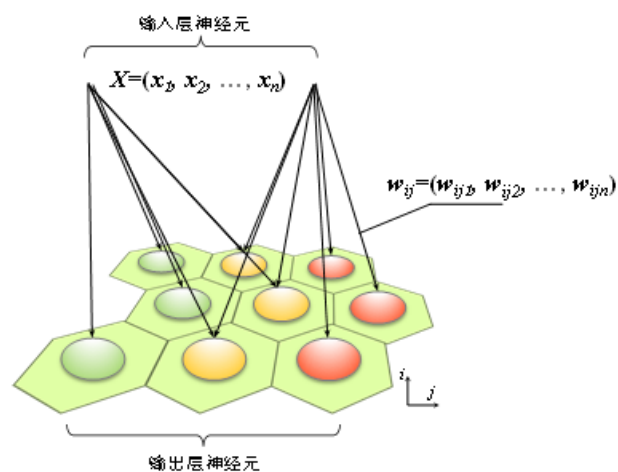
多元统计分析 - 主成分分析图表



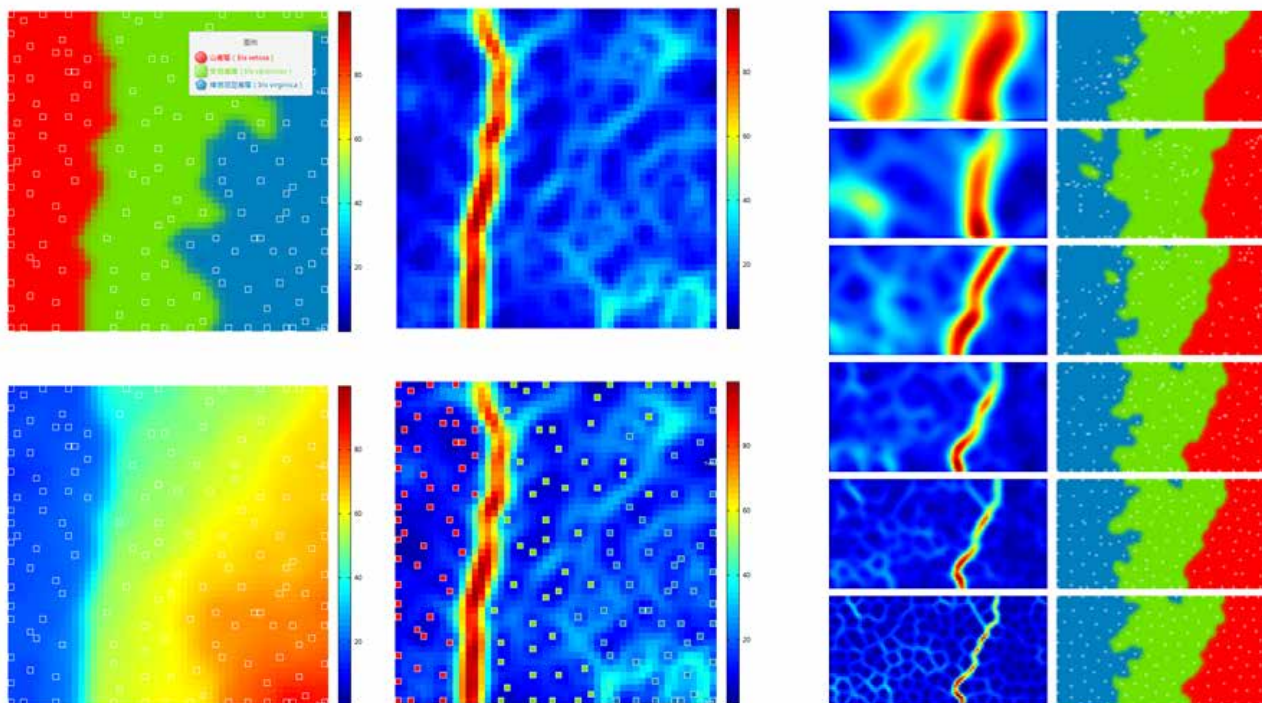
自变量统计与方差分析



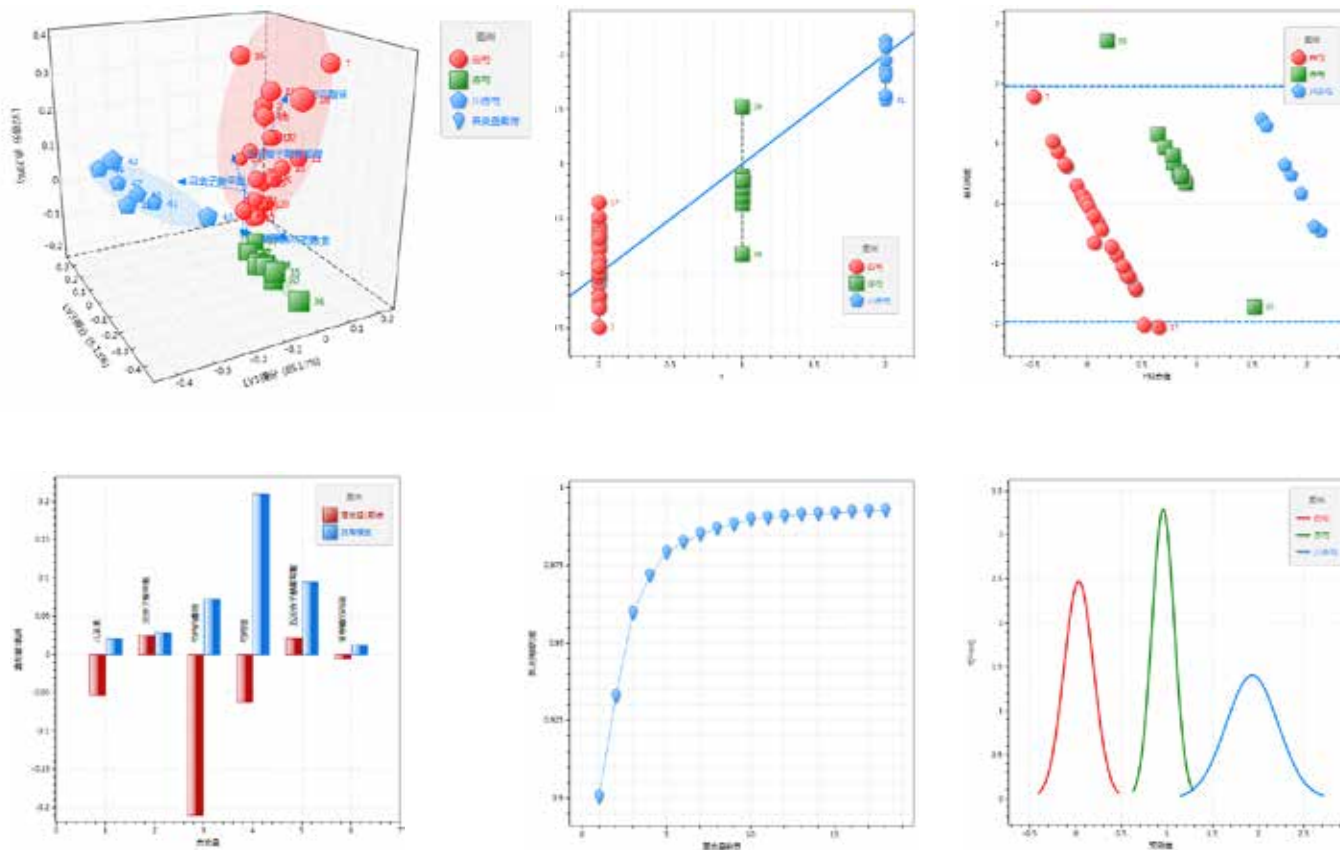
人工神经网络 - SOM自组织映射原理



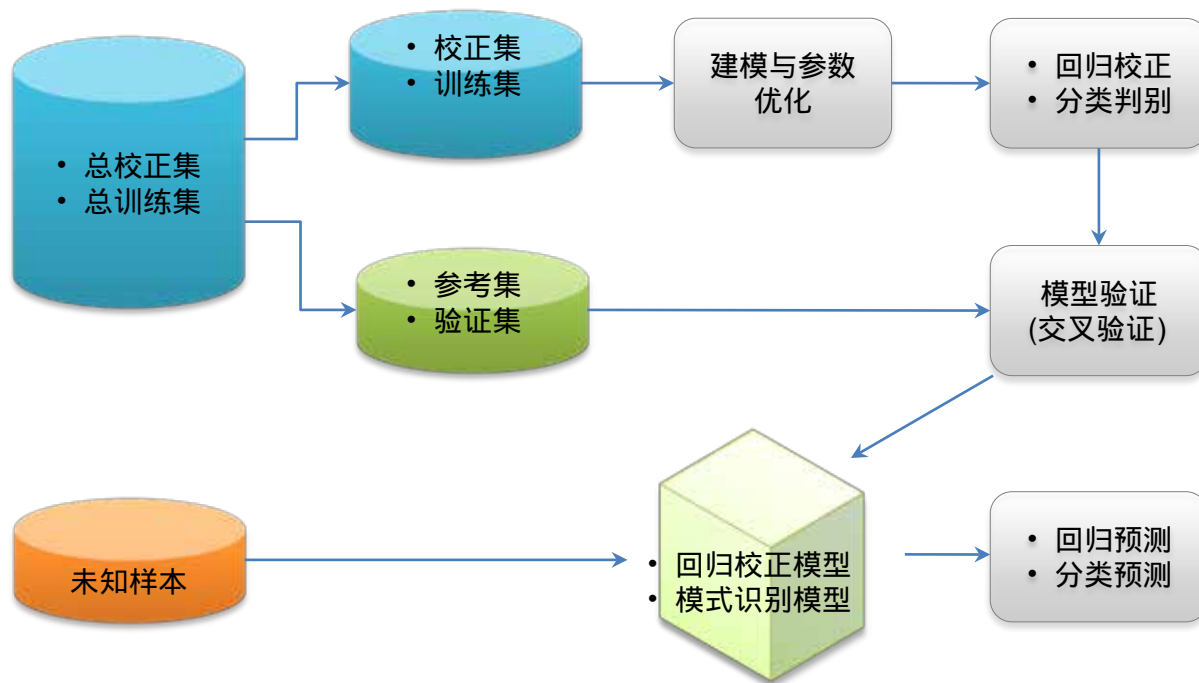
人工神经网络 - SOM图表



回归建模 - 偏最小二乘回归



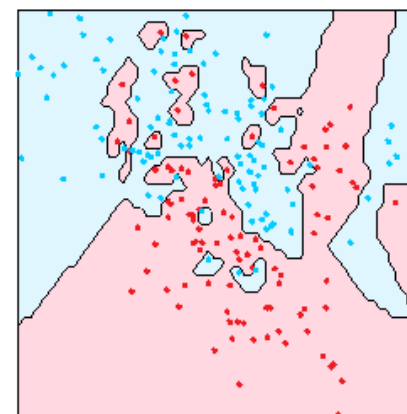
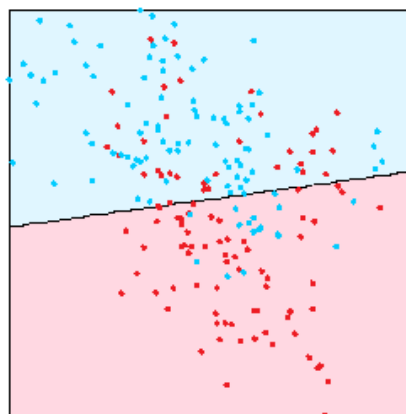
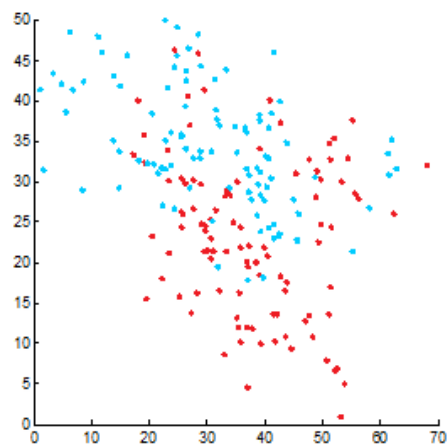
化学模式识别



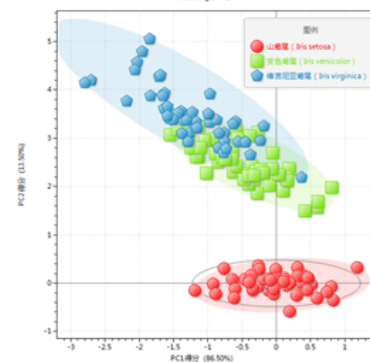
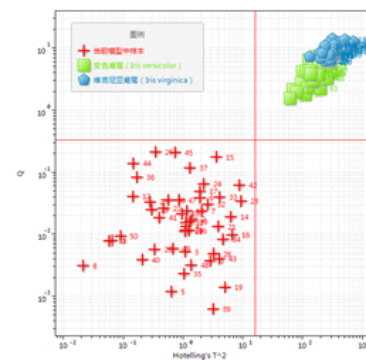
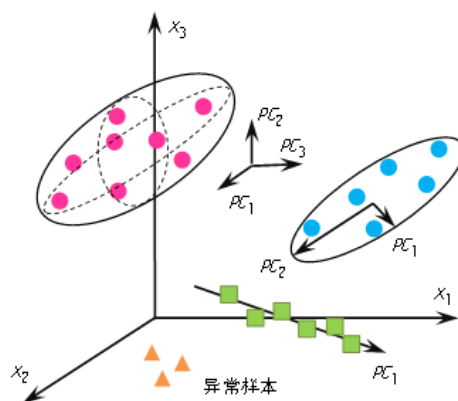
ChemPattern化学模式识别方法

- k近邻法 (kNN)
- 偏最小二乘判别分析 (PLS-DA)
- 典型相关分析 (CCA)
- 簇类独立软模式 (SIMCA)
- 支持向量机 (SVM)
- 自组织映射人工神经网络 (SOM)

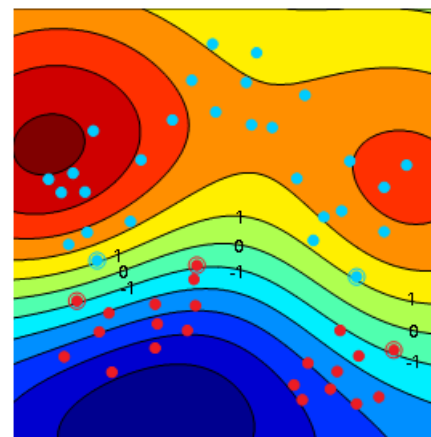
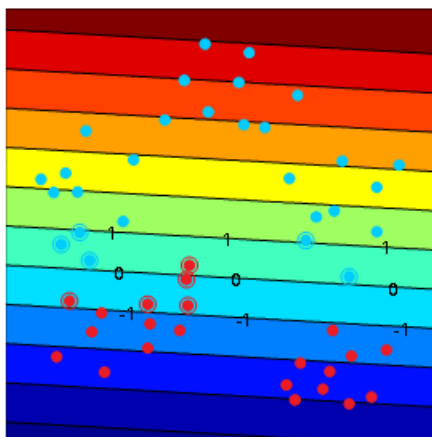
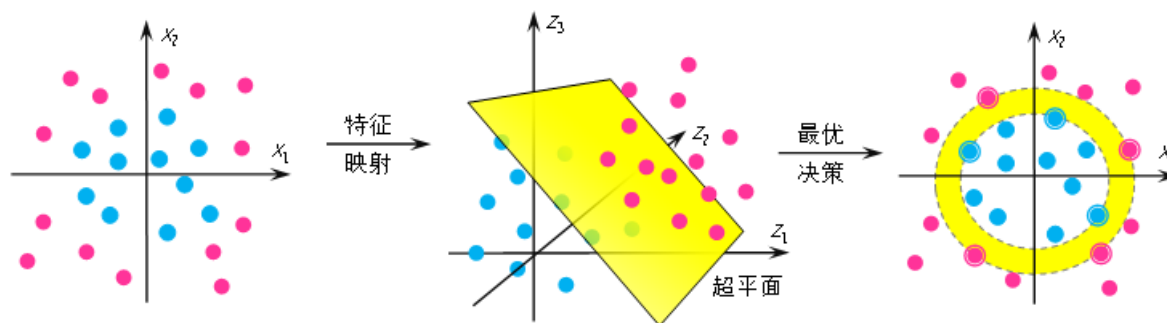
模式识别 - k近邻法



模式识别 - 簇类独立软模式法



模式识别 - 支持向量机



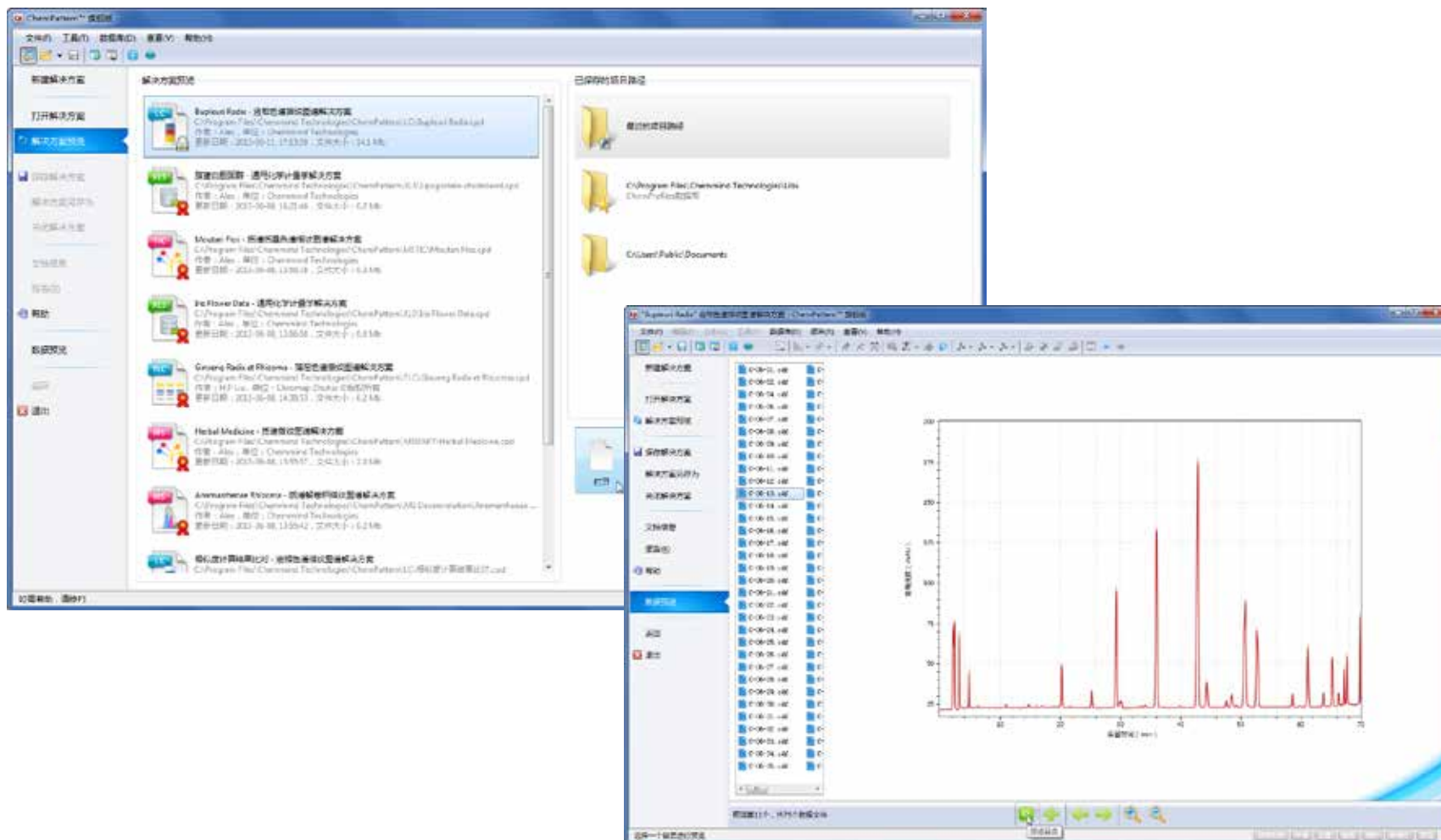
ChemPattern™ 谱蕴™

先进化学计量学与化学指纹图谱系统解决方案软件



软件系统功能

解决方案管理及数据预览界面

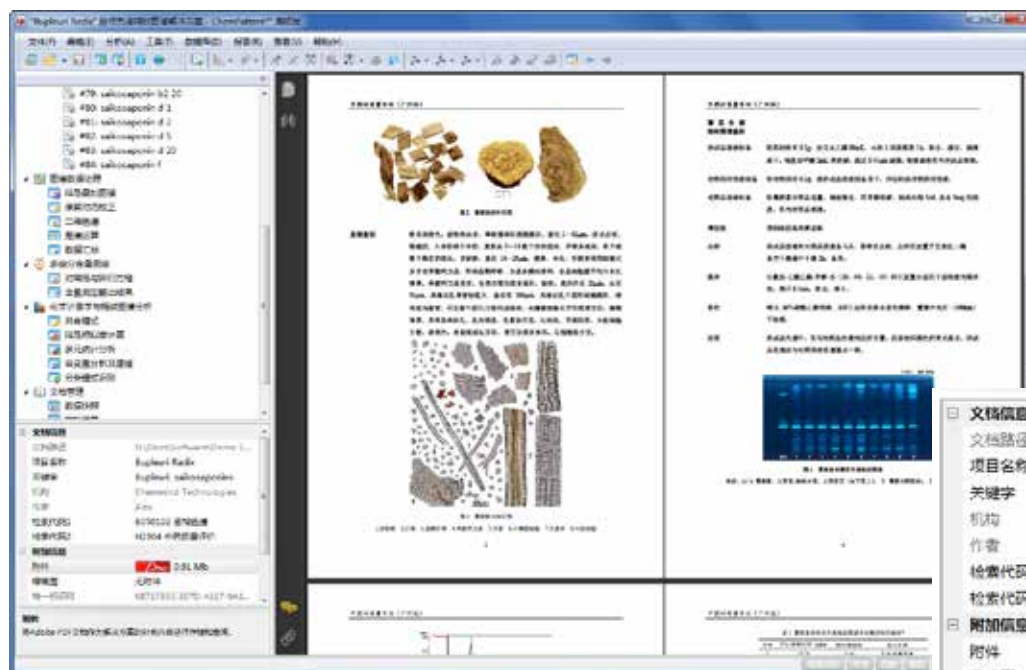


LIMS/21 CFR PART 11



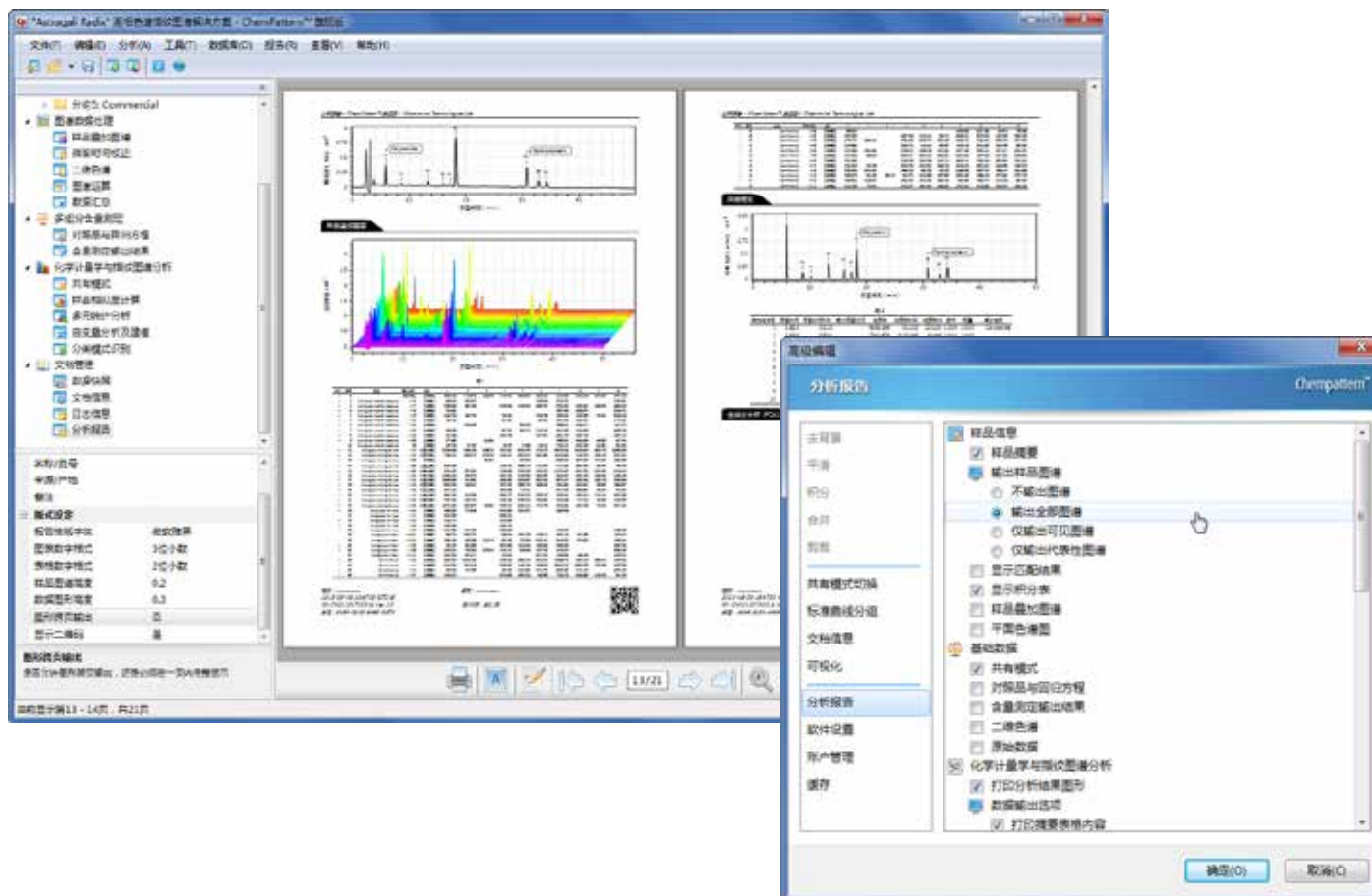


文档信息管理

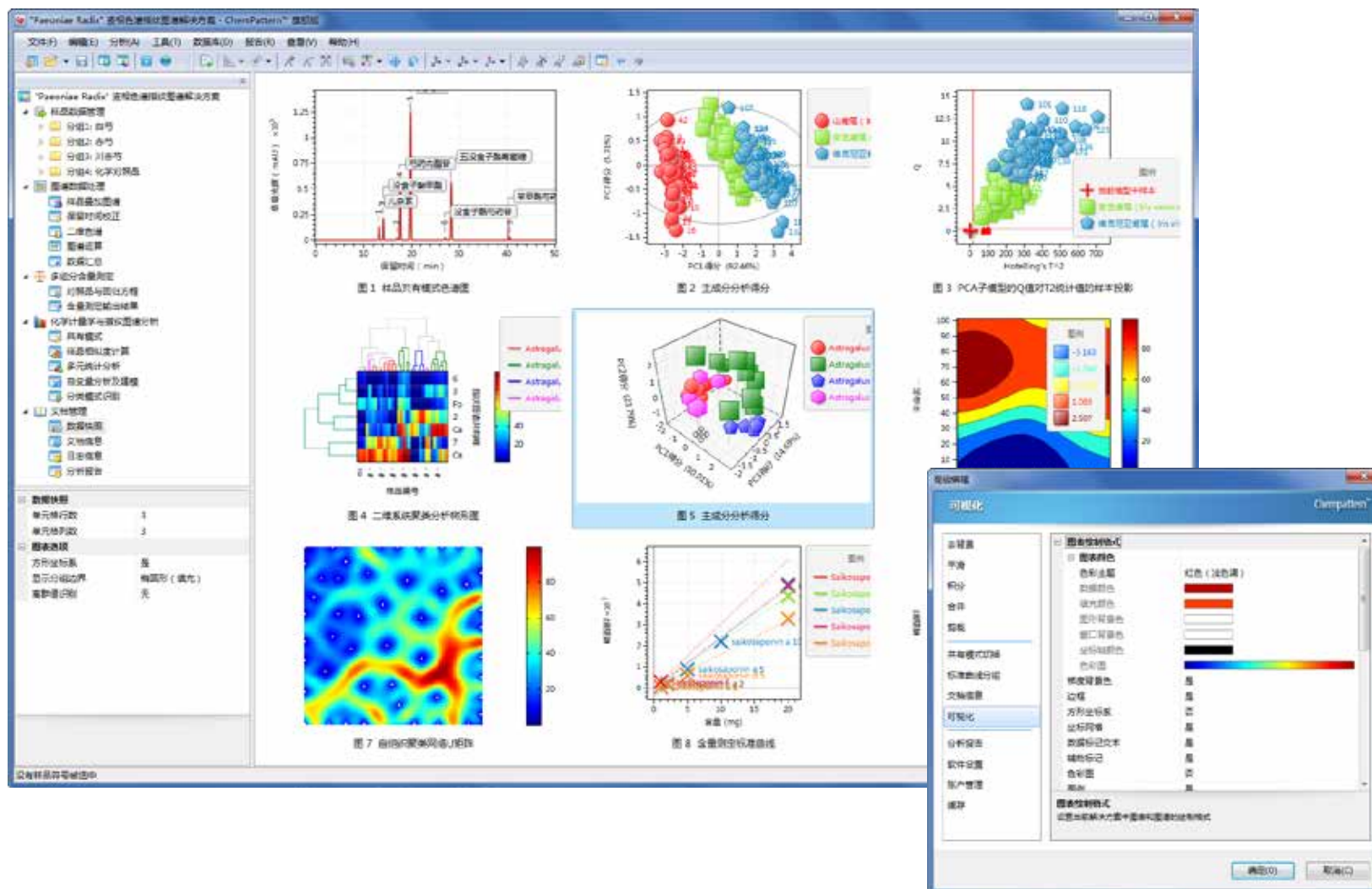


文档信息	
文档路径	C:\Program Files\Chemmind Technologies\...
项目名称	Bupleuri Radix
关键字	Bupleuri, saikosaponins
机构	Chemmind Technologies
作者	Alex
检索代码1	B050102 液相色谱
检索代码2	B0512 化学计量学与化学信息学
附加信息	
附件	 4.32 Mb
缩略图	 0.02 Mb
唯一标识符	68717B93-E07D-4317-9A39-EC599DB84...
文档访问设置	
电子签名	启用
文档访问控制	仅允许发布者访问
文档编辑控制	全部禁止
电子签名	
当前解决方案文档添加电子签名，保存后生效，该签名不可撤销。	

分析报告生成



数据快照



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



应用实例

化学计量学应用领域

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
化学药物	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、农产品化学	食品安全快速筛查、违法违禁添加检测、检验检疫、产品质量控制与真伪鉴别、原料及添加剂分析、风味特征物质剖析、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
珠宝及考古学	古颜料、玉石、陶瓷等的辨伪、断代、断源及文保
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

解决方案 - 中药及天然产物

产品质量控制解决方案

- ü 中药材、饮片及中成药的质量控制及过程监控
- ü 药品真伪优劣快速鉴别及药品安全筛查
- ü 中药注射剂指纹图谱质量标准
- ü 国家基本药物品种评价性抽样
- ü 农残及重金属分析
- ü 名特优中成药品牌的指纹图谱质量标准建立

解决方案 - 中药及天然产物(2)

中药新药创制及物质基础研究解决方案

- ü 药用植物资源研究及种属基源鉴定
- ü 药用植物代谢组学研究
- ü 中药药效评价及谱效学研究
- ü 中药药代动力学及药物代谢组学研究
- ü 中药新药创制及安全性检验

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



联系我们

欢迎访问我们的网站



www.chemmind.com

并与我们取得联系

企业简介

[首页](#) ▶ [公司概况](#) ▶ [企业简介](#)

科迈恩（北京）科技有限公司由原中科院大连化学物理研究所留学归国博士后创办，于2012年1月30日注册成立。公司位于北京（海淀）留学人员创业园内，是一家快速成长、朝气蓬勃的高新技术企业。公司致力于复杂体系分析所需的软硬件系统的研制开发，以满足目前化学分析领域对于先进数据分析手段和仪器日益增长的迫切需求，从而为分析化学和仪器分析各个分支领域的产、学、研界专业用户提供领先的复杂分析体系一站式解决方案和技术服务。

公司于2013年9月所最新推出的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。该分析软件系统可广泛应用于中药、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。

科迈恩科技秉持“创新+应用+标准”的可持续化发展思路，以“智慧化学，化繁为简”的产品理念，为用户提供完整的先进软硬件系统解决方案、应用支持以及技术服务。我们以雄厚的技术实力和完善的客户服务体系为后盾；以重诺守信，严谨求实，目光远大的行为准则。恪守“用户第一，服务至上”的理念，与用户保持长期密切合作，从而为广大客户提供放心、满意的专业产品和技术服务。



中关村创业大厦

北京（海淀）留学人员创业园

全国免费服务热线 400-010-6001

感谢您的关注！




科迈恩（北京）科技有限公司

ChemPattern

先进化学计量学系统解决方案软件

ChemPattern™谱蕴™先进化学计量学系统解决方案软件为复杂体系高通量、高内涵的定性、定量解析提供一站式解决方案。可用于基于色谱、质谱、光谱及核磁共振波谱数据的化学指纹图谱分析、代谢组学分析、替代对照品法含量测定、快速无损分析、有关物质分析、肽图分析、痕量分析、非目标分析，以及信息学研究和数据挖掘等任务。

该软件系统可广泛应用于临床医药、代谢组学、食品安全、烟草白酒、香精香料、石油化工、检验检疫、环境监测、文物保护、国土安全以及司法鉴定等复杂体系相关的分析领域。



现在是时候开始体验
面向复杂体系等前沿分析
领域的大数据分析及干法
实验工具了！