



# ChemPattern®

先进化学计量学系统解决方案软件

# 快速入门

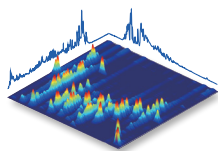
欢迎试用 ChemPattern®!

本指南将引导您快速安装及创建  
解决方案文档，以及如何获得帮  
助和在线技术支持。

# 简介

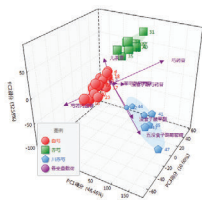
访问 [www.chemmind.com](http://www.chemmind.com)

ChemPattern® 为基于各类色谱、质谱、光谱及核磁数据的复杂体系高通量、高内涵解析提供一站式化学计量学解决方案。该系统可应用于指纹图谱、代谢组学、产品过程控制、定量勾兑、特征剖析，以及快速无损分析等复杂任务。



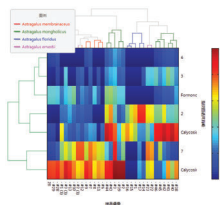
## 强大的分析仪器数据兼容和专业的前处理功能

ChemPattern®提供对各类柱色谱、平面色谱、质谱、光谱，以及核磁共振波谱数据的导入支持。专业的数据前处理功能包括色谱峰保留时间对齐、质谱解卷积及分子特征匹配、光谱多元校正、NMR分段积分，以及多组分同时含量测定等。



## 完善的化学计量学算法支持

ChemPattern®提供共有模式建模、数据规范化、相似度分析、定量勾兑、多元统计分析、化学模式识别等，涵盖 PCA、PLSR、PLS-DA、SOM、ANN、SVM、SIMCA、聚类热图、线性规划等数十种经典算法，可满足各类不同分析任务的需要。



## 所见即所得的大数据可视化技术

通过与化学计量学的“数学分离”手段(干法实验)相结合，ChemPattern®的大数据可视化技术可对仪器的高维高分辨数据及其分析结果进行高质量重现，从而协助您揭示复杂体系大数据中所蕴藏的丰富信息与激动人心的新发现。

# 安装

访问 [download.chemmind.com](http://download.chemmind.com)

---

ChemPattern® 软件的安装内容包括主要主程序、帮助文档及各类示例数据库，此外在安装过程中还需要对数字签名根证书和用户数字证书进行配置。

1. 双击 ChemPattern® DVD安装光盘中的 Installer.exe程序图标，启动安装程序。
2. 请认真阅读显示的《软件最终用户许可证协议》，并选择“接受”以继续安装。
3. 接下来，请对软件的安装内容以及安装路径进行配置。
4. 在用户数字签名证书界面中，选择您存放电子签名证书 (.cer ) 的位置。
5. 安装过程中，程序将显示根证书安装确认对话框，请点击“是”。
6. 安装完毕后，将提示您在启动软件前将用户授权证书 USB Key连接电脑。
7. 至此软件已安装完毕，可选择“立即启动 ChemPattern程序”，并单击“完成”。
8. 软件首次启动后即进入用户登录界面，软件的管理员账号为 Administrator，初始密码为: 111111。



---

## 产品安装手册

更全面的安装配置指南请参考《ChemPattern产品安装手册》电子版，其位于 DVD安装盘的 \Manual子目录下，亦可访问网站 [download.chemmind.com](http://download.chemmind.com)进行在线下载。

# 创建解决方案

访问 [solution.chemmind.com](http://solution.chemmind.com)

---

ChemPattern® 针对不同的分析仪器类型分别提供完善的数据前处理和化学计量学解决方案，从而充分满足您跨仪器平台的大数据分析和管理的需要。



## 柱色谱法系统解决方案

支持 HPLC、UPLC、LC×LC、GC、HPCE等



## 平面色谱法系统解决方案

支持TLC、HPTLC、PAGE等



## 质量色谱法系统解决方案

支持 GC/MS、LC/MS、CE/MS、TLC/MS等



## 质谱解卷积系统解决方案

支持ESI-MS、APCI-MS等



## 质谱法解决方案

支持 DART-MS、ICP-MS等



## 红外光谱法系统解决方案

支持NIR、IR、Raman等



## 核磁共振波谱系统解决方案

支持  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR



## 通用化学计量学解决方案

支持任意格式的电子表格类型数据分析

---

## 产品使用手册

更全面的软件使用指南请参考 ChemPattern产品手册，其位于 DVD安装盘的 \Manual子目录下，或者访问网站 [wiki.chemmind.com](http://wiki.chemmind.com)获得联机帮助，亦可登录网站 [download.chemmind.com](http://download.chemmind.com)在线下载说明书的电子版。

# 技术支持

访问 [support.chemmind.com](http://support.chemmind.com)

---

您可通过400免费热线电话、网站、电子邮箱，以及微信公众号等多种途径方便地与我们联系。



## 产品本身

打开 ChemPattern应用程序并单击“帮助”菜单。



## 联机支持

通过网站进行即时检索。  
产品中心:  
[product.chemmind.com](http://product.chemmind.com)  
在线百科:  
[wiki.chemmind.com](http://wiki.chemmind.com)



## 热线电话

通过电话获得人工帮助。  
全国免费服务热线：  
400-010-6001



## 电子邮箱

售前咨询：  
[info@chemmind.com](mailto:info@chemmind.com)



## 微信公众号

请搜索“ChemPattern”公众号，或扫描右侧二维码并添加。



---

© 2012-2015 Chemmind Technologies Co., Ltd.

ChemPattern 和“谱蕴”是科迈恩（北京）科技有限公司的商标。Art.No. 109.01 v1.0, 2015年5月印于北京

[www.chemmind.com](http://www.chemmind.com)

**Chemmind**<sup>®</sup>  
TECHNOLOGIES

# 产品与服务

访问 [product.chemmind.com](http://product.chemmind.com)

科迈恩(北京)科技有限公司致力于为药品、食品、临床医学等分析化学各相关领域提供专业大数据分析技术,以及复杂体系先进质量控制解决方案。



©2012-2015 Chemmind Technologies

## ChemPattern®

### 先进化学计量学系统解决方案软件(中英文双语)

该解决方案软件可广泛应用于药学、临床医学、食品、烟草、白酒、香精香料、石油化工、检验检疫、环境监测等分析化学相关分支领域。

[www.chemmind.com](http://www.chemmind.com)



©2015 Chinese Pharmacopoeia Commission

## 数字化中药材标准

### 国家药品标准数字化出版物及数据库载体(5国语言)

国家药典委员主编,科迈恩(北京)科技有限公司研制。作为国家药品标准的信息化载体和集大成者,该软件旨在为系统使用及研究包括《中国药典》在内的各级中药材质量标准提供前瞻性的数字工具。

[www.chpapp.cn](http://www.chpapp.cn)

# 仪器分析解决方案

访问 [wiki.chemmind.com](http://wiki.chemmind.com)

ChemPattern® 通用数据接口技术实现了仪器工作站与数据分析“干法实验”之间的无缝衔接。系统采用规范化的处理流程，为高维高分辨大数据的信息挖掘和定量分析等核心问题提供一站式解决方案。

### 1 色谱法系统解决方案

色谱峰保留时间对齐提供对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的功能。

含量测定具备(外 内) 标法校正因子和分组校正等功能，适用于大样本集、多数据源的复杂体系样品的多组分同时含量测定。

共有模式建模系统确保自变量的筛选过程完全以统计学方式进行，在软件多元统计分析中具有承上启下的作用。

### 3 光谱法系统解决方案

为近红外、拉曼等光谱数据提供以多元校正定量分析、化学模式识别为代表的复杂体系样品在线分析及快速无损分析等功能。

### 2 质谱法系统解决方案

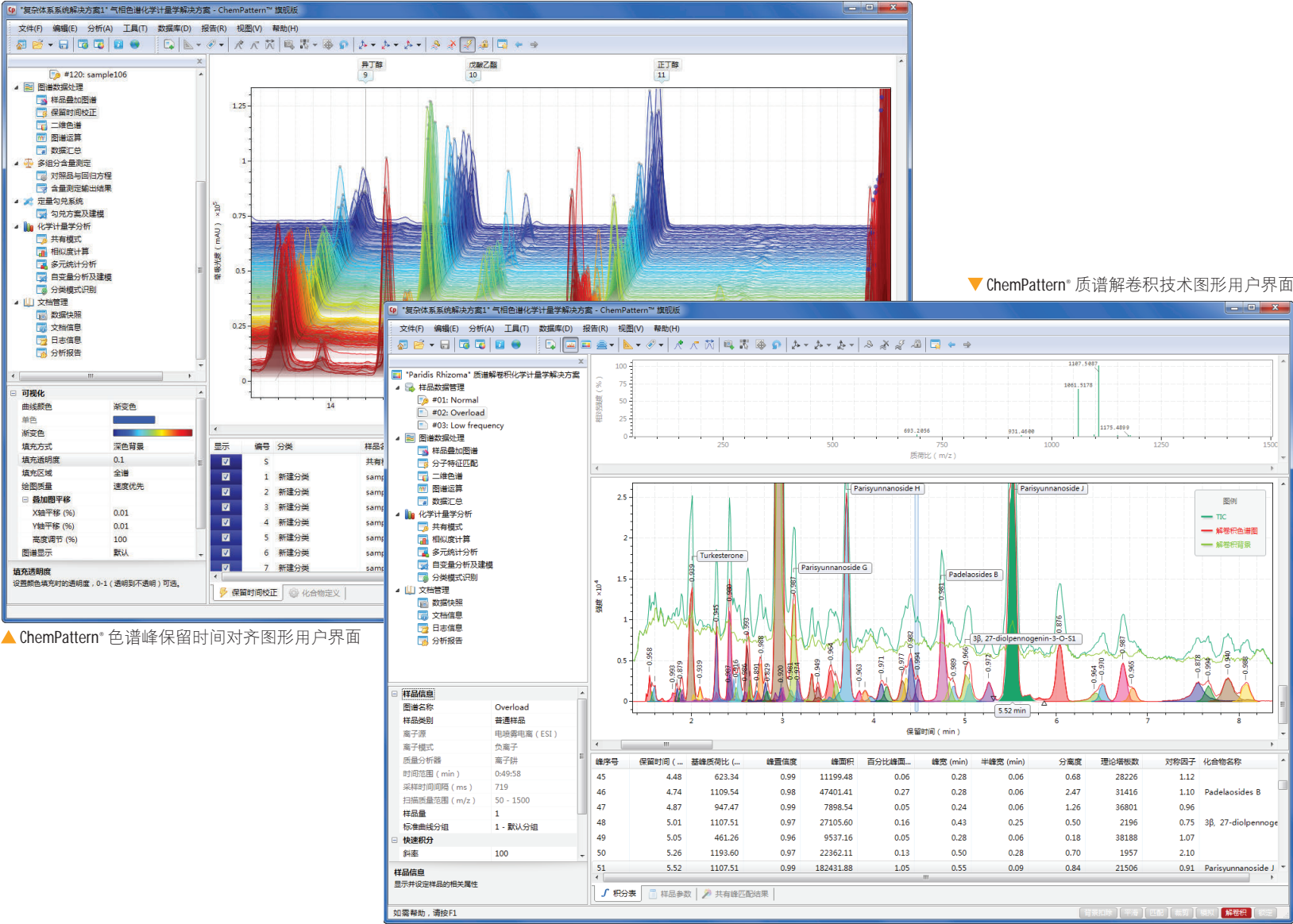
质谱解卷积技术适用于复杂的 LC/MS共流出峰解析。高度优化的解卷积算法可兼容不同分辨率和质量的质谱数据。

分子特征匹配技术利用化合物的质谱与色谱信息对解卷积色谱峰进行自动对齐，实现了对化合物的快速和精确定性分析。

DART-MS及 ICP-MS质谱共有模式建模技术使得进行基于质谱数据的精确匹配和数据的深入挖掘成为可能。

### 4 核磁共振波谱法系统解决方案

基于核磁共振波谱法化学计量学解决方案为复杂体系指纹图谱分析、代谢组学分析等任务提供化学位移校正、分段积分处理技术。



▼ChemPattern® 质谱解卷积技术图形用户界面

▲ChemPattern® 色谱峰保留时间对齐图形用户界面



# 行业解决方案

访问 [solution.chemmind.com](http://solution.chemmind.com)

分析化学是一门与数据分析息息相关的量测和信息科学。随着仪器性能和化学计量学的快速发展，分析化学正迎来“大数据时代”的到来。ChemPattern® 为复杂体系分析提供了有力工具，并针对不同行业用户提供专业化的应用解决方案。

## 1 中药与天然药物

药材饮片及成药真伪优劣鉴别与质量评价、化学指纹图谱分析、中药注射剂质量控制、定量谱学研究

## 3 化学药及生物制品

有关物质分析、原料药及中间体快速鉴别、生物制品肽图指纹谱分析

## 5 临床医学

疾病代谢组学、癌症的早期诊断、基于HRMS的先进快速诊断技术

## 7 石油化工

轻质油、润滑油、生物柴油的油品分析、油页岩分析、溢油源鉴别

## 9 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

## 2 食品化学

食品安全快速筛查、产品质量控制与鉴别、原料及添加剂分析、风味特征物质剖析、定量勾兑、香精香料分析

## 4 代谢组学

药理、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

## 6 环境化学

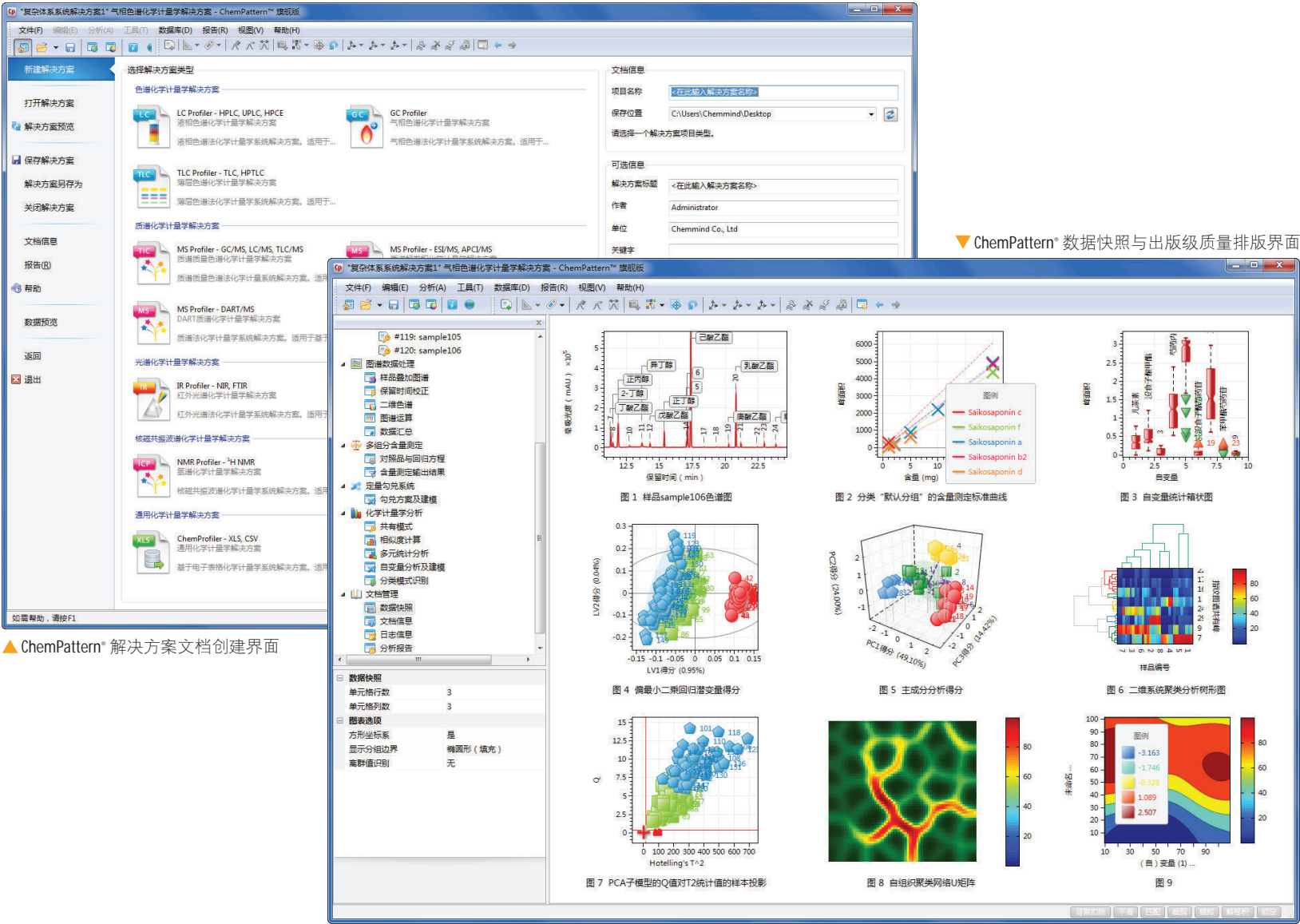
污染物分析、有害物监测、污染事故快速检测

## 8 化学化工

商业化学品剖析、高聚物鉴别、合成过程控制

## 10 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® 数据快照与出版级质量排版界面