



Comprehensive Chemometrics
Modeling Software



Pirouette 5.0

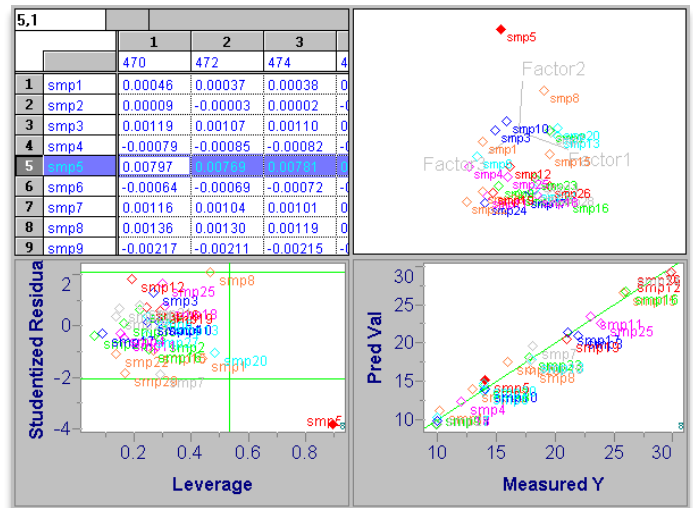
ケモメトリクス用ソフトウェア Pirouette

複雑なデータを多変量解析で解釈可能に！

Infometrix 社のPirouette は、ケモメトリクス用ソフトウェアです。クロマトグラフィーや分光光度計、質量分析計など、膨大で複雑なデータを一括して読み込み、多変量解析し、その中に潜んでいる重要な情報を効率的に抽出します。ツールボタンとマウス操作だけで簡単に結果が得られ、難解な数学や統計学の知識は必要ありません。解析結果も理解しやすい図で表示されるため、多変量解析を始める初心者の方はもちろん、ケモメトリクスに詳しいエキスパートの方まで、全てのユーザーに最適なソフトウェアです。

□ ケモメトリクスの応用分野

- ・科学捜査、法医学
 - ・環境科学
 - ・食品や飲料の分野
 - ・定量的構造活性／物性相関
 - ・医学・薬学
 - ・バイオテクノロジー
 - ・石油化学
- など



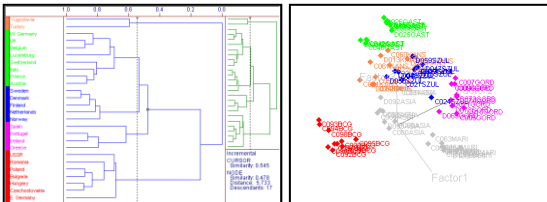
Pirouette が持つ多変量解析の手法

Pirouette には、ケモメトリクスの分野で使用される、代表的な以下のアルゴリズムが用意されています。

<探索的データ解析>

～データの特徴を抽出する～

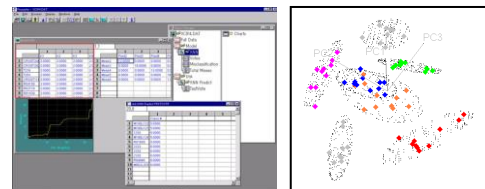
- ・ クラスタ分析 (Hierarchical Cluster Analysis)
- ・ 主成分分析 (Principal Component Analysis)
(+ OSC 直交化信号相関)



<分類とモデリング>

～未知サンプルをカテゴリーに分類する～

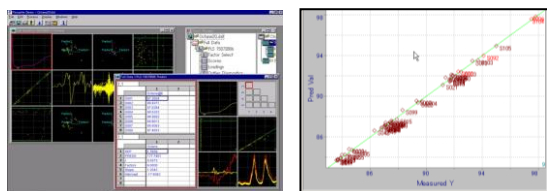
- ・ KNN (K-Nearest neighbors)
- ・ SIMCA (Soft Independent of Class Analogy)
- ・ PLS-DA (Partial Least Squares-Discriminant Analysis)



<多変量回帰分析>

～未知サンプルの特性値を回帰モデルから予測する～

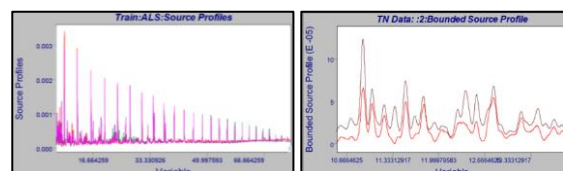
- ・ PLS (Partial Least Squares)
(+ OSC 直交化信号相関)
- ・ PCR (Principal Component Regression)
- ・ CLS (Classical Least Squares)



<多変量カーブリゾリューション>

～混合スペクトルを分離する～

- ・ MCR (Multivariate Curve Resolution)
- ・ ALS (Alternating Least Squares)



お手持ちのデータをそのまま使えます

クロマトグラムのデータ (ANDI/AIA フォーマット) や、近赤外分光計のデータ (JCAMP フォーマット) を、そのままPirouette で読み込みます。また、データ処理機独自のファイル形式も多数サポートしています。表計算ソフトウェアとしてのMicrosoft Excel や Lotus 1-2-3 のファイル、他のWindows アプリケーションからの、コピー& ペーストも可能です。

読み込み可能なファイル形式

ASCII (*.DAT, *.CSV)	NIR Systems (*.DA)	Mattson (*.ASB)
Lotus 1-2-3 (*.WK*)	LT Industries (*.DAT)	Brimsrose (*.DAT)
Excel (*.XLS, *.XLSX)	Galactic (*.SPC)	Guided Wave (*.ASC)
AIA (*.CDF)	Perkin Elmer (*.SP)	Agilent/HP (*.WAV)
JCAMP (*.DX, *.JDX)	KVB Analect (*.ASF)	ChemStation (*.CH)

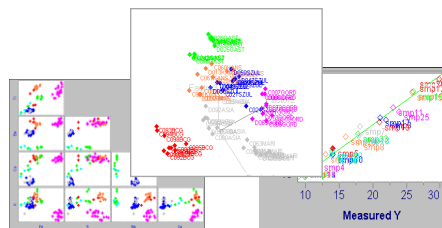
結果を効率的に可視化します

〈データの表示形式〉

読み込んだデータを、テーブルや図として視覚的に表現できます。多変量解析を実行する前に、データをさまざまな角度から観察することで、データ間の類似性、傾向、アウト라이어等を発見できます。

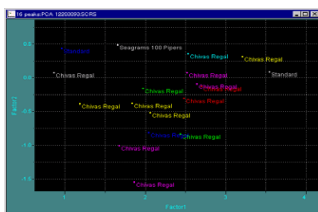
表示可能な形式

テーブル表示、ラインプロット、二次元散布図、三次元散布図、マルチプロット



〈名前の表示〉

テーブルに入力したサンプル名や変数名を、図中に表示できます。異常値を発見した場合には、直ちにそのサンプル名や変数名を把握できます。



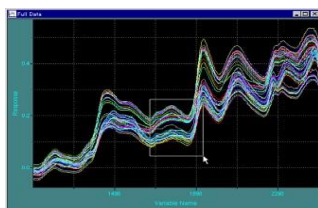
〈リンク機能〉

テーブルや図の一部をマウスで選択すると、それにリンクして、別の図の同一部分が自動的に選択されます。さらに、クローク機能によって、リンクされたサンプルのみを容易に確認できます。



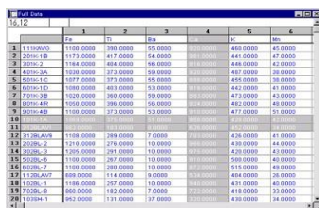
〈図の部分的拡大〉

散布図やラインプロットの一部分を、マウス操作によって自由に拡大し、詳細に観察できます。



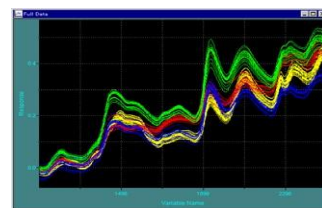
〈サンプルの一部除外〉

異常値や一定のサンプルグループ、変数ブロック等を除外してから、再表示や再解析できます。



〈色による識別〉

同じカテゴリーに属するサンプルを、同一色で表示できます。これにより、グループ間の関係や特長を明確に識別できます。



データの前処理と変換

データの質を高めるために、前処理や変換を適切に行うことは、多変量解析を成功させる第一歩です。Pirouette は、以下の前処理機能と変換機能を備えています。

前処理 (Preprocessing)

- オートスケール (正規化)
- 平均化
- レンジスケール
- 分散スケール
- パレート

変換 (Transform)

- 微分 (1次、2次)
- 整列 (Align)
- ベースライン補正
- 除算・乗算・減算
- 常用対数 (Log10)
- MSC
- ノーマライズ
- 平滑化
- SNV

動作環境

CPU: 3GHz、RAM: 12GB 以上
HDD / SSD : 100MB 以上の空き容量
OS : Microsoft Windows 10 / 11

ライセンスについて

1PC固定ライセンス
USBシングルライセンスによる複数PCでの運用も可能
アカデミック版ライセンスあり

本製品に関するお問い合わせ先



ヘルスケアサービス部 ライフサイエンスグループ
〒107-0052
東京都港区赤坂9-7-2 東京ミッドタウン・イースト10F
TEL: 03-6866-3860
Email: info-science@infocom.co.jp
HP: https://www.infocom-science.jp/

総輸入元



〒163-1130
東京都新宿区西新宿6-22-1 新宿スクエアタワー30F
TEL: 03-5323-6611
HP: https://www.gls.co.jp/

■記載の商品名等は各社の登録商標、または商品場合があります。
■仕様及び価格は予告なく変更する場合があります。最新情報はお問い合わせ下さい。
■本カタログの仕様は2023年6月現在のものです。