

Die umfassende Softwareplattform für die chemometrische Praxis in der Spektroskopie

Intelligente Spektroskopie...

Spektroskopie mit chemometrischer Auswertung ist eine in mehreren Jahrzehnten ausgereifte Technologie, mit der konventionelle, meist chemische Analysenmethoden durch viel einfachere Messungen mit optischen Geräten ersetzt werden können. Ermöglicht wird dies durch Modellierung des Zusammenhangs zwischen Spektren und Analysendaten mit bewährten mathematisch-statistischen Methoden. Auf diese Weise können zerstörungsfrei, sauber und schnell Eigenschaften von unbekanntem Proben bestimmt werden. Mit anderen Worten: in der täglichen Routineanalytik werden damit Zeit, Ressourcen und vor allem Kosten eingespart.

... mit SL-Softwareprodukten

Durch die Verbindung mehrerer sorgfältig abgestimmter SL-Anwendungsmodulen mit einer einheitlichen Projekt-Datenbankstruktur können die Anforderungen vielfältiger Einsatzgebiete erfüllt werden. Die SL-Module sind einsetzbar zum Beispiel:

- zur Analyse von Getreideproben in der Landwirtschaft,
- zur Untersuchung von Fleischprodukten in der Lebensmittelproduktion,
- zur Bestimmung der Säurezahl von Substanzen in der chemischen Industrie oder der Oktanzahl von Benzenen in der Petrochemie,
- zur Identitätsprüfung in der Pharmaindustrie.

Der gesamte Arbeitsablauf - von der Erfassung der Spektren und Referenz-Analysenwerte, der anschließenden Erstellung einzelner Kalibrationsmodelle und kompletter Applikationen bis hin zu ihrer Anwendung im Messbetrieb - wird praxistgerecht unterstützt. Dies geschieht unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Arbeitsplatzanforderungen und weitgehend unabhängig von dem jeweils eingesetzten Gerätetyp.

Aufgrund ihrer durchdachten Modularisierung eignet sich die SL-Produktfamilie gut für kunden- oder anwendungsspezifische Anpassungen. Also überall dort, wo besondere Anforderungen erfüllt werden müssen, jedoch das Erstellen einer reinen Individualsoftware wirtschaftlich nicht gerechtfertigt ist.

Folgende **SL** - Module sind erhältlich:

SL Calibration Workshop:

für die praxisgerechte Entwicklung und Validierung spektroskopischer Analysemethoden zur Bestimmung qualitativer und quantitativer Probeneigenschaften

SL Predictor:

für den vielseitigen Routineeinsatz im analytischen Messbetrieb at-line oder im Labor zur qualitativen und quantitativen Analyse und zur Datenerfassung für die Methodenentwicklung

SL Application Development Kit

zur flexiblen Verwendung der *SL*-Plattform durch OEM-Partner in zusätzlichen spezifischen Softwareanwendungen

SL Utilities:

eine Sammlung nützlicher Hilfsprogramme, darunter Spektrenbearbeitung, Formatkonvertierung, Batch-Import sowie Eingabehilfe für Touchscreens

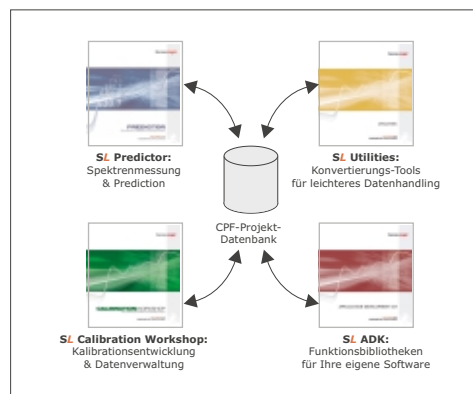


Fig. 1: *SL*-Module

Partner

Um unseren Kunden einen problemlosen Betrieb mit den *SL*-Produkten zu ermöglichen, arbeitet *SensoLogic* eng mit den Herstellern von Spektralphotometern zusammen, die uns Original-Gerätetreiber zur Verfügung stellen und/oder das *SL* Application Development Kit benutzen. In der Liste der *SL* Partner sind alle Hersteller- und Vertriebsfirmen aufgeführt, die eine Verwendung der *SL*-Plattform in Verbindung mit ihren Produkten unterstützen.

Schulungen

SensoLogic bietet Gruppen- und Firmenseminare zum effizienten Arbeiten mit allen *SL*-Produkten sowie zu ihren spektroskopischen und chemometrischen Grundlagen an. Details entnehmen Sie bitte unseren Schulungs- und Kalibrationsinformationen.

Kalibrationsentwicklung

Auf Wunsch übernehmen wir im Kundenauftrag die Entwicklung einzelner chemometrischer Kalibrationen, die langfristige Betreuung für bestimmte analytische Methoden bis hin zur kompletten Kalibrationsentwicklung und Pflege. Details entnehmen Sie bitte unseren Schulungs- und Kalibrationsinformationen.

Preisliste

Bitte fordern Sie unsere aktuelle Preisliste für die Module der *SL*-Produktfamilie unter info@sensologic.com (Betreff: *SL*-Preisliste) an.

SL Calibration Workshop Vs. 2.03

Einfache Modellerstellung für quantitative und qualitative Analyse



Inhalt:

Software SL Calibration Workshop
Sprache: Englisch
1 CD-ROM
1 Software Handbuch (Englisch)

PC System Anforderungen:

Intel- oder AMD-Prozessor (empfohlen > 1 GHz)
mindestens 256 MB RAM
mindestens 20 MB Platz auf Festplatte
CD-Laufwerk
Druckeranschluss
MS Windows 98/2000/NT/XP

Eine große Auswahl bewährter statistischer Techniken steht für jeden analytischen Einsatzzweck zur Verfügung. Die freie Kombination von MLR- und Faktormodellen mit der jeweiligen Outlier-Diagnose sichert die bestmöglichen Analyseergebnisse. Fertige Applikationen werden im SL Calibration Workshop erstellt und stehen für die Berechnung von qualitativen und quantitativen Eigenschaften unbekannter Proben im SL Predictor zur Verfügung.

Funktionen des SL Calibration Workshop

Bewährte statistische Techniken

Methoden der quantitativen Faktoranalyse: Principal Component Regression (PCR)
Partial Least Squares Regression (PLSR)
Multiple lineare Regression (MLR): mit freier Kombinationssuche
sichert die besten Analyseergebnisse

Die freie Kombination von MLR- und Faktormodellen mit der jeweiligen Outlier-Diagnose *sichert bestmögliche Analyseergebnisse!*

PCA Bibliotheks- und Clustermodelle: sichere Identifikation und Qualifikation

Verschiedene Importformate

- JCAMP (*.dx, *.jdx); für die Konvertierung anderer Formate in JCAMP siehe SL Utilities
- GRAMS Multifiles (*.spc); siehe auch SL Utilities
- Unscrambler (*.una, *.uns)
- Sesame Projektdateien (*.spf)
- Binärfiles (*.dat)

Datenvorbehandlung und Spektrenauswahl

- Standardisierung
- Glättung
- Ableitungen
- Standard Normal Variate (SNV) u.a.
- Kombinationen aller Algorithmen
- Filterwerkzeuge zur Auswahl von Spektren, z.B. nach Extinktionswerten bei frei wählbarer Wellenlänge, nach Ausreißern oder nach Merkmalswerten

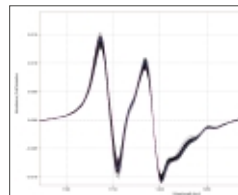


Fig. 2:
Ausschnitt eines Kohlenwasserstoffspektrums, das mit der 1. Ableitung der Absorptions-Werte transformiert wurde

Graphikfunktionen

- zur Beurteilung von Primär- und Sekundärdaten
- anwendungsfreundliche Tools für die Auswertung der Techniken zur Faktoranalyse

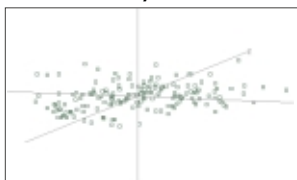


Fig. 3:
Score plot Darstellung einer Spektrenserie zur Identifizierung möglicher Untergruppen, Outliern oder anderer interessanter Eigenschaften des Datenmaterials

SL Predictor Vs. 1.3

Labor- oder Produktions-Analytik für den täglichen Einsatz



Inhalt:

Software SL Predictor
Sprachen: Deutsch, Englisch

- 1 CD-ROM
- 1 Software Handbuch (Deutsch, Englisch)

PC System Anforderungen:

Intel- oder AMD-Prozessor (empfohlen > 1 GHz)
mindestens 256 MB RAM
mindestens 20 MB Platz auf Festplatte
CD-Laufwerk
Druckeranschluss
MS Windows 98/2000/NT/XP

Vielfältige Konfigurationsmöglichkeiten im SL Predictor erleichtern die spektroskopischen Routine-Analysen in Labor und Produktion:

- Die Spektrenaufnahme erfolgt einfach und bedienerfreundlich
- Eigenschaften unbekannter Proben werden zeitsparend und effizient berechnet.
- Die Anpassung vorhandener Kalibrationsmodelle mit neuem Datenmaterial ist problemlos im SL Calibration Workshop möglich.

Funktionen des SL Predictor

Konfigurierbarkeit des Arbeitsplatzes

- Spektrometer verschiedener Hersteller sind unter Verwendung vollständig integrierter Originaltreiber eingebunden (siehe Partner).
- Für jeden Spektrometertyp sind individuell entsprechend seinem Treiber die Geräteparameter einstellbar.
- Die Ausgabeformate für die Messergebnisse sind beliebig wählbar über Bildschirm, Drucker, ASCII-Dateien, etc.

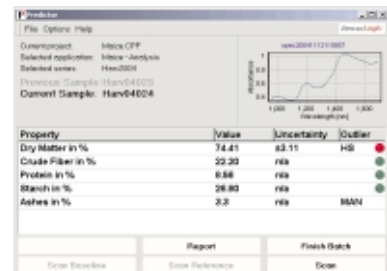


Fig. 4: Messbildschirm SL Predictor

Bedienungsfreundlichkeit

- Optionale Eingabe von Referenz-Analysenwerten gleich bei der Spektrenaufnahme
- Spektrenaufnahme mit oder ohne Abspeichern direkt in der SL-Datenbankserie
- Spektrenaufnahme allein oder mit qualitativer bzw. quantitativer chemometrischer Analyse
- Scan-Optionen wie z.B. Mittelung von Wiederholmessungen

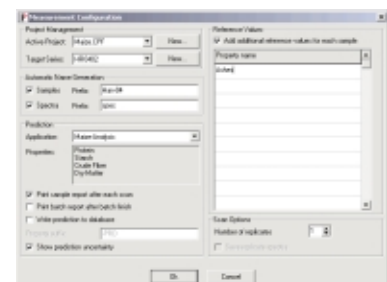


Fig. 5: Konfiguration der Messung im SL Predictor

Betriebssicherheit

- User-Verwaltung mit zwei Ebenen (Administrator und User)
- Mehrsprachige Bedienung (Deutsch und Englisch)

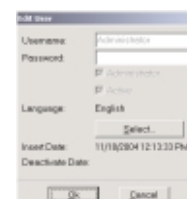


Fig. 6: Editieren Nutzer

SL Application Development Kit Vs. 2.21

Vielseitige Funktionsbibliotheken für Ihre eigene Software



- Quantitative Prediction mit MLR und Faktor-Regressionsmodellen, Outlier-Diagnose
- Qualitative Prediction mit PCA Library- und Clustermodellen (optional)
- Direkter Schreib- und Lesezugriff auf Datenbankeinträge

SL Utilities Vs. 2.0

Programmsammlung für ein leichteres Datenhandling

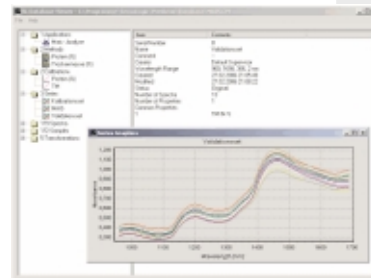


Die SL Utilities bieten, ergänzend zu den Importmöglichkeiten im SL Calibration Workshop, erweiterte Importroutinen sowie Programme zur Konvertierung in ein CPF-importfähiges Format. Ausserdem stehen mit der *Wavelength Range Conversion* und der *Subset Selection* Programme für die Bearbeitung von spektralen Daten zur Verfügung. Der *Database Viewer* ermöglicht einen schnellen Überblick zu allen Informationen eines chemometrischen Arbeitsprojekts *.CPF (Chemometric Project File)

Database Viewer

Schneller Überblick über den Inhalt einer CPF-Projektdatei

- Proben und Referenzdaten
- Spektren, Serien und Bibliotheken
- Transformationen
- Kalibrationen, Methoden und Applikationen



Wavelength Range Conversion

Anpassung von Spektrenserien für andere Datenbereiche; vorteilhaft bei der Nutzung von vorhandenen, bewährten Kalibrationsmodellen, z.B. auf Geräten mit anderen Wellenlängenbereichen und/oder Inkrementen

Subset Selection

Auswahl einer repräsentativen Teilmenge von Spektren aus einer vorhandenen Spektrenmenge mit Hilfe des Gauss-Jordan-Verfahrens oder nach dem Zufallsprinzip

SPC File Import und ISI ASCII File Import

- Batch-Import von mehreren SPC Singlefiles (optional mit oder ohne Referenzwerten, z. B. Excel-Sheet) oder Import von SPC Multifiles in die CPF-Datei
- Ergänzend zum *SPC File Import* bietet die *SPC File Info* zusätzliche Informationen zur SPC-Datei
- *ISI ASCII File Import* für den Import von ASCII-Daten, die mit der ISI-Software erzeugt wurden, in die CPF-Datei

JCAMP Single-, CSV Single- und JCM Multifiles

werden in das (mit SL Calibration Workshop) importfähige JCAMP Multifile Format konvertiert

SL Mini Soft Keyboard

Zur leichteren Bedienung von Geräten mit Touchscreen

SensoLogic GmbH

Hummelsbütteler Steindamm 78 A
D-22851 Norderstedt
Telefon: +49 (0)40 / 52 95 67 - 0
Fax: +49 (0)40 / 52 95 67 - 99

www.sensologic.com
e-mail: info@sensologic.com