

PATTERN EXPERT

air spect

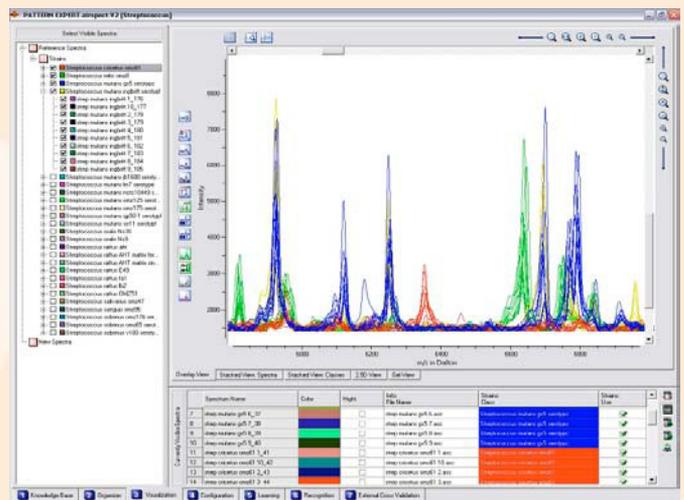
www.airspect.com

Programminformationen

Die Auswertung komplexer Spektren von Proben, die aus Gemischen bestehen - etwa von biologischen Proben - ist oft sehr schwierig. Mit dem Programm "PATTERN EXPERT airspect" (Adaptive Information Extraction and Research System for Spectroscopy) können Spektren von komplexen Gemischen ausgewertet und klassifiziert werden. "PATTERN EXPERT airspect" arbeitet dabei auf der Basis leistungsstarker Algorithmen der Neuroinformatik und Mustererkennung. Mit der Software können Sie IR-Spektren, Massenspektren und Ionenmobilitätsspektren auswerten.

Ihre Wissensbasen können Sie an Dritte mit dem Programm airspect::go weitergeben. Mit airspect::go können diese Ihre Wissensbasen für eigene Analysen einsetzen.

Das System wurde an umfangreichen Spektrensammlungen mit über 25 Klassen und über 4000 Datensätzen erfolgreich getestet.



Vielfache Anwendungen in Forschung und Technologie

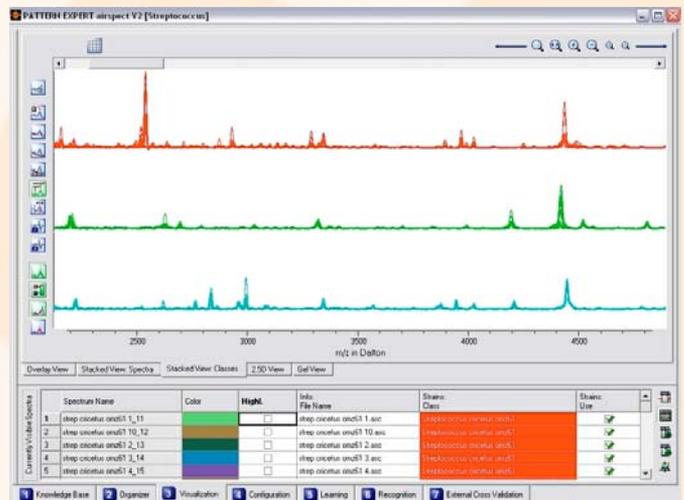
Die Software wurde in Zusammenarbeit mit dem Kriminaltechnischen Institut des Bundeskriminalamtes entwickelt und wird dort für die Identifikation von Materialproben eingesetzt. In den Lebenswissenschaften und der Chemometrie, für die Materialforschung und die Qualitätskontrolle werden vielfach große Spektrensammlungen angelegt und aufgebaut. Mit airspect kann das in solchen Sammlungen enthaltene Wissen optimal extrahiert und einer großen Zahl von Nutzern zugänglich gemacht werden.

Visualisierung für detaillierte Analyse

Zur Analyse der Daten dienen übersichtliche Visualisierungen, wie die Darstellung der 1. Ableitung der Spektren, die gleichzeitige Anzeige mehrerer Spektren über- und untereinander oder die Darstellung von Mittelwertkurven und Standardabweichungen aller Spektren, die zu einer Klasse gehören (Abb. unten).

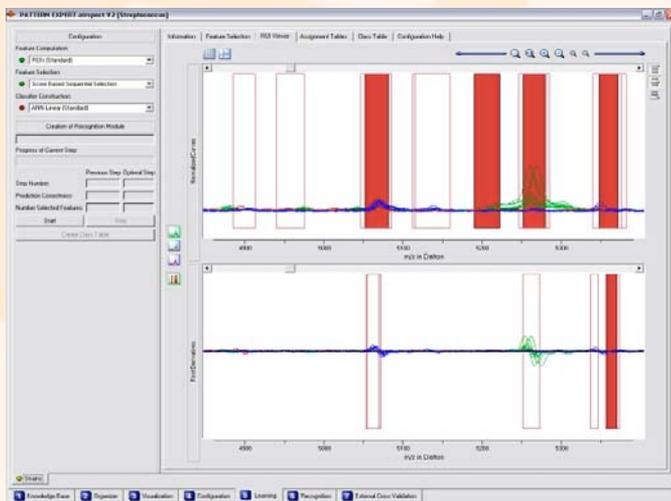
Spektroskopische Diagnoselösungen

Mit dem Programm airspect lassen sich so genannte Wissensbasen anlegen und antrainieren. Dabei sind Vorkenntnisse, wie aus der Signalverarbeitung oder der Neuroinformatik, nicht nötig. Der Anwender kann selbständig die einzelnen Spektren seiner Datenbasis bestimmten Klassen zuordnen, die für diese Spektren bekannt sein müssen. Das Anlernen benötigt je nach Schwierigkeitsgrad der Daten wenige Sekunden bis mehrere Stunden.



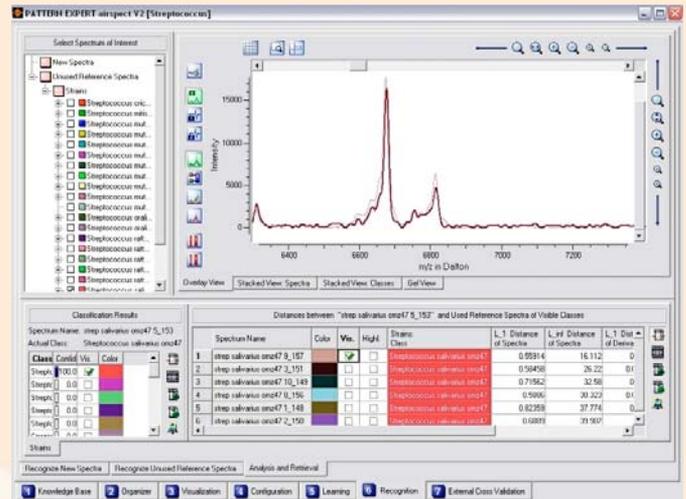
Umfangreiche Auswertungsmöglichkeiten des Klassifikators

Für das Anlernen der Wissensbasis stehen verschiedene Skripte zur Auswahl. Damit kann für das jeweilige Problem das jeweils bestmögliche Verfahren ausgewählt werden. Die Software bietet zur Analyse des Klassifikationsverhaltens verschiedene Auswertungsmöglichkeiten. So werden zum Beispiel die Spektralbereiche, die für die gegebene Fragestellung relevant sind, visuell oder in Tabellenform dargestellt.



Große Treffergenauigkeit bei Retrieval aus umfangreichen Datenbanken

Für die Einzelspektren-Analyse stehen weitere umfangreiche Auswertungsmöglichkeiten zur Verfügung. Es können Spektren klassifiziert, sowie einzeln mit Referenzspektren aus der Datenbasis verglichen werden. Mittels der Lernalgorithmen werden auf intelligente Weise adäquate Abstandsmaße generiert, die für die Bewertung des Abstandes zwischen einem unbekanntem Spektrum und einem bekanntem Vergleichsspektrum herangezogen werden können. Erfahrungsgemäß liefert airspect bei einem Retrieval in einer Datenbank auf Anhieb die tatsächlich besten Treffer.



Technische Leistungsparameter:

In das Programm können derzeit Spektren im JCAMP-DX, SPC- oder ASCII-Format eingelesen werden. Weitere Formate auf Anfrage.

Programmeigenschaften:

- ◆ Einfache und intuitive Bedienung
- ◆ Vollautomatische Vorverarbeitung (Entfernen von Sprungstellen, Baseline-Korrektur, Skalierung)
- ◆ Visualisierung der Spektren: Originale, Zwischen- und Endergebnisse der Vorverarbeitung, 1. und 2. Ableitung, 1-dim., 2,5-dim., „Gel-View“
- ◆ Automatische Generierung von Merkmalen zur Klassifikation
- ◆ Effiziente Klassenzuordnung mittels Zuordnungstabellen oder Verzeichnisstruktur
- ◆ Tabellarische Darstellung der Lernergebnisse
- ◆ Klassifikation mit zusätzlichen benutzerdefinierten Merkmalen möglich
- ◆ Steuerung der Lernalgorithmen über Skripte, die auf Nachfrage für spezielle Probleme erstellt werden können.

PATTERN EXPERT
H.-Heine-Str. 12
04451 Borsdorf

info@airspect.com
www.airspect.com