

ChartSpect[®]

機器分析データ統合管理
解析支援システム



データ管理・共有の効率化により 研究業務に集中できる環境を実現します

以下のようなことにお困りではないですか？

データ管理

- ・データが各機器 PC 上に散逸し、どこに保存されているかわからない。
- ・必要なデータを速やかに検索できない。

データ共有

- ・他部門とのデータ共有が困難である。
- ・在宅勤務や出張中にデータを確認できない。

データ解析

- ・各機器 PC のような特定の場所でしか作業ができない。
- ・各ソフトウェアの操作を覚えることが難しい。

報告書作成

- ・チャートを報告書に合わせて切り貼りすることに時間がかかっている。
- ・レポート作成のために本来行うべき業務時間が取られている。

研究開発の現場では、様々な種類の分析を行っています。また、近年では分析機器のロボット化や HTS 化により、一度の実験で大量のデータを得られるようになり、データ管理は以前にも増して困難になっています。

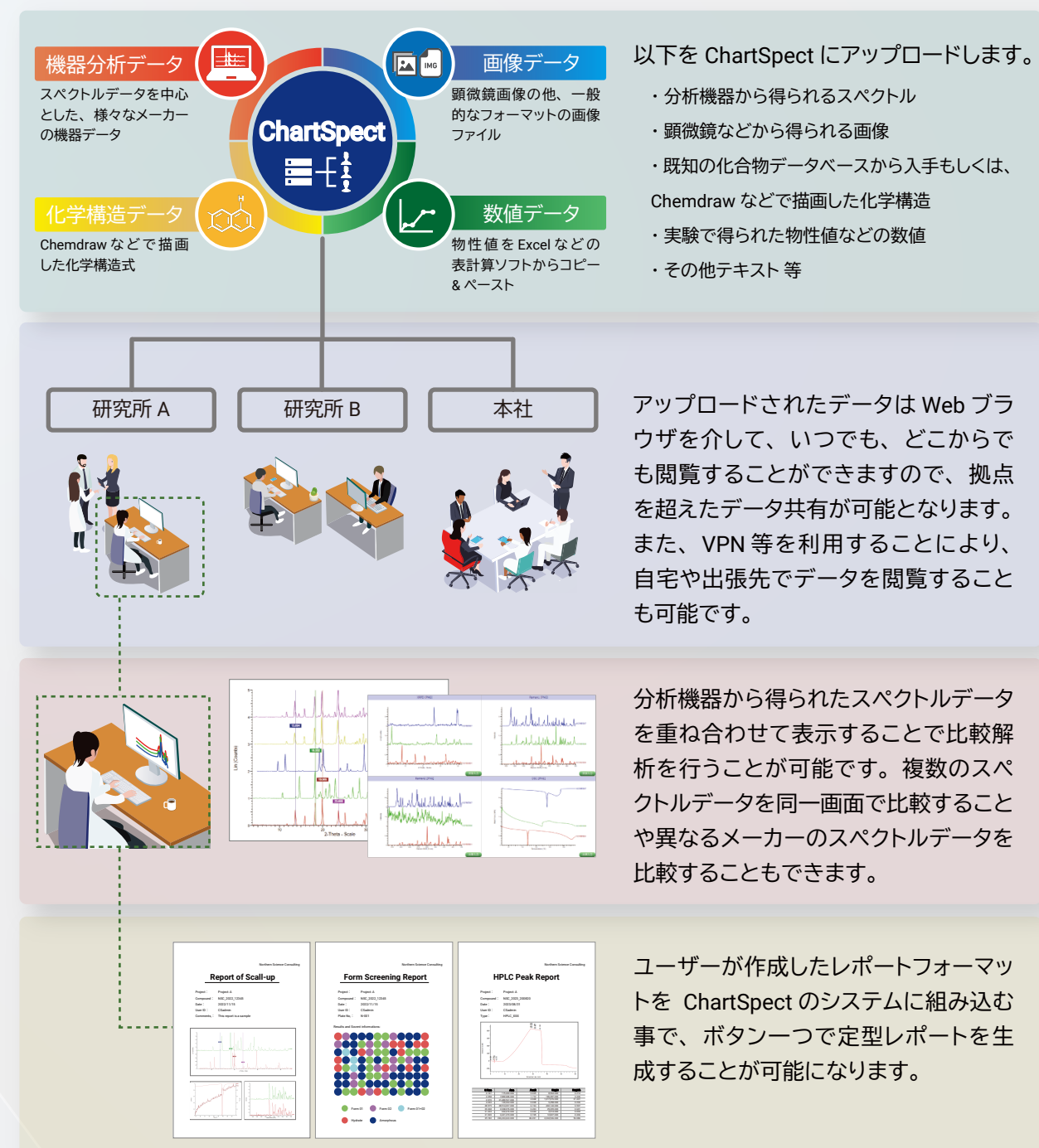
「データを適切に管理、共有するために多分に労力がかかっているが、人力で対応するには限界がある。」

ChartSpect は、そのようなお悩みを抱えていたお客様からの相談から開発されました。

開発開始から 15 年以上に渡り、お客様の要望にお応えする形で機能追加、改良が行われており、現在では、データ管理・共有はもとより、チャートの比較解析や報告書の作成など、多くの機能でお客様の研究業務の効率化に寄与しています。

コンセプト

ChartSpect は、研究現場で発生する様々なデータを一元管理することで、データの管理作業を効率化し、研究業務に集中できる環境の構築やデータの有効活用を実現するために開発されています。



I システム概要

ChartSpect を利用することで、各分析機器の PC 端末に分散しているあらゆる種類の機器分析データと関連する画像データや数値・テキストデータを 1 台のサーバーに集約して管理・共有を行うことが可能となります。

多様なファイルフォーマットに対応

ユーザーの所有する機器フォーマットに随時対応しています。

現在、**160** 以上のフォーマットに対応しており、未対応フォーマットについては、最短 2 営業日以内に対応することができます。

主な対応分析：

NMR, XRD, XRF, Raman, TG-DTA, DSC, CD, IR, UV, LC, GC, LCMS, GCMS, TOFMASS, EDS, PSA, Autograph, PDA, PSA, DVS, GPC, など

様々なデータを登録可能

ChartSpect には、機器分析データ以外にも様々なデータを登録することができます。また、これ以外のデータについてもご相談頂ければ登録可能な場合があります。詳しくはお問い合わせください。



化学構造データ



数値データ



画像データ



PDF データ



文書データ

様々な環境に対応

ChartSpect サーバマシンは、様々な環境で利用頂くことが可能です。

マシン環境：

- オンプレミス
- データセンター
- クラウド（AWS, Azure など）

対応済み Linux ディストリビューション：

- Fedora
- Red Hat Enterprise
- Rocky Linux
- Alma Linux

拠点を越えたデータ共有

Web ベースのサーバー・クライアントシステムを採用しているため、使用場所の制限を受けず、複数ユーザーでデータを共有することが可能です。研究所内のデータ管理はもちろんのこと、VPN などの専用回線を使用する事で遠隔の関連部署や自宅、出張先でもデータを閲覧することができます。

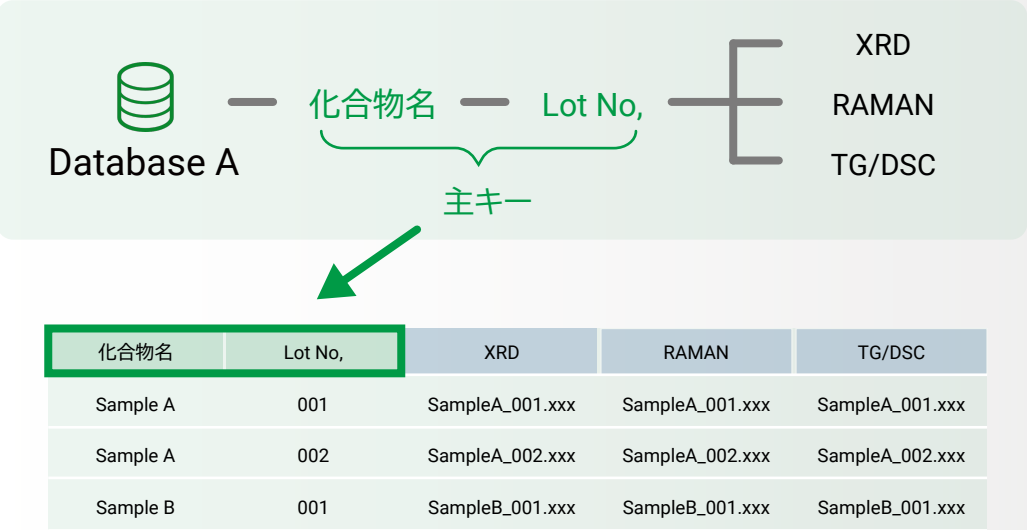
Data Management & Data Sharing



ChartSpect は、目的に合わせたデータベースの構築が容易にできるように設計されています。
Web ベースのサーバー・クライアントシステムを採用しているため、Microsoft Edge や Google Chrome などの Web ブラウザを介して、いつでも、どこからでもデータを閲覧することができます。

データベース構造

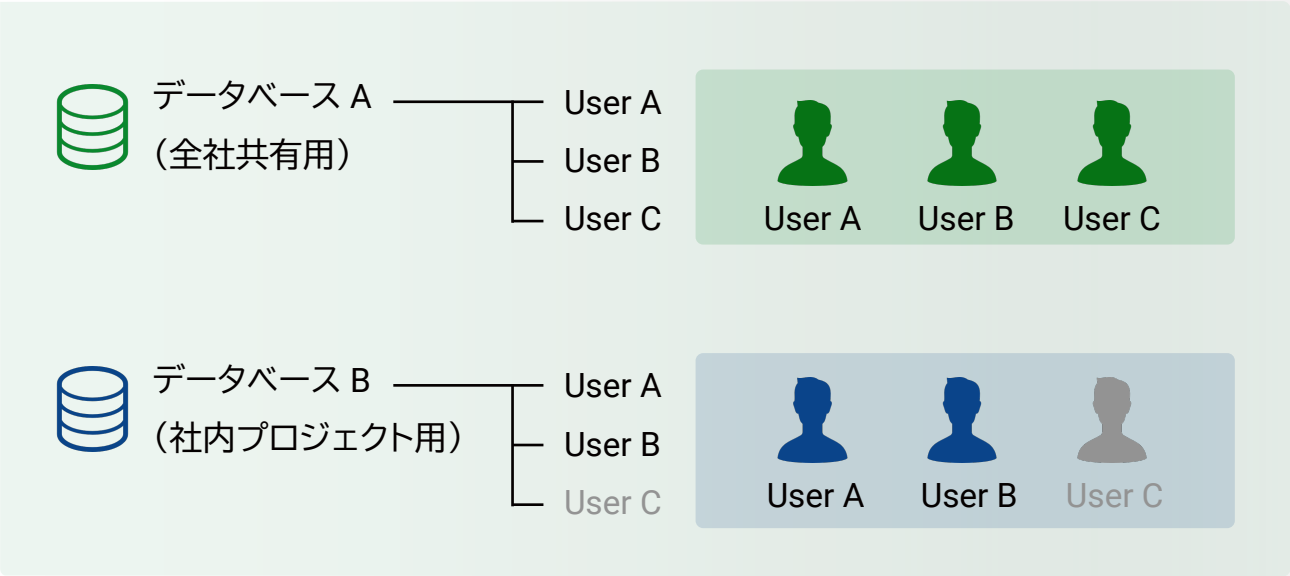
ChartSpect は、リレーショナルデータベースシステムを採用しています。以下のように管理を行いたいフィールド（機器データや画像データなど）が関連付けられていることがわかり、且つ一意（ユニーク）にすることができる主キー（キーフィールド）を設定して、レコード毎に各データを登録します。



主キーは 2 ～ 4 種類を設定することができます。例えばプロジェクト名、化合物名、分析番号のような主キーを設定することもできます。

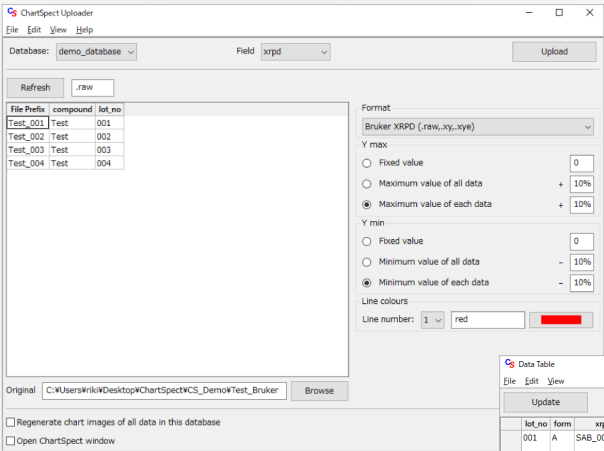
データベース作成

データベースは目的に応じていくつでも作成することができます。また、システム管理権限、データベース作成権限などの管理者権限の付与、各データベースのアクセス権限をユーザ毎に管理することができるため、特定のメンバーのみアクセス可能なデータベースを作成することが可能です。



データ登録

ChartSpect サーバーへのデータ登録は、専用ソフトウェアである ChartSpect - Data Uploader を使用します。



シンプルな GUI 上で「登録するデータベース」、「フォーマットの種類」などを選択するだけで、簡単にデータをアップロードできます。

Data Uploader は Windows 11 / 10 で動作しますが、ご要望があれば、Linux 版を提供することも可能です。

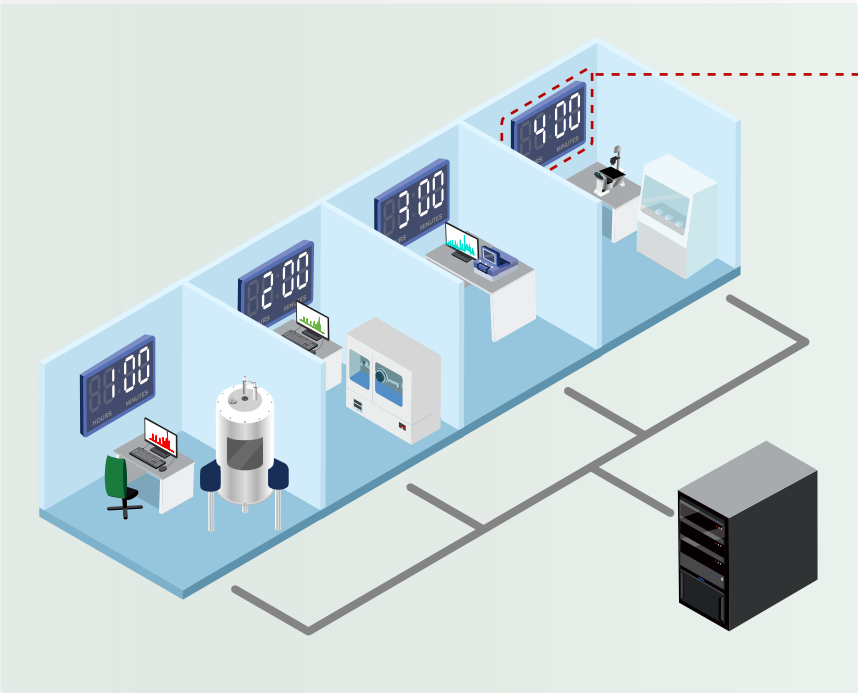


数値データなどは、Excel のようなインターフェースに直接入力することやコピー & ペーストすることができます。

lot_no	form	xprd	raman	nm	tgita	melting_point	structure	solubility
001	A	SAB_001.svg	SAB_001.svg	SAB_001.svg	SAB_001_55.svg	190	SAB_001.mol	
002	A	SAB_002.svg	SAB_002.svg	SAB_002.svg		191	SAB_002.mol	
003		SAB_003.svg	SAB_003.svg	SAB_003.svg	SAB_003_57.svg	192	SAB_003.mol	
004		SAB_004.svg		SAB_004.svg		193	SAB_004.mol	0.004
005		SAB_005.svg				194	SAB_005.mol	0.005

データ自動登録

Windows タスクスケジューラーとの組み合わせにより、データの自動登録を行うことも可能です。例えば以下の図のように、夜中の 1 時から順次機器データを登録するように設定することができます。これにより、ユーザーは解析毎にデータを登録することなく、より効率的にデータベースの構築を行うことができます。



各装置毎に登録スケジュールにしたがってデータを登録します。右の場合、顕微鏡のデータは AM 4:00 からデータ登録が開始されます。

各機器データの自動登録には、以下の設定が必要です。

- ・フォルダ構成
- ・ファイル名ルール
- ・自動登録スケジュール



I データ検索

ChartSpect は、登録したデータを検索項目とする「キーワード検索」、スペクトルのピーク位置や形状の類似度から検索を行う「スペクトル検索」、既知のデータベースなどからダウンロード、もしくは Chemdraw などで描画した化学構造との部分一致・完全一致検索を行う「構造検索」の 3 つのオプションが用意されています。

キーワード検索

化合物名やプロジェクト名などのテキストデータ、物性値などの数値データの場合、範囲を指定して検索も可能です。「化合物名+物性値条件」のように、複数の検索条件を組み合わせるとより複雑な検索を行うことも可能です。

以下のように検索条件の設定を行うことが可能です。

- AND / OR / NOT 検索
- 部分一致、完全一致

スペクトル検索

登録されているデータに対して、選択したファイル、ピーク位置を条件に検索が可能です。



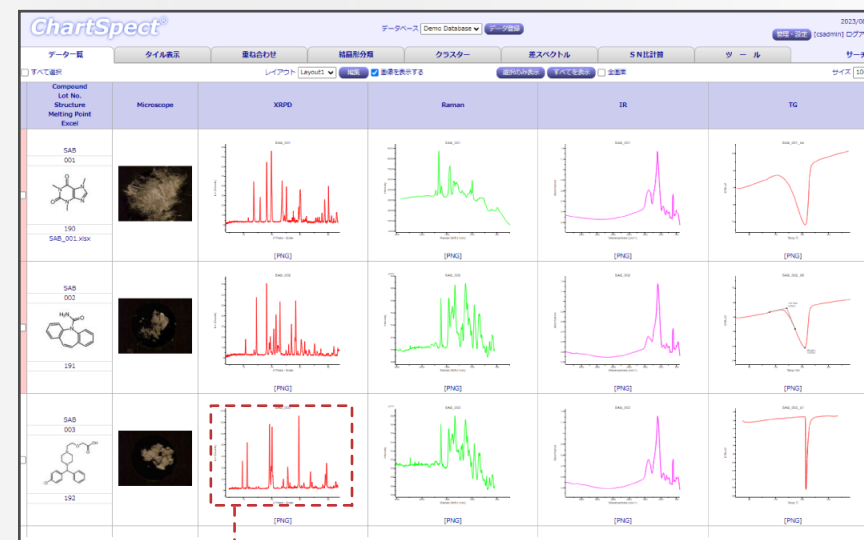
ピークの閾値レベル、平滑化次数、ピーク誤差などのパラメータを設定してなるべく大きなシグナルだけを拾うことや、小さい重要なピークを含めて検索することもできます。

構造検索

登録されているデータに対して、選択した MOL ファイルの化学構造を条件に検索が可能です。PubChem や ChEMBL などの既知の化合物データベースから MOL ファイルや SDF ファイル等を取得した場合や Chemdraw などで描画された化学構造と部分一致する（もしくは完全に一致する）ものを登録済みデータから検索します。

I データ閲覧

ChartSpect では、ユーザーが定義した自由なレイアウトで各機器分析データと関連データを閲覧することができます。目的に合わせて複数のレイアウトを準備しておくことで、効率的にデータの閲覧が可能となります。

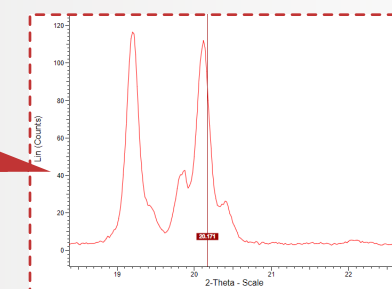
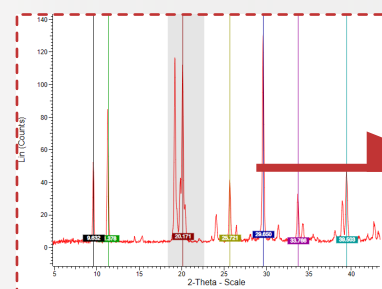
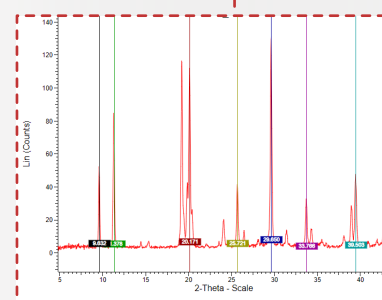


レイアウトはいくつも作成いただけますので、結晶形の顕微鏡画像と構造式、各機器データを並べるレイアウトや特定の機器のみを表示するレイアウトなどが作成が可能です。一度作成したレイアウトの修正や削除も可能です。



チャートへの操作

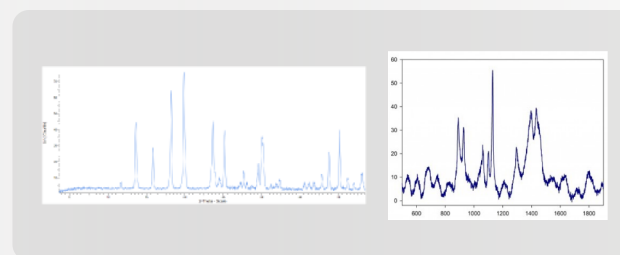
ChartSpect では、キーボードとマウスクリックを用いて、表示されたチャートに様々な操作を行うことが可能です。例えば、色を指定するキー（R：赤や G：緑など）を押しながらチャートをクリックすることでインディケーターの挿入ができます。



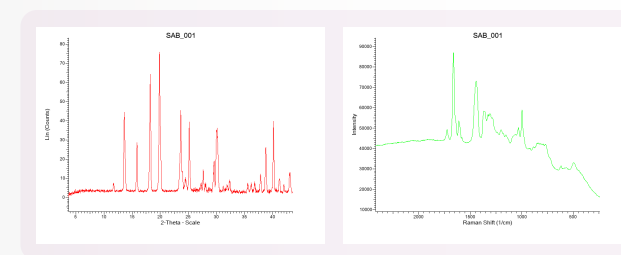
Shift キーを押しながらマウスをドラッグし範囲を指定することで、X 軸方向に拡大することができます。同じく Ctrl キーを押しながらマウスをドラッグすることで、矩形の範囲で拡大することも可能です。

チャート画像のコピー & ペースト

チャート画像の下に表示されている [PNG] ボタンを押すことで PNG 形式で画像を表示することができます。PNG 形式ではチャートへの操作は行えませんが、マウスの右クリックをコピーすることができますので、各機器から得られたチャートを統一感のある形態で報告書や発表資料にペーストすることが可能です。



各機器のソフトウェア上でスクリーンショットを撮った場合



ChartSpect からコピー & ペーストをした場合

Comparative Analysis



ChartSpect は、登録したスペクトルデータを重ね合わせて表示し、比較解析することができます。異なるメーカーの機器データであっても、比較解析を行うことができ、また複数のスペクトルデータを同一画面上で比較解析することも可能です。

異なるメーカー間の分析データ比較

機器メーカーが異なるスペクトルデータを重ね合わせる場合でも、ChartSpect を利用することで簡便な操作で重ね合わせることが可能です。

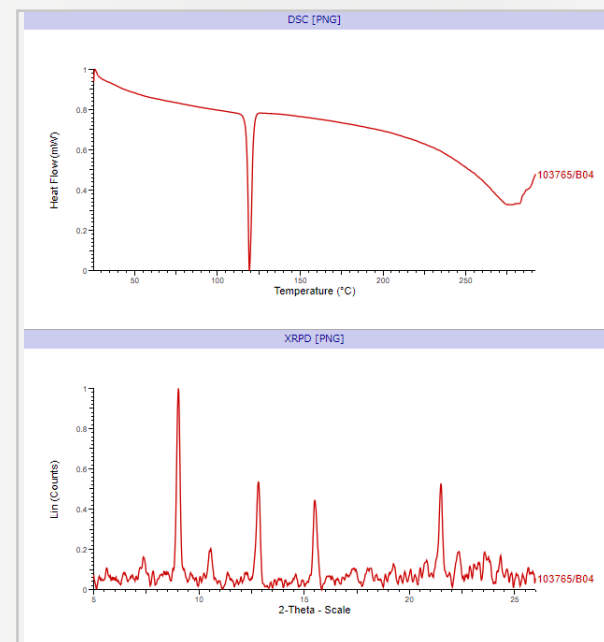


各機器から X, Y 座標データを取得し、Excel などの表計算ソフトウェアでグラフを作成することや印刷した紙を透かして物理的に重ね合わせるなどの面倒な作業が不要になります。



複数種類のスペクトルデータを同時解析

複数種類の機器データを同時に比較解析することができます。右の図のように、X 線（XRD）と熱分析（DSC）を同時に解析することで、溶媒和状態も判別が可能になり、解析をより効率的に行うこともできます。同一レイアウト上に複数のスペクトルデータをマージさせることも可能です。例えば、DSC と TG を同一レイアウト上に表示させることで、重量損失を伴わない吸熱反応や発熱反応などを判別することが可能になります。



重ね合わせに使用するレイアウトも一覧表示同様にユーザーの目的に合わせていくつも作成することが可能です。



スペクトルデータの補正表示

ChartSpect では、生データでは確認しづらい、強度スケールの違いや高くなったベースラインを補正し、比較しやすく表示することができます。

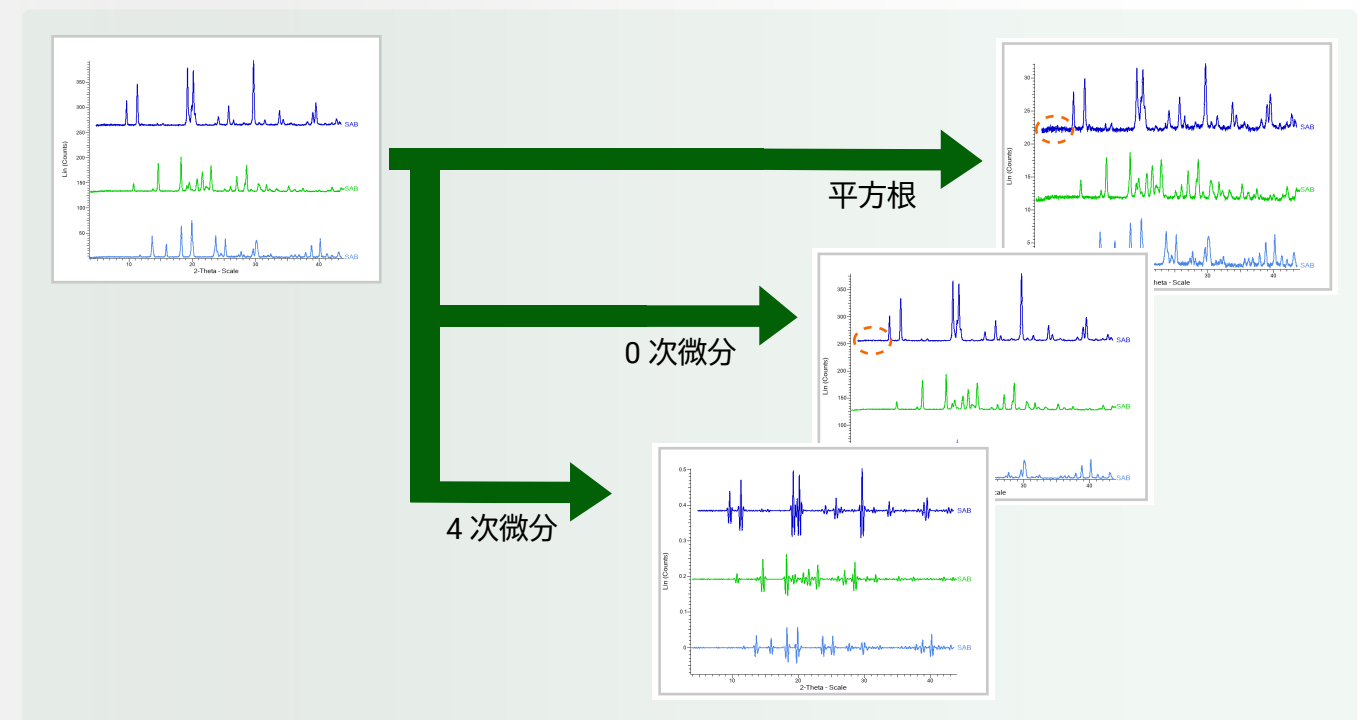
√x 強度の変換操作

様々なピークを閲覧するために、以下の強度変換が可能です。

平方根、立方根 : 小さなピークを強調して表示します

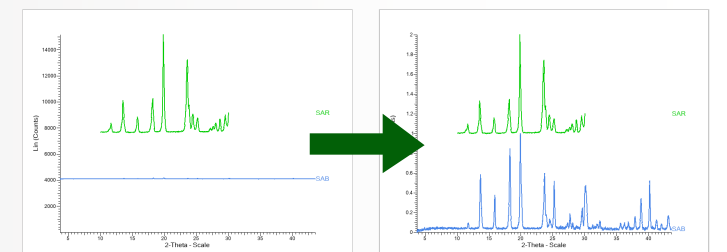
0 次微分 : スペクトルデータにスムージングをかけます

1 次～ 4 次微分 : 重なったピークを分離しバックグラウンドを消去した状態で表示します



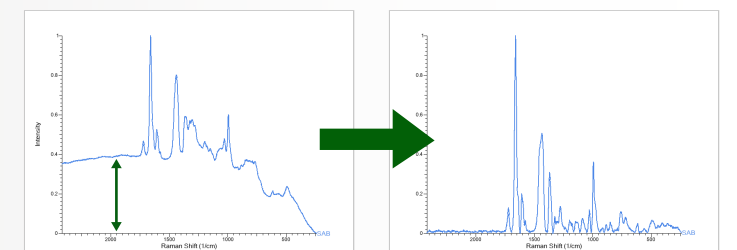
🎵 ノーマライズ

Y 軸の最小値と最大値を 0 ～ 1 の範囲に正規化（ノーマライズ）し表示します。これにより、分析強度が異なるチャートを容易に比較することが可能になります。



✳ ベースライン補正（X 線、Raman のみ）

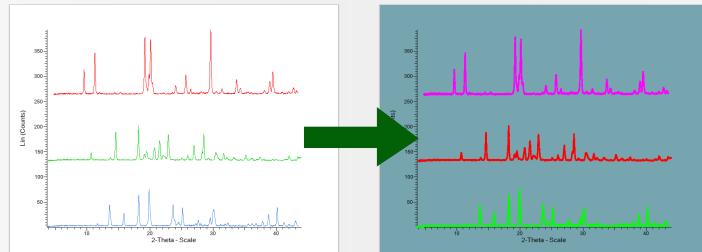
ベースラインを引き算し、疑似的に補正します。蛍光やハローの影響によりベースラインが高くなってしまったチャートを比較しやすく表示することが可能になります。



その他チャート、ラベルの設定

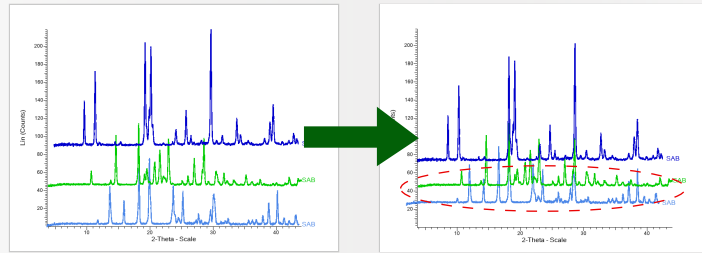
スペクトルの設定

色や太さ、X軸方向の長さ等、表示するスペクトルに対して、様々な設定をすることが可能です。また、スペクトルの背景色を自由に設定することも可能です。



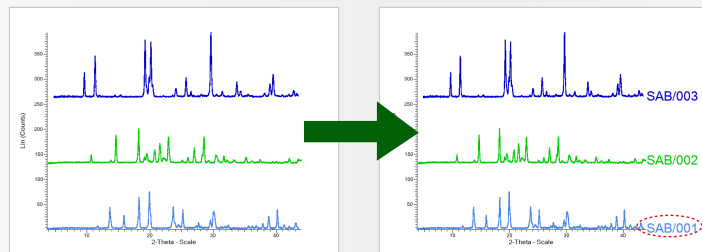
スペクトル間のオフセット調整

スペクトル間のオフセットを自由に設定することができます。スペクトル曲線毎にマウスでX軸方向、Y軸方向共に自由に位置を移動することも可能です。



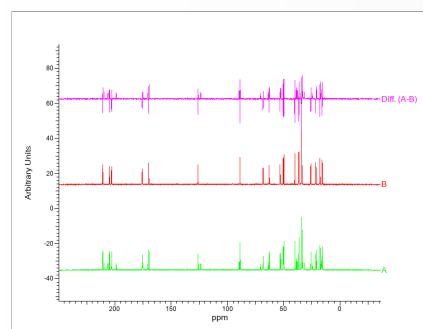
チャートラベルの設定、操作

チャートラベルに表示する項目を自由に設定できます。項目以外にも表示サイズや位置などを設定することやマウスで自由に位置を移動させることも可能です。

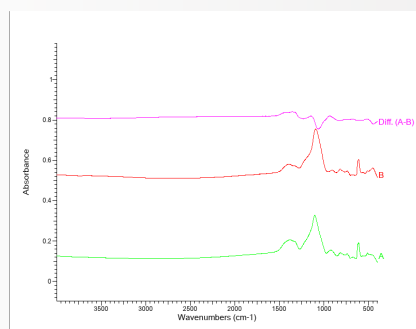


差スペクトル

NMR などにより得られた混合物や純物質の差スペクトルを計算して、表示することが可能です。例えば、混合物の成分比の同定や未知成分物質の検出に利用することができます。



NMR



IR

スペクトル A と B を選択することで、A-wB が計算されます。スペクトル B の強度比 (w) 変更やスペクトル B を X 軸方向にシフトさせてずれを調整することが可能です。計算された差スペクトル同士を重ね合わせて比較することも可能です。



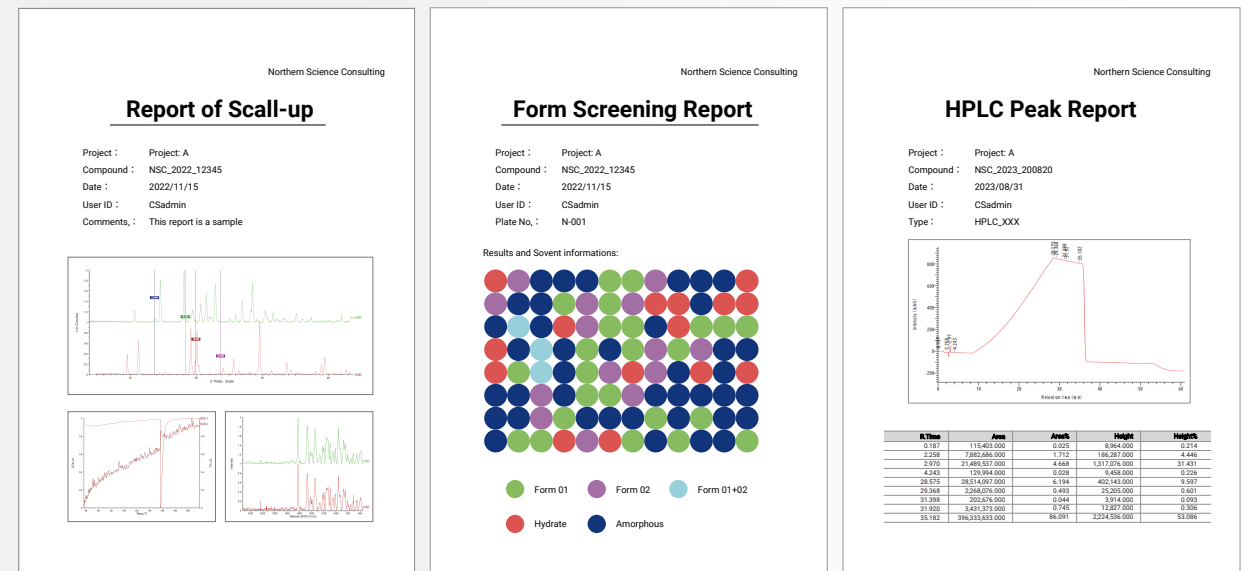
Report Generation



ChartSpect を使用することで、報告書を素早く、きれいに作成することが可能です。報告書作成の為に、各機器からスペクトルデータを集めたり、レポートに合わせて画像サイズやフォントを調整したりする手間を省き、研究業務に集中することが可能になります。

レポートフォーマットのカスタマイズ

ご提出いただいたレポートレイアウトテンプレートを弊社にてプログラム内に組み込むことにより、お客様独自の定型レポート (PDF 形式) をボタン一つで作成することができる機能が利用可能となります。スペクトルデータだけではなく、コメントや数値データ等、ご希望のデータをレポート化することが可能です。



レポートフォーマットの組み込みは無償で対応致します。無償対応可能なフォーマット数は契約ユーザー数によって異なりますので、詳しくはお問い合わせください。



データダウンロード

生データや画像ファイル (スペクトルデータ) を ChartSpect からダウンロードできます。画像ファイルは選択したデータを 1 枚に重ね合わせたデータとしてダウンロードしたり、個別にダウンロードができます。また、データ一覧や重ね合わせ画面から png ファイルをコピーし、報告書や発表資料に貼り付けることも可能です。

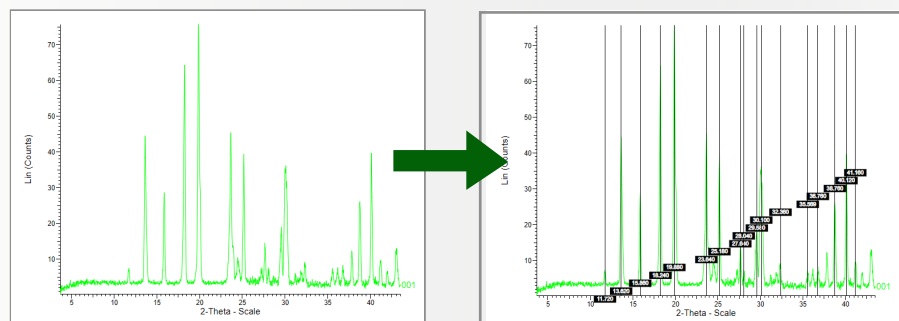
その他、以下のようなデータをダウンロード可能です。

- 生データファイル
- ピーク位置・強度・相対強度 (.txt)
- X 軸、Y 軸座標データ (.txt)
- 画像ファイル (.svg, .jpg, .png)
- 表形式データ (.csv)

I ピーク位置の自動アサイン

医薬品の特許申請は化合物そのものの物質特許を始め、用途や製法など複数の特許で構成されており、非常に複雑です。結晶多形についても特許の対象となっており、結晶多形の特許取得により、実施品そのものの直接的保護を行うことが可能になります。結晶形の特許申請には特徴となる X 線粉末回折パターンのピーク位置、強度、相対強度などのデータを提出する必要があり、特許に関する係争の際にも X 線のデータを比較することが多数あります。

ChartSpect では、ピーク情報を自動アサインすることが可能です。アサインするピークの方向や閾値レベルの設定を行うことや、アサインされたピーク位置を手動で修正、ピーク位置を追加、削除することなども可能です。



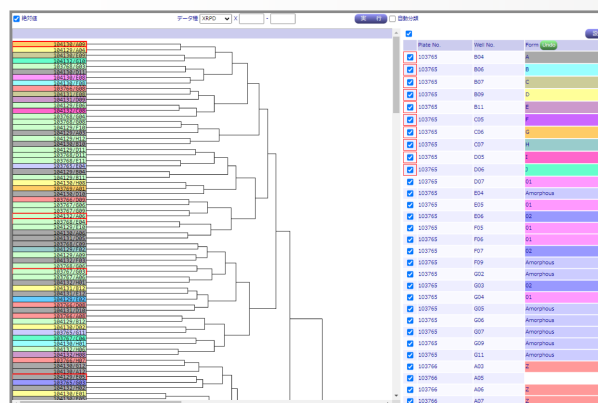
ピークをアサインすることで、前ページでご紹介をしたピーク位置・強度・相対強度 ファイルがダウンロード可能となります。



I オプションモジュール

🌿 クラスタリングモジュール

結晶形の分類など、多数のスペクトルデータを分類する際にピーク位置やピーク形状の類似から機械的にスペクトルを分類することができます。目視による分類に比べ大幅に効率を向上させます。



クラスター間の距離計算法は、「最短距離法」、「最長距離法」、「メジアン法」、「重心法」、「群平均法」、「ウォード法」から選択することができます。また、平滑化次数には Savitzky Golay アルゴリズムが使用されています。



🔌 Web API モジュール

ChartSpect サーバーに HTTP 通信を行うことで、様々なデータを取得することができます。取得したデータと外部データを組み合わせて別のデータベースを構築する際に有用です。

I 導入事例

物性研究部門 (A 社) での成功事例

新薬の研究開発を行う A 社では、物性評価の為に多くの機器分析を行っており、日々得られる膨大なデータの管理の負担が増大していました。さらに他部門との物性情報の共有には報告書作成が必要であり、データ管理、共有を効率的に進められるシステムを探していました。

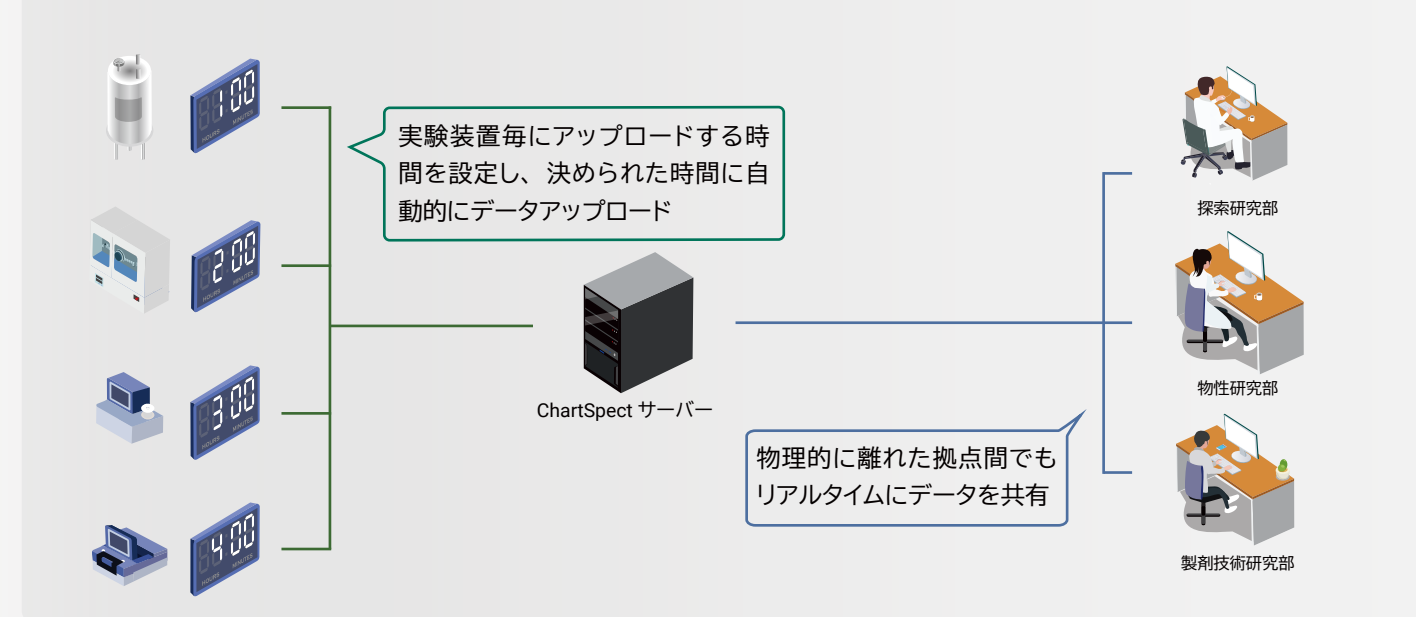
ChartSpect 導入効果

01 | データ管理労力の低減

ChartSpect のデータ自動アップロード機能により、決められた時間にデータが各機器から自動的にアップロード、データベース化されるようになったため、データ管理の為に割かれていた労力が大幅に低減されました。

02 | 社内でのデータ共有効率化

これまで作成していた、データ共有用の報告書が不要となり、容易にデータを共有できるようになりました。また、複数部門で得られたデータを関連付けて管理することで、データの利活用が促進され、新たなアイデア創出にも繋がりました。



ChartSpect は、製薬企業の研究所を中心に化学メーカー、大学研究室等幅広く利用されています。ユーザーのご要望に沿ったカスタマイズにも実現可能な範囲で対応致しますので、是非一度お問い合わせください。



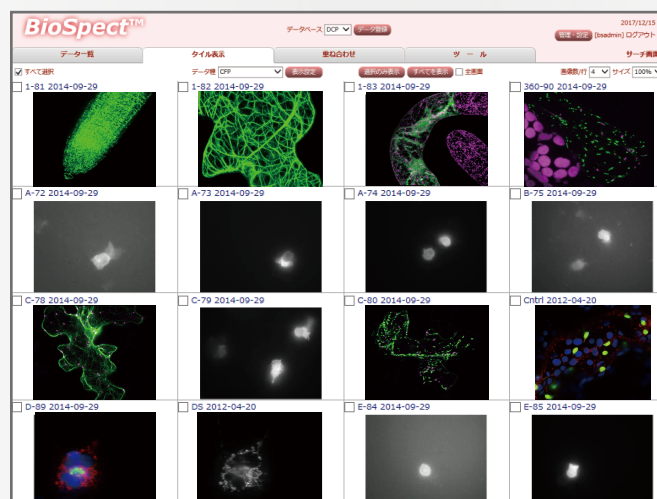
関連製品

BioSpect™

BioSpect™は、共焦点レーザー顕微鏡や二光子顕微鏡、蛍光顕微鏡等から得られるイメージングデータをデータベース化し、関連データと共に管理できるデータベースシステムです。

今まで、顕微鏡で取得し処理を行った Stack File 画像、動画を確認するためには、専用のソフトウェアで1つ1つ開いて確認する必要があり、研究全体の非効率の原因となっていました。

BioSpect™を利用することで、データ登録、検索、共有の面で研究全体の効率化が可能となります。



ChartSpect® Personal

データ管理システムや比較解析に興味を持っているが、もっと小規模での利用を希望するお客様の声を受け、ChartSpect の全機能を1台のノート PC に集約した Personal 版の販売を行っております。小規模でのデータの管理、解析にご利用いただけます。専用のノート PC もついておりますので、ハードウェアを準備いただく必要がありません。また、専用 PC は常に良好な性能に保たせるため、4年に1度無償で最新の PC に交換を致します。

Personal から ChartSpect® へアップグレード頂く場合、それまでに登録したデータは ChartSpect® に移行させることができるため、安心して継続利用頂くことができます。


ChartSpect® との比較

	ChartSpect®	ChartSpect® Personal
データベース機能	○	○
データ解析機能	○	○
レポート作成	○	○
クラスタリング・結晶形分類	オプションモジュール	○
ネットワーク共有	○	×
ユーザーアカウント数	契約上限まで	1
自動データバックアップ	○	×
データフォーマット対応	無償	有償
レポートフォーマット対応	無償（契約上限まで）	有償

ChartSpect、及び関連製品は、90日間の無料トライアルが可能です。また、登録可能なデータや機能面に関する詳細はお気軽にお問い合わせください。



Aug 2023

 ノーザンサイエンスコンサルティング株式会社

<https://www.northernsc.co.jp/>
nsc_support@northernsc.co.jp