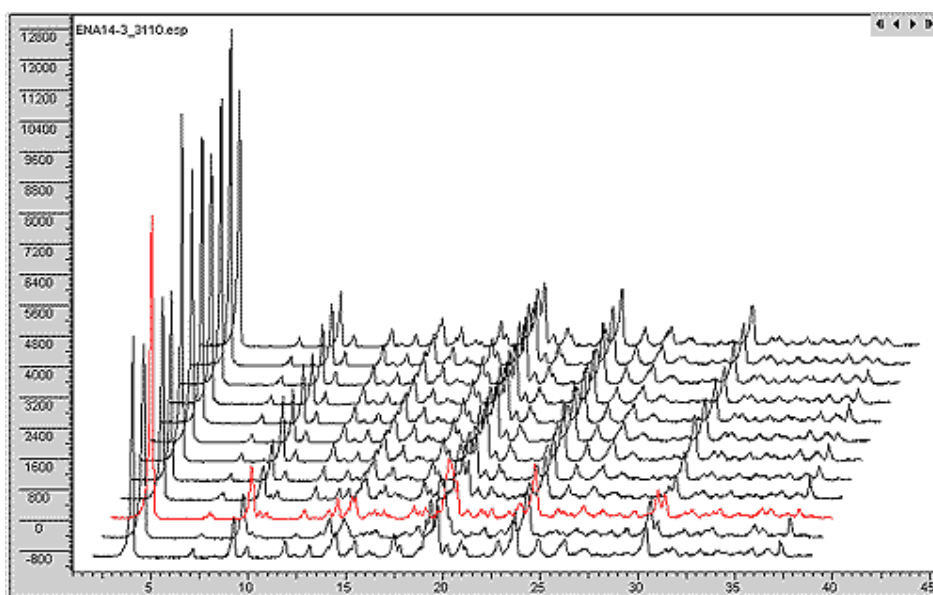


# Технические спецификации на Программное Обеспечение ACD/Curve Processor и ACD/Curve Manager версия 12.0

## I. TO

### Основная функциональность:

- Чтение данных из ASCII файлов с одним, двумя или несколькими столбцами с использованием ASCII импорт-мастера.
- Экспорт ваших аналитических кривых в файл формата ASCII.
- Импорт файлов форматов Import TA Instruments (\*.\*), JCAMP (\*.dx), Galactic GRAMS (\*.spc), PANalytical, STOE XRPD (\*.raw), Bruker DIFFRAC-AT, и DIFFRAC-PLUS.
- Импорт Sirius pKaLogP программных файлов.
- Расширение списка поддерживаемых импорт/экспорт форматов с использованием ваших собственных внешних преобразователей (DOS исполняемых (\*.exe) или программы ACD/ChemBasic программы (\*.bas)).
- Сбор, анализ, отчет, и хранение различных кривых из других модулей ACD/SpecManager (2D графики из ACD/Matrix и 3D Viewer, калибровочные кривые и SIMPLISMA-кривые из ACD/UV-IR Processor, и Quanalist графики из ACD/1D NMR Processor).
- Автоматически сохраняет всю историю совершенных обработки и анализа данных, наряду с полной детальной интерпретацией ваших кривых и серий кривых в файлах универсального ACD/Labs \*.esp формата.
- Присоедините химические структуры к вашим аналитическим кривым для лучшего их интерпретации. Поиск данных по органическим, полимерным, неорганическим, металлоорганическим и обобщенным Markush-структурам.
- Организация и сравнение нескольких спектров в различных режимах. Настройка изображения офсета в серии для улучшения ясности толкования; добавление или замена спектров, а также синхронизирование осей внутри нескольких окон. Офсет может быть установлен в абсолютных или относительных единицах для облегчения работы с серией с различными единицами по оси Y.

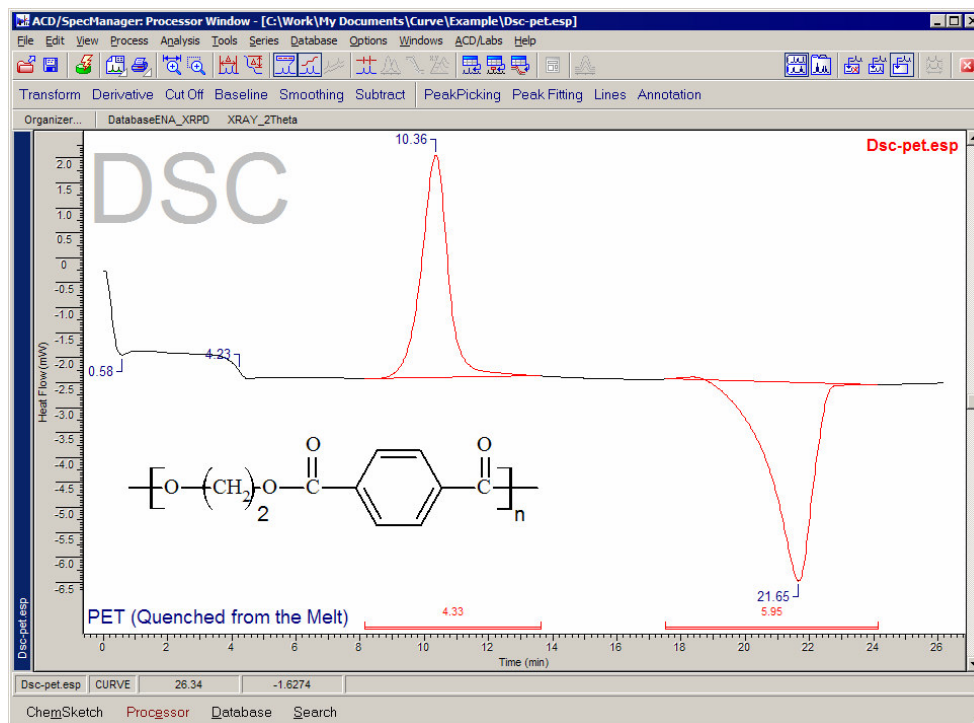


- Настройка цвета кривой, имен осей, и их направления.
- Более полное сохранение толкований аналитической кривой со стороны аналитиков путем использования нескольких уровней аннотаций.
- Интерактивное масштабирование на любой части кривой.

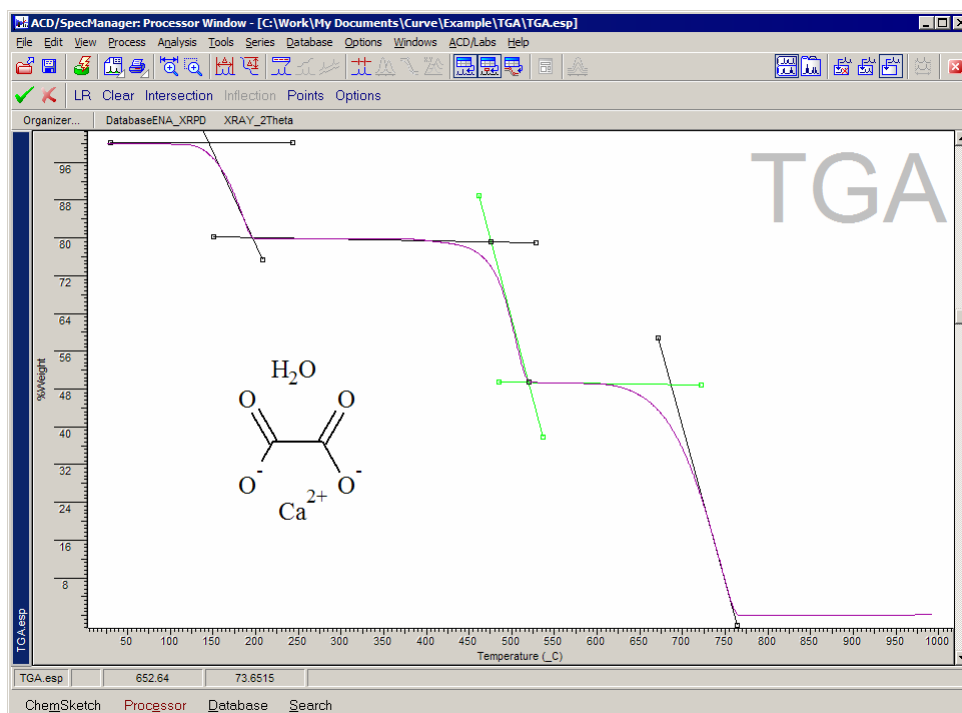
- Блокировка отображения на желаемый диапазон по умолчанию, через указание либо минимального, либо максимального края, или регионов для X- и/или Y- осей.
- Создание настраиваемых диалоговых окон ввода данных с использованием Data Forms Manager для облегчения ввода данных. Хранение разработанных пользовательских форм во внутренней библиотеке форм.
- Задание до 16000 пользовательских полей на каждую запись с вашими кривыми, с возможностью поиска по ним. Данные могут быть введены в интерактивном режиме, импортированы, или сгенерированы автоматически программным обеспечением с помощью различных способов.
- Создание профессиональных высококачественных отчетов в PDF и ACD/ChemSketch форматах, и многих других.
- Обзор шагов обработки для ваших кривых с данными с помощью Истории файла (полный аудит).
- Автоматизация повторяющихся задач обработки с помощью макро-команд, которые могут быть применены позднее к Серии кривых или к какой-то единичной кривой.
- Быстрое создание макро с использованием истории предыдущих действий или инструментов шаблонов.
- Легко организовать вашу библиотеку с макро внутри Макро Органайзера.
- Использование пакетной обработки для всей вашей коллекции файлов с помощью группы интерфейса Группового Макро.

### **Обработка и Анализ Кривой (Curve Processor. Curve Processor также включен в Curve Manager)**

- Выполнение различных преобразований X- и Y-осей через стандартные математические операции с помощью специального Инструмента Преобразования. Эта функция позволяет отталкиваться от типичных значений данных (MinX/MaxX, MinY/MaxY), а также от каких-либо конкретных данных, которые были аннотированы (например, позиции пика внутреннего стандарта). Инструмент Преобразования может быть применен для получения нормализованных кривых, чтобы получить логарифм функции, для линеаризации данной кривой, для калибровки с одним или более стандартов, чтобы повернуть кривую, и многого другого.
- Расчет производных от 1-го до 4-го порядка производной и совмещение их с оригинальной аналитической кривой, или окончательным трансформированием кривой в ее производную.
- Обратить производную по отношению к ее нормальной ориентации.
- Вычитание кривой, масштабированной с тем той или иным фактором, из другой кривой.
- Вычитание Базовой Линии из единичной кривой или серии кривых, автоматически или интерактивно.
- Интерактивное удаление шума из данных с использованием гибких алгоритмов сглаживания FTT или Savitsky-Golay.
- Вырезание выбранной части кривой или серии кривых.
- Стандартизация видимого разрешения кривой, для совмещения с более низким или более высоким разрешением инструментального оборудования, или для производства равномерно расположенных данных.
- Моделирование спектра или кривой, аналогичной спектру с набором аналитических функций пиков (Гаусса, Лоренца, Гаусс+Лоренца, LogNormal, Пирсона VII).
- Настройка интервала данных (размер шага вдоль горизонтальной оси) для кривой или серии кривых при помощи линейной или сплайн-интерполяций.
- Определение пиков и точек перегиба на кривой автоматически или вручную. Эти позиции пиков автоматически заносятся в таблицу пиков.



- Расчет площадей пиков и FWHM (полная ширина на половине высоты).
- Считывание позиции курсора по осям X и Y для быстрого получения информации о расположении спектральных особенностей; находясь в режиме Определения Пиков программа самостоятельно выходит на максимум пика и подсвечивает его значение.
- Измерение вертикального и горизонтального расстояния на кривой.
- Создайте прямые линии, накладывающиеся на экспериментальные кривые, вручную или при помощи расчета линейной регрессии по выбранной части кривой. Перемещайте и поворачивайте линии. Найдите пересечения пар линий и центральную точку линейного сегмента между двумя другими линиями.

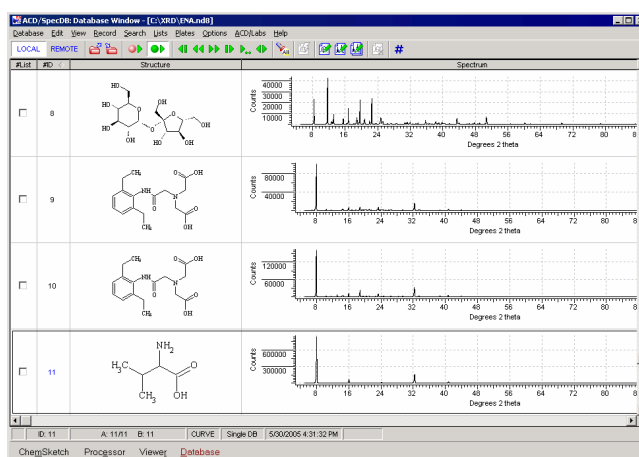


- Создание аннотаций к регионам кривой, пикам, или характерным точкам, и приложите текстовыми примечаниями.
- Подгонка данных под прямую или полиномиальные линии с использованием мощного и интерактивного инструмента регрессии.
- Свяжите данные, полученные при помощи связанных методов в четкую иерархическую систему; данные о кривой могут быть привязаны непосредственно к точке или пику в хроматограмме, спектре, или другой аналитической кривой.

## Управление Базами Данных (только в ACD/Curve Manager)

Модуль Баз Данных в ACD/Curve Manager поможет вам сделать следующее:

- Пополнение базы данных экспериментальных кривых со структурами, таблицей пиков, и любой дополнительной информацией, необходимой пользователю. Замена пользовательских данных систематически во всей базе данных по выбранному списку.



- Выбор записей базы данных в интерактивном режиме в Блочном или Табличном режиме просмотра.
- Воспользуйтесь преимуществами универсального хранения данных для различных видов кривых, спектров, и хроматограмм в единой поисковой базе данных.
- Храните и **отображайте** BMP, JPEG, GIF и PNG файлы изображений с вашей аналитической кривой.
- Поиск по параметрам, химической структуре, структурному сходству и подструктуре, пикам, формуле, молекулярной массе, или данным пользователя.
- Поиск по форме кривой (только для X-Ray кривых).
- Стандартизируйте ввод данных в ваши корпоративные базы данных с помощью данных форм Data Forms Manager.
- \* Управление удаленными базами данных с помощью локальных или глобальных сетей с ACD/SpecManager Enterprise клиент-серверной системы.
- Отмечайте записи с нулевыми или неуместными данными и выявите те из них, которые отвечают желательным критериям.
- Поддержка анализа с высокой пропускной способностью на основе предварительной обработки, макро автоматизации, и навигации интерфейсов по плашке.

\* - Требуется приобретения ACD/SpecManager Enterprise.

**II. Поддерживаемые форматы:**

<b>Digital Format</b>	<b>Vendor</b>	<b>ACD/Curve Manager</b>
ACD/Labs Spectrum (*.esp)	ACD/Labs Inc.	Import & export are available
JCAMP (*.dx; *.jdx)		Import is available
ASCII single column (*.txt; *.prn; *.csv; *.asc)		Import is available
ASCII dual column (*.txt; *.prn; *.csv; *.asc)		Import & export are available
ASCII multicolumn (*.txt; *.prn; *.csv; *.asc)		Import is available
Galactic (*.spc)	Thermo Galactic	Import is available
TA Instruments (*.*)	TA Instruments	Import is available
PANalytical XRDML <sup>a)</sup>	PANalytical	Import is available
Bruker DIFFRAC-AT	Bruker	Import is available
Bruker DIFFRAC-PLUS	Bruker	Import is available
Sirius	Sirius Analytical Instruments	Import is available
STOE XRPD (*.raw)	STOE	Import is available