

KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

「KnowItAll ID エキスパート」を使用したシンプルスペクトル検索/識別

シンプルスペクトル検索/識別

KnowItAll ID エキスパートを使用してシンプルなスペクトル検索/識別を行う手順

目的

以下のエクササイズでは、KnowItAll ID エキスパートを使用して赤外線（IR）、Raman、および他のスペクトルを識別する方法を実践します。

目標

これらのエクササイズを通じて、以下の内容を学ぶことができます：

- 単一成分の検索の方法、複数成分の検索の方法、デザイナードラッグの分類と官能基解析を同時に行う方法、未知のスペクトルに対するすべての可能性を一画面で確認する方法
- 産業材料を有機化学物、無機化学物、および成分化学物に分解する方法
- KnowItAll ID エキスパートの特許取得済みの最適化補正技術が最適な検索結果を見つけるのに役立つ方法
- クリック一つで PDF レポートを生成する方法

背景

KnowItAll ID Expert スペクトル識別ソフトウェアは、KnowItAll スペクトルライブラリと組み合わせて、未知のスペクトルを同定する科学者に迅速な回答を提供します。

使い方は簡単です。未知のスペクトルを開くだけで、KnowItAll ID エキスパートは自動的に単一成分の検索、複数成分の検索、デザイナードラッグの分類や官能基解析などを同時に行い、結果を1つの画面にまとめて未知のスペクトルの可能性を完全に表示します。また、純粋な有機化合物や無機化合物のスペクトルのみを使用して分析することもできるため、産業材料を基本的な構成要素に分解することが可能です。もしクエリスペクトルに問題がある場合、ID エキスパートは特許取得済みの最適化補正技術を使用して問題を特定し修正するスペクトルインテリジェンスを備え

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples

- \ID Expert\IR\2 - ATR-IR of Unknown Sample 8675309.irf
- \ID Expert\IR\4 - ATR-IR of Unknown Sample 1282013.irf
- \Deformulation\Deformulation Example.irf
- \Optimized Corrections\Raman Spectrum of Mint Candy.wdf

KnowItAll 使用アプリケーション

- KnowItAll ID エキスパート™

ています。ユーザーが未知のスペクトルを同定した後、クリックひとつで PDF レポートを生成することも可能です。

KnowItAll の IR および Raman スペクトル検索アルゴリズム

KnowItAll が使用するアルゴリズムについての背景知識は役立つでしょう。IR および Raman スペクトルの比較において、KnowItAll は以下のアルゴリズムを使用しています：

相関

これは KnowItAll の検索でデフォルトのアルゴリズムとして採用されており、業界標準の相関アルゴリズムに準拠しています。相関アルゴリズムは、ユークリッド距離アルゴリズムと似ていますが、比較の前に各スペクトルが平均中心化されます。その後、ドット積の正規化が行われます。この手法は、ノイズのあるスペクトルやベースラインの問題を持つスペクトルに対して、特にベースラインオフセットが負のスパイクや化学的ノイズによる場合に、検索結果を改善することができます。ただし、ユークリッド距離アルゴリズムよりもわずかに時間がかかります。検索速度が遅くなるのは、データベース内の各スペクトルが比較前に平均中心化および正規化されるためです。相関アルゴリズムによって得られる検索結果は、未知の化合物がデータベースに存在しなくても、未知の化合物とスペクトル的に類似しています。相関アルゴリズムは、ピークの面積に大きく影響を受けます。広がった特徴は鋭い特徴よりも強く重み付けされます。このアルゴリズムは、ピークのシフトや相対的なバンドの強度の非線形性に対して最も寛容です。

相関（クラシック）

KnowItAll 2020 以前のすべてのバージョンに存在した相関アルゴリズムは、ユークリッド距離アルゴリズムに類似していましたが、業界標準の相関アルゴリズムには準拠していませんでした。KnowItAll 2020 からは、相関アルゴリズムは業界標準に準拠し、KnowItAll での検索のデフォルトアルゴリズムとなっています。過去の検索結果を再現したいお客様のために、以前の相関アルゴリズムは「クラシックな相関」として提供されています。

ユークリッド距離：

ユークリッド距離アルゴリズムは、2つのスペクトル間の点ごとの差を測定します。ユークリッド距離アルゴリズムによって得られる結果は、未知の化合物がデータベースに存在しない場合でも、スペクトル的に類似しています。ただし、このアルゴリズムは、未知のスペクトルが傾斜したベースラインやオフセットを持つ場合には、検索結果が劣化する可能性があります。ユークリッド距離アルゴリズムは、ピークの面積に大きく影響されます。広がった特徴は鋭い特徴よりも強く重み付けされます。また、このアルゴリズムは、ピークのシフトや相対的なバンドの強度の非線形性に対して最も寛容です。

一次導関数ユークリッド距離

このアルゴリズムは、未知のスペクトルにおけるベースラインの傾斜やオフセットの影響を軽減するために使用されます。ユークリッド距離アルゴリズムと比べて、一次導関数ユークリッド距離はやや検索速度が遅くなりますが、特に未知のスペクトルが2つ以上の化合物の混合物である場合、より良い検索結果が得られることがあります。一次導関数ユークリッド距離アルゴリズムは、傾斜の変化によって重要な影響を受けます。鋭い特徴は広がった特徴よりも強く重み付けされます。また、このアルゴリズムはピークのシフトに非常に敏感です。わずかなシフトでも、アルゴリズムが類似した結果を見逃す可能性があります。

二次導関数ユークリッド距離：二次導関数ユークリッド距離アルゴリズムを使用して、参照スペクトルとクエリスペクトルの二次導関数を比較します。

最適化された補正：スペクトル検索のための画期的な技術

スペクトル検索は、研究者が材料を分類または同定するために最も重要なツールの一つですが、依然としてエラーや不完全さに悩まされています。スペクトル検索では、サンプルスペクトルを参照スペクトルのデータベースと比較します。適な一致をデータベース内で見つけるために、スペクトルは最適化された補正が行われます。これにより、計測器やアクセサリ、環境条件などの要因によって生じるスペクトル間の差異を補正することができます。

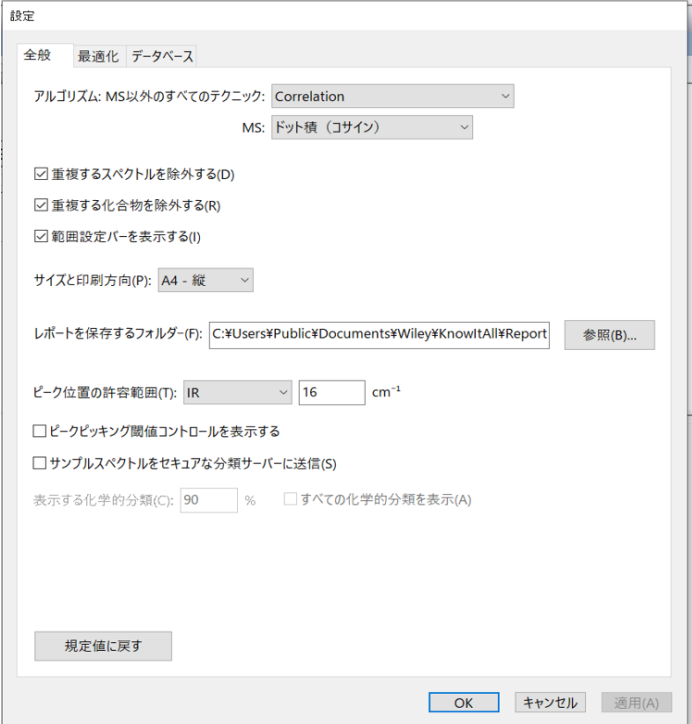
ASTM のスペクトル検索 1 に関するガイドによれば、同じ化合物の比較される 2 つのスペクトルがさまざまな理由で異なる場合、適切な一致スコアを得るためには、さまざまなアルゴリズムや手動での調整方法が存在すると述べられています。これらの方法は特定のケースでは機能するかもしれませんが、X 軸のシフトなど微妙な不一致は手動では非常に難しく、特定のスペクトルの誤りに対して柔軟に対応することはできません。一般的に使用される数学的なアルゴリズムは、欠陥のあるスペクトルにおけるこの種のエラーを補正することができません。


分光学の経験が浅い人々は、専門の分光学者が行うような手動の補正は行いにくいものです。彼らは自分のサンプルスペクトルに必要な補正をどのように行えば最適な検索結果が得られるのかを知ることができません。この懸念に対処するため、Wiley は特許取得済みの画期的な技術である最適化された補正 (**Optimized Corrections**) を導入しました。この技術は、クエリと各個別の参照スペクトルの間で最適な一致を見つけるために、複数の補正を計算上行います。この補正は、クエリと参照スペクトルの両方に対して行われます。このトレーニングガイドでは、最適化された補正技術が、単独の剛性な検索アルゴリズムや手動の方法に比べて、クエリと参照スペクトルの間でより優れた一致を実現することを実証します。また、スペクトルを検索に最適化するために、従来の手法と比べてどのように効果的な結果をもたらすかも示します。

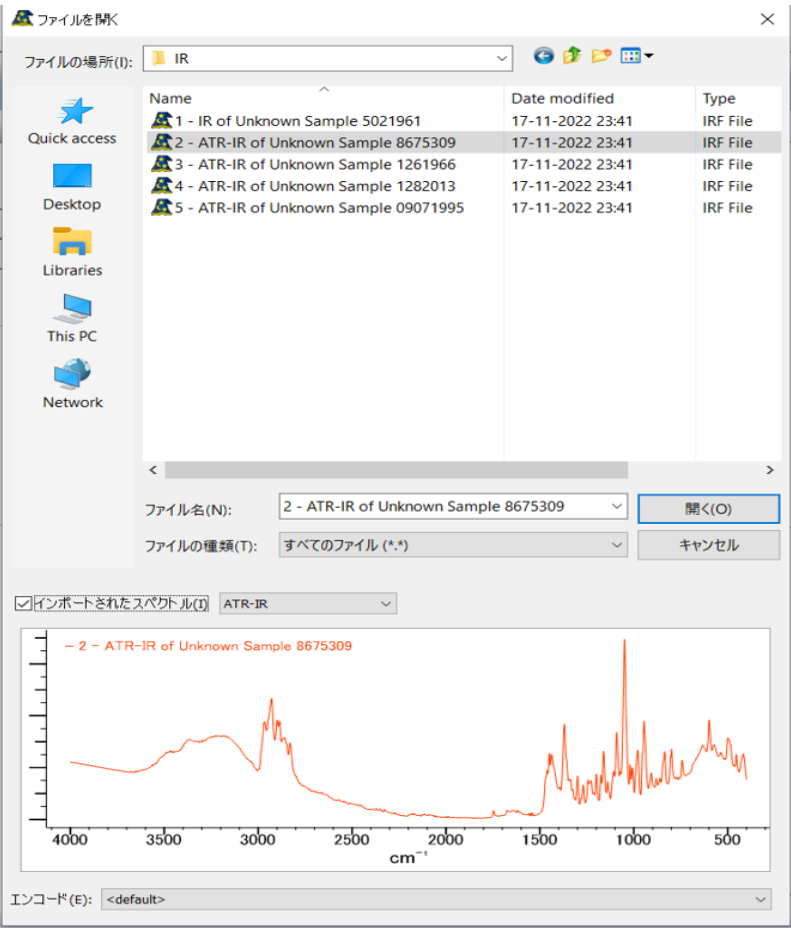
最適化された補正では、選択した範囲内での検索時にフルスペクトルを考慮します。

¹ E2310-04 - 中赤外分光法で記録されたデータを用いたスペクトル検索におけるカーブマッチングアルゴリズムの使用ガイド (2009 年版)。ASTM インターナショナルウェブサイト。 <http://www.astm.org/Standards/E2310.htm> (2015 年 3 月 4 日アクセス)。

例 1: 2 - 不明なサンプルの ATR-IR 8675309.irf

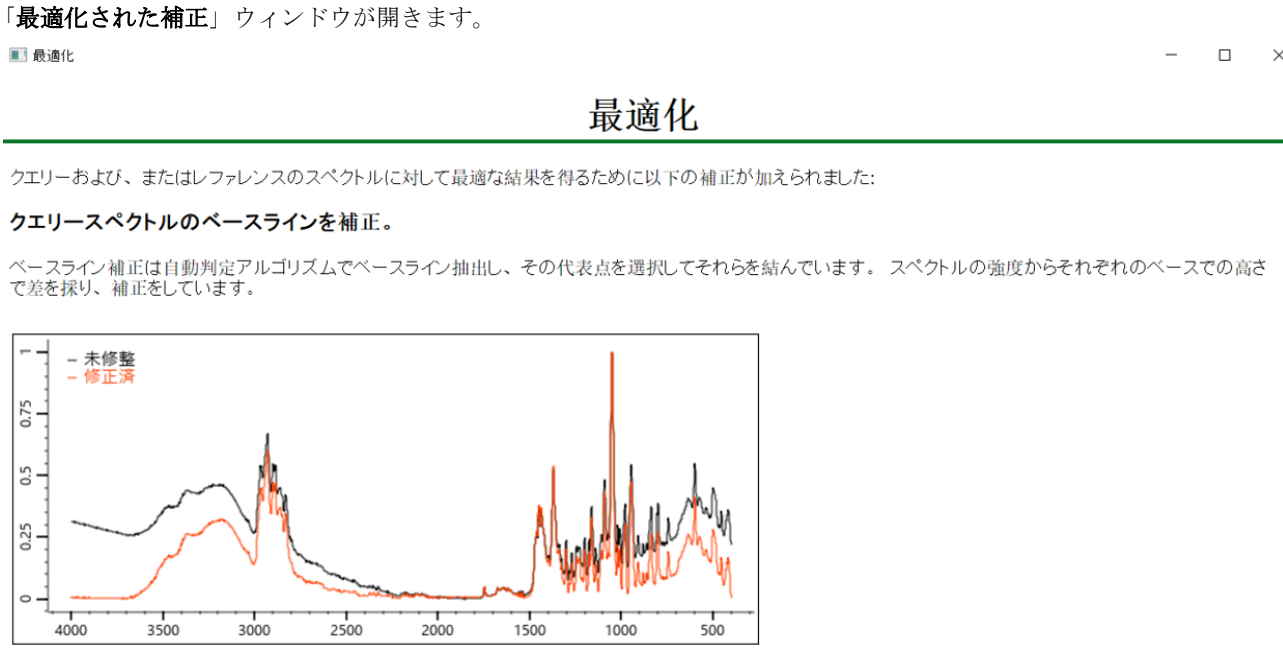
	アクション	結果
1	<p>Data toolbox (データツールボックス) に移動し、ID エキスパート アプリケーションを開くために ID エキスパート のアイコンをクリックしてください。または、デスクトップ (スタンドアロン) アプリケーションがインストールされている場合は、デスクトップのアイコンをダブルクリックして直接 ID エキスパート を起動することもできます。</p>	アプリケーションが開き、ウィンドウの「 Open 」ダイアログボックスが表示されます。
2	<p>「Open (開く)」ダイアログボックスを閉じて、次に「File」>「Settings」を選択してください。</p>	すると、設定画面が表示されます。 

	アクション	結果
3	「 Optimized Corrections （最適化された補正）」タブを選択してください。	 <p>デフォルトでは IR、Near IR、Raman、および NMR スペクトルに対して「Optimized Corrections（最適化された補正）」が有効になっています。「Optimized Corrections（最適化された補正）」のチェックボックスがオンになっている場合、各スペクトル技術に適用する補正を指定することができます。</p>
4	IR の場合、すべての Optimized Corrections （最適化された補正）を有効にしてください。 OK をクリックします。	すると、 設定 画面が閉じられます。

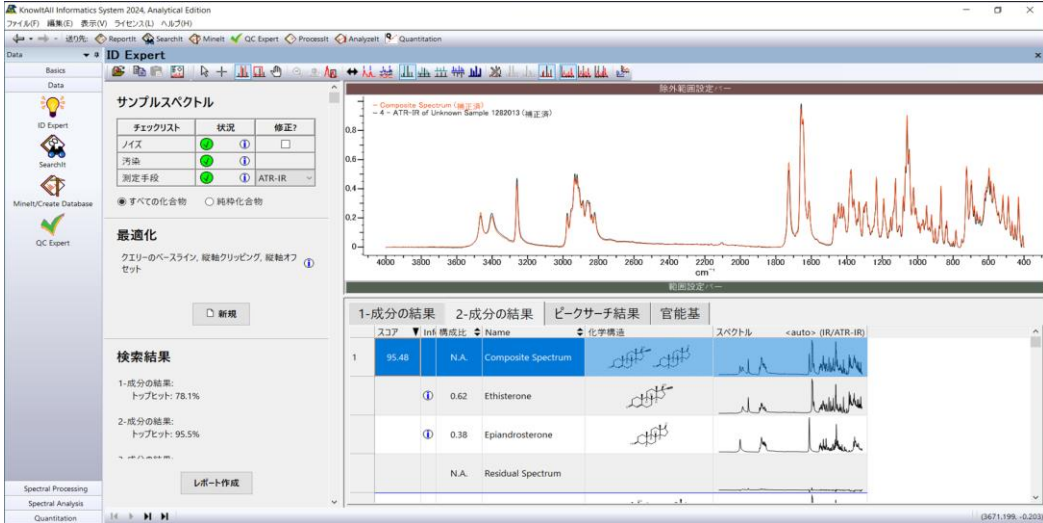
	アクション	結果																		
5	<p>ウィンドウの中央左部にある「New Search (新しい検索)」をクリックしてください。</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\ID Expert\IR フォルダに移動してください。</p> <p>「2 - 不明なサンプルの ATR-IR 8675309.irf」を選択してください。</p> <p>「Imported spectrum is」のチェックを入れてください。ドロップダウンメニューから ATR-IR を選択してください。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	 <p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所(I): IR</p> <table border="1"><thead><tr><th>Name</th><th>Date modified</th><th>Type</th></tr></thead><tbody><tr><td>1 - IR of Unknown Sample 5021961</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr><tr><td>2 - ATR-IR of Unknown Sample 8675309</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr><tr><td>3 - ATR-IR of Unknown Sample 1261966</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr><tr><td>4 - ATR-IR of Unknown Sample 1282013</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr><tr><td>5 - ATR-IR of Unknown Sample 09071995</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>IRF File</td></tr></tbody></table> <p>ファイル名(N): 2 - ATR-IR of Unknown Sample 8675309 開く(O)</p> <p>ファイルの種類(T): すべてのファイル (*.*) キャンセル</p> <p><input checked="" type="checkbox"/>インポートされたスペクトル(S) ATR-IR</p> <p>2 - ATR-IR of Unknown Sample 8675309</p> <p>4000 3500 3000 2500 2000 1500 1000 500</p> <p>cm⁻¹</p> <p>エンコード(E): <default></p>	Name	Date modified	Type	1 - IR of Unknown Sample 5021961	17-11-2022 23:41	IRF File	2 - ATR-IR of Unknown Sample 8675309	17-11-2022 23:41	IRF File	3 - ATR-IR of Unknown Sample 1261966	17-11-2022 23:41	IRF File	4 - ATR-IR of Unknown Sample 1282013	17-11-2022 23:41	IRF File	5 - ATR-IR of Unknown Sample 09071995	17-11-2022 23:41	IRF File
Name	Date modified	Type																		
1 - IR of Unknown Sample 5021961	17-11-2022 23:41	IRF File																		
2 - ATR-IR of Unknown Sample 8675309	17-11-2022 23:41	IRF File																		
3 - ATR-IR of Unknown Sample 1261966	17-11-2022 23:41	IRF File																		
4 - ATR-IR of Unknown Sample 1282013	17-11-2022 23:41	IRF File																		
5 - ATR-IR of Unknown Sample 09071995	17-11-2022 23:41	IRF File																		

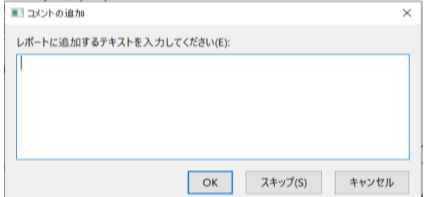
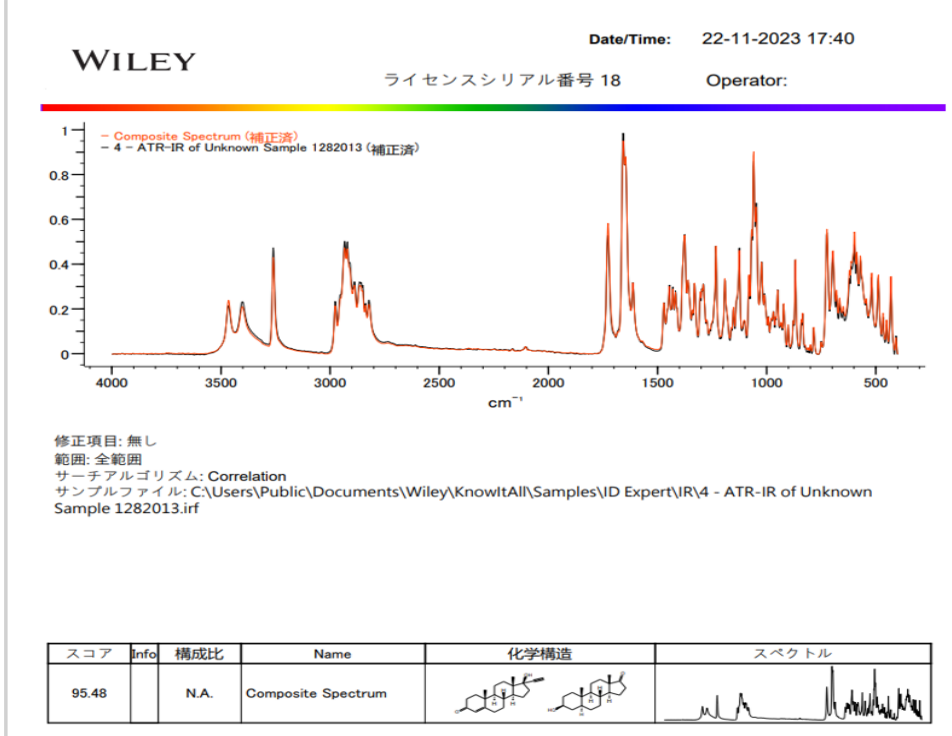
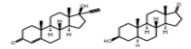

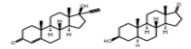

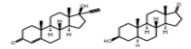

アクション	結果																				
<p>6 検索が完了するまで、検索ステータスバーが表示されるのをお待ちください。</p>	<p>検索は自動的に進行します。</p>  <p>The screenshot shows the ID Expert software interface. On the left, there is a 'サンプルスペクトル' (Sample Spectrum) section with a checklist for 'チェックリスト' (Checklist) containing 'ノイズ' (Noise), '汚染' (Contamination), and '測定手段' (Measurement Method), all marked as 'OK'. Below this is a '最適化' (Optimization) section with a '新規' (New) button. The main area displays an IR spectrum plot with a y-axis from 0.0 to 0.6 and an x-axis from 4000 to 400 cm⁻¹. Below the plot is a '1-成分の結果' (1-Component Results) table:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>スコア</th> <th>Inf Name</th> <th>スペクトル</th> <th>官能基</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>96.47</td> <td>Methandriol</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>85.83</td> <td>2-(ISOPROPYLAMINO)ETHANOL</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>84.49</td> <td>STANOZOLOL IN KBr EXTRACT WINSTROL</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>84.39</td> <td>LACTOSEINOSITOL (1:1)</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>Below the table, there is a '検索結果' (Search Results) section with '1-成分の結果: トップヒット: 96.5%' and '2-成分の結果: クリックしてサーチを続ける。' (Click to continue search). A 'レポート作成' (Create Report) button is at the bottom.</p> <p>スコアはヒットクオリティインデックス (HQI) で、100%単位で参照スペクトルとクエリスペクトルの比較結果を表しています。</p> <p>注記: ヒットリストは、参照データが継続的に追加されるため、異なる場合があります。</p>	スコア	Inf Name	スペクトル	官能基	96.47	Methandriol			85.83	2-(ISOPROPYLAMINO)ETHANOL			84.49	STANOZOLOL IN KBr EXTRACT WINSTROL			84.39	LACTOSEINOSITOL (1:1)		
スコア	Inf Name	スペクトル	官能基																		
96.47	Methandriol																				
85.83	2-(ISOPROPYLAMINO)ETHANOL																				
84.49	STANOZOLOL IN KBr EXTRACT WINSTROL																				
84.39	LACTOSEINOSITOL (1:1)																				

アクション	結果
-------	----

	アクション	結果
7	<p>メインウィンドウの「Optimized Corrections (最適化された補正)」セクションにある情報アイコン ⓘ をクリックしてください。</p> <p>スクロールダウンして、最適化された補正に関する情報を表示します。</p> <p>情報の確認が終わったら、ウィンドウを閉じてください。</p>	<p>「最適化された補正」ウィンドウが開きます。</p>  <p>クエリーおよび、またはレファレンスのスペクトルに対して最適な結果を得るために以下の補正が加えられました:</p> <p>クエリースペクトルのベースラインを補正。</p> <p>ベースライン補正は自動判定アルゴリズムでベースライン抽出し、その代表点を選択してそれらを結んでいます。スペクトルの強度からそれぞれのベースでの高さで差を採り、補正をしています。</p> <p>レファレンススペクトルのベースラインを補正。</p>

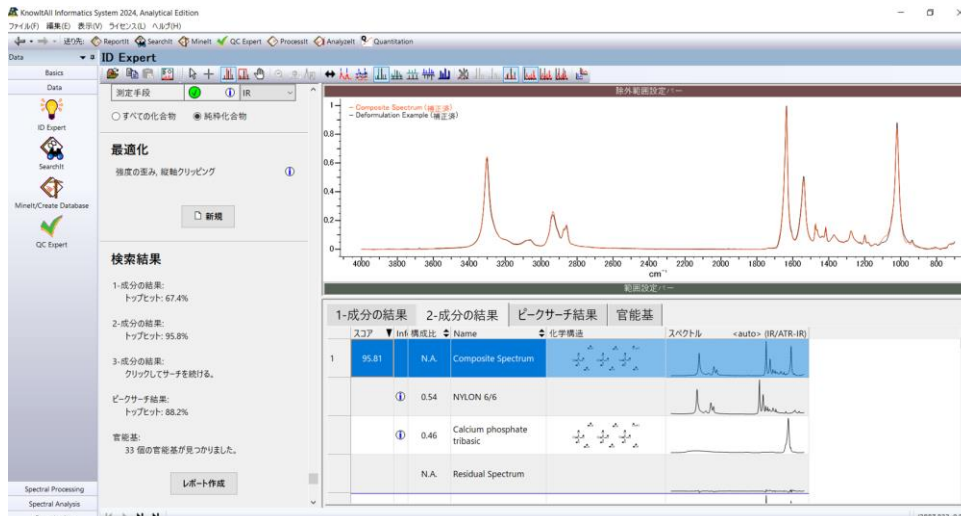
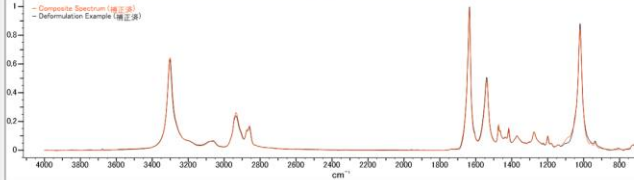



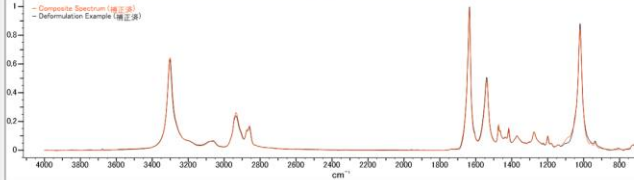



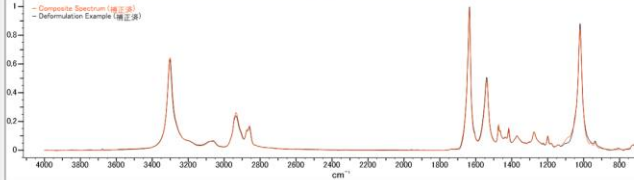



例 2: 4 - 不明なサンプルの ATR-IR 1282013.irf

	アクション	結果																				
1	New Search (新しい検索) をクリックしてください。	ウィンドウの「 Open 」ダイアログボックスが表示されます。																				
2	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\ID Expert\IR 。 「4-不明なサンプルの ATR-IR 1282013.irf」というスペクトルファイルを開いてください。	検索は自動的に進行します。 優れた 1 成分の一致はありませんが、KnowItAll ID Expert は自動的に複数成分の一致を調べます。																				
3	検索が完了するまでお待ちください。	検索ステータスの「 2-Component Results (2 成分結果)」タブが点滅し、良い一致が見つかったことを示します。																				
4	「 2-Component Results (2 成分結果)」タブをクリックしてください。	複合スペクトル、各成分スペクトル、および残差スペクトルが表示されます。  <table border="1"> <thead> <tr> <th>1-成分の結果</th> <th>2-成分の結果</th> <th>ピークサーチ結果</th> <th>官能基</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>スコア: 95.48</td> <td>N.A.</td> <td>Composite Spectrum</td> <td></td> </tr> <tr> <td>0.62</td> <td>Ethisterone</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>0.38</td> <td>Epiandrosterone</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>N.A.</td> <td>Residual Spectrum</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	1-成分の結果	2-成分の結果	ピークサーチ結果	官能基	スコア: 95.48	N.A.	Composite Spectrum		0.62	Ethisterone			0.38	Epiandrosterone			N.A.	Residual Spectrum		
1-成分の結果	2-成分の結果	ピークサーチ結果	官能基																			
スコア: 95.48	N.A.	Composite Spectrum																				
0.62	Ethisterone																					
0.38	Epiandrosterone																					
N.A.	Residual Spectrum																					

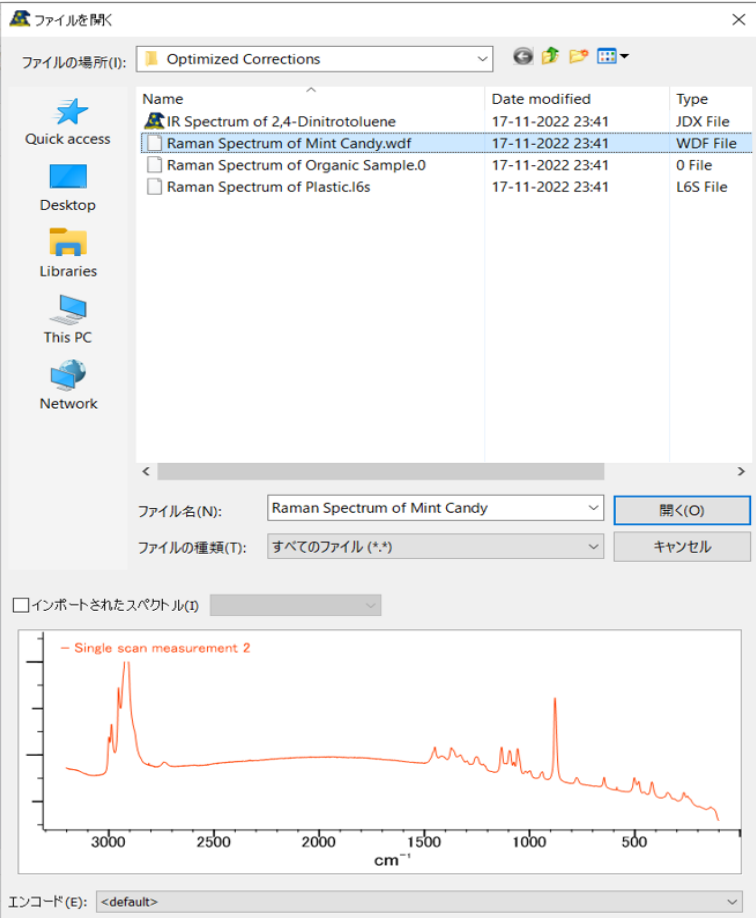
	アクション	結果												
5	<p>検索ステータスセクションの「Search Status (レポート作成)」をクリックしてください。</p>	<p>Add Comments (コメントの追加) ダイアログボックスが開きます。</p> 												
6	<p>OK をクリックします。</p>	<p>レポートが作成され、自動的に表示されます。</p>  <table border="1" data-bbox="934 1258 1816 1339"> <thead> <tr> <th>スコア</th> <th>Info</th> <th>構成比</th> <th>Name</th> <th>化学構造</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>95.48</td> <td></td> <td>N.A.</td> <td>Composite Spectrum</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	スコア	Info	構成比	Name	化学構造	スペクトル	95.48		N.A.	Composite Spectrum		
スコア	Info	構成比	Name	化学構造	スペクトル									
95.48		N.A.	Composite Spectrum											

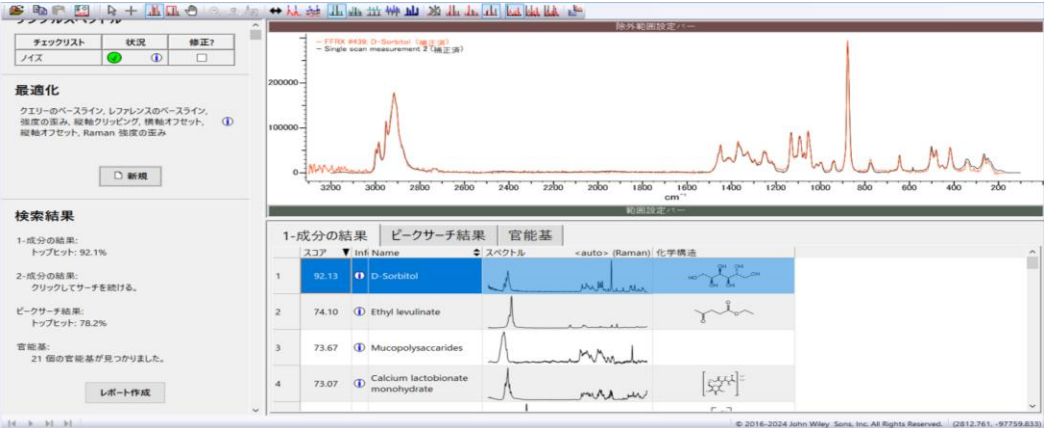
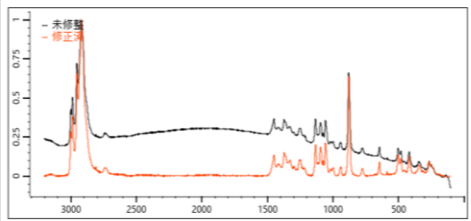
例 3: DeformulationExample.irf

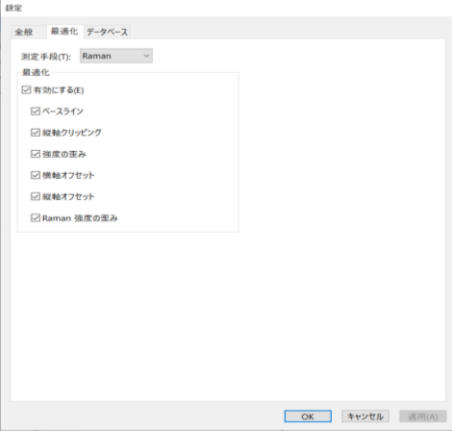
	アクション	結果
1	<p>クエリステータスセクションの「All Compounds」のラジオボタンをクリックしてください。</p> <p>(ID Expert で前の操作が行われている場合、スタートページが異なる場合があります。All Compounds のラジオボタンが表示されない場合は、KnowItAll を閉じて再度開き、ID Expert に移動して Open ダイアログボックスを閉じてください。その後、All Compounds を選択できるようになります。)</p> <p>New Search (新しい検索) をクリックしてください。</p>	<p>ウィンドウの「Open」ダイアログボックスが表示されます。</p>
2	<p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Deformulation.</p> <p>DeformulationExample.irf を選択してください。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	<p>検索は自動的に進行します。</p> <p>完全一致が見つかりました : AKOLOUN S223-HM8。ただし、この材料が何でできているかは不明です。</p>
3	<p>「Pure Compounds」のラジオボタンをクリックします。</p>	<p>ID Expert は純粋な有機および無機化学物質スペクトルのみで別の検索を実行します。</p> <p>検索ステータスの「2-Component Results (2 成分結果)」タブが点滅し、良い一致が見つかったことを示します。</p>

	アクション	結果																														
4	<p>「2-Component Results (2成分結果)」タブをクリックしてください。</p>	<p>複合スペクトル、個々の化学成分スペクトル、および残差スペクトルが表示されます。サンプルはおそらくナイロンとカルシウム塩から成っています。</p>  <p>検索結果</p> <ul style="list-style-type: none"> 1-成分の結果: トップヒット: 67.4% 2-成分の結果: トップヒット: 95.8% 3-成分の結果: クリックしてサーチを続ける。 <p>ピークサーチ結果: トップヒット: 88.2%</p> <p>官能基: 33 個の官能基が見つかりました。</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>スコア</th> <th>in6 構成比</th> <th>Name</th> <th>化学構造</th> <th>スペクトル</th> <th>官能基</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>95.81</td> <td>N.A.</td> <td>Composite Spectrum</td> <td><chem>C12CCC(NC1)C2</chem></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>0.54</td> <td></td> <td>NYLON 6/6</td> <td><chem>C12CCC(NC1)C2</chem></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>0.46</td> <td></td> <td>Calcium phosphate tribasic</td> <td><chem>Ca3(PO4)2</chem></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>N.A.</td> <td></td> <td>Residual Spectrum</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	スコア	in6 構成比	Name	化学構造	スペクトル	官能基	95.81	N.A.	Composite Spectrum	<chem>C12CCC(NC1)C2</chem>			0.54		NYLON 6/6	<chem>C12CCC(NC1)C2</chem>			0.46		Calcium phosphate tribasic	<chem>Ca3(PO4)2</chem>			N.A.		Residual Spectrum			
スコア	in6 構成比	Name	化学構造	スペクトル	官能基																											
95.81	N.A.	Composite Spectrum	<chem>C12CCC(NC1)C2</chem>																													
0.54		NYLON 6/6	<chem>C12CCC(NC1)C2</chem>																													
0.46		Calcium phosphate tribasic	<chem>Ca3(PO4)2</chem>																													
N.A.		Residual Spectrum																														

例 4: Raman of Mint Candy.wdf

アクション	結果
1 New Search (新しい検索) をクリックしてください。	ウィンドウの「 Open 」ダイアログボックスが表示されます。
<p>2 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Optimized Corrections フォルダに移動してください。</p> <p>「Raman Spectrum of Mint Candy.wdf」というスペクトルファイルを選択してください。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	<p>プレビューから見ると、これは「良い」スペクトルではありません。</p> 

アクション	結果
<p>4 検索が完了するまでお待ちください。その後、検索ステータス エリアをスクロールしてください。</p>	<p>非常に良い一致が見つかりました。</p> 
<p>6 「Optimized Corrections」のために ⓘ をクリックしてください。</p> <p>表示された情報をスクロールしてください。終了したら、ポップアップウィンドウを閉じてください。</p>	<p>最適化</p> <p>クエリーおよび、またはレファレンスのスペクトルに対して最適化結果を得るために以下の補正が加えられました:</p> <p>クエリースペクトルのベースラインを補正。</p> <p>ベースライン補正は自動判定アルゴリズムでベースライン抽出し、その代表点を選択してそれらを結んでいます。スペクトルの強度からそれぞれのベースでの高さで差を採り、補正をしています。</p>  <p>レファレンススペクトルのベースラインを補正。</p> <p>最初の一致に対して、最適化された補正が行われています。KnowItAll 独自のものとしては、「Raman-specific intensity distortion (ラマン特有の強度歪み)」があります。</p>

	アクション	結果
7	「File」>「Settings」に移動し、「Optimize Correction（最適化された補正）」タブを選択してください。	<p>これは Raman サンプルおよび参照スペクトルに対して行われた補正です。</p>  <p>ピークのクリッピングに関する注意事項：KnowItAll は、意図的に最も強いピークの強度を低くするように努めています。</p>
8	練習として、 Enabled にチェックを入れて検索を再実行すると、非常に異なる結果が得られます。	