

C l u s t e r とプロファイル検索が合体した

# C l u s t e r P 2 ソフトウェア

Ver.1.11M

2016年09月13日



*HelperTex Office*

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

変更履歴

Version 1.100 2009/08/10 データベースプロファイル表示、データベースに処理条件登録

## 概要

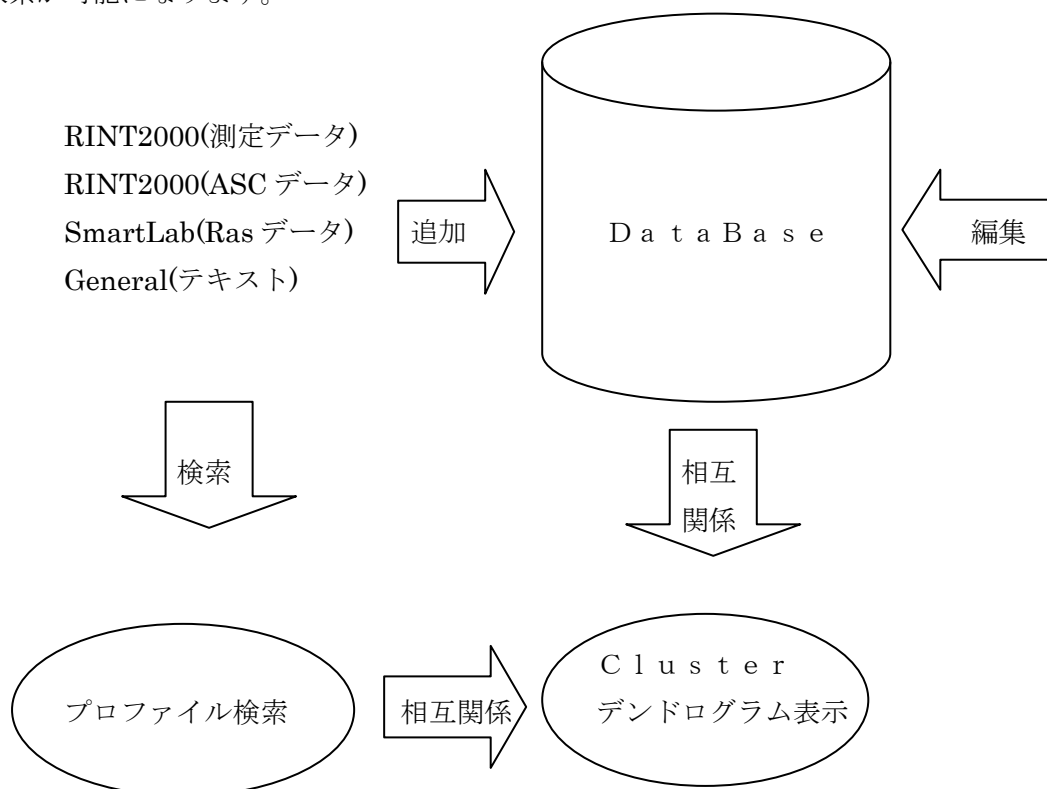
C l u s t e r P 2ソフトウェアは、D a t a B a s e, C l u s t e r, プロファイル検索プログラムが一体となって、物質の同定を行うソフトウェアです。

未知物質（被検試料）を同定する場合、その被検試料と似通った既知の物質のD a t a B a s eを作成し、プロファイル検索で、被検試料と似通った物質をD a t a B a s eから探し出します。

C l u s t e rはD a t a B a s eに登録されているデータが相互にどのような関係があるか

あるいは、プロファイル検索されたデータ群と被検試料の相互関係を計算表示する。（デンドログラム）

この機能により、データベース管理（追加、変更、削除）、データの相互関係（C l u s t e r), 未知物質の探索が可能になります。



扱えるデータは、

R I N T 2 0 0 0 ( R a w), R I N T 2 0 0 0 ( A s c )  
S m a r t L a b ( R a s), 一般テキストデータ

デンドログラム表示

表示出来るデータ数に制限はないが、50以上になると見難くなります。  
プロフィール検索後の表示は最大10プロフィールとします。

D a t a B a s e登録数

最大数に制限はないが、デンドログラム表示から、最小区分けは50以下が望ましい。

50以上のメンバーが存在する場合、複数の最小区分けにすると良い。

## 初期設定

### 横軸（角度など）間隔

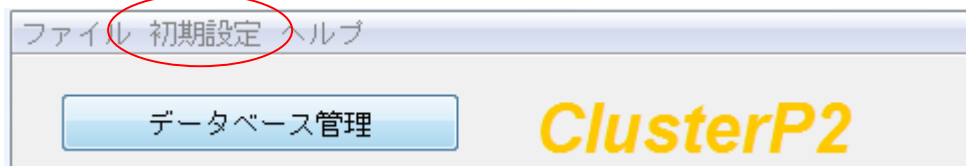
D a t a a B a s e 作成上、横軸間隔を最初に指定する必要があります。

大量なD a t aを扱う場合、0.02、精密な検索を扱う場合、0.01を選択する事を薦めます。

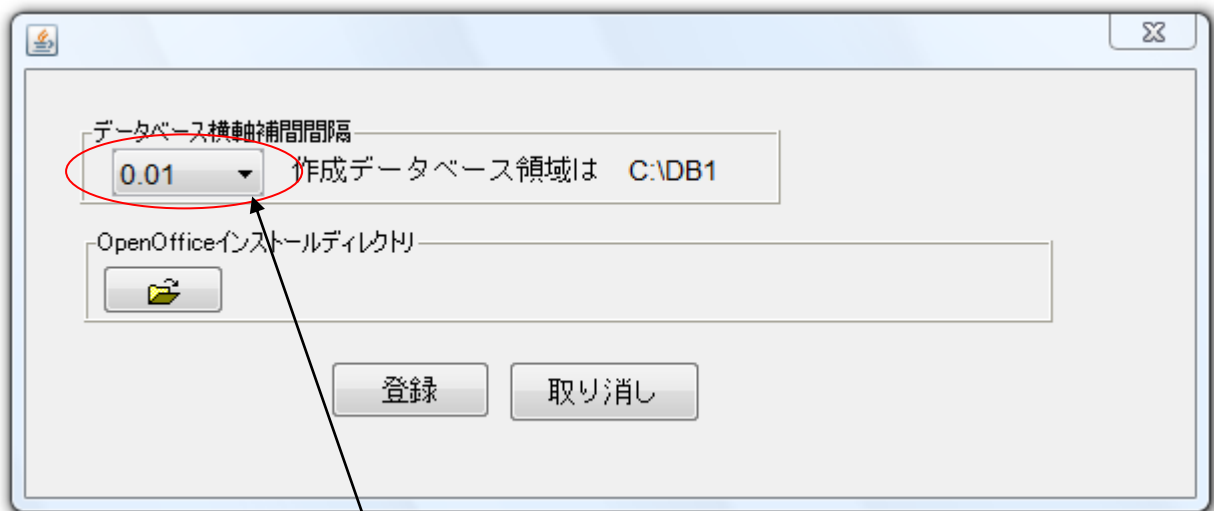
### OpenOfficeが登録されているディレクトリ

報告書はOpenOfficeを経由して印刷、あるいはPDF化します。

OpenOfficeのバージョンによって、ディレクトリ名が変わる可能性があり、初期設定で指定する事とします。

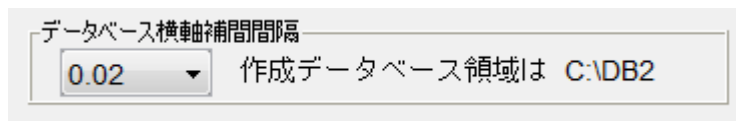


初期設定→初期パラメータで



0.01が選択されている。

0.02を選択すると、

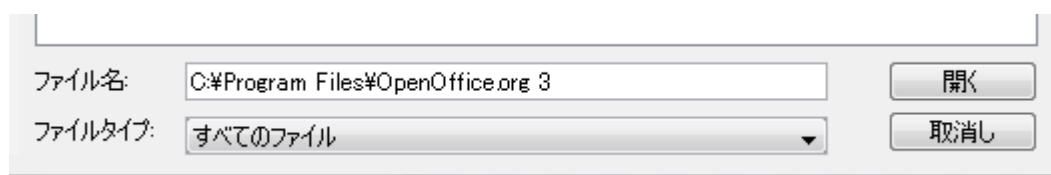


D a t a a B a s e 登録領域がDB1->DB2に変わります。

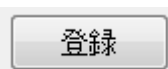
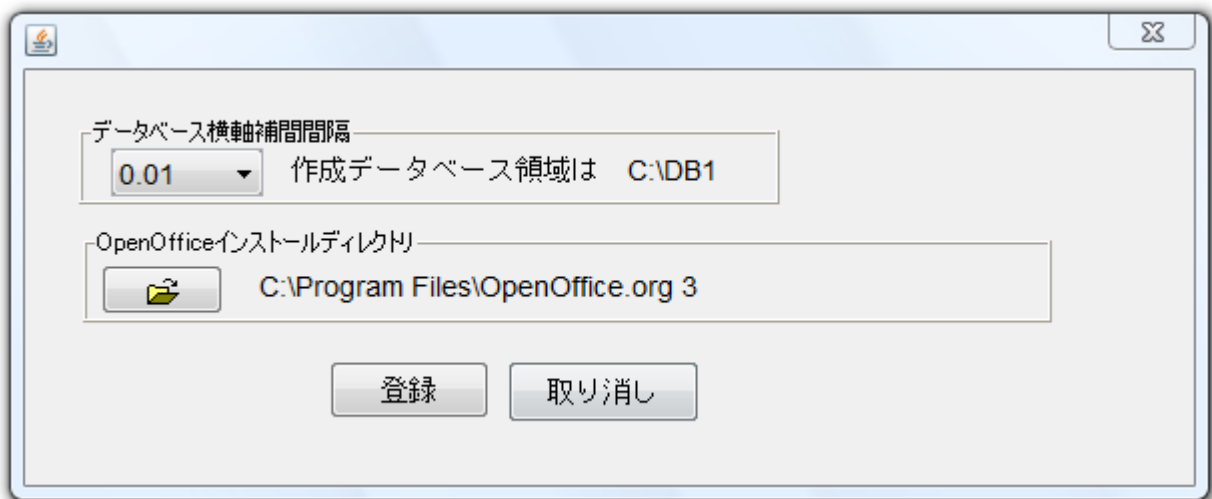
### OpenOfficeインストールディレクトリ

予めインストールされているディレクトリの指定

標準的なインストール先は



です。

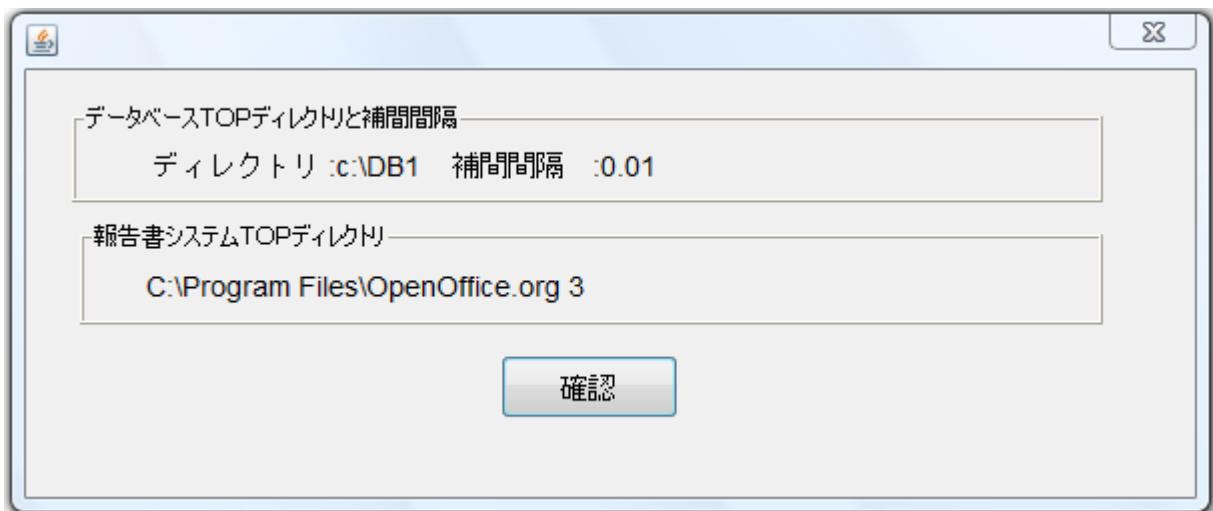


による初期設定は完了します。

登録結果は、C:\CTR\work\ClusterP2\envfile に登録されるが、変更出来なくなります。  
変更する場合、このファイルを削除して、初期設定で再設定して下さい。

初期設定が完了したら、ClusterP2ソフトウェアを終了し、再立ち上げしてください。

再立ち上げ後、初期パラメータの参照で以下が登録されている事を確認する。



## ClusterP2ソフトウェアの使い方

プログラムは C:\¥CTR¥bin¥ClusterP2.jar をクリックする事で起動します。



データベース管理

データベースの追加、編集、削除を行う。

Cluster

登録されているデータベースのデンドログラム表示を行う。

SmartLab(Ras)



プロフィール検索

Data Base から被検試料に似通ったプロフィールを探し出し、デンドログラム表示を行う。

ヘルプ

プログラムのバージョンと所有者を表示

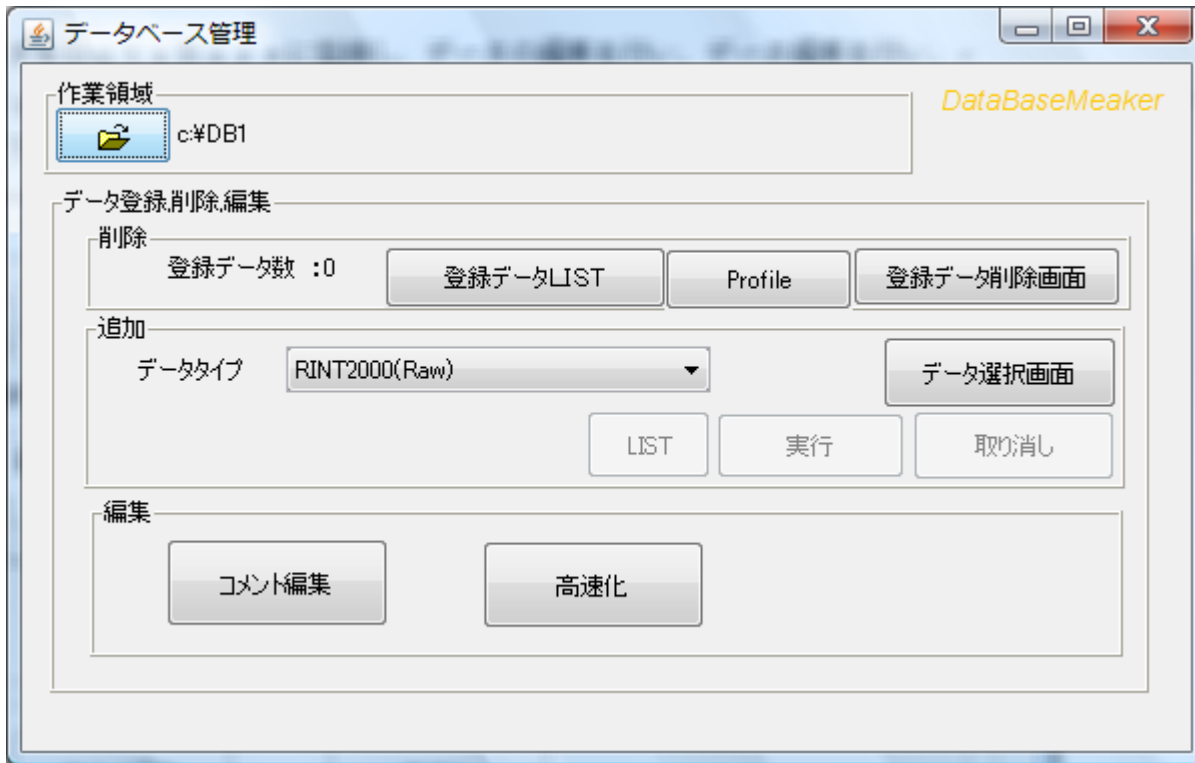
バージョン表示にTが含まれている場合、所有者は表示されません。

ファイル

終了でプログラムが終了

## 実践

複数のデータをD a t a B a s eに登録し、データの編集を行い、データ編集を行い、登録したD a t a B a s eの相互関係を調べ、被検試料としてその中の1データをプロフィール検索を行う。この操作でアプリケーションの全ての機能が分かります。



実践1 複数のデータをD a t a B a s eに登録する、



クリックする。



登録数は0件

D a t a B a s eに登録される形態は、入力データの階層をそのまま登録されます。階層でそのデータの履歴が判別出来る階層名にすると管理が簡単になります。

X:\Demo

X:\Demo\3atoms

のデータをD a t a B a s eに登録するとD a t a B a s eの階層は

C:\DB1

C:\DB1\CR

C:\DB1\CR\Demo

C:\DB1\CR\Demo\3atoms

として登録されます。

横軸間隔0.01でC r管球データが3 a t o m s以下に登録されます。

データの追加 (R a wデータの場合)

追加  
 データタイプ RINT2000(Raw) [データ選択画面]  
 LIST 実行 取り消し

[データ選択画面] をクリック

ファイル選択画面で追加する Raw データのトップディレクトリを選択 (この場合 X:\demo)

追加  
 データタイプ RINT2000(Raw) [データ選択画面]  
 検索されたファイル数:66 LIST 実行 取り消し

指定したディレクトリ以下の Raw ファイル数を表示 実行する。

追加  
 データタイプ RINT2000(Raw) [データ選択画面]  
 変換ファイル数: 66/66 LIST 実行 取り消し

追加完了すると、変換ファイル数が表示される。(66 / 66)

ファイル単位では

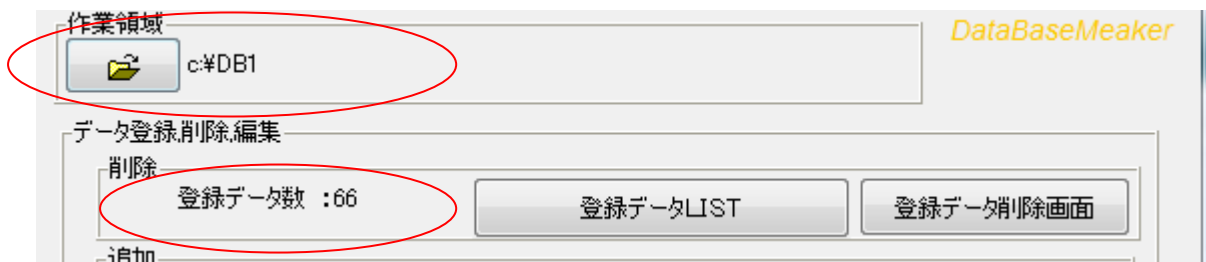
入力データ

登録データ

X:\demo\atoms\01.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\01.Txt
X:\demo\atoms\02.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\02.Txt
X:\demo\atoms\03.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\03.Txt
X:\demo\atoms\04.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\04.Txt
X:\demo\atoms\05.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\05.Txt
X:\demo\atoms\06.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\06.Txt
X:\demo\atoms\07.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\07.Txt
X:\demo\atoms\08.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\08.Txt
X:\demo\atoms\09.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\09.Txt
X:\demo\atoms\10.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\10.Txt
X:\demo\atoms\11.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\11.Txt
X:\demo\atoms\12.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\12.Txt
X:\demo\atoms\13.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\13.Txt
X:\demo\atoms\14.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\14.Txt
X:\demo\atoms\15.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\15.Txt
X:\demo\atoms\16.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\16.Txt
X:\demo\atoms\17.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\17.Txt
X:\demo\atoms\18.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\18.Txt
X:\demo\atoms\19.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\19.Txt
X:\demo\atoms\20.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\20.Txt
X:\demo\atoms\64.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\64.Txt
X:\demo\atoms\65.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\65.Txt
X:\demo\atoms\66.raw	C:\DB1\CR\demo\atoms\66.Txt

追加がされているかの確認





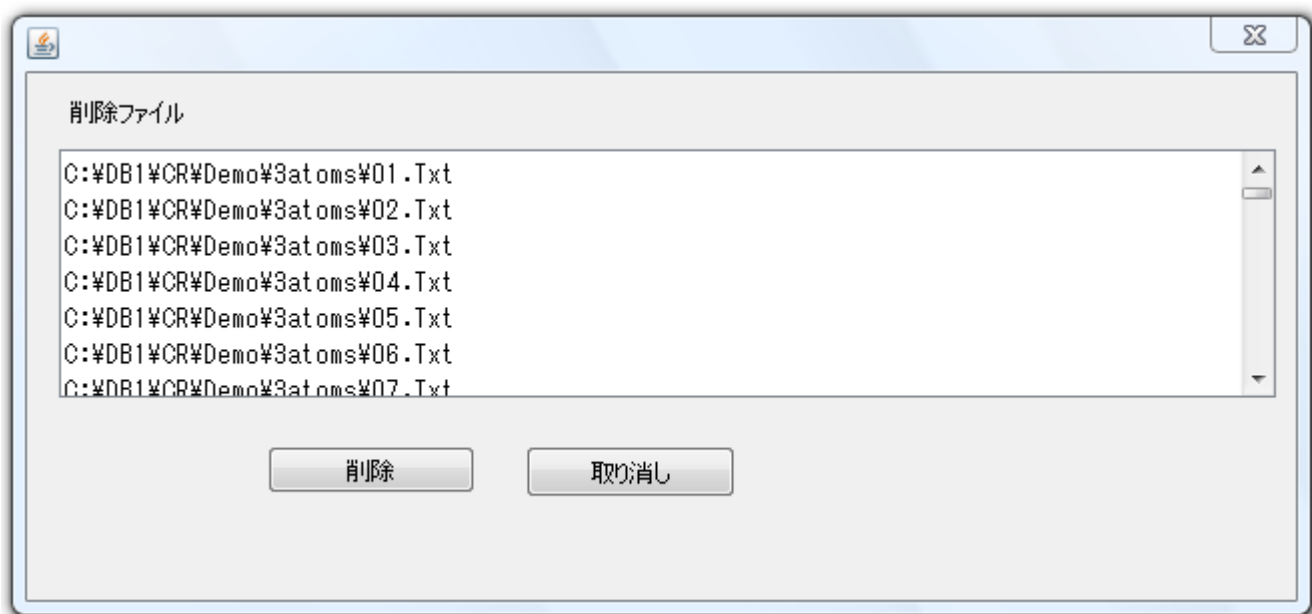
作業領域を再選択する事で登録データ数を表示する。

追加されているデータの削除



をクリックして削除するデータ、あるいはディレクトリを選択

A S C 2 ディレクトリを選択すると



をクリックして選択したデータを削除する。

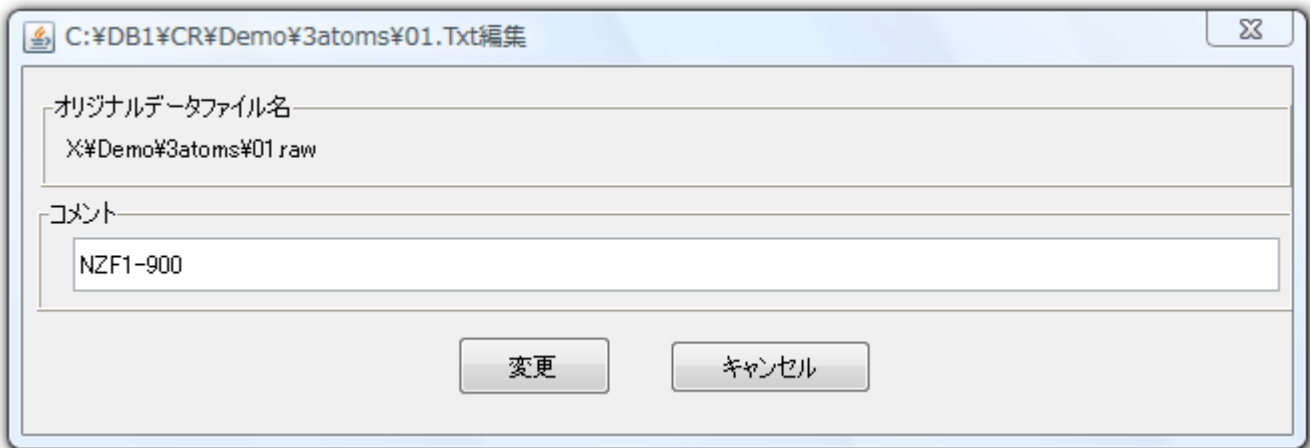
作業領域を再選択して、削除されている事を確認する。



登録データの編集

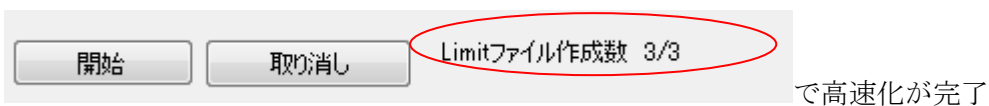
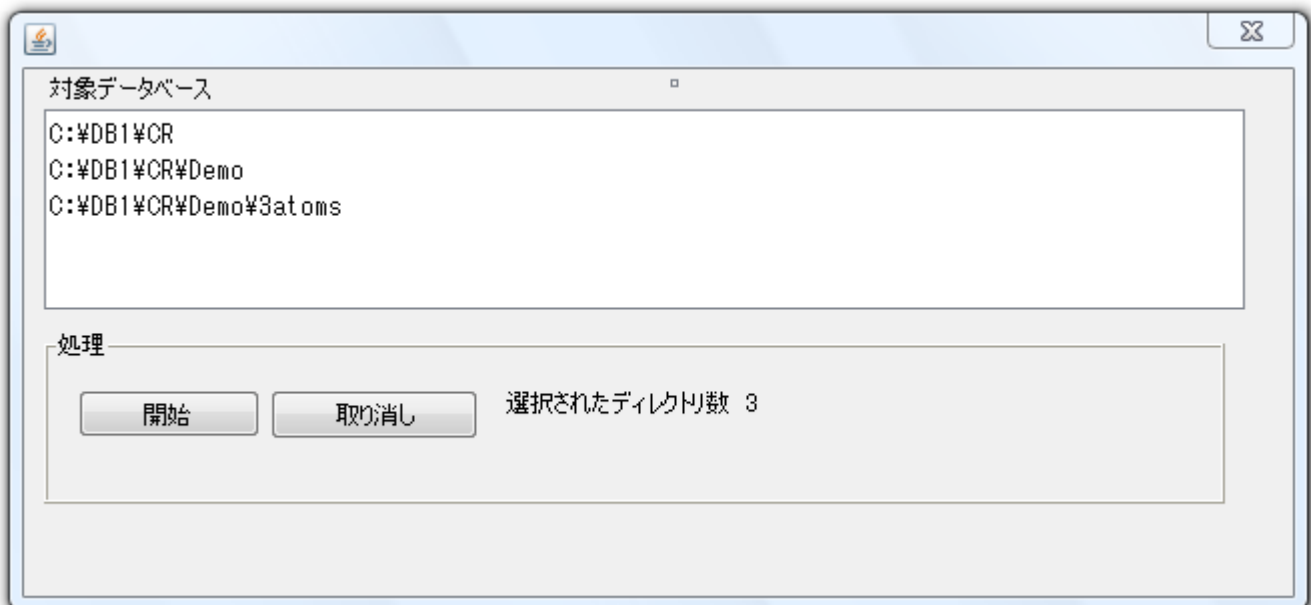


プロフィール検索時、検索結果として表示するコメントを追加する。  
コメントはファイル単位に追加する。  
ファイルを選択すると



#### 登録データの高速化

登録データの単位群のデータ範囲を管理する `limitfile` を作成する。  
全 DATABASE の高速化を行う。

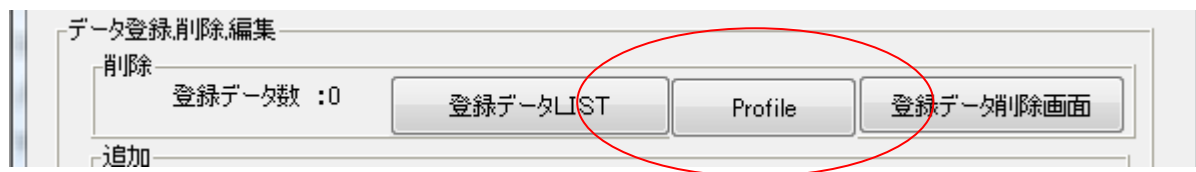


高速化が完了すると全てのディレクトリに `limitfile` が存在する。

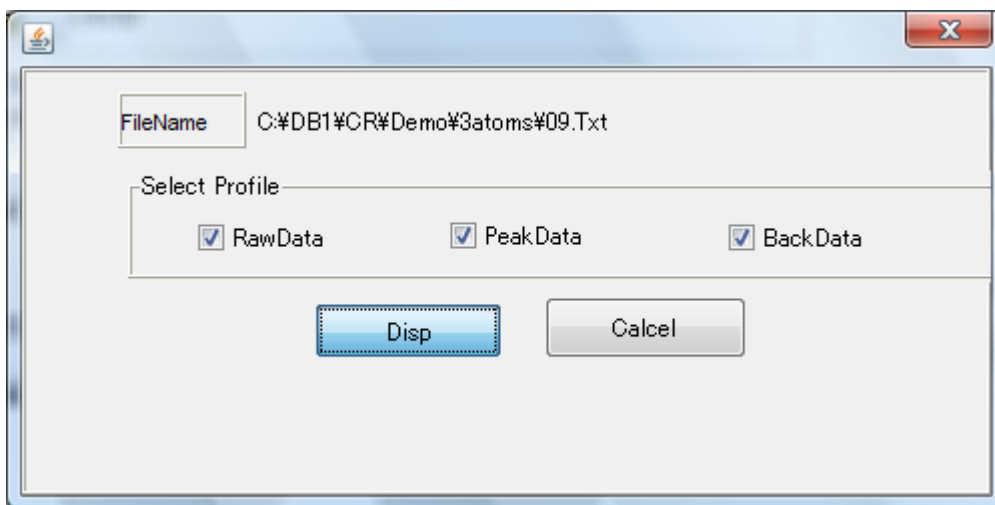
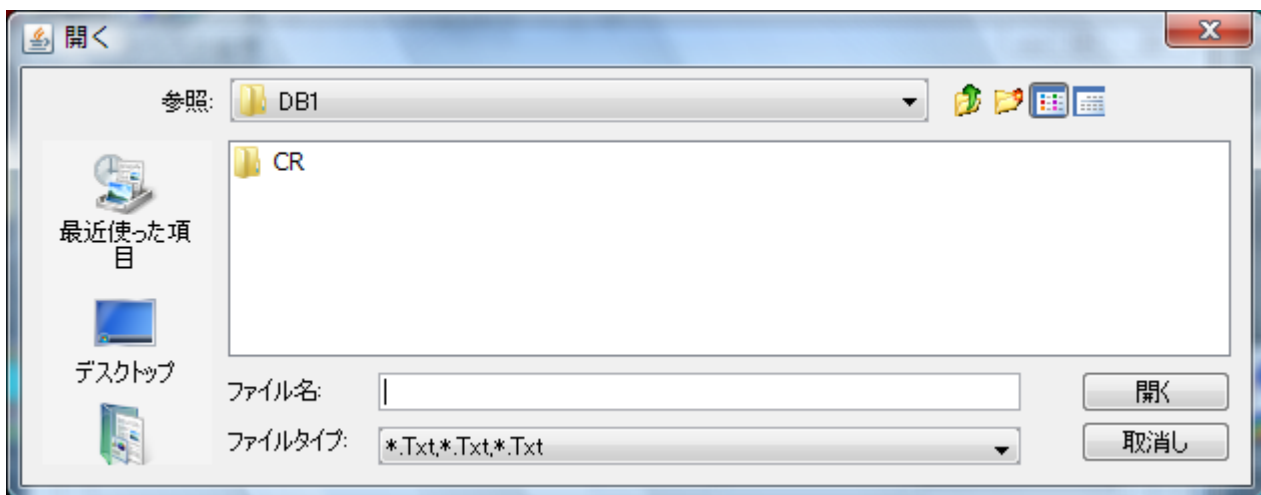
C:\DB1\CR\Demo\3atoms\62.Txt  
C:\DB1\CR\Demo\3atoms\63.Txt  
C:\DB1\CR\Demo\3atoms\64.Txt  
C:\DB1\CR\Demo\3atoms\65.Txt  
C:\DB1\CR\Demo\3atoms\66.Txt  
C:\DB1\CR\Demo\3atoms\LimitFile  
C:\DB1\CR\Demo\LimitFile  
C:\DB1\CR\LimitFile  
C:\DB1\LimitFile

データを追加した場合、必ず高速化を行って下さい。

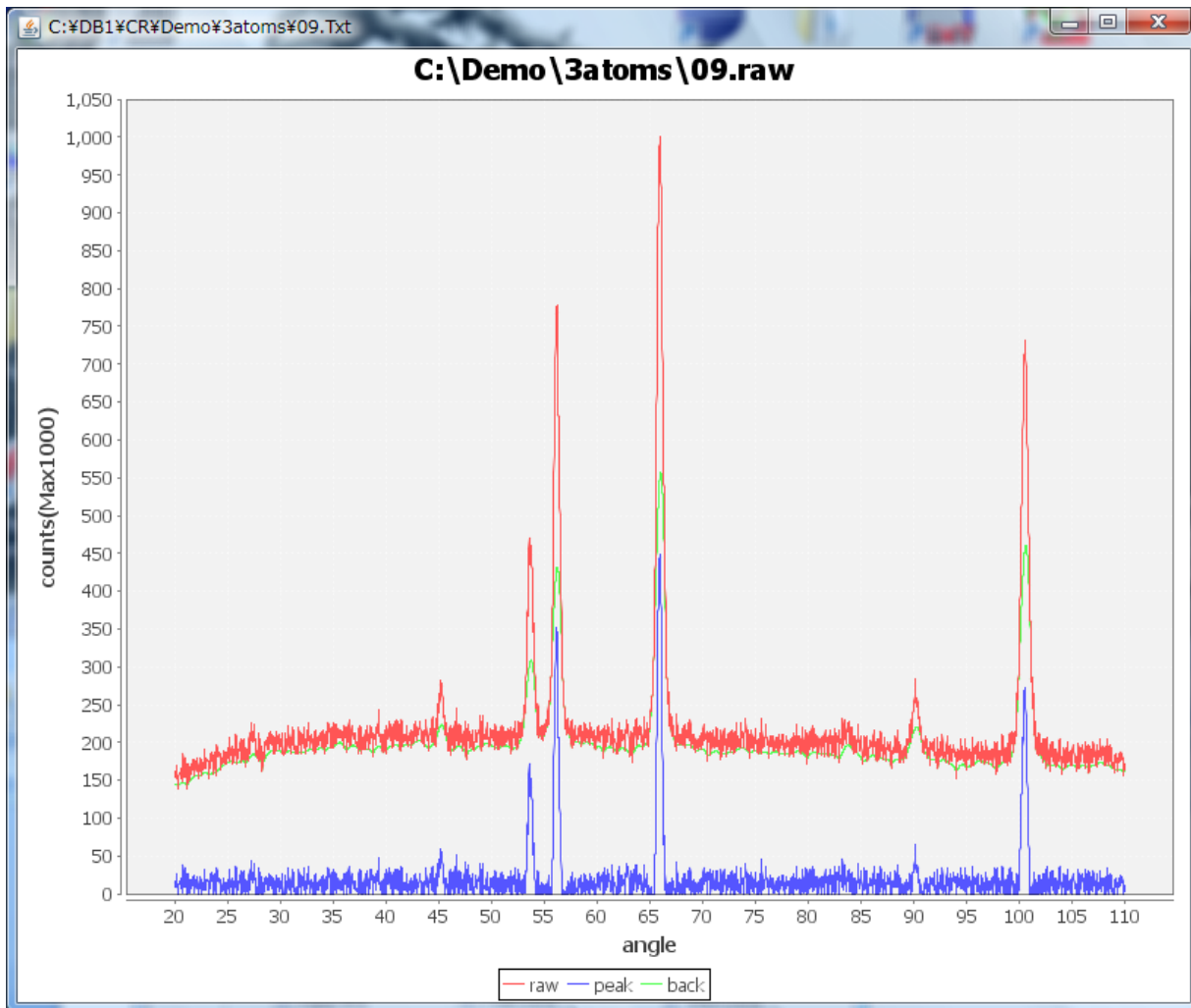
データベース登録データプロフィール確認



profileをクリックで表示プロフィールを選択



表示プロフィール (rawData,PeakData,backdata) を選択しDispで表示する。

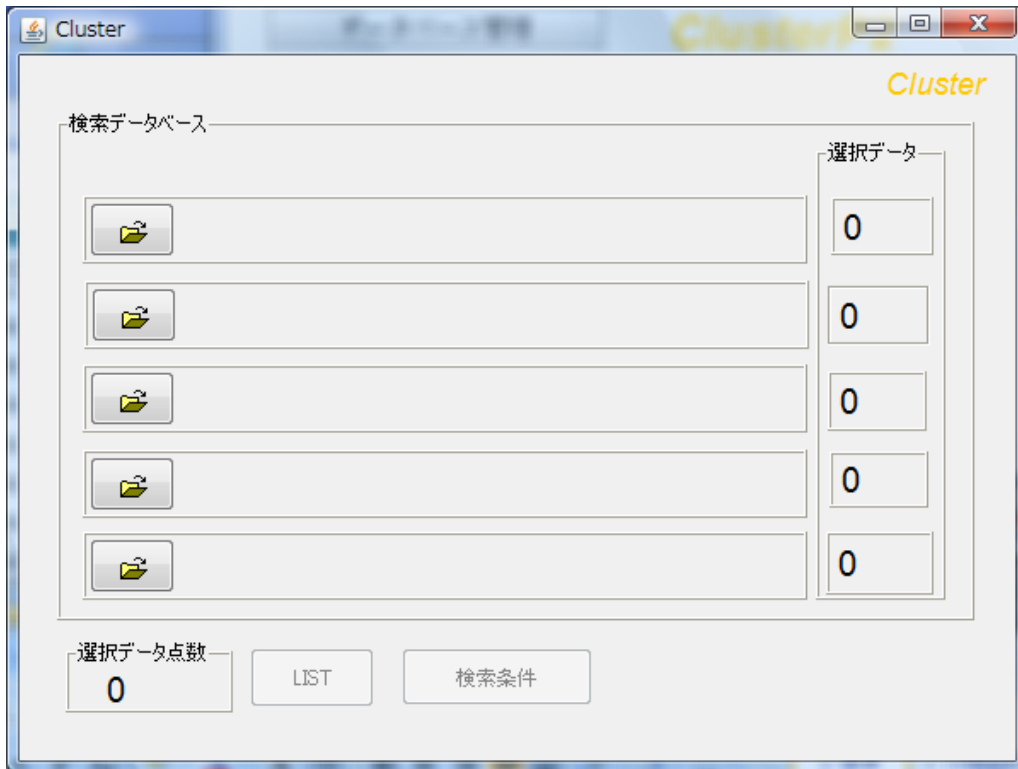


画面上を右クリックで印刷等が行える。

登録されたDATABASEの相互相関を調べる (Cluster)



をクリック



登録されている複数のディレクトリを指定して相互相関を調べる。



選択データ点数

66

LIST

検索条件

をクリック

Cluster Condition

Cluster Condition

測定範囲

20.0

範囲制限

下限

20.0

上限

110.0

110.0

プロフィール処理

平滑化 1

ピークシフト

検索方法

全プロフィール(raw)

ピークプロフィール(peak)

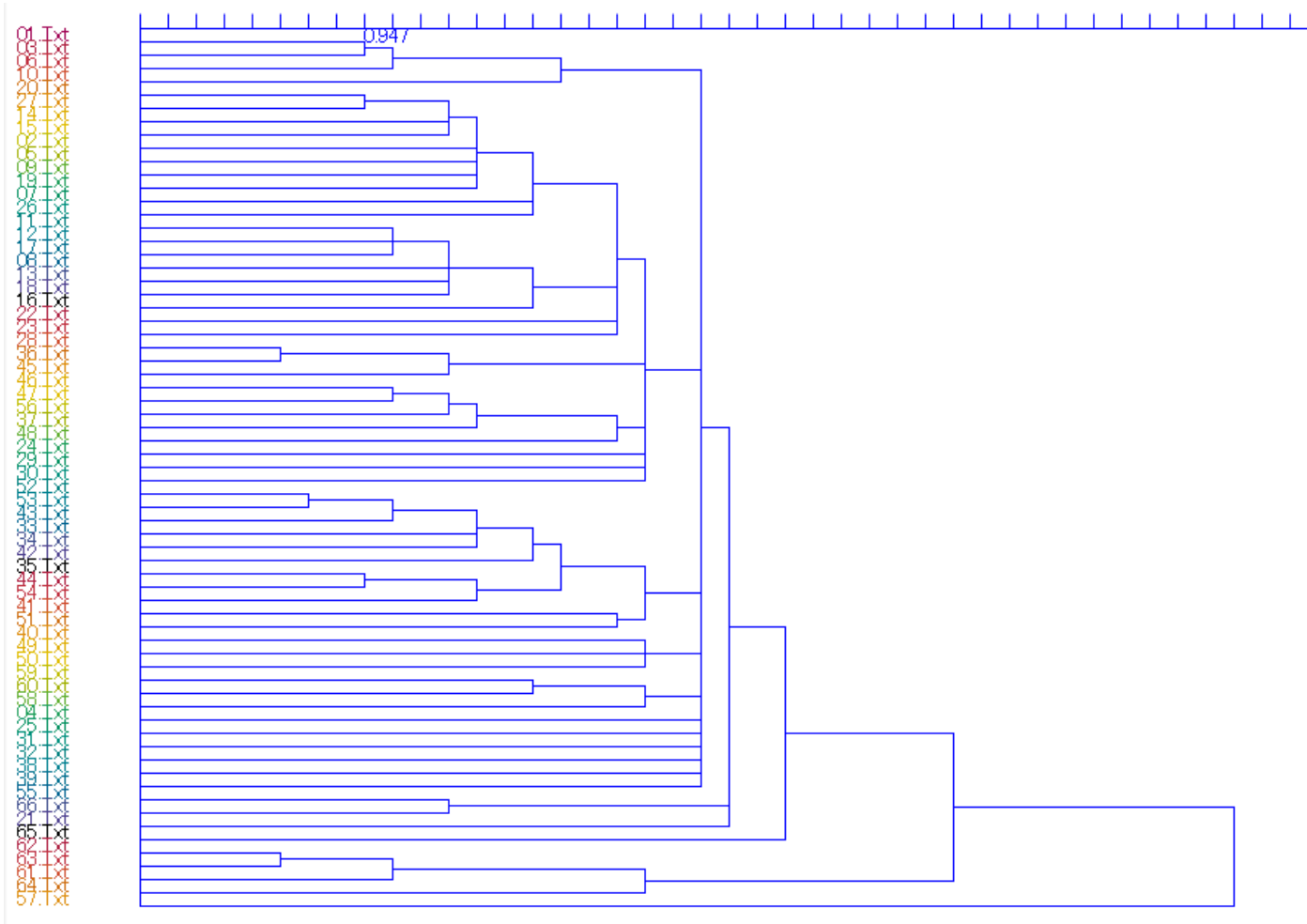
非晶質(back)

分解能

150

検索開始

検索条件を指定して検索を開始する。

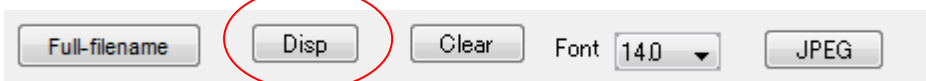


01. Txt と 03.Txt の相関係数は0.947でありプロファイルが似ている事が分かります。

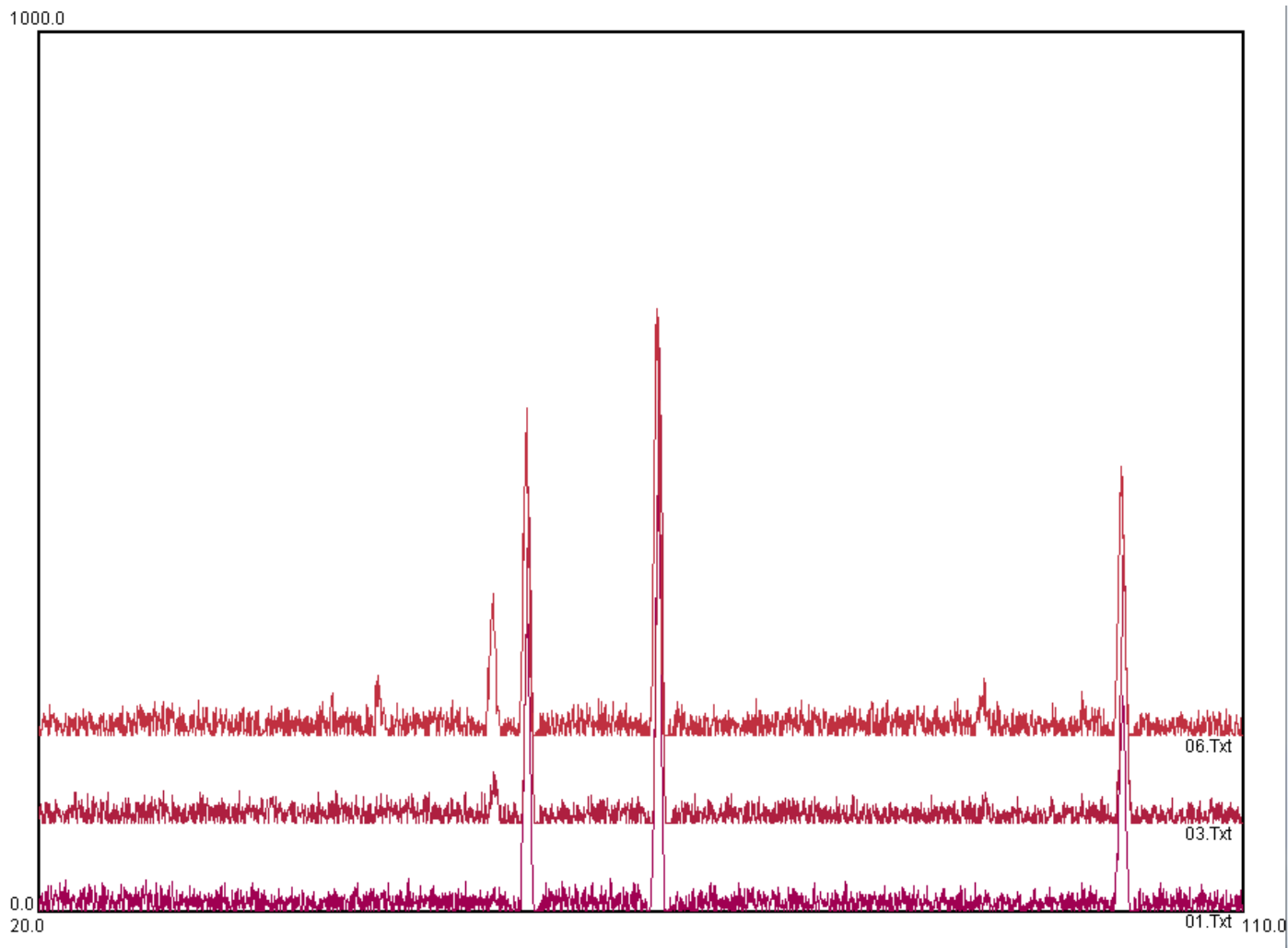
01. Txt,03.Txt,06.Txt がどの程度似ているか確認する。



ファイル名を選択して表示色を黒くして



Dispする。



01, 03, 06を比較すると良く似ている事が分かります。

印刷はファイル-報告書でOpenOfficeが立ち上がります。

OpenOfficeが立ち上がらない場合、別にOpenOffice起動していないか？

あるいは、HDの正規の位置にOpenOffice 3.0がインストールされているか？



## プロフィール検索 (Rawファイルの場合)

プロフィール検索

RINT2000(Raw)



プロフィール検索



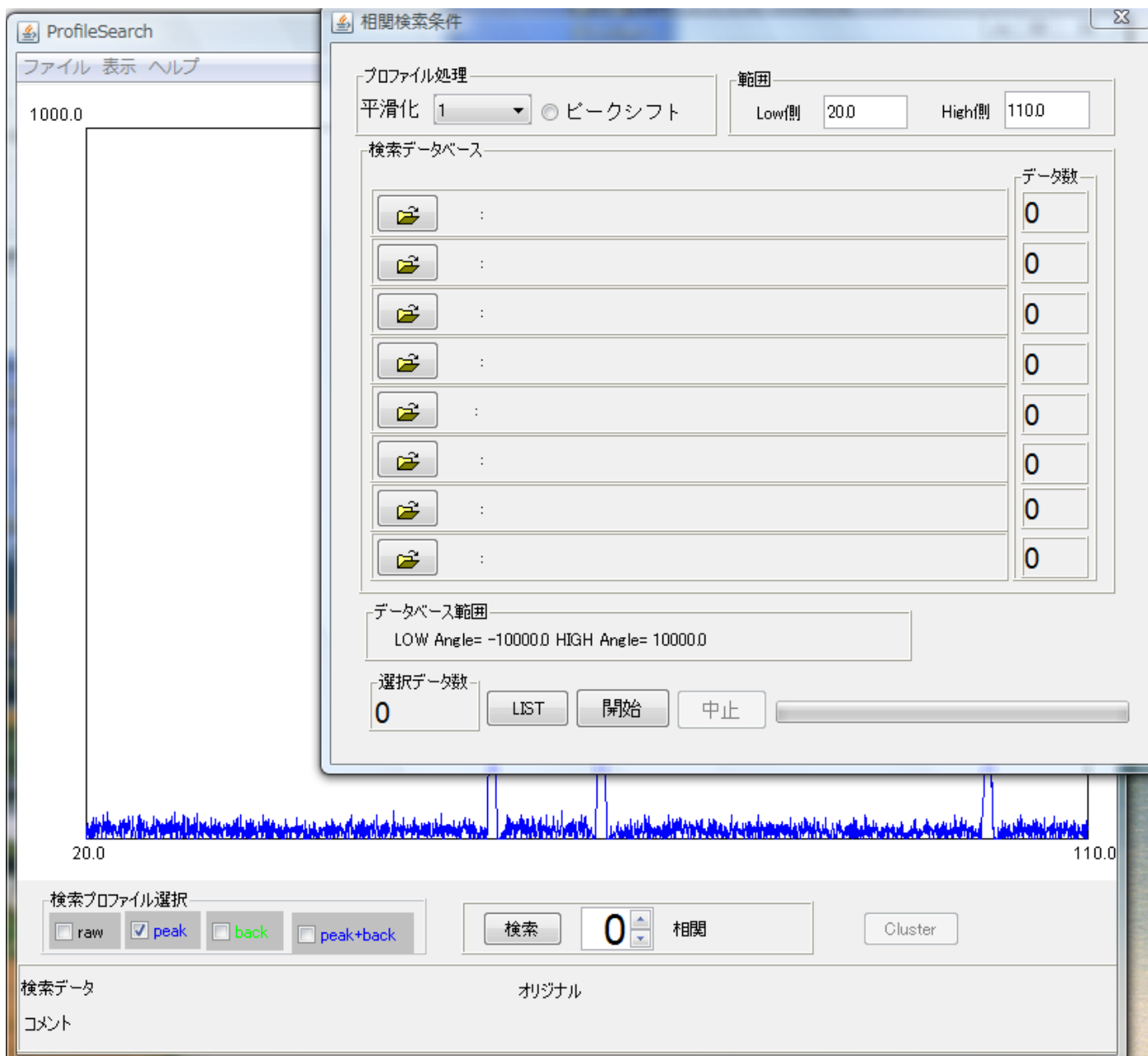
でファイルを指定する。



X:\Demo\3atoms\01 raw

プロフィール検索

Data Baseを作成したファイルを指定して検索



ProfileSearch

ファイル 表示 ヘルプ

1000.0

20.0 110.0

検索プロフィール選択

raw  peak  back  peak+back

検索 0 相關 Cluster

検索データ オリジナル

コメント

ProfileSearch 検索条件









プロフィール処理

平滑化 1  ピークシフト

範囲

Low側 20.0 High側 110.0

検索データベース

	データ数
 :	0
 :	0
 :	0
 :	0
 :	0
 :	0
 :	0
 :	0

データベース範囲

LOW Angle = -100000 HIGH Angle = 100000

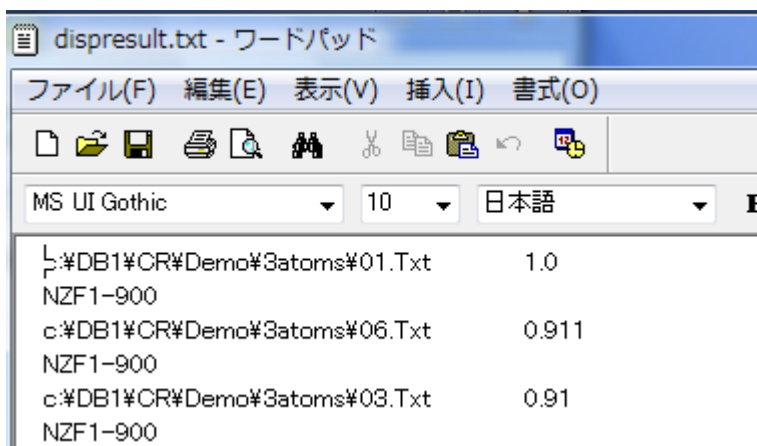
選択データ数

0 LIST 開始 中止

Data Baseを指定する。



LIST 開始 開始する。

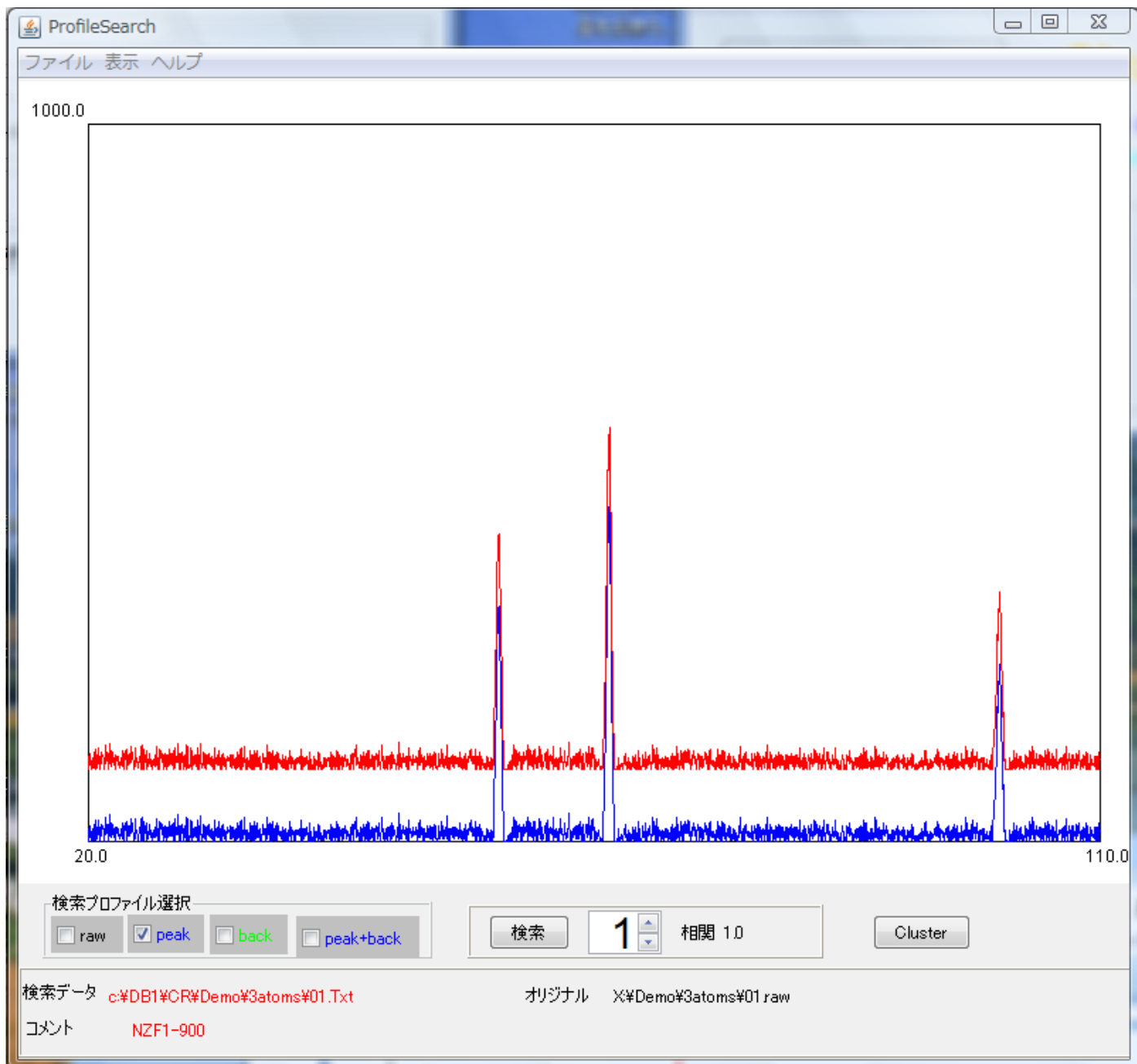


Data Base の 01. Txt に相関係数 1. 0 で一致し、コメントも表示されています。

プロフィールで確認するには後ろ側のプロフィール画面を全面に表示して



0 → 1 に表示を変える

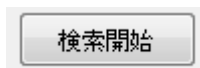
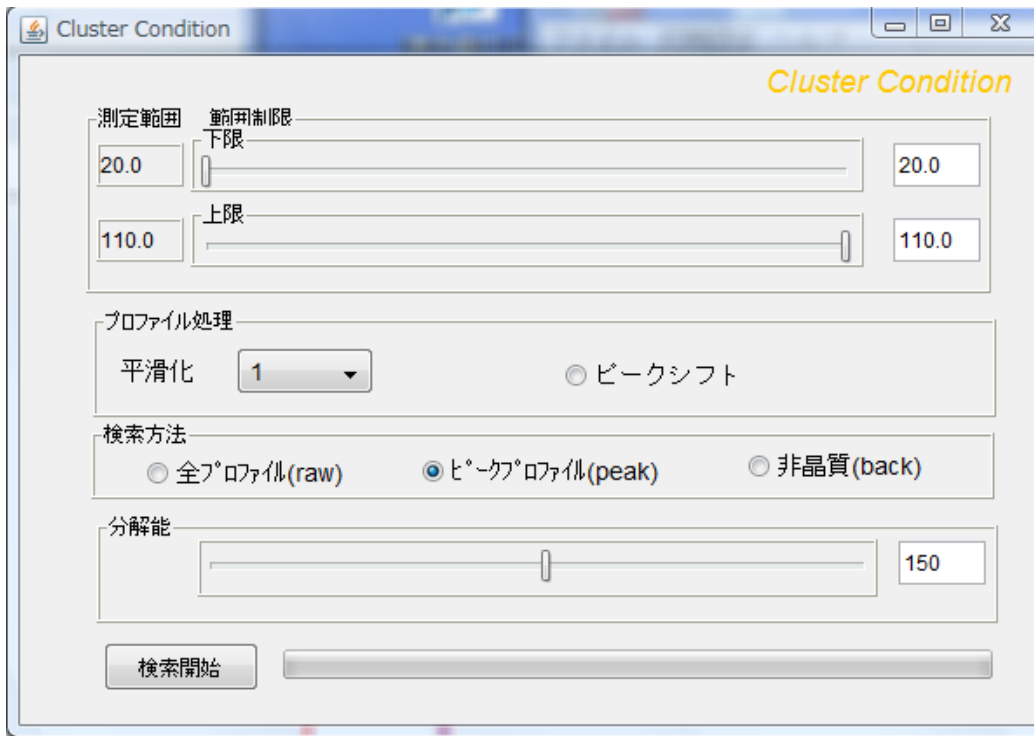


D a t a B a s e の詳細が表示される。

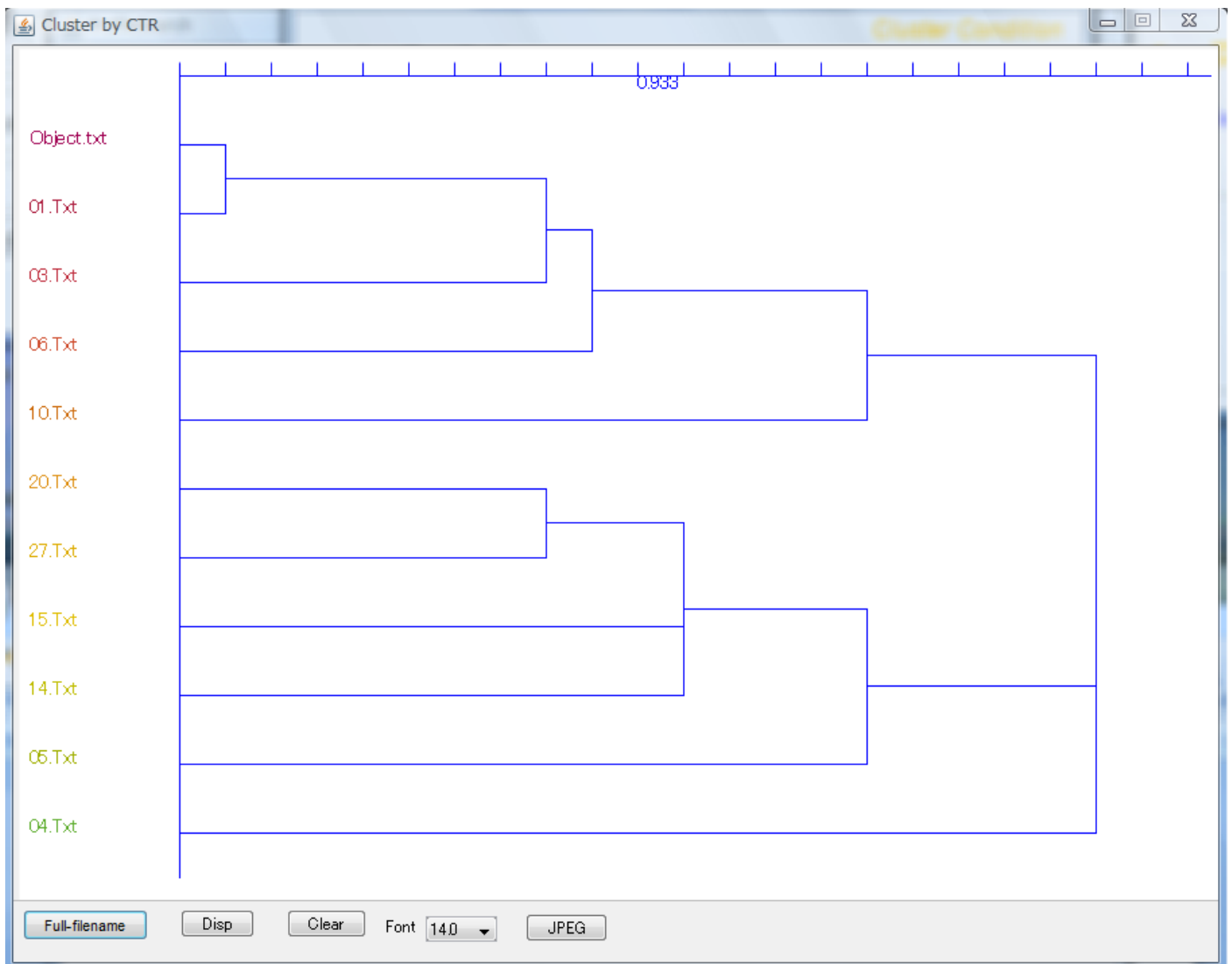


で検索されたD a t a B a s e 上位 1 0 件と相互相関の計算条件を表示

報告書はメニュー>ファイル>報告書で印刷

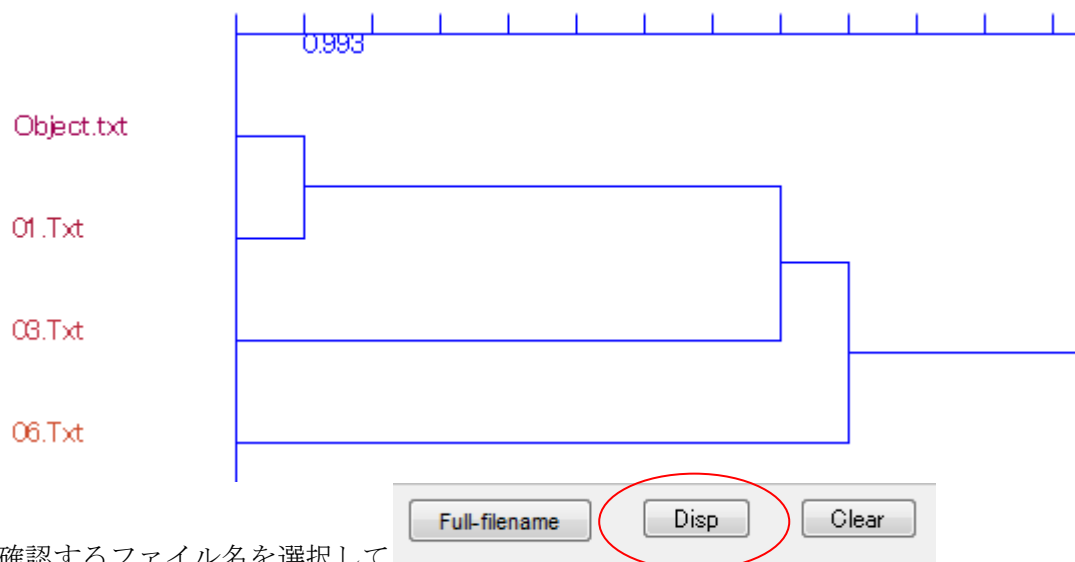


でデンドログラムを表示

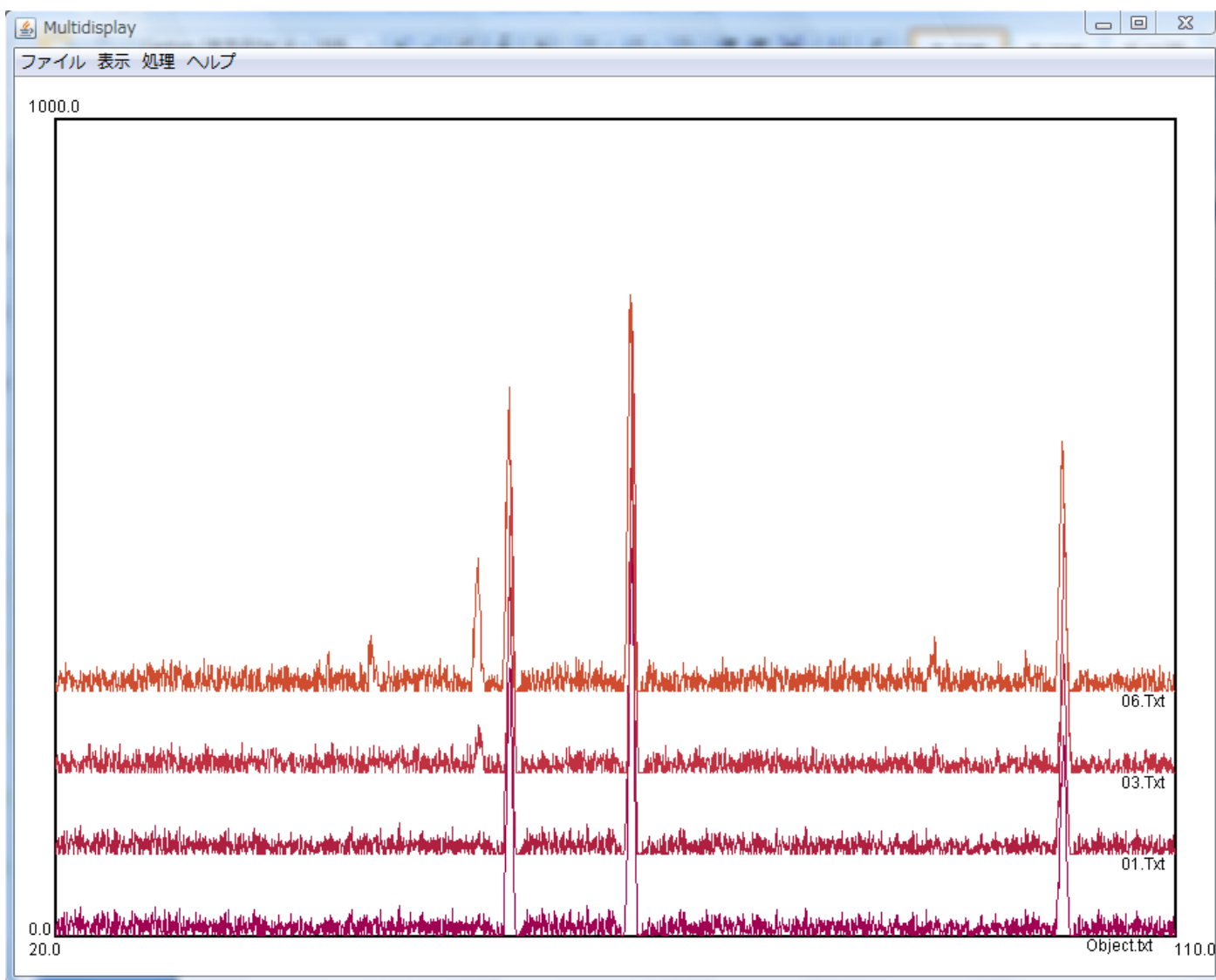


被検試料はObjectとして表示され、01.txtと似通っている事が分かります。

プロファイルで確認する



確認するファイル名を選択して



印刷はファイルー報告書でOpenOfficeが立ち上がります。