Cluster とプロファイル検索が合体した

ClusterP2ソフトウエア

Ver.1.11M

2016年09月13日



http://www.geocities.jp/helpertex2

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

ClusterP2ソフトウエアは、DataBase,Cluster,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エアです。

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DataBase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DataBaseから探し出します。

ClusterはDataBase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(Cluster),未知物質の 探索が可能になります。



扱えるデータは、

RINT2000 (Raw), RINT2000 (Asc) SmartLab (Ras), 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。 プロファイル検索後の表示は最大10プロファイルとします。

DataBase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

DataaBase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Data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。

ClusterP2

初期設定-->初期パラメータで

	23
データベース横軸補間間隔 0.01 ▼ 作成データベース領域は C:\DB1	
OpenOfficeインストールディレクトリー	
登録 取り消し	

- 0.01が選択されている。
 - 0.02を選択すると、



DataBase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

ファイル名:	C:¥Program Files¥OpenOffice.org 3	開入
ファイルタイプ:	(ฮฺ๙ัႠ๗ファイル ▾)	取消し

です。

<u>ی</u>	23
データベース横軸補間間隔 0.01 ▼ 作成データベース領域は C:\DB1	
OpenOfficeインストールディレクトリ C:\Program Files\OpenOffice.org 3	
登録 取り消し	

登録	による如期設定は空了します
	による初期以足は元」しより。

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、С 1 и s t e r P 2 ソフトウエアを終了し、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。

<u>لا</u>	
↓ 「データベースTOPディレクトリと補間間隔	
ディレクトリ :c:\DB1 補間間隔 :0.01	
ーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーー	
C:\Program Files\OpenOffice.org 3	
確認	
L	

ClusterP2ソフトウエアの使い方

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。

SclusterP2 1.100FT by CTR	
ファイル 初期設定 ヘルプ	
データベース管理	ClusterP2
Cluster	Cluser & ProfileSearch Version 1.100
「プロファイル検索	
RINT2000(Asc)	
プロファイル検索	

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。



DataBaseから被検試料に似通ったプロファイルを探し出し、デンドログラム表示を行う。

ヘルブ

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DataBase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DataBaseの相互関係を調べ、被検試料としてその中の1データをプロファイル検索を行う。 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。

🏂 データベース管理	F-124810. F-248	
作業領域 C¥DB1		DataBaseMeaker
データ登録削除編集		
登録データ数 :0	登録データ山ST Profile	登録デーダ川除画面
-追加 データタイプ RINT200	D(Raw) IIST 実行	データ選択画面
編集	高速化	

データベース管理	クリックすろ

ヮデ゛	夕登録削除編集		
	_ 肖儿徐		
	登録データ数 :0	登録データLIST	
	_ietn	4	登録数は0件

DataBaseに登録される形態は、入力データの階層をそのままで登録されます。

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DataBaseに登録するとDataBase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Cr管球データが3atoms以下に登録されます。

データの追加 (Rawデータの場合)

実践1 複数のデータをDataBaseに登録する、

-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

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	レ数:66	LIST 実行 本	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。

をクリック

- 1旦加 データタイプ	RINT2000(Raw)	•		データ選択画面
変換ファイル数: 60	5/66	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

追加がされているかの確認

登録データ

X:¥Demo¥3atoms¥01.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#01.Txt X:¥Demo¥3atoms¥02.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥02.Txt X:¥Demo¥3atoms¥03.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥03.Txt X:¥Demo¥3atoms¥04.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥04.Txt X:¥Demo¥3atoms¥05.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#05.Txt X:¥Demo¥3atoms¥06.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥06.Txt X:¥Demo¥3atoms¥07.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#07.Txt X:¥Demo¥3atoms¥08.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥08.Txt X:¥Demo¥3atoms¥09.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#09.Txt X:¥Demo¥3atoms¥10.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#10.Txt X:¥Demo¥3atoms¥11.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#11.Txt X:¥Demo¥3atoms¥12.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥12.Txt X:¥Demo¥3atoms¥13.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#13.Txt X:¥Demo¥3atoms¥14.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥14.Txt X:¥Demo¥3atoms¥15.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥15.Txt X:¥Demo¥3atoms¥16.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#16.Txt X:¥Demo¥3atoms¥17.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥17.Txt X:¥Demo¥3atoms¥18.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥18.Txt X:¥Demo¥3atoms¥19.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥19.Txt X:¥Demo¥3atoms¥20.raw C#DB1#CR#Demo#3atoms#20.Txt C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥64.Txt X:¥Demo¥3atoms¥64.raw X:¥Demo¥3atoms¥65.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥65.Txt

X:¥Demo¥3atoms¥66.raw C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥66.Txt

作業領域 C¥DB1	>	DataBaseMeaker
-データ登録削除編集		
登録データ数:66	登録データ山S	ST 登録デーダル除画面

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

登録デー対I除画面 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 ASC2ディレクトリを選択すると

4	X
肖明余ファイル	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥01.Txt	•
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥02.Txt	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥O3.Txt	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥O4.Txt	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥05.Txt	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥06.Txt	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥O7.Txt	-
前隊金取り消し	

削除

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。

└作業領域 C¥DB1		DataBaseMeaker
データ登録削除編集 		
登録データ数:0	登録データ∐ST	 緑データ削除画面
「追加		

編集		
	コメント編集	高速化

プロファイル検索時、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

C:¥DB1¥CR¥Demo¥3ato	ms¥01.Txt編集	
-オリジナルデータファイル名		
 NZF1-900		
1	変更 キャンセル	

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。

対象テータベース	D C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
C:¥DB1¥CR	
C:¥DB1¥CR¥Demo	
C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms	
如理	
開始取り消し選択され	にたディレクトリ数 3

開始	取り消し	Limitファイル作成数 3/3	3	
		,		で高速化が完了

高速化が完了すると全てのディレクトリに1 imitfileが存在する。



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ァイル確認



profileをクリックで表示プロファイルを選択

_ ▲ 開く		X
参照:	- 🕕 DB1 🔹 🔊 🖡	2 💷 🔤
していた項 最近使った項 目	CR CR	
デスクトップ デスクトップ	ファイル名: ファイルタイプ: *.Txt*.Txt*.Txt	開く 取消し
FileName	C:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥09.Txt	
Select I	Profile 🛛 RawData 🛛 📝 PeakData 📝 BackData	
4	Disp	

表示プロファイル (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)

Cluster

をクリック

S Cluster	
	Cluster
	選択データ―
	0
	0
	0
	0
	0
「選択データ点数」 D LIST 検索条件	

🛃 Cluster	
	Cluster
_検索データベース	選択データ―
C¥DB1¥CR¥Demo	66
	0
	0
	0
	0
- 選択データ点数	

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 LIST 検索条件 66 をクリック	ク
--	---

🛃 Cluster Condition		
測定範囲 節囲制限 10.0 「上限 110.0		Cluster Condition 20.0 110.0
プロファイル処理 平滑化 1 ▼	◎ ビークシフ	ŀ
_硬系方法 ◎ 全プロファイル(raw)	⊚ ヒ°-⁄フ°ロファイル(peak)	◎ 非晶質(back)
分解能	0	150
検索開始		

検索条件を指定して検索を開始する。

0.947							
	_						
	ł	- I					
		∃					
		- I					
	F	Ξ Ι					
			_				

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。





01,03,06を比較すると良く似ている事が分かります。

印刷はファイルー報告書で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OpenOffice3.0がインストールされているか?

1000.0

プロファイル検索(Rawファイルの場合)

「プロファイル検索―――		
RINT2000(Raw)		
プロファイル検索		
でファイルを指定	さする。	
X¥Demo¥3atoms¥01 raw	V	
プロファイル検索	DataBaseを作成したファイルを指定して検索	
DrafilaCaarch	▲ 相関検索条件	X
当 Prollesedich		
1000.0	「ブロファイル処理」 「平滑化」1 ▼ ○ ビークシフト 「範囲」 	
	1741C このビークシックド Lowing 200 Highlight 1000 検索データベース 0 0 0 ごご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : 0 0 ご : : 0 ご : : 0 ! : : 0<	
111、2116、1241)は。1250年12月1日。1250年 2010 1分本ペロファイル 221日	nen den de service de service de la des 11	0.0
raw ✓ peak back	peak+back 検索 相関 Cluster	Contraction of the
検索データ コメント	オリジナル	

DataBaseを指定する。

<u>多</u> 相関検索条件	X
プロファイル処理 平滑化 1 ▼ ○ ビークシフト Low側 20.0 High側	110.0
	_デーク数
c:¥DB1 : 200 1100	66
:	0
:	0
	0
	0
	0
:	0
	0
データベース範囲 LOW Angle= 20.0 HIGH Angle= 110.0	
- 選択データ数- 66 LIST 開始 中止	
LIST 開始 開始する。	
🗐 dispresult.txt - ワードパッド	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 挿入(I) 書式(O)	
L L L C C C C C C C C C C C C C C C C C	
¦÷¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥01.Txt 1.0 NZF1−900	
c:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥06.Txt 0.911 NZF1-900 c:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥03.Txt 0.91	

DataBase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。

プロファイルで確認するには後ろ側のプロファイル画面を全面に表示して

検索プロファイル選択		
□ raw	検索 0 🚽 相関	Cluster

0->1に表示を変える

🔊 ProfileSearch	(holian)		
ファイル 表示 ヘルプ			
1000.0			
	1		
at the state for the state before the well at the state of the state of states of the state of the state is a s	water and the state of the	internal des la vertamenta de la constituir se se al deserva	tine destroyed
and the state of the desided below the well at white who be to a make of internation of the second	and the state of the	and the second	the destinated destates
20.0			110.0
検索プロファイル選択 □ raw	検索 1▲	相関 1.0 Cluster	J
検索データ c:¥DB1¥CR¥Demo¥3atoms¥01.Txt	オリジナル X¥Demo	¥3atoms¥01 raw	
コメント NZF1-900			

DataBaseの詳細が表示される。

Cluster

で検索されたDataBase上位10件と相互相関の計算条件を表示

報告書はメニューー>ファイルー>報告書で印刷

🛃 Cluster Condition	And in case of the local division of the loc	
		Cluster Condition
─測定範囲 _範囲制限 20.0		20.0
110.0		110.0
プロファイル処理		
平滑化 1 🔸	◎ ビークシフ	•
検索方法 ◎ 全プロファイル(raw)	⊚ է°∽७٦°ם٫イル(peak)	◎ 非晶質(back)
分解能	0	150
検索開始		

検索開始

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。

	0.993				
Object.txt					
01.Txt				_	
08.Txt					
06.Txt					
確認するファイルネ	 名を選択して	Full-filename	Dis	Clear	

ファイル 表示 処理 ヘルプ 1000.0	
ale main man distributed with the distributed down and before the first second as the	
والمحافظ والمحاف	
01.Txt	
	10.0

印刷はファイルー報告書でОрепОfficeが立ち上がります。