

ケモメトリックスソフトウェア PLS_Toolbox (MATLAB Add-In)

データセットの作成／インポート (DataSet Editor)、プリプロセスのオプション設定 (Preprocessing)、クロスバリデーション法の選択／設定 (Cross Validation)、検量 Calibration)、結果と解釈に役立つ豊富なグラフィック (Figure Objects)／エクスポート、モデルの作成 (Modeling)、未知データの予測 (Prediction) をボタン／フローボックスに従って実行できます。三次元の蛍光分光解析に使われる PARAFAC や遺伝アルゴリズムによる有意な変数選択他、ユニークなツールも揃っています。Excel, ASCII XY などの一般的なデータのインポート、GRAMS や分析機器の生データファイルのインポート、MATLAB のデータセットなどを使用できます。

基本機能

- データの探索とパターン認識(Principal Components Analysis(PCA), Parallel Factor Analysis(PARAFAC), Multiway-PCA, Tucker Models...)
- 判別分析(SIMCA, PLS-Discrimination Analysis(PLS-DA), K-Nearest Neighbors, Support Vector Machine Classification, Clustering (HCA)...))
- 線形および非線形の回帰分析(Partial Least Squares(PLS), Principal Components Regression(PCR), Multiple Linear Regression(MLR), Classical Least Squares(CLS), Support Vector Machine Regression, Artificial Neural Networks(ANN), N-way PLS, Locally Weighted Regression...)
- 自己モデリング曲線分解、純粋変数法(Multivariate Curve Resolution(MCR), Purity...)
- データセットの編集と視覚化ツール(DataSet Editor)
- プリプロセス(Centering, Scaling, Smoothing, Derivatizing, Transformations, Baselineing, EEM Filtering...)
- クロスバリデーション(Venetian Blinds, Contiguous Blocks, Leave-One-Out, Random)
- 欠損データのサポート(SVM, NIPALS)
- 変数選択(Genetic algorithms, IPLS, Selectivity, VIP...)
- 実験計画法(Full Factorial, Fractional Factorial, Box-Behnken...)

必要なシステム構成：MATLAB 7.6(2008a) がインストールされた Windows, MAC OS, UNIX, LINUX
(MATLAB のオプション／ツールボックスはなにも必要ありません)



SOLO(スタンドアロンバージョン)

MATLAB のない PC (Windows マシン) で PLS_Toolbox と同じタスクを同じようなインターフェイスで実行できます。
必要なシステム構成：Windows 7 以降

製作会社：Eigenvector Research Inc.

株式会社 デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772
E-mail:tech@ddmcorp.com URL:http://www.ddmcorp.com