

### Import Parameters Mapper の使い方

富士通株式会社 テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部 HPC アプリケーション統括部 TEL:043-299-3680 FAX:043-299-3011 E-MAIL: tcsu-acd@ml.css.fujitsu.com

#### ◆ はじめに ◆

本ガイドでは ACD/Labs Spectrus Processor v2014の Import Parameters Mapper の基本操作を紹介 します。このツールはデフォルトでは取り込めないスペクトルファイル上のパラメータを取り込める 様にするツールです。

#### ◆ 操作 ◆

1. スタートメニュー | ACDLabs 2014 | Import Parameters Mapperを選択します。



2. ACD/Import Parameters Mapper ウィンドウが表示されます。



ACD/Import Parameters Mapper					- 0 <b>X</b>
<u>F</u> ile <u>E</u> dit <u>H</u> elp					
Parameter	Mapping	! Docume	Vendor Format	Vendor Field Name	ACD/Labs Alias
	Add Delete Delete All				
•	Þ	•			*

3. 対象のファイルを読み込みます。<u>File</u>|<u>I</u>mport Document...メニューコマンドを選択します。 Import ダイアログボックスが表示されます。

Import			×
ファイルの場所(]):	\mu ACD2014		
	D:¥AGD2014	•	
名前	^	更新日時	種
ACTIVEX		2014/07/02 21:53	7:
DATABASE		2014/07/02 21:56	フ:
DOCS		2014/07/02 21:56	フ:
EXAMPLES		2014/07/02 21:57	フ:
FORMS		2014/07/02 21:41	フ:
🔋 HINT_HTML		2014/07/02 21:42	フ:
INSTRUCT		2014/07/02 21:42	フ:
ISIS 👔		2014/07/02 21:57	フ:
IXCR		2014/07/02 21:57	フ: +
			+
ファイル名( <u>N</u> ):			
ファイルの種類(工):	(Auto Detect)	<ul> <li>キャン</li> </ul>	セル
			<b>У(Ш)</b>

4. 取り込みたいファイルを選択し、開く(<u>O</u>)ボタンをクリックします。取得可能なパラメータが表示さ れます。



ACD/Import Parameters	Mapper					
<u>File E</u> dit <u>H</u> elp						
Parameter	*	Mapping	! Docume	Vendor Format	Vendor Field Name	ACD/Labs Alias
procs_TITLE	Parameter	Add				
procs_JCAMPDX	5.0	Add				
procs_DATATYPE	Parameter '	Delete				
procs_NPOINTS	9					
procs_ORIGIN	Bruker Bios	Delete All				
procs_OWNER	root					
procs_ABSF1	9.383931					
procs_ABSF2	-0.7753685					
procs_ABSG	5					
procs_ABSL	0					
procs_ALPHA	0					
procs_AQORDER	0					
procs_ASSFAC	0					
procs_ASSFACI	0					
procs_ASSFACX	0					
procs_ASSWID	0					
procs_AUNMP	<proc_2ds;< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></proc_2ds;<>					
procs_AXLEFT	0					
<	P F		•			Þ
2D NMR UXNMR/XWINNMR 2D						

5. 取り込みたいパラメータを選択し、Add ボタンをクリックします。パラメータが右側のリストに追 加されます。

ACD/Import Parameters Mappe	er							1. K.	- • ×
<u>File Edit H</u> elp									
Parameter 🔺	Mapping	! Docume	Vendor Format	Vendor Field Name	ACD/Labs Alias	Value	Storage Type	Keep Original Data	÷
procs_TITLE F	Add	2D NMR	UXNMR/XWINNMR 2D	procs_TITLE	procs_TITLE		Spectrum User Data		
procs_JCAMPDX 5	Add								
procs_DATATYPE P	Delete								
procs_NPOINTS 9									
procs_ORIGIN E	Delete All								
procs_OWNER n									
procs_ABSF1 9									
procs_ABSF2 -									
procs_ABSG 5									
procs_ABSL 0									
procs_ALPHA 0									
procs_AQORDER 0									
procs_ASSFAC 0									
procs_ASSFACI 0									
procs_ASSFACX 0									
procs_ASSWID 0									
procs_AUNMP <									
procs_AXLEFT 0									
A NUMBER									
Modified 2D NMR	UXNMR/XWI	NMR 2D							

6. 各項目を編集し、取り込み方法を設定します。各項目は以下の様になっています。

項目名	機能
!	編集可能なデータかどうか指定します。 ダブルクリックで"!"
	が表記されると編集不可となります。
Document Type	分析手法名が入ります。
Vendor Format	ベンダーフォーマット名が入ります。
ACD/Labs Alias	元のパラメータ名をこの値に変更します。
Value	取得する値
Storage Type	格納する場所
Keep Original Data	選択された場合、パラメータ名と値が元のまま使用されま
	す。

7. 必要な項目が全て入る様に操作します。



8. <u>File|Save Configration...メニューコマンドを選択します。Save ダイアログボックスが表示されます。</u>

Save		and and the second s	X
保存する場所(1):	\mu ACD2014	🚽 🌀 🤣 🖼 👻	
-	D:¥ACD2014		
名前	^	更新日時	種
ACTIVEX		2014/07/02 21:53	フ:
)) DATABASE		2014/07/02 21:56	フニョ
DOCS		2014/07/02 21:56	フ:
EXAMPLES		2014/07/02 21:57	フ:
FORMS		2014/07/02 21:41	フ:
HINT_HTML		2014/07/02 21:42	フ:
INSTRUCT		2014/07/02 21:42	フ:
ISIS		2014/07/02 21:57	フ:
)) IXCR		2014/07/02 21:57	フ: +
•			P.
ファイル名( <u>N</u> ):	MAPOFGIXML	保存	(S)
ファイルの種類(工):	Configurations (*×ml)	<ul> <li>キャン</li> </ul>	セル
			<b>ИН)</b>

- 9. ACD がインストールされているフォルダにファイル名を"MAPCFG.XML"と設定し、保存(<u>S</u>)ボタン をクリックします。
- 10. Spectrus Processor を起動し、対象のファイルを読み込み、設定したパラメータが取得出来ている ことを確認します。

以上操作は終了です。