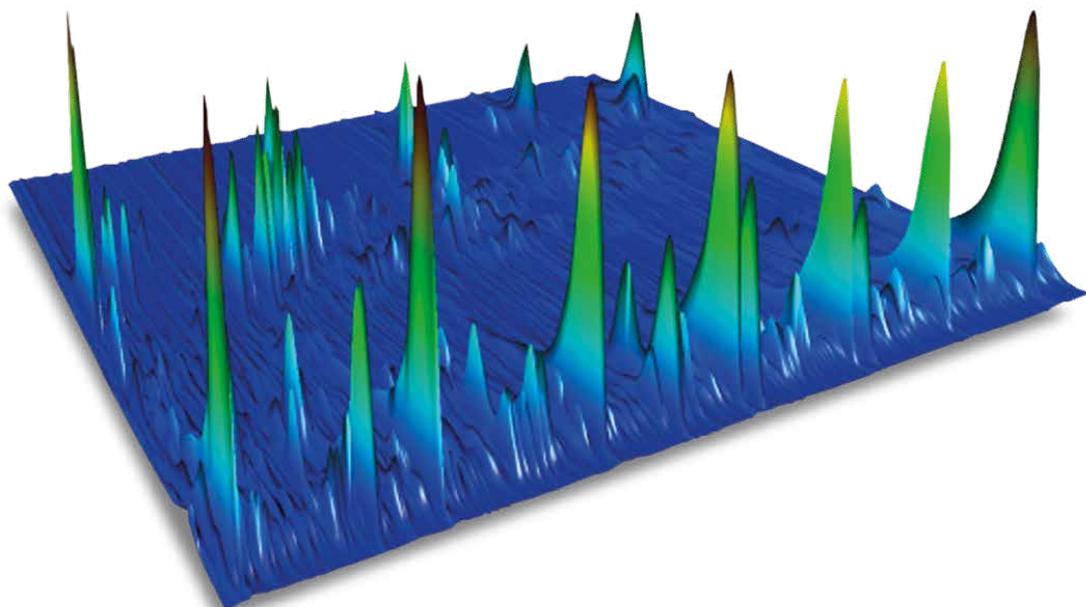


GC IMAGE SOFTWARE

Elaborazione dati efficace e dinamica per la GC×GC

GC Image è un software potente e dinamico sviluppato per la gestione dei dati prodotti dalla GC×GC. L'elevata complessità e la ricchezza di informazione tipiche dei dati bidimensionali necessitano software avanzati e altamente performanti. Il pacchetto multifunzione **GC Image** permette di rispondere a questa esigenza ed eseguire la visualizzazione, l'elaborazione e l'analisi dei dati 2D sfruttando un ricco insieme di funzionalità. I vantaggi includono un'eccellente universalità di utilizzo, grazie alla capacità di gestire numerosi formati di dati, ed elevata flessibilità.

Dalle più comuni operazioni di routine - integrazione, ricerca spettrale con libreria, quantificazione - a sofisticati strumenti di comparazione e clusterizzazione multi-campione, **GC Image** offre una gestione dei dati intelligente e versatile. Interfacce dedicate permettono di facilitare flussi di lavoro automatizzati sia qualitativi che quantitativi mirati a rispondere con efficacia agli obiettivi analitici più esigenti e diversificati.



UNA PIATTAFORMA UNIVERSALE

GC Image è un pacchetto software universale pensato per garantire la massima versatilità di utilizzo. È in grado di importare e processare numerosi formati di dati, garantendo compatibilità con piattaforme strumentali diversificate, sia in termini di modulatore che rivelatore. Le tipologie di detector supportati sono numerose, tra questi:

- Rivelatori universali quali FID e TCD
- Rivelatori selettivi quali SCD, ECD, VUV
- Spettrometri di massa basati su diversi principi di funzionamento:
 - a scansione con singolo quadrupolo
 - Tempo di volo (Time-of-Flight o TOF) a bassa/alta risoluzione e QTOF.

GC Image è disponibile in due versioni:

- **GC Image GC×GC Edition Software** per gestire tutti i più comuni tipi di rivelatore inclusa la spettrometria di massa a bassa risoluzione.
- **GC Image GC×GC-HRMS Edition Software** pensata per supportare tutti i formati della versione base e la spettrometria di massa ad alta risoluzione.

Sistema GC×GC-MSD con modulatore a flusso Agilent



Sistema GC×GC-QTOF con modulatore termico ZOEX



ELEVATA FLESSIBILITÀ E PRESTAZIONI

Il pacchetto software include tre componenti indipendenti ma intercomunicanti:

- **GC Image** per visualizzazione, sviluppo del metodo, analisi e reporting di singoli cromatogrammi.
- **GC Project** per elaborazione automatizzata di molteplici cromatogrammi (*batch processing*).
- **Image Investigator** per l'analisi interattiva di set di dati multi-campione e statistica.

L'integrazione di queste interfacce è in grado di facilitare flussi di lavoro automatizzati, sia qualitativi che quantitativi, per analisi mirate e screening untargeted.



GC Image



Project



Investigator

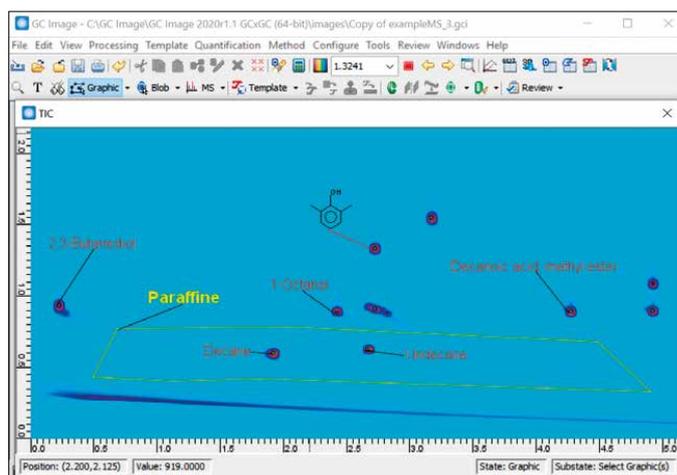
Le funzionalità a disposizione vanno dalle operazioni più basiche fino a elaborazioni complesse.

Schermata principale

Menù a discesa organizzati per tipologia e un set di icone garantiscono accesso immediato a strumenti e comandi. Con un semplice click è possibile passare dalla gestione dei picchi (*blobs*) a quella delle informazioni spettrali fino agli oggetti grafici, che possono essere disegnati per una rapida e semplice definizione di zone cromatografiche per la suddivisione in classi chimiche.

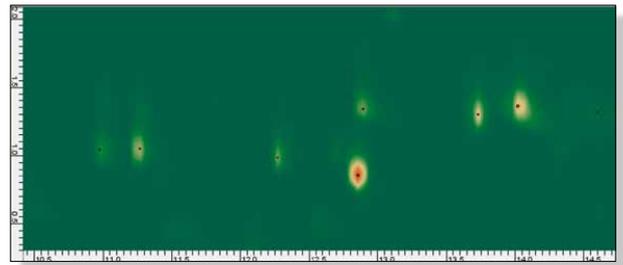
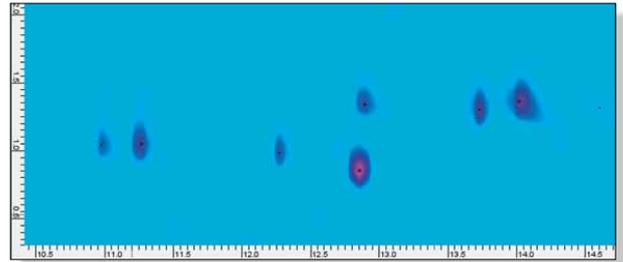
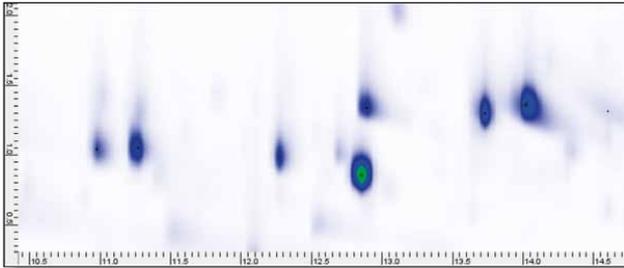
Alcuni esempi di opzioni e strumenti a disposizione:

- Creazione dell'immagine (*colour plot*) – import, rasterizzazione, colorizzazione
- Visualizzazione – proiezioni sugli assi, vista in 3D
- Rimozione del rumore di fondo e integrazione dei picchi bidimensionali
- Ricerca spettrale con libreria per l'identificazione di composti
- Costruzione di modelli (*templates*) basati su picchi ed aree geometriche per la determinazione di composti target e gruppi di interesse
- Costruzione di rette di calibrazione e quantificazione
- Comparazione visiva di cromatogrammi
- Scripting per filtrare ed estrarre caratteristiche cromatografiche e spettrali (espressioni *CLIC*)
- Analisi multivariata automatizzata e interattiva di set multi-campione - comparazione, classificazione e individuazione di markers.



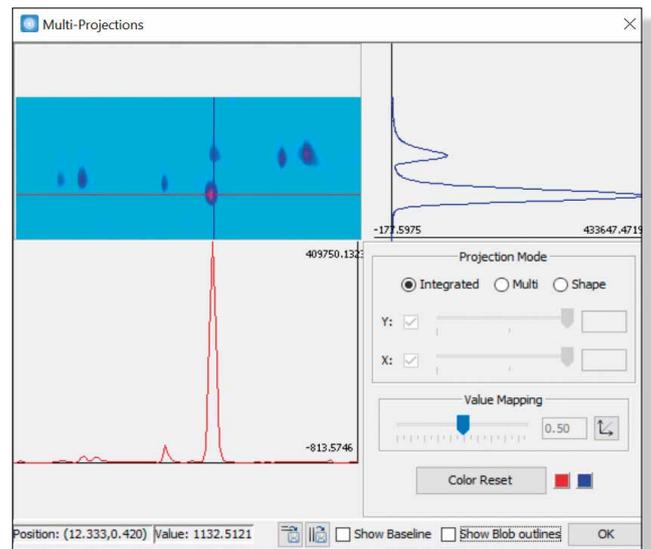
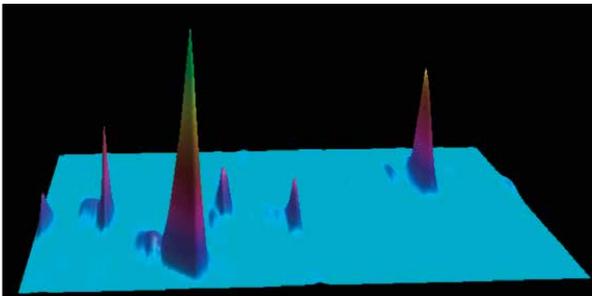
Colorizzazione

Possibilità di scegliere tra una varietà di palette di colori preimpostate per ottimizzare la visualizzazione nel modo preferito. L'utente può inoltre creare, salvare ed esportare i propri schemi di colorazione personalizzati.



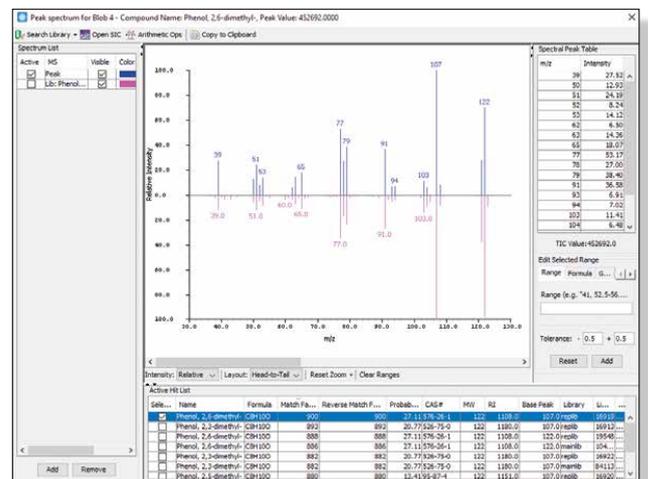
Visualizzazione 3D, multi-projections

Molteplici tipologie di visualizzazione per l'esplorazione del profilo cromatografico e dei singoli picchi bidimensionali in modo dinamico e interattivo.



Ricerca di spettri MS con libreria

Gli spettri MS possono essere ricercati con l'ausilio di librerie commerciali e personalizzate. Parametri e criteri di ricerca ottimizzabili dall'operatore permettono di massimizzare l'affidabilità del processo identificativo.



Blob metadata

Le informazioni associate ai picchi bidimensionali (nome, appartenenza a gruppo, ione selezionato per la quantificazione etc.) possono essere facilmente visualizzate e modificate. Facilità di trasferimento di questi *metadata* nei cromatogrammi successivi è garantita tramite l'ausilio di *templates* intelligenti.

Blob Table e Blob Set Table

Tabelle facilmente personalizzabili raccolgono le informazioni chimiche quali-quantitative per picchi individuali o gruppi. Viene offerta la possibilità di esportare nei formati in .xls o .csv.

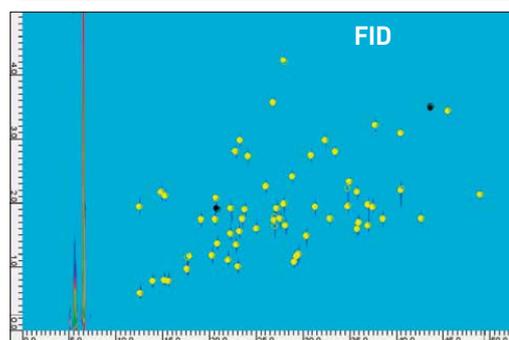
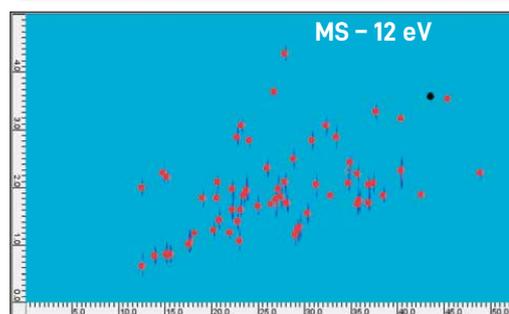
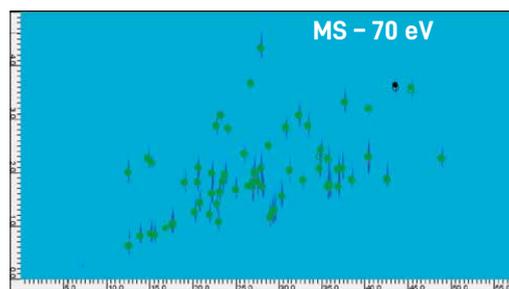
Templates

Modelli che permettono di definire pattern cromatografici sulla base di picchi e aree includendo le informazioni ad essi associate (nome del composto, gruppo di appartenenza, profilo spettrale, ioni quantificatori, etc.). Le informazioni presenti nei *templates* possono venir ricercate e riconosciute in immagini successive tramite un processo di identificazione intelligente e interattivo. In caso di match positivo, le informazioni (*metadata*) sono trasferite nell'immagine sotto esame.

Nell'esempio riportato a fianco, si mostra la trasposizione delle informazioni associate a un pattern cromatografico di una miscela standard di allergeni sui diversi canali di segnale acquisiti durante una corsa cromatografica con modulatore termico (Zoex) e rivelazione in parallelo. I segnali si riferiscono a due tracce MS ottenute con un BenchTOF-Select™ con Tandem Ionization (SepSolve) - rispettivamente a 70 e 12 eV - e un rivelatore FID. Il flusso di lavoro permette di identificare i composti con il canale MS per costruire un pattern target dettagliato. Queste informazioni sono trasferite sul canale FID per una quantificazione robusta, tramite algoritmi che permettono di gestire la trasformazione globale del pattern per adattarsi alle differenti condizioni di eluizione.

Labels	Statistics	Analysis	Qualifier/Quantifier Ions
Compound Name: Phenol, 2,6-dimethyl-	Blob ID: 4		
Compound Library: Mono-aromatics	Area: 212		
Constellation Name:	Volume: 4592253.0000		
Compound Description:	Peak Value: 452692.0000		
	Column I: 2.7000		
	Column II: 1.3250		
	Internal Standard: 0		
	Volume Ratio: -		

Name	Type	# of Blobs	Volume (Total)	Included Volume (Total)	Included Percent Re...	Color Blobs	Group Color
Alifatic	Graphic	202	110954.26	110954.26	62.26	<input checked="" type="checkbox"/>	
Aromatic	Graphic	199	67015.00	67015.00	37.61	<input checked="" type="checkbox"/>	
Residual	Residual Group	76	233.61	233.61	0.13	<input type="checkbox"/>	

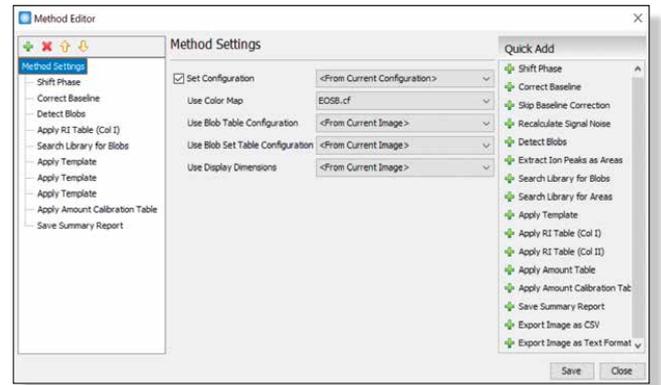


Ringraziamenti:

Chiara Cordero, Elena Gabetti, Carlo Bicchi, Philippe Merle, Emilie Belhassen (2019). GC×GC with parallel detection by FID and TOF MS featuring tandem ionization: extra-dimensions for great flexibility in fragrance allergens profiling. In: 43rd International Symposium on Capillary Chromatography & the 16th GCxGC Symposium. Fort Worth, Texas, USA Editors: Daniel W. Armstrong and Kevin A. Schug, Fort Worth, Texas, USA, 12-17 Maggio 2019.

Sviluppo e gestione del metodo di analisi

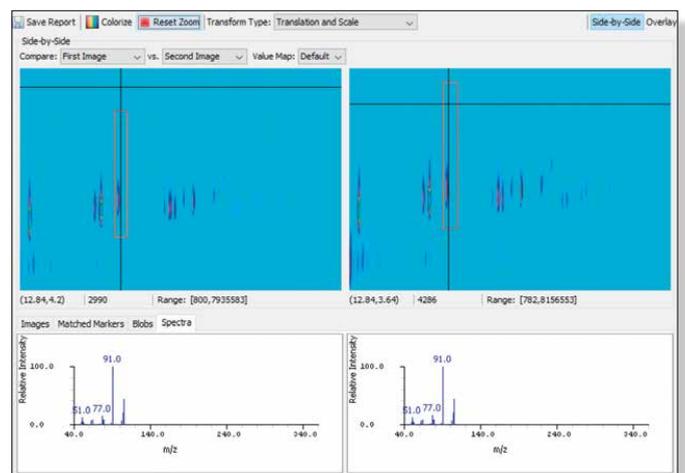
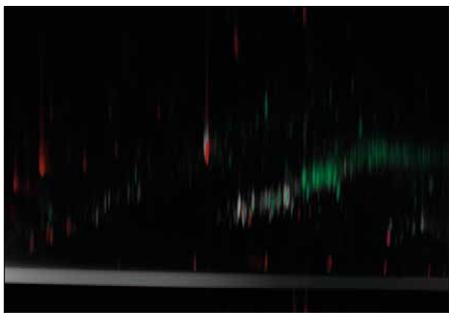
Un'intuitiva interfaccia permette lo sviluppo del metodo di analisi semplicemente aggiungendo i singoli passaggi di elaborazione desiderati in pochi click.



Strumenti di comparazione visiva

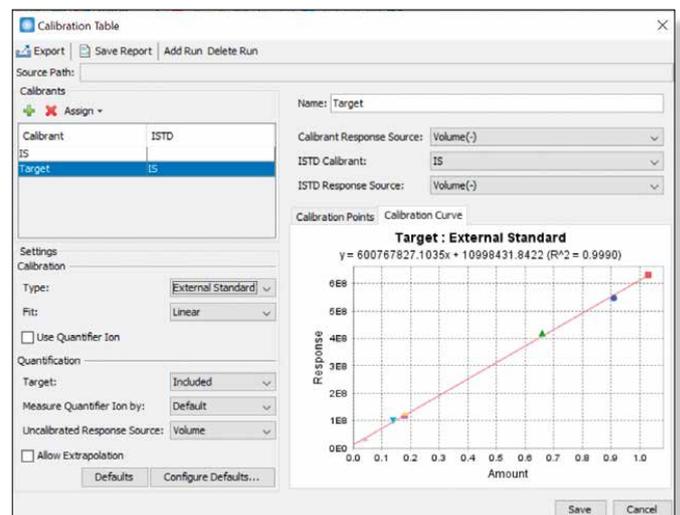
Immagine differenziale, pair-view

Comparazione veloce ed efficace dei profili 2D tramite strumenti visivi. Tra questi, la visualizzazione *Side-by-Side* e la possibilità di creare immagini differenziali tra due cromatogrammi sovrapposti in cui pixel colorati rappresentano l'intensità di segnale del campione rispetto all'immagine di riferimento.



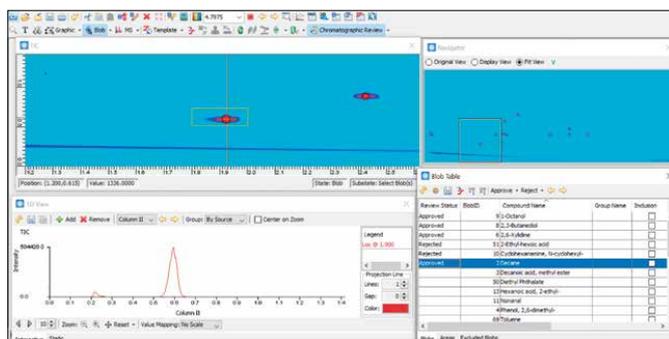
Risultati quantitativi affidabili

Flussi di lavoro dedicati facilitano la costruzione di rette di calibrazione per singoli picchi o aree. Tabelle e metodi di calibrazione possono essere generati, salvati e importati in immagini singole o set di dati per la generazione di report quantitativi.



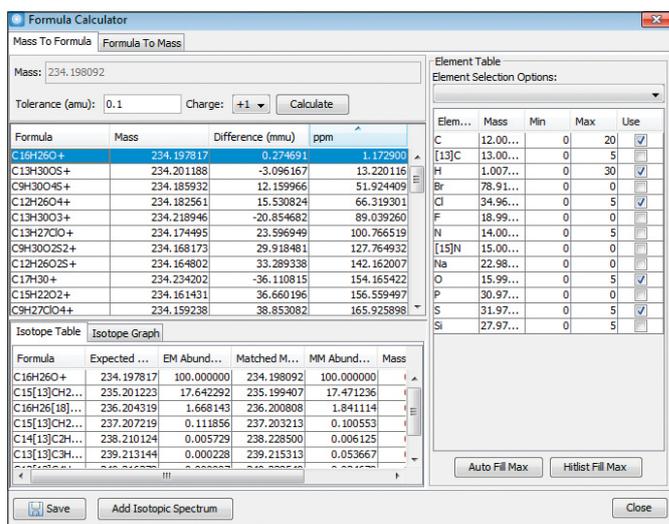
Revisione dei risultati

Revisione dei risultati resa accessibile da interfacce di review multi-finestre pensate per una panoramica delle caratteristiche cromatografiche o spettrali in un veloce colpo d'occhio. Possibilità di personalizzare i layout per rispondere alle specifiche esigenze di lavoro.

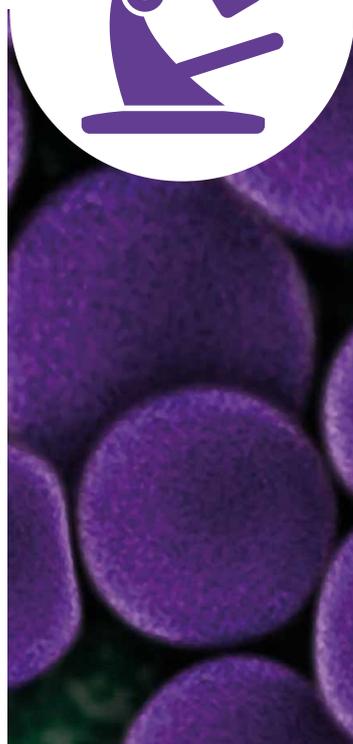


GC Image GC×GC-HRMS Edition

Offre strumenti dedicati alla spettrometria ad alta risoluzione, quali la possibilità di generare formule compatibili con la massa accurata con pieno controllo sulla selezione degli elementi e valutazione del profilo isotopico.



Metabolomics



Environment



Food



Fuel



GC Project

Elaborazione di reti di dati e preparazione automatica di reportistica riassuntiva e di comparazione per una rapida valutazione di dati quantitativi in molteplici campioni.

	Retention I	Retention II	Volume	Percent Response
campione01_Run01_Img01.gci	7.5891	2.1007	81265403.0000	10.5796
campione02_Run01_Img01.gci	7.5889	2.1007	51795530.0000	13.9126
campione03_Run01_Img01.gci	7.5889	2.1007	48149125.0000	12.3500
campione04_Run01_Img01.gci	7.5889	2.1007	70438333.0000	13.0982
campione05_Run01_Img01.gci	7.5889	2.1007	26593373.0000	12.1449
Mean	7.5889	2.1007	55648352.8000	12.4171
Stdev	9.7610E-5	9.9274E-8	21155680.6057	1.2405
RSD	1.2862E-5	4.7258E-8	0.3802	0.0999

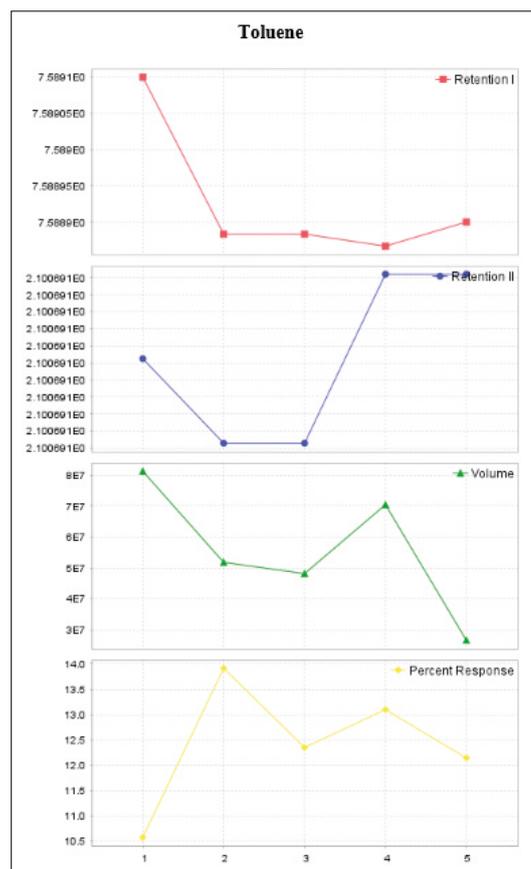
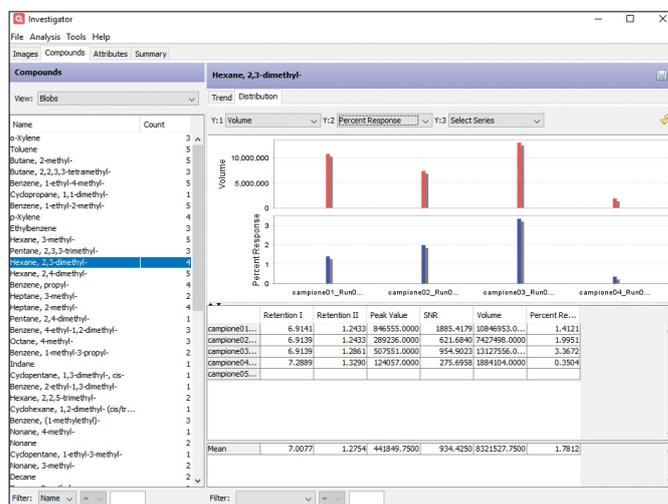


Image Investigator

Analisi multi-campioni interattiva con strumenti visivi e statistici. L'utente può esaminare i cromatogrammi dal punto di vista dei composti o degli attributi di interesse. L'interfaccia permette, per esempio, di creare grafici di trend e distribuzione per analiti, eseguire clusterizzazione (PCA) e determinare marker specifici su base statistica.



SRA
INSTRUMENTS
ANALYTICAL SOLUTIONS



Agilent Premier Solutions Partner

- SRA INSTRUMENTS SpA**
 Via alla Castellana, 3 | 20063 Cernusco S/N (MI) | Italy
 Tel. +39 02 9214 3258 | Fax +39 02 9247 0901
 info@srainstruments.com
- SRA INSTRUMENTS SAS**
 210 rue des Sources | 69280 Marcy l'Etoile | France
 Tel. +33 (0)4 78 44 29 47 | Fax +33 (0)4 78 44 29 62
 info@sra-instruments.com
srainstruments.com