

SZCZEGÓŁOWY OPIS PRZEDMIOTU ZAMÓWIENIA (parametry i wymagania minimalne)

Nazwa nadana postępowaniu:

Przedmiotem zamówienia jest sprzedaż i dostawa oprogramowania dla Biura Kolegium Nauk Przyrodniczych Uniwersytetu Rzeszowskiego

Pozycja nr 1: Sprzedaż i dostawa oprogramowania o następujących parametrach minimalnych: 1 licencja

Oprogramowanie umożliwiające pozyskiwanie, analizę i wizualizację danych pomiarowych, które spełnia następujące wymagania:

Dopasowanie pików

Automatyczne wykrywanie pików w danych wyjściowych oraz lokalizowanie ich punktów centralnych. Możliwość wyznaczenia parametrów każdego pików oraz zastosowania różnego modelu dla każdego z nich. Lokalizowanie pików ukrytych oraz parametrów linii bazowej. Analiza przebiegów, które mają charakter nałożonych wzajemnie na siebie wielu pików.

Dopasowanie powierzchni

Procedury dopasowania nieliniowego pozwalające generować powierzchnię dopasowaną do zestawów danych XYZ. Zestaw danych wejściowych i powierzchnia dopasowania mogą być umieszczone na wspólnym rysunku 3D, na którym można dodać odcinki łączące punkty z powierzchnia symbolizujące residua. Wykorzystanie algorytmu iteracyjnego *Levenberg-Marquardt* do dopasowania nieliniowego. Możliwość definiować własne powierzchnie.

Zaawansowane metody statystyczne

Analiza statystyczna zawierająca następujące procedury w zakresie: statystyki opisowej (*Descriptive Statistics*), wyznaczania częstości zdarzeń (*Discrete Frequency Counting*), testów normalności, analizy korelacji, analizy ANOVA z powtarzanymi pomiarami (*Repeated Measures ANOVA*), testów nieparametrycznych, analizy przeżywalności (*Survival Analysis*) oraz krzywych ROC.

Przetwarzanie sygnałów

Krótkoczasową transformata Fourier'a STFT (*Short Time Fourier Transform*), transformacja Hilberta, transformacja Fourier'a 2D oraz filtry bazujące na tej transformacji, korelacja 2D oraz przekształcenie falkowe (*Wavelets*).

Analiza i przetwarzanie obrazów

Operacje związane z przezroczystością obrazu (*Alpha Blending*), operacjami logicznymi na pikselach, filtrowanie morfologiczne oraz operacje związane z wyodrębnianiem i podmianą tła.

Dendogramy

M tworzenia dendogramów, w tym dendogramów kołowych. Zaawansowana modyfikacja tego typu wykresów np.: zmiana węzłów, wyodrębnianie wybranych węzłów do nowych wykresów.

Dopasowanie danych z wykorzystaniem sieci neuronowych

Dopasowanie danych przy wykorzystaniu odpowiednio wytrenowanych sieci neuronowych. Przeznaczona do przewidywania odpowiedzi zmiennych niezależnych.

Przykładowe oprogramowanie spełniające powyższe wymagania to np. oprogramowanie Origin Pro 2021 Node-Locked Posiadające następujące aplikacje: 2D Peak Analysis; Video Data Explorer; Piper Diagram; Marginal Abatement Cost Curve; 3D Antenna Radiation Pattern; Canonical Correlation Analysis; Correlation Plot; Direct Linear Transformation; Fit Adsorption Isotherm; Linear Mixed Effects Model; Linear Regression with Marginal Distribution; Modified Short-Time Fourier Transform; Nonmetric Multidimensional Scaling; Standard Curve Analysis; SVM Classification; X-Ray Diffraction Analysis

Pozycja nr 2: Sprzedaż i dostawa oprogramowania o następujących parametrach minimalnych: 1 licencja

Oprogramowanie do obróbki danych spektroskopowych, które spełnia następujące wymagania:

Przetwarzanie i wizualizacja danych

Kompleksowy pakiet do przetwarzania, wizualizacji i raportowania danych. Zaawansowane procedury przetwarzania, porównywania i wizualizacji danych oraz możliwość obsługi danych z praktycznie każdego instrumentu analitycznego.

Wielofunkcyjność

Możliwość pracy z danymi z następujących instrumentów analitycznych: spektroskopii optycznej (FTIR, Raman, NIR, UV-Vis, fluorescencja), NMR i technik łączonych (LC / GC-MS, LC-PDA). Możliwość odczytu danych bezpośrednio z ich oryginalnego formatu.

Bezpośrednie pozyskiwanie danych z wielu instrumentów i możliwość wymiany danych z Microsoft Excel. Wizualizacja dużych zbiorów danych w czasie rzeczywistym za pomocą i uzyskanie dostępu do danych z innych aplikacji.

Wydajne przetwarzanie danych

Szybkie przetwarzanie spektroskopowych. Obszerna biblioteka wbudowanych procedur przetwarzania danych, narzędzia do analizy większości rodzajów danych spektroskopowych.

Biblioteka przetwarzania danych zawierająca następujące narzędzia: korekta linii bazowej (wielopunktowa, wielomianowe dopasowanie), dopasowywanie pików (funkcje Gaussa, Lorentza, Voigta i inne), wygładzanie widma, pochodne, automatyczne odejmowanie widm, konwersja jednostek widmowych, korekcja długości ścieżki ATR, obliczenia interferogramu, transformata Kramersa-Kroniga, korekcja przesunięcia Ramana i rutynowa kalibracja spektrometru CCD.

Pakiet aplikacji NMR: przetwarzanie danych 1D NMR; przeprowadzanie pełnej obróbki danych na sygnałach FID, w tym FFT, i identyfikację fazy, integracji, oraz pików.

Pakiet aplikacji do chromatografii: tworzenie metod analizy chromatograficznej; zbieranie i identyfikacja pików, kalibracja modelu i oznaczanie ilościowe.

Pakiet aplikacji GC-MS: Analiza danych z eksperymentów GC-MS; obliczenie i porównanie chromatogramów pojedynczych jonów, automatyczna identyfikacja pików i przeszukiwanie bibliotek widmowych.

Przykładowe oprogramowanie spełniające powyższe wymagania to np. oprogramowanie GRAMS GRAMS/AI Version 9 Spectroscopy Software