

LC-MS/MS向け波形処理ソフトウェア Peakintelligence™を用いた食品中残留農薬の 効率的な波形処理

川嶋 美帆

ユーザーベネフィット

- ◆ ピーク波形処理に要する手間と時間を削減できます。
- ◆ パラメータ設定が不要で、誰が波形処理しても同じ結果が得られます。

はじめに

食品の輸出入の増加に伴い、規制される農薬の種類や設定される各食品中の基準値（MRL）の数は増加しています。食の安全に携わる検査・研究機関は、より迅速に正確な情報を提供することが要求されています。

多成分・多検体のデータの解析においては、多数のピークを目視で確認する必要があるため、ピークピッキングは長時間におよび、大きな業務負担を生んでいます。さらに、人為的なミスや作業者ごとの癖は解析結果に影響するリスクとなり、これらを軽減できるピーク波形処理法が望まれています。

本稿では、AI（人工知能）を用いて開発したアルゴリズムを搭載するトリプル四重極液体クロマトグラフ質量分析計（LC-MS/MS）向け波形処理ソフトウェア

「Peakintelligence」を残留農薬分析に適用し、波形処理を省力化・効率化した例をご紹介します。



* Peakintelligenceは、島津製作所と富士通の共同研究開発製品です。

食品中残留農薬一斉分析における波形処理

食品中の残留農薬一斉分析において、モニターする農薬の数は食品に応じ様々ですが、多くの場合一分析で数百成分をモニターし、これらの農薬が基準値を超えて含有していないことの確認が行われます。多くの農薬が不検出となる中で、誤検出・誤同定が無いように、作業者が目視でクロマトグラムを確認する必要があります。その総数は、(成分数)×(サンプル数)×(繰り返し回数)となるため膨大で、作業者に大きな業務負担を与えます。



従来のアルゴリズムの課題

従来のピーク検出アルゴリズムでは、クロマトグラムに応じて数多くの検出パラメータをその都度最適化する必要がありました。それでも正しくピーク検出されない場合は手作業による修正を要し、作業者への大きな負担となっていました。また、これらの作業の習熟や標準化も大きな課題です。



図1 従来の波形処理パラメータの設定画面

Peakintelligenceの波形処理アルゴリズム

Peakintelligenceは、人工知能(AI)の一種である「Deep Learning」を用いて開発された新しい波形処理技術です。AIは総合的な概念と技術のことを言い、「Machine Learning (機械学習)」や「Deep Learning」はAIを支える手法です(図2)。「Machine Learning」では解析対象の特徴を人が抽出して学習する必要があるのに対し、「Deep Learning」は解析対象の特徴の抽出を機械(PC内のソフトウェア)が行います。このため、人によるばらつき無く、大量にデータを学習させることが可能です。

Peakintelligenceでは、図3に示すように、熟練作業者により波形処理が確認された約13,000本のクロマトグラムを使用し、クロマトグラムをデータ、ピーク開始点・終了点をラベルとしてデータセットを用意し、学習やハイパーパラメータのチューニング、性能評価を行い学習済みモデルを作成しました。この学習済みモデルを解析PCにインストールすることで、LC/MSの自動データ解析に利用しています。

* お客様の波形処理を学習する機能は搭載していません。

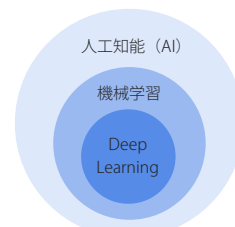


図2 Deep Learningのイメージ図

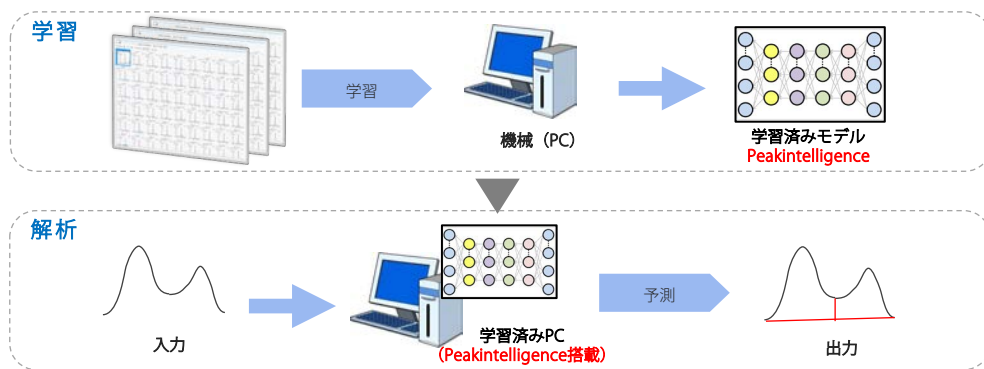


図3 Peakintelligenceのイメージ図

■パラメータレスで波形処理

Peakintelligenceは、熟練作業者が行った波形処理を機械学習させているため、その熟練者と同等レベルの解析を実現できます。従来のアルゴリズムとは異なり、事前のパラメータ調整は不要です。

従来のアルゴリズムとPeakintelligenceでのパラメータ設定画面を図4に示しました。波形処理の設定画面で、アルゴリズムを選択するだけでPeakintelligenceの波形処理が適用されます。複雑なパラメータ設定はありません。作業による処理結果のばらつきが生じることはなく、属人性は排除されます。

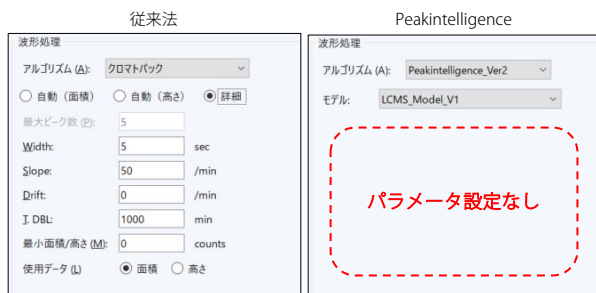


図4 従来のアルゴリズムとPeakintelligenceのパラメータ設定画面

図5には、波形処理の一例を示しました。S/Nが低い場合や、夾雑成分や異性体と未分離のピークも適切に検出し波形処理されています。

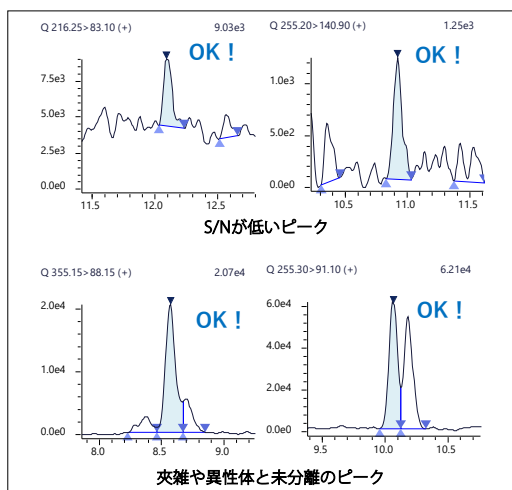


図5 Peakintelligenceによる波形処理例

Peakintelligenceは、株式会社 島津製作所の日本およびその他の国における商標です。

■誤検出数の低減による波形処理時間の削減

農薬を添加していない大豆抽出液中の157成分の農薬分析を例に、従来法(クロマトパック)との波形処理結果の比較を図6に示しました。従来法では、85成分についてベースラインのノイズやうねりを誤検出・誤同定していましたが、Peakintelligence ではその数は28成分となり、33%に低減しました。誤検出したピークを確認し、手動波形処理するのに要する時間を10秒とすると、1データ中に含まれる化合物157成分の波形処理に要する時間は、Peakintelligenceを適用することにより14分→4.6分となります。

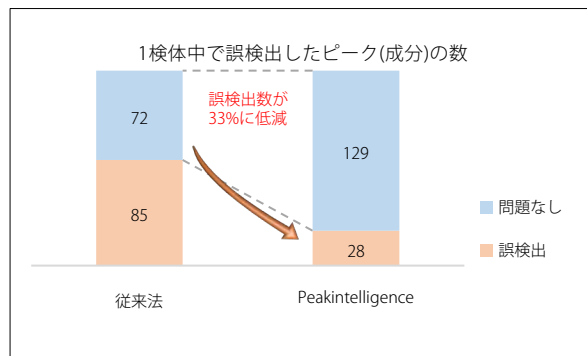


図6 大豆抽出液中の農薬157成分の波形処理結果の比較

■まとめ

残留農薬分析の波形処理にPeakintelligenceを適用することで、事前のパラメータ調整なしで、誤検出・誤同定するピーク(成分)の数を33%に低減することができました。これにより、波形処理にかかる時間を削減し、ピークピッキングにおける作業者の負担の軽減が期待できます。

また、パラメータ設定が不要であることから、作業による処理結果のバラツキのリスクがなくなり、属人性の排除に寄与します。