SHIMADZU
Excellence in Science

Application News

ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-TQ™8040 NX

Peakintelligence ™ for GCMS™による農薬データ解析時間の短縮

坂井 健朗、金澤 慎司

ユーザーベネフィット

- ◆ LabSolutions Insight™ DB GCMSのオプションソフトウェアであるPeakintelligence for GCMSを用いて、大量のピーク波形処理を高速に精度よく実施できます。
- ◆ パラメータレスのため、解析者の恣意による結果のばらつきがありません。

■はじめに

クロマトグラムの波形処理が正しく行われているか、そうでないかの判断基準は、一意に定義することが難しく、多くの公定試験法においてもその厳格なルールが定められているケースは稀です。各分析者がその知識と経験をもとに、適切と思われる方法で判断を行うことが暗に求められます。それゆえに波形処理は分析者の恣意性が強く反映される過程でもあり、完全に客観的な分析結果を目指す際の課題になる可能性があります。

また、昨今では一般的になった一斉分析の場合、得られたクロマトグラムをひとつひとつ確認していく作業は多くの分析者の悩みの種です。自動の波形処理プログラムを用いる場合でも、最適なパラメータの設定には時間を要することが多く、その結果を確認/修正する作業から逃れることはできません。

Peakintelligence for GCMSは機械学習のアルゴリズムを用いて、熟練者のピーク波形処理を模倣することを実現したLabSolutions Insight DB GCMSのオプションソフトウェアです。パラメータレスで作業者による結果のばらつきがなく、精度よくピークを検出することができます。

今回、GC-MS/MSによる残留農薬のデータに対して、Peakintelligence for GCMSで波形処理を行い、従来の自動波形処理の結果を比較しました。その結果、従来よりも高い精度で波形処理を実施することができました。

動作環境

OS	Windows® 10 Professional
ソフトウェア	LabSolutions Insight DB GCMS (Ver.3.9以降) LabSolutions Insight™ CS（Ver. 3.9 SP1以降）

* 動作にはLabSolutions™ DB GCMS (Ver.6.116以降）もしくはLabSolutions™ CS （Ver. 6.115以降）が必要です。
* Peakintelligence for GCMSはLabSolutions Insightプロセッシングモードで動作します。

■自動波形処理パラメータの問題点

従来の自動波形処理アルゴリズムも、十分に高さのあるピークの場合は、特にパラメータの設定を行わなくても精度よく波形処理を行うことができます。（図1）

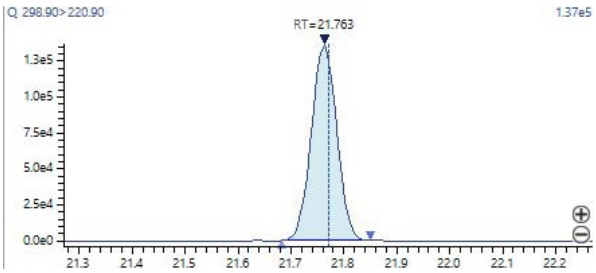

図１　高さのあるピークの自動処理結果

一方で、ピークの高さが小さい場合には、図2のような自動波形処理結果に遭遇することがあります。概ね問題なく波形処理できているように見えますが、ピーク開始位置をもう少し早めに設定してもよさそうです。

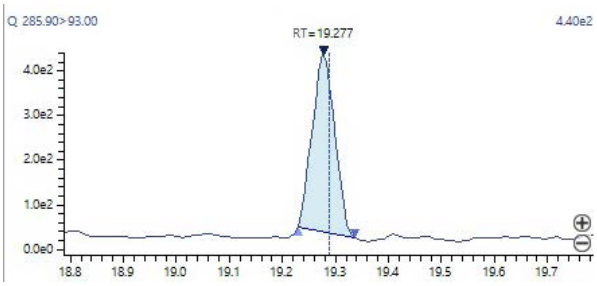

図２　高さのないピークの自動処理結果

これは、デフォルトの波形処理パラメータにおけるピークの立ち上がりを判定する設定が、高さのないピークでは適切でないことに由来します。ピークの立ち上がりは波形処理のパラメータで調整できます。（図3）

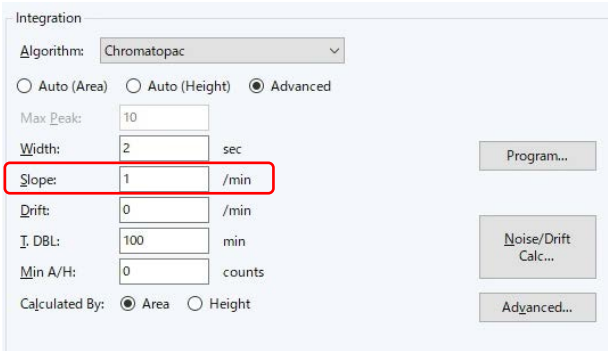

図３　クロマトパックによる波形処理パラメータ設定

ただ、この閾値の設定を変更すると、ノイズに近い強度値の上昇もピークと認識してしまうため、図4のような誤同定が発生します。

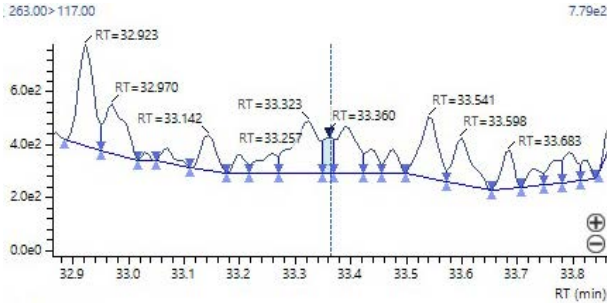

図 4　Slope設定を低くした場合の波形処理

このようにピーク波形処理におけるパラメータは、適切に設定すれば快適に波形処理ができる一方、その設定の検討には時間がかかることが課題になる場合があります。

■パラメータレスの波形処理

Peakintelligence for GCMSでは、アルゴリズムにAIを採用することにより、このような煩雑なパラメータ設定を排除しました。（図5）

これにより、作業者の恣意によって解析結果に差が生じるフェーズを大幅に削減することができます。

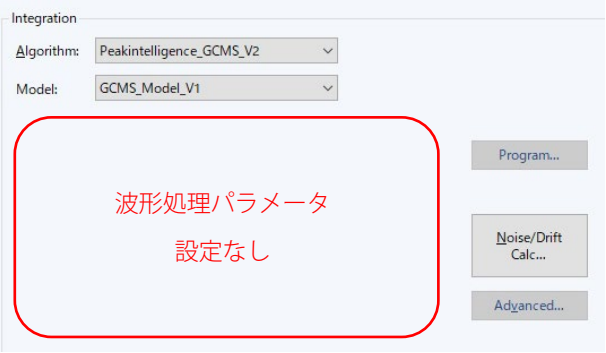

図 5　Peakintelligence for GCMSの波形処理画面
Peakintelligence for GCMSはユーザーの波形処理を学習する機能は搭載しておりません。

■従来法との精度の比較

従来のクロマトパックによるデフォルトのアルゴリズムと、 Peakintelligence for GCMSによるピークの波形処理結果を比較しました。

前述のとおり、クロマトグラムの波形処理結果が適切か否かの判断基準を一意に定義することは難しいため、当社技術者がそれぞれのピーク波形処理に関して「適切/不適切」を判断し、その割合を比較しました。対象はGC/MS残留農薬分析用データベースを使用して取得した471成分同時分析の2データで、定量イオン/確認イオンのクロマトグラムを含め、合計1884クロマトグラムに関して評価しました。その結果を表1に示します。

表 1　ピーク波形処理の結果（1884クロマトグラム）

	適切に波形処理できたピークの割合
クロマトパック（デフォルト設定）	89.61%
Peakintelligence for GCMS	98.27%

クロマトパックでも、9割近いクロマトグラムで適切にピーク波形処理ができていますが、Peakintelligence for GCMSではさらに高い率で適切に波形処理ができていることがわかります。

■従来法との所要時間の比較

続いて波形処理に要した時間を比較しました。図2で代表されるような、適切でない波形処理に関しては、分析者が手動で波形処理の内容を修正する必要があります。今回の1884クロマトグラムの自動波形処理結果において、修正が必要だったクロマトグラムの数は、クロマトパックの自動波形処理では204、 Peakintelligence for GCMSでは34でした。修正の必要なクロマトグラムの数が大きく減ったことにより、波形処理の修正にかかる時間を大幅に削減できることがわかります。

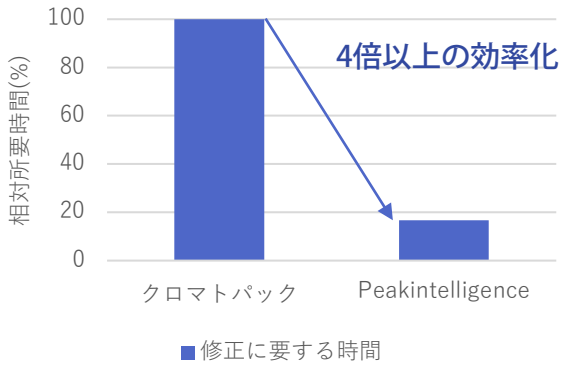

図 6　自動波形処理の結果にかかる時間のイメージ

■まとめ

Peakintelligence for GCMSを使用することにより、作業者の恣意による結果のばらつきを大きく抑えることができます。また、波形処理の修正にかかる時間を大幅に削減できることにより、分析者の精神的負担を減らし、作業効率をアップさせることができました。

Peakintelligence、GCMS、LabSolutions、 LabSolutions Insightは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。
Windowsは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

株式会社 島津製作所　分析計測事業部
https://www.an.shimadzu.co.jp/
01-00585-JP　初版発行：2023年 6月
島津コールセンター　0120-131691

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。
本文中に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。
本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

© Shimadzu Corporation, 2023