

Application News

高速液体クロマトグラフ質量分析計 LCMS™-8045/8050/8060NX

Peakintelligence™による効率的なデータ解析 —有機フッ素化合物 (PFAS) 分析への応用—

服部 考成、丹羽 宏之

ユーザーベネフィット

- ◆ 波形処理ソフトウェアPeakintelligenceを用いることで、PFAS分析のデータ解析に要する手間と時間を大幅に削減できます。
- ◆ パラメータ設定が不要で、誰が波形処理しても熟練作業者と同等程度の結果が得られます。

はじめに

有機フッ素化合物 (Per- and polyfluoroalkyl Substances, PFAS) は、撥染剤、耐熱性、耐薬品性などに特徴を持ち、コーティング剤、表面処理剤、乳化剤、消火剤などの用途で広く使用されます。一方、環境中への残留性、生物蓄積性、生物への毒性、長距離移動性への懸念から、近年、実態調査や規制導入が進められています。2023年10月現在、日本で規制対象となっているPFASはPFOS, PFOA, PFHxSの3成分のみですが、欧米ではより多くのPFASがすでに規制されており、世界的に分析対象となるPFASの種類は増えると考えられます。それに伴い、得られた分析データの解析にはより多くの労力と時間を要するため、効率的なデータ解析が求められます。

本アプリケーションニュースでは、AI (人工知能) を用いて開発したアルゴリズムを搭載する波形処理ソフトウェア「Peakintelligence」をPFAS分析のデータに適用し、データ解析を省力化・効率化した例をご紹介します。

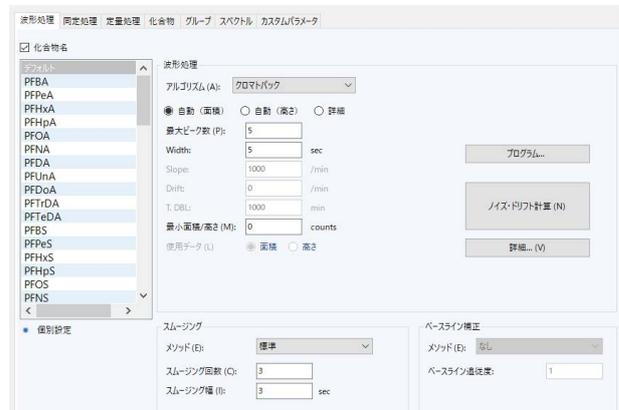


図1 従来の波形処理パラメータの設定画面

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で、「Machine Learning (機械学習)」や「Deep Learning」はAIを支える手法です。「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」で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。そのため、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、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 (図2)。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追加学習する機能は搭載しておりません。



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

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調整する必要がありました (図1)。それでも正しくピーク検出されない場合は手作業で修正し、作業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。

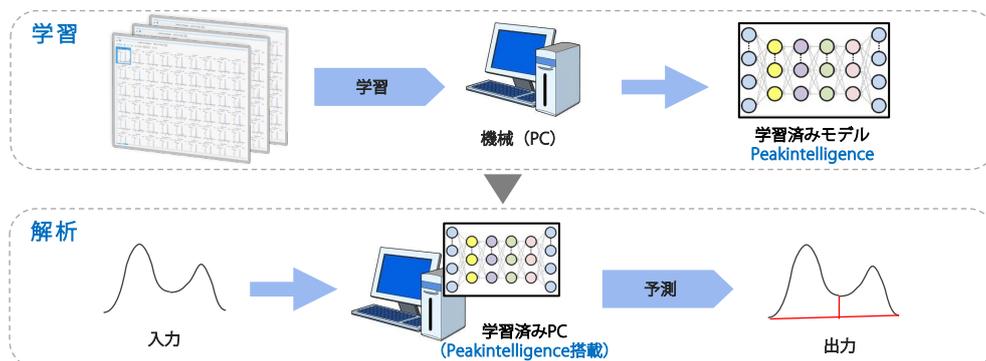


図2 Peakintelligence のイメージ図

■パラメータレスで良好な波形処理

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（図3）。複雑なパラメータ設定もなく、アルゴリズムとモデルを選択するだけでPeakintelligenceの波形処理が適用されます。パラメータの設定違い・ミスによる結果のばらつきも低減できます。



図3 従来のアルゴリズムとPeakintelligenceのパラメータ設定画面

■データ解析時間の削減

工場排水中の72成分（内部標準物質31成分）のPFAS分析データをPeakintelligenceで解析しました。図4に示すように、PeakintelligenceではS/Nが悪いピークでも問題なく波形処理できました。

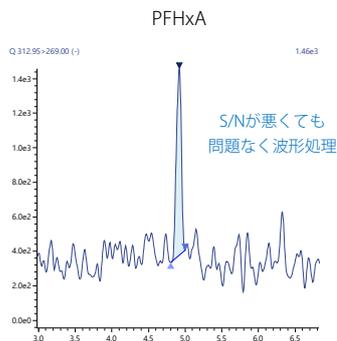


図4 Peakintelligenceでの波形処理例

また、従来法では、図5に示すようなベースラインのノイズやうねりを誤検出していましたが、Peakintelligenceでは誤検出なく正確にピーク検出できました。従来法では26成分誤検出していたのが、Peakintelligenceでの誤検出は0でした（図6）。誤検出した場合、手作業でピーク削減する必要があるので、より多くの解析時間を要します。1データを解析するのに要した時間は、従来法では2分でしたが、Peakintelligenceでは45秒となりました。100データを解析することを想定した場合、Peakintelligenceを適用することで約3.3時間→約1.3時間となり、データ解析における労力と時間を大幅に削減できます。

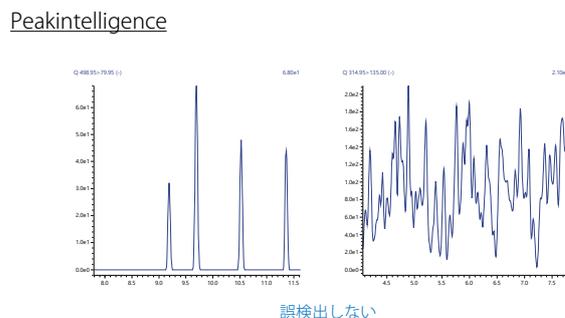
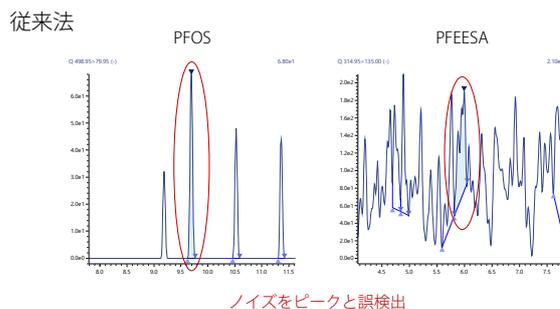


図5 従来法とPeakintelligenceでの波形処理の比較

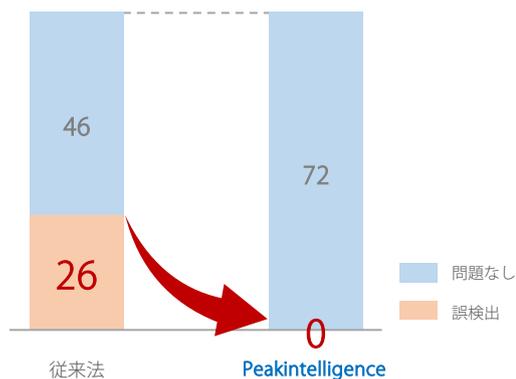


図6 工場排水中のPFAS72成分の波形処理結果の比較

■まとめ

PFAS分析のデータ解析に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・誤同定するピークや手作業での波形処理が必要なピーク数を大幅に低減できました。これにより、データ解析の時間を大幅に削減し、作業者の負担軽減が期待できます。また、パラメータ設定が不要なため、作業者による処理結果のばらつきがなくなり、属人性の排除に寄与します。今後、分析対象となるPFASの数が増大にすると共に、より効率的なデータ解析が求められますが、Peakintelligenceはそのための有効なソリューションになると考えられます。

LCMSおよびPeakintelligence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。