

# 一体型HPLCシステムによるAIアルゴリズムを用いたLCグラジエント条件の自動最適化

藤崎 真一

## ユーザーベネフィット

- ◆ AIアルゴリズムによりグラジエント条件を自動で最適化できるため、LCメソッド開発にかかる作業を大幅に省力化できます。
- ◆ 新規のメソッド開発だけでなく、既存の分析条件に適用し、効率的に分離を改善することも可能です。

## はじめに

一般的なLCのメソッド開発では、移動相やカラムの設置、分析スケジュールの作成といった「準備」を行い、「分析」を開始します。その後、得られたデータの「解析」を実施し、次の分析のための「準備」を再度行い、再び「分析」を仕掛けます。この作業の繰り返しでメソッド開発は進行しますが、分析者にとっては、繰り返しの分析スケジュールの作成に膨大な時間を要するだけでなく、得られたデータの解析結果に基づき最適条件を探索する過程では、クロマトグラフィーに対する知見も要求されます。つまり、通常のメソッド開発においては「人」による介入が必須であり、一連のメソッド開発の無人化・自動化による作業の省力化が望まれています。本稿では、低分子化合物の混合物（7種）をモデルサンプルとし、一体型LCシステムi-Series（図1）と分析法開発支援ソフトウェア LabSolutions™ MDに搭載されたAIアルゴリズム（[Technical Report C190-0577](#)）を組み合わせ、分離度のクライテリアを満たすグラジエント条件を自動探索した事例をご紹介します。

## 分析条件および対象成分

分析条件および対象成分を表1に示します。本稿では、低分子化合物7種の混合物をモデルサンプルとしました。本サンプルに対して、分離度および最終ピークの溶出時間のクライテリアを設定し、これらを満たすグラジエント条件を自動探索しました。

表1 分析条件および対象成分

System : LC-2080C 3D	
Sample : (1) Antipyrine, (2) Benzoic acid, (3) Salicylic acid, (4) Hydrocortisone, (5) Furosemide, (6) Naproxen, (7) Probenecid	
Mobile phase	
Pump A :	0.1% formic acid in water
Pump B :	Acetonitrile
Column : Shim-pack Scepter™ C18-120*1 (100 mm × 3.0 mmI.D., 1.9 μm)	
Analytical conditions	
B Conc.	: 20%(0 min)→X*2%(3 min) →95%(3.01~4 min)→20%(4.01~8 min)
Column Temp.	: 40 °C
Flow rate	: 0.7 mL/min
Injection Vol.	: 5 μL
Detection	: 254 nm (STD cell)
Criteria of automatic optimization of gradient conditions	
Minimal resolution	: 3
Time of last eluting peak	: < 10 min

\*1 : 227-31013-03 (島津GLC 製品番号)

\*2 : X = 90, 91, 92, 93, 94 (5 patterns)



図1 一体型LCシステム i-Series (LC-2080C 3D)

## グラジエント条件の自動最適化

グラジエント条件の自動最適化フローを図2に示します。LabSolutions MDは、独自のAIアルゴリズムを搭載しており、初期分析の結果に基づき、「AIによるグラジエント条件の改良（条件探索）」および「改良された条件での分析（補正分析）」を繰り返すことでクライテリアを満たす条件を自動で探索します。クライテリアに関しては、「分離度」と「最終ピークの溶出時間」について設定可能です。今回は、低分子化合物7種に対し、最小分離度を3.0、最終ピークの溶出時間を10分未満として、分析時間の短縮も考慮してグラジエント条件を自動探索しました（図3）。



図2 LabSolutions MDのグラジエント条件自動最適化のフロー

最小分離度:

最終ピーク溶出時間:  min

図3 グラジエント条件の自動最適化設定

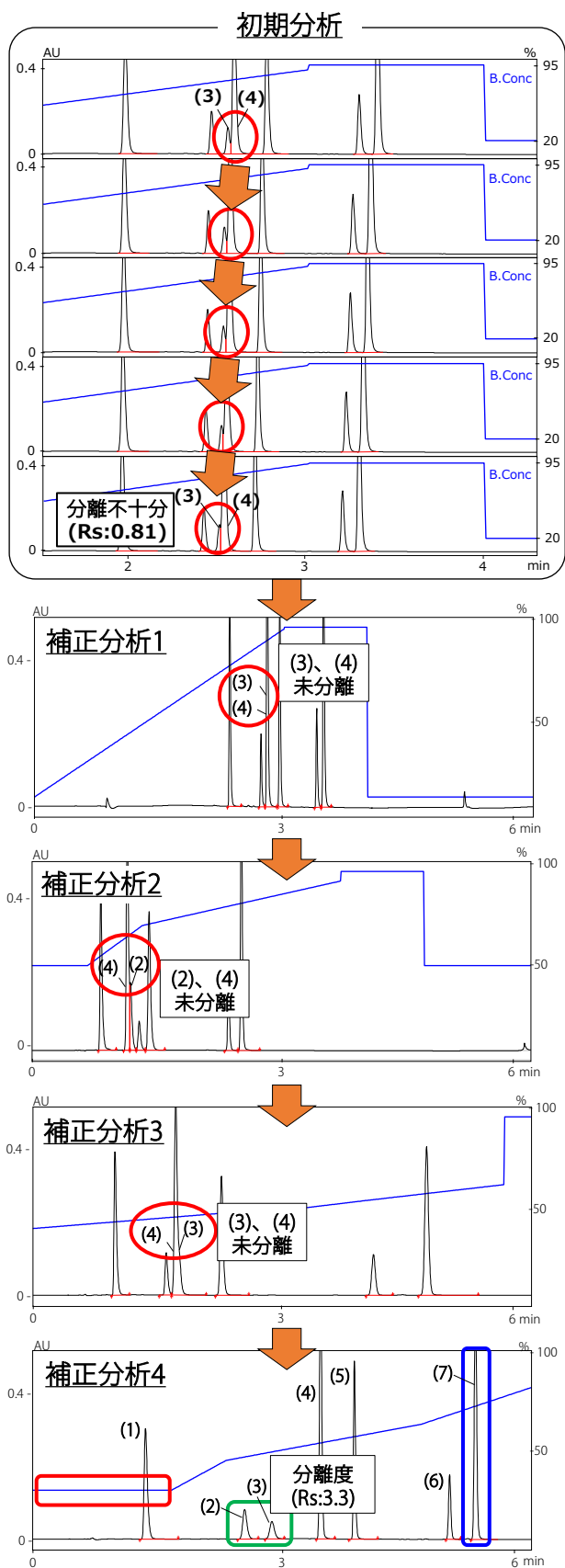


図4 グラジエント条件の自動最適化  
 \*図中青線はグラジエント条件  
 \*ピーク番号は表1参照

グラジエント条件を自動探索した結果を図4に示します。5パターンのグラジエント条件（表1のB Conc.参照）で初期分析が実施された後に、4回の補正分析を経て、低分子化合物7種の分離が自動で最適化されました。初期分析結果においては、(3)と(4)のピークが分離不十分（図4初期分析の赤丸内）であることがわかります。AIアルゴリズムによる補正分析の繰り返しにより、最終的にはクライテリアを満たすグラジエント条件が自動探索されました（補正分析4）。補正分析4においては、一定組成（アイソクラティック）の領域（赤枠内）を設けることで分離度のクライテリア（分離度：3.0）を達成（緑枠内）できました。また、グラジエント勾配が自動で調整され、最終ピーク（青枠内）の保持時間もクライテリアである10分以内を満たすことができました。このように、AIアルゴリズムを活用することで、クロマトグラフィーの経験の有無によらず誰でも簡単にクライテリアを満たす条件の探索ができます。

### ■まとめ

i-SeriesとLabSolutions MDのAIアルゴリズムを組み合わせ、低分子化合物7種の混合物品に対して、グラジエント条件の自動最適化を適用しました。その結果、クライテリア（「最小分離度3.0」かつ「最終ピークの溶出時間10分未満」）を満たす条件を自動探索できました。メソッド開発においてグラジエント条件を最適化する際は、分析スケジュールの作成やデータ解析のたびに、「人」による介入が必要のため、一連のワークフローの無人化・自動化が求められますが、AIアルゴリズムにより作業の大幅な省力化が可能です。

LabSolutionsおよびShim-pack Scepter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。

**株式会社 島津製作所** 分析計測事業部  
<https://www.an.shimadzu.co.jp/>

01-00933-JP

初版発行：2025年9月

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」、「®」を明記していません。

▶ アンケート

**関連製品** 一部の製品は新しいモデルにアップデートされている場合があります。



▶ i-Series  
一体型液体クロマトグラフ



▶ 分析法開発支援システム  
分析法開発支援ソフトウェア

## 関連分野

▶ 医薬・バイオ医薬品

▶ 低分子医薬品

▶ 価格お問い合わせ

▶ 製品お問い合わせ

▶ 技術お問い合わせ

▶ その他お問い合わせ