

LabSolutions Insight向け波形処理ソフトウェア
Peak Integration Software for LabSolutions Insight

Peakintelligence for GCMS



Peakintelligence™ for GCMS™



パラメータ不要の波形処理

パラメータ設定作業から解放され、
波形処理作業の属人性を解消します。



熟練者の波形処理を9割再現可能

熟練者と同じ、質の高い波形処理を実現します。



手動波形処理による修正時間の短縮

波形処理結果の確認・修正作業を低減でき、
トータルで解析にかかる時間の短縮が可能になります。



新AI波形処理アルゴリズム搭載



質量分析では多サンプル×多成分の一斉分析で、日々大量のデータを取得しています。近年は装置の高性能化に伴い、素早くデータを得ることができ、データ量が増大する傾向にあります。一方、データ解析では波形処理、同定処理、定量処理を行う中で、特に波形処理では結果を目視で確認し、手作業での修正を行うため、データ解析に膨大な時間がかかっています。そのため、増加するデータ量に対応する解析業務の効率化が求められています。Peakintelligence for GCMS は、GC/MS または GC/MS/MS 定量処理ワークフローにおいて波形処理に要する時間を大幅に短縮する新AI波形処理アルゴリズムを搭載しています*。波形処理のノウハウを学習したAIアルゴリズムは、ユーザーによるパラメータの設定が不要で、熟練者なみの波形処理を実現できます。さらに、データ解析にかかる時間をおよそ 75 % 低減できます。

※特許出願済み



Analytical Intelligence は、島津製作所が提案する分析機器の新しい概念です。システムやソフトウェアが、熟練技術者と同じように操作を行い、状態・結果の良し悪しを自動で判断し、ユーザーへのフィードバックやトラブルの解決を行います。また、分析機器に対する知識や経験の差を補完し、データの信頼性を確保します。

代謝物データへの適用



測定対象の化合物が数百成分ある代謝物分析では、波形処理結果の確認や手動波形処理での修正作業が定量処理ワークフローのボトルネックとなっています。Peakintelligence for GCMSは、パラメータ設定なしで熟練者と同等の波形処理を実現でき、ワークフローを改善します。

製品パッケージ

Smart Metabolites Database™ Ver. 2に対応しています。

さらに、マルチオミクス解析パッケージと組み合わせることで代謝物データの解析作業を効率化します。



Smart Metabolites Database™ Ver. 2



Peakintelligence™ for GCMS

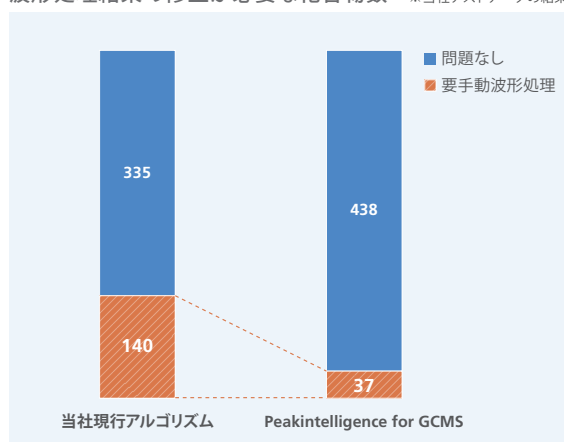


マルチオミクス解析パッケージ

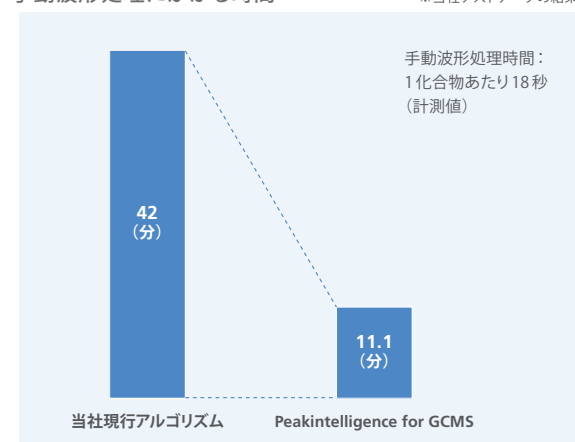
手動波形処理にかかる時間の短縮

定量処理ワークフローでは、自動で波形処理をした結果を目視で確認し、結果が正しくない場合は手動波形処理で修正を実施します。Peakintelligence for GCMSを利用すると、現行アルゴリズムと比べて波形処理結果の修正が必要な化合物を削減することができ、手動波形処理による修正にかかる時間を現行アルゴリズムの**約4分の1**に短縮できます（1サンプルに475化合物が含まれる代謝物データの場合）。

波形処理結果の修正が必要な化合物数 ※当社テストデータの結果



手動波形処理にかかる時間 ※当社テストデータの結果



- ・本製品は、代謝物データベース「Smart Metabolite Database Ver. 2」で分析されたMRMデータを用いて評価を行っています。
- ・使用している技術の特性から、処理結果について説明できない場合があります。

波形処理事例

Peakintelligence for GCMSでは難しいベースライン処理も重なりあった複数のピークもパラメータの設定なしで正しく処理し、誤検出を抑えて小さいピークを検出、安定した定量を実現します。

当社現行アルゴリズム

波形処理

アルゴリズム (A): クロマトバック

自動 (面積)
 自動 (高さ)
 詳細

最大ピーク数 (P): 5

Width: 1 sec

Slope: 100 /min

Drift: 0 /min

T. DBL: 1000 min

最小面積/高さ (M): 0 counts

使用データ (L) 面積 高さ

パラメータ設定が必要

Peakintelligence for GCMS

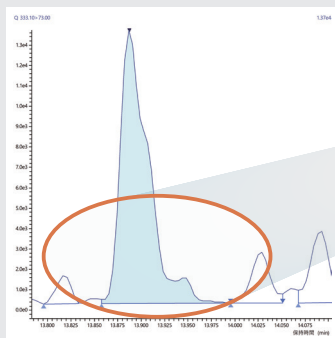
波形処理

アルゴリズム (A): Peakintelligence_GCMS_V2

モデル: GCMS_Model_V1

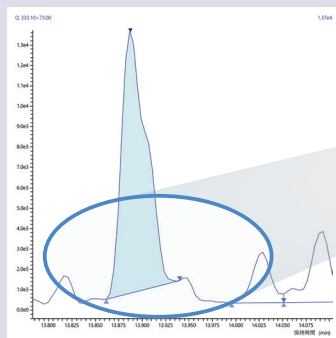
パラメータ
設定なし

バナナサンプル中の Galacturonic acid-meto-5TMS (2)



熟練者の
波形処理結果

不一致

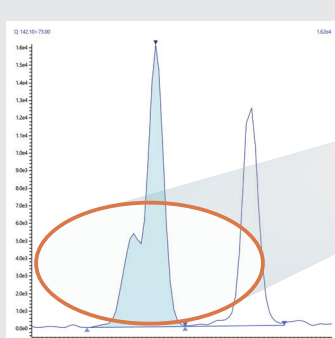


熟練者の
波形処理結果

一致

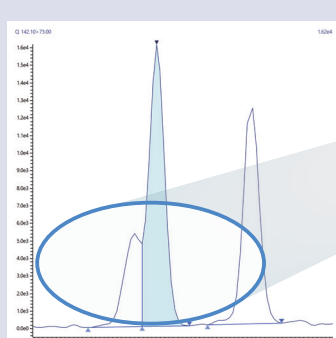
- ベースラインを期待通りに処理するには、パラメータ設定のノウハウが必要
- 設定が適切でない場合は、手動波形処理による修正が必要

大豆サンプル中の Ornithine-4TMS



熟練者の
波形処理結果

不一致



熟練者の
波形処理結果

一致

手動波形処理による修正が必要


作業者によらず、熟練者と同等の
波形処理結果を実現

残留農薬データへの適用




残留農薬分析では、数百成分もの規制対象の農薬を一斉に分析する必要があり、波形処理パラメータの設定が難しく、手動波形処理にも時間がかかっています。また、波形処理の際に手動で面積を小さく修正すると、データ改ざんの疑いが生じる可能性もあります。

Peakintelligence for GCMSを使用すると、パラメータの設定なしで大量のデータを正確かつ迅速に処理できるため、作業者による定量結果のばらつきやデータ改ざん疑いのリスクを低減することができます。



Application

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



製品パッケージ

スクリーニング用データベース Quick-DB GCMS残留農薬分析用データベース Ver. 2.1 (LabSolutions™) と定量用データベース Smart Pesticides Database™ Ver. 2.1 (LabSolutions) に対応しています。



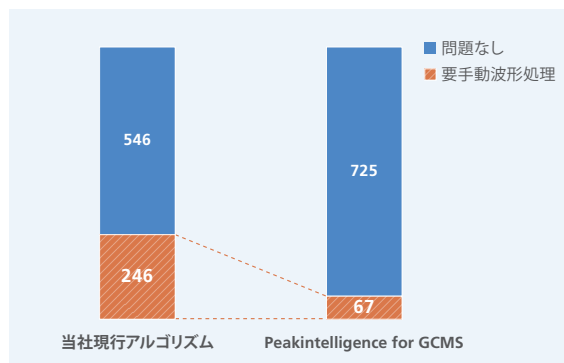
残留農薬のSIMデータへの適用

残留農薬ではMRMデータだけでなくSIMデータにも対応しました。

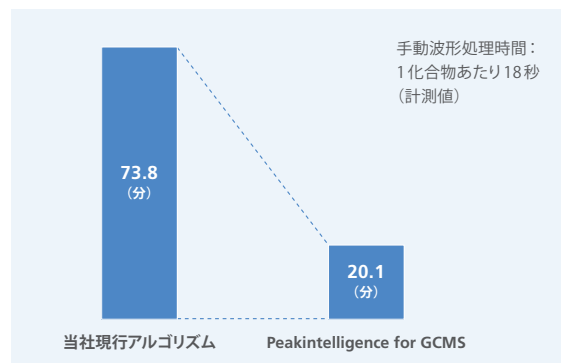
手動波形処理にかかる時間の短縮

定量処理ワークフローでは、自動で波形処理をした結果を目視で確認し、結果が正しくない場合は手動波形処理で修正を実施します。Peakintelligence for GCMSを利用すると、現行アルゴリズムと比べて波形処理結果の修正が必要な化合物を削減することができ、手動波形処理による修正にかかる時間を現行アルゴリズムの約4分の1に短縮できます（4サンプル、約200化合物が含まれる残留農薬データの場合）。

波形処理結果の修正が必要な化合物数 ※当社テストデータの結果



手動波形処理にかかる時間 ※当社テストデータの結果



- ・本製品は、「スクリーニング用データベース Quick-DB GCMS残留農薬分析用データベース Ver. 2.1」、「定量用データベース Smart Pesticides Database Ver. 2.1」で分析されたMRMデータ、およびSIMデータを用いて評価を行っています。
- ・使用している技術の特性から、処理結果について説明できない場合があります。

波形処理事例

当社現行アルゴリズム

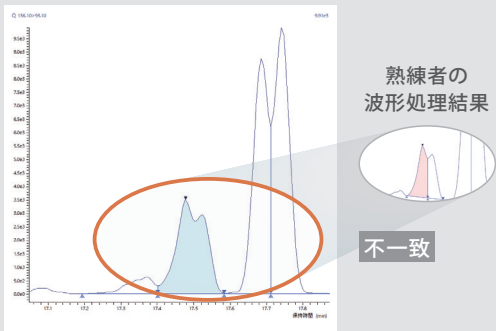
数百成分もの化合物を一斉に分析
成分ごとに波形処理パラメータを検討する作業は大変

Peakintelligence for GCMS

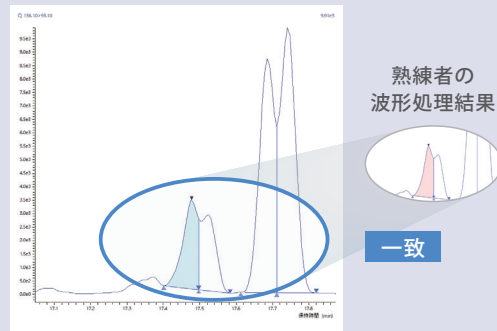
パラメータ設定なしでも正しい波形処理を実現

STEP1: 標準試料での検量線作成と波形処理結果の確認

標準試料中のアレスリン-1



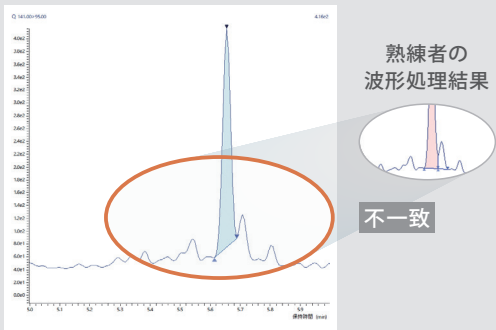
正しく検出できなかった場合は、
手動波形処理による修正が必要



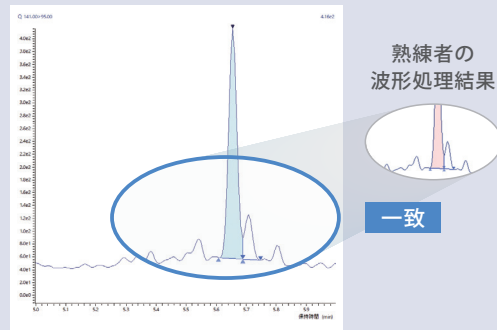
- 熟練者と同等の波形処理を実現
- 手動波形処理による修正が不要

STEP2: 作成した検量線を使用し実サンプルを定量

イチゴサンプル中のメタミドホス



夾雑物の影響でピーク形状が複雑に
作業により手動波形処理結果がばらつく



- 作業者によらず、熟練者と同等の波形処理を実現し、
結果のばらつきを解消
- パラメータ設定不要 / 手動波形処理作業削減により、
データ改ざんを疑われるリスクが低減

ライセンスの種類

- ・スターターパック
- ・1年継続ライセンス

Peakintelligence、LabSolutions Insight、GCMS、Analytical Intelligenceロゴ、Smart Metabolites Database、LabSolutionsおよびSmart Pesticides Database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。

本文書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。
なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。
本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。
治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。
トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。
外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

株式会社 島津製作所

分析計測事業部

604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

製品情報



価格お問合せ



東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631
(大学担当) (03) 3219-5616
(会社担当) (03) 3219-5622
関西支社 (06) 4797-7230
札幌支店 (011) 700-6605
東北支店 (022) 221-6231
郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511
(会社担当) (029) 851-8515
北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095
(会社担当) (048) 646-0081
横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106
(会社担当) (045) 311-4615
静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521
(会社担当) (052) 565-7531
京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604
(会社担当) (075) 823-1603
神戸支店 (078) 331-9665
岡山営業所 (086) 221-2511
四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652
九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332
(会社担当) (092) 283-3334

島津コールセンター ☎ 0120-131691
(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等:(075) 813-1691