

LabSolutions Report

Technical Report No. 37

LabSolutionsのブラウザ機能を 用いたデータ解析作業の効率化

1.はじめに

得られた測定データのクロマトグラムや定量結果の確認作業は、ソフトウェアの操作に 慣れていないラボのオペレータを悩ます作業の1つとなっています。例えば、標準試料や 未知試料の測定データの開き方やそれらの定量結果を表示するテーブルの操作、クロマ トグラム上での異常ピークの確認や定量結果における異常値の確認、解析パラメータの 変更やデータの再解析操作等があげられます。これらソフトウェア上のさまざまな解析機 能を有効に配置し、データの視認性と解析操作を容易にする画面がLabSolutionsにはあ ります。それがブラウザ機能です。ここではLabSolutionsのブラウザ機能によるデータ解 析操作について解説します。

2. データ解析の流れ

一般的なデータ解析の流れをFig.1に示します。まずシングル分析やバッチ分析で採取したLCやGCの標準試料やコントロール試料のデータを解析して各データのクロマトグラム、 保持時間やピーク面積をチェックして、システムが正常に稼動していたか?や、検量線が正 しく作成されているか?をオペレーターが目で見て判断します。このとき正しい結果が得ら れていない場合には、データ解析パラメータを編集して、正しい結果が得られるように測 定データを再解析後、検量線を再作成します。次に各未知試料のクロマトグラムや定量結 果を確認後、結果をレポート出力して報告書を作成します。測定した未知試料の中に目的 ピークの波形処理が正しく行われていないクロマトグラムがあった場合は、標準試料の測定 結果と同じく、データ解析パラメータを編集したり、手動波形処理(マニュピレーション)をして 測定データの再解析を行います。これら一連のデータ解析操作、例えばクロマトグラムの 表示や定量結果の確認等を1つの画面上で行うことができれば、オペレータによるデータ 解析の効率アップが期待できます。



3. 定量ブラウザによるデータ解析

LabSolutionsの定量ブラウザ画面をFig.2に示します。 定量ブラウザ画面には、測定したデータの定量結果テー ブルやクロマトグラム表示、データ処理パラメータ編集 画面、検量線情報の表示画面等があり、ひとつの画面で データ解析に必要な情報や解析操作が行えるように各機 能が配置されています。 データを解析するには、まずLabSolutionsのデータエク スプローラからマウス操作で解析するバッチファイルを 定量ブラウザ画面にドラッグ&ドロップします。選択した バッチファイルで測定した標準試料やコントロール試料、 未知試料の各クロマトグラムや定量結果が定量ブラウザ 画面上に自動的に読み込まれます。





3-1.クロマトグラムや検量線、定量値の確認

定量ブラウザ画面上の定量結果テーブルには、選択し たバッチファイル内の各データにおける化合物の測定結 果(ピーク面積値や高さ、保持時間、定量値、理論段数や シンメトリ係数等のカラム性能評価結果)が表示されます。 また定量結果テーブルでは、標準試料またはコントロール 試料のみ画面上に絞り込んで表示する機能やバッチファ イルに設定した各データに対して、化合物ごとに平均値 やCV値等の統計計算結果を表示する機能もありますので、 未知試料の測定の前にシステム適合性試験(SST)を行 なうような作業フローにおいて、オートサンプラによる繰 り返し注入再現性や保持時間再現性等の確認がスムー ズに行えます。

バッチ分析で測定したデータのクロマトグラムを確認 する操作も定量ブラウザを用いることで、より簡単に行う ことができます。定量結果テーブル上の各データをマウ スでクリック、またはキーボード上の[↓]カーソルキーを 押すことで、クロマトグラム表示画面に表示されるクロマ トグラムを切り替えながら各測定データを確認すること ができます。そのため定量ブラウザでは、各データのクロ マトグラムを確認、表示するために余分なマウスクリック 操作を必要としません。定量ブラウザでは、検量線情報の 確認も容易です。定量結果やクロマトグラムと同期して、各 化合物の検量線が検量線情報画面に表示されますので、標 準試料の検量線ポイントや直線性の確認が定量ブラウ ザ画面上で行えます。また定量結果テーブルで未知測定 試料データを選択した場合には、検量線グラフにその化合物の面積値や濃度値に相当する補助線が表示されます。

3-2.検出ピークの波形処理パラメータの変更

測定したデータのクロマトグラム上で目的ピークの波 形処理が正しく行われていない場合は、定量ブラウザ画 面で波形処理パラメータを変更して、正しいピーク波形処 理に変更することができます。

東形処理 同定処理	定量処理	化合物 グループ	パフォーマンスカスタム	007190	保持指標	
Channel(H):	検出器/	4 - Ch1 (254nm)		~		
Width (W):	5	sec	すべてのチャンネルにコピ	2-(<u>C</u>)		
Slope (S):	1000	uV/min	[here]			
Drift(D)	0	uV/min	-2020-2			
T. DBL	0	min	()0))/(4)			
最小面積/高さ(M)	1000	カウント	ノイズ・ドリフト計算	10 <u>0</u>		
使用データ(1)	●面積	○高き	■其相(べ)			
				_		

Fig.3:波形処理パラメータ画面

検出ピークの波形処理パラメータの変更は、波形処理 パラメータ編集画面とそのクロマトグラムのみに適用さ れるマニュアル波形処理の2種類で行うことができます。

波形処理パラメータの編集画面(Fig.3)で解析パラメータ を編集するには、画面上の「編集」ボタンを有効にして、編 集モードに切り替えます。その後、画面内の波形処理タブ において、Width値、Slope値、Drift値等の各パラメータ および波形処理タイムプログラムを編集します。編集後、画 面上の「表示」ボタンをクリックすると、定量ブラウザに表示している全てのデータに対して再設定した解析パラメー タで自動的に波形処理が実行され、再解析した結果が定 量結果テーブルに表示されます。なお編集モードでは、波形 処理以外にノイズ/ドリフト、定量限界値や検出限界値の 計算や化合物テーブル、理論段数やシンメトリ係数等の カラム性能評価パラメータの編集も同時に行えます。

また、現在表示しているクロマトグラムのみに対して手動波形処理(マニュピレーション)を行う場合には、クロマトグラム表示画面での右クリックメニューから「手動波 形処理バー」を選択します。手動波形処理バー(Fig.4)にて、ピーク検出点の移動やピークの挿入/除去等の波形 処理を実行します。波形処理を行った同定ピークは、直ちに定量計算され、その結果を定量結果テーブルに表示します。



Fig.4:手動波形処理バー

3-3.定量結果の基準値による判定

定量ブラウザでは、検量線の作成に使用した標準試料 の誤差%や正確さ%に対して上下限基準値による判定、 測定した未知試料中の各化合物の濃度(定量値)がその 検量範囲内であるかどうかの判定を行うことができます。判 定結果は、定量結果テーブル内に「判定結果」欄として表 示させることができ、かつ異常値が検出された場合には、そ のデータに対して判定結果を赤色で表示しますので、バ ッチ分析における複数データの中からすばやく異常値を 確認、見つけ出すことができます(Fig.5参照)。



Fig.5:定量結果テーブル内の「判定結果」欄

基準値による測定結果の判定を行うには、波形処理パ ラメータ画面内にある「QCチェック」タブで誤差%や正確 さ%判定に使用するサンプルの設定や上下限値を入力 設定します(Fig.6)。パラメータ設定後、画面内の「表示」 ボタンをクリックすることで、自動的に再解析処理が実行 され、その判定結果が「判定結果」欄に表示されます。 また上記の基準値による判定に加えて、「QCチェック」 タブでは、各化合物の濃度値に対して検出限界や定量限 界の基準値以下であるかどうかの判定も同時に行うこと ができます。この設定を有効にすることで、例えば定量限 界以下の濃度値(定量値)のピークが検出された場合の 確認も容易です。

形態理 同定処理 定量処理	化合物	グループ	パフォーマン	2 7294	007195	呆持指標	
標準試料	基準値				その他のき	FIND	
✓ 正確さ%をチェックする(②)	85	8-	115	8	2定量;	限界をチェ	わする
□ 誤差%をチェックする(円)	+-	15	*		□ 検出限	限界をチェ	界をチェックする
コントロール構成料							
▼正確さ%をチェックする(E)	80	8-	125	8			
□ 誤差%をチェックする(医)	+-	20	- 16				
添加国家科							
□正確さ続チェックする(R)	85	8-		8			
□誤差%をチェックする(型)	+-	20	- 16				
未知試料(QA/QC)							
☑ 正確さメメをチェックする(U)	80	8-	125	8			
「誤差然チェックする(D)	4-	20	8				

Fig.6:判定基準値の設定(QCチェックタブ)

3-4.定量結果のサマリ印刷

定量ブラウザにはデータの解析機能に加えて、レポー トの印刷機能も充実しています。定量結果テーブル画面 上に表示している各化合物のサマリレポート、データを 採取する際にバッチテーブルに設定したレポートフォー マットファイルでの出力、選択したデータのクロマトグラ ムや定量結果を出力する個別レポートといった3種類の 印刷形式をサポートしています。それぞれの印刷を実行 するには、定量ブラウザのメインメニューから「ファイル」-「定量結果テーブルの印刷」、「選択しているデータのデー タレポート」、「選択しているデータの定量結果印刷」を選 択し、そのメニューに続けて「印刷」を選択するだけで、目 的のレポートが出力されます(Fig.7)。このとき出力する レポートフォーマットを変更することもできます。上記と 同様にレポートフォーマットの編集メニューを選択して、 表示されるレポート編集画面にて出力項目や内容を編集 します。

またLabSolutionsでは、レポート印刷機能としてプリ ンタによる紙での印刷に加え、PDFファイル形式でのレポー ト出力も標準装備していますので、ラボ全体での分析業 務におけるペーパーレス化にも貢献します。



Fig.7:定量ブラウザの印刷機能とサマリレポート出力例

4. データブラウザを用いた測定結果の表示

LabSolutionsには、測定したデータを解析する機能と して定量ブラウザ機能とともにデータブラウザ機能 (Fig.8)があります。データブラウザでは、複数データの 各クロマトグラムやスペクトル、サンプル情報、ピークテー ブル情報等をひとつの画面内に表示することができ、異 なるデータ間での測定結果の比較を行う際に威力を発揮 します。データブラウザにデータを表示するには、LabSolutionsのデータエクスプローラからデータファイルをデータ ブラウザ画面内にドラッグ&ドロップします。データブラ ウザ画面の各データセルに指定されている出力内容に 従った情報で測定結果が表示されます。データブラウザに 表示する測定結果のデータセルのレイアウト(表示行数 や列数、データセルに表示する内容の設定、同一データ を複数のデータセルで表示する場合の設定等)は、自 由にカスタマイズでき、そのレイアウトを保存して使用す ることもできます。

またデータブラウザ画面でも各クロマトグラムに対す る波形処理操作が行えます。LabSolutionsのアシスタン トバーから「データ処理パラメータ」アイコンや「手動波 形処理」アイコンを選択することで、定量ブラウザと同じ く、表示されているクロマトグラムに対して最適な波形処 理パラメータを適用できます。

② 選択しているクロマトグラムに



5.おわりに

LabSolutionsのブラウザ機能は、複数データの定量結 果の確認、クロマトグラムの分離やピーク形状の確認、検 量線情報の確認、波形処理パラメータの編集や再解析等 の一連のデータ解析が効率よく行えるように機能が配 置されています。また各ブラウザ画面上に表示したい ファイルをドラッグ&ドロップするだけで簡単に測定データ 内の各情報を表示できますので、ソフトウェアの操作に 慣れていないオペレータでも簡単にデータ解析ができま す。

またブラウザ機能は、ラボ内でのさまざまなアプリケー ションに対応します。例えば、多検体のデータ解析を行う 際、測定したバッチファイル単位で定量ブラウザ画面に読



分析計測事業部 http://www.an.shimadzu.co.jp/

Fig.8:データブラウザ画面

み込むことができ、かつデータ処理パラメータとして設定 した判定基準値をもとに測定データの異常値をすばやく 検知できますので、複数データの視認性が飛躍的に向上 します。また複数の移動相を切り替えながら測定するメ ソッド開発システムにおいては、複数のクロマトグラムの 分離やピーク形状の確認を行う場合やPDA検出器を用 いたデータ解析においては、クロマトグラムとともにスペ クトルデータを表示することができますので、複数データ間 でのスペクトルによるピーク確認がよりスムーズに行え ます。

このようにLabSolutionsのブラウザ機能は、ラボのデー タ解析の効率を高める最適なツールとしてさまざまなア プリケーションでご使用いただけます。