



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 118795074 A

(43) 申请公布日 2024. 10. 18

(21) 申请号 202410432044.5

G01N 30/72 (2006.01)

(22) 申请日 2024.04.11

G06F 123/02 (2023.01)

(30) 优先权数据

2023-065939 2023.04.13 JP

(71) 申请人 株式会社岛津制作所

地址 日本京都府京都市中京区西之京桑原
町1番地

(72) 发明人 北嶋(吉山)仁望 金泽慎司

(74) 专利代理机构 北京派特恩知识产权代理有
限公司 11270

专利代理师 康艳青 张铮铮

(51) Int.Cl.

G01N 30/86 (2006.01)

G06F 18/213 (2023.01)

G06F 18/241 (2023.01)

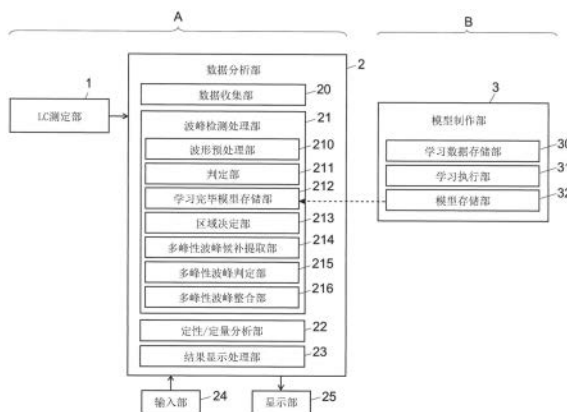
权利要求书3页 说明书13页 附图8页

(54) 发明名称

波形分析方法、波形分析装置以及分析装置

(57) 摘要

本发明提出波形分析方法、波形分析装置以及分析装置。波形分析方法包括：通过使用多个组的机器学习，来制作对所输入的波形中所含的波峰部分进行确定的学习完毕模型，所述组包含多个局部波形；将分析对象波形分割为多个局部波形，使用学习完毕模型来判定多个局部波形各自是否为波峰部分，基于判定的结果来推测分析对象波形中的包含重叠波峰区域等的多个不同种类的区域；以及对于推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰，使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者谷的底部与夹着谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一信息，来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。



1. 一种波形分析方法,对作为色谱或光谱的信号波形进行分析,所述波形分析方法的特征在于,包括:

模型制作步骤,通过使用多个组的机器学习,来制作对所输入的波形中所含的波峰部分进行确定的学习完毕模型,所述组包含通过对波峰部分的位置为已知的参照波形进行分割而制作的多个局部波形;

区域推测步骤,将分析对象波形分割为多个局部波形,使用所述学习完毕模型来判定所述多个局部波形各自是否为波峰部分,基于所述判定的结果来推测所述分析对象波形中的包含单一波峰区域、重叠波峰区域、及非波峰区域的多个不同种类的区域;以及

多峰性判定步骤,对于在所述区域推测步骤中推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰,使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、多个波峰中的邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者所述谷的底部与夹着所述谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一个信息,来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。

2. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,还包括:

整合步骤,在所述多峰性判定步骤中判定为多峰性波峰的情况下,对所述多峰性波峰以作为单一波峰来处理的方式进行整合。

3. 根据权利要求2所述的波形分析方法,其特征在于,
根据用户的选择,来切换是否执行基于所述整合步骤的整合。

4. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,
所述重叠波峰区域根据重叠波峰的分割方法被细分为包含垂直分割波峰区域的多种区域,在所述多峰性判定步骤中,对于与垂直分割波峰区域对应的波峰,判定是否为多峰性波峰。

5. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,
在所述多峰性判定步骤中,将主峰或肩峰的高度为规定的阈值以下作为多峰性波峰的条件之一。

6. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,
在所述多峰性判定步骤中,使用主峰与肩峰的高度的比率、邻接的两个波峰之间的谷的深度与其中任一个波峰的高度的比率、或者所述谷的底部与任一个波峰的顶部之间的宽度中的至少任一个来进行多峰性波峰的判定。

7. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,
在所述多峰性判定步骤中,计算重叠波峰区域中的信噪比、分离度、对称系数、面积、或波峰宽度中的任一个以上,在多峰性波峰的判定中一并利用此计算结果。

8. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,
所述信号波形是通过色谱仪质量分析所获得的色谱,在所述多峰性判定步骤中,利用对关于同一成分的定量离子的色谱的判定结果与对确认离子的色谱的判定结果此两者来判定多峰性波峰。

9. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,
在所述多峰性判定步骤中,在多峰性波峰的判定中利用与目标化合物相关的化合物信息。

10. 根据权利要求1所述的波形分析方法,其特征在于,

在所述多峰性判定步骤中,在多峰性波峰的判定中利用对重叠波峰波形进行平滑处理前后的波形的差异。

11.一种波形分析装置,对作为色谱或光谱的信号波形进行分析,所述波形分析装置的特征在于,包括:

区域推测部,将分析对象波形分割为多个局部波形,使用通过利用了多个组的机器学习所制作的学习完毕模型,判定所述分析对象波形的多个局部波形各自是否为波峰部分,其中,所述组包含通过对波峰部分的位置为已知的参照波形进行分割而制作的多个局部波形,并基于所述判定的结果来推测所述分析对象波形中的包含单一波峰区域、重叠波峰区域、及非波峰区域的多个不同种类的区域;以及

多峰性判定部,对于通过所述区域推测部推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰,使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、多个波峰中的邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者所述谷的底部与夹着所述谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一个信息,来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。

12.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,还包括:

整合部,在通过所述多峰性判定部判定为多峰性波峰的情况下,对所述多峰性波峰以作为单一波峰来处理的方式进行整合。

13.根据权利要求12所述的波形分析装置,其特征在于,还包括:

操作部,接受用以切换是否执行利用所述整合部的整合的由用户进行的选择操作。

14.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述重叠波峰区域根据重叠波峰的分割方法被细分为包含垂直分割波峰区域的多种区域,

所述多峰性判定部对于与垂直分割波峰区域对应的波峰,判定是否为多峰性波峰。

15.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述多峰性判定部将主峰或肩峰的高度为规定的阈值以下作为多峰性波峰的条件之一。

16.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述多峰性判定部使用主峰与肩峰的高度的比率、邻接的两个波峰之间的谷的深度与其中任一个波峰的高度的比率、或者所述谷的底部与任一个波峰的顶部之间的宽度中的至少任一个来进行多峰性波峰的判定。

17.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述多峰性判定部计算重叠波峰区域中的信噪比、分离度、对称系数、面积、或波峰宽度中的任一个以上,在多峰性波峰的判定中一并利用此计算结果。

18.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述信号波形是通过色谱仪质量分析所获得的色谱,所述多峰性判定部利用对关于同一成分的定量离子的色谱的判定结果与对确认离子的色谱的判定结果此两者来判定多峰性波峰。

19.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述多峰性判定部在多峰性波峰的判定中利用与目标化合物相关的化合物信息。

20.根据权利要求11所述的波形分析装置,其特征在于,

所述多峰性判定部在多峰性波峰的判定中利用对重叠波峰波形进行平滑处理前后的波形的差异。

21.一种分析装置,其特征在于,包括:

根据权利要求11至20中任一项所述的波形分析装置作为数据分析部,
其中,所述分析装置是色谱仪装置、质量分析装置、光学测定装置中的任一个。

波形分析方法、波形分析装置以及分析装置

技术领域

[0001] 本发明涉及一种对通过分析装置所获取的信号波形进行分析的方法及装置、以及包括此种波形分析装置的分析装置。

背景技术

[0002] 在通过气相色谱仪(gas chromatograph, GC)或液相色谱仪(liquid chromatograph, LC)等分析装置所获取的色谱中,会出现来源于试样中所含的成分的波峰。在配设于此种分析装置的数据装置中,一般通过进行对借助分析获得的色谱的波形处理来检测波峰,并通过对所检测出的多个波峰进行鉴定处理来鉴定目标化合物的波峰。而且,根据所鉴定的波峰的面积或高度,来算出与所述波峰对应的化合物的浓度或含量。

[0003] 迄今为止,作为检测波峰的方法,已有各种方法供实用,但近年来,作为新的波峰检测方法,提出了利用机器学习的方法并已得到实用化(参照专利文献1、非专利文献1)。

[0004] 专利文献1中记载的波形分析方法中,对应于每个参照波形来准备包含通过沿时间轴方向精细地分割波峰部分的位置为已知的参照波形所制作的多个局部波形的组,通过使用大量组的每个参照波形的局部波形的机器学习,来制作对相当于输入波形中所含的波峰部分的局部波形进行确定的学习完毕模型。分析对象波形也与参照波形同样地分割为多个局部波形,使用学习完毕模型来判定所述多个局部波形各自是否为波峰部分。并且,基于所述判定结果来决定分析对象波形中的波峰区域与除此以外的区域。在波峰部分以外,进行使用与波峰开始点、波峰结束点对应的局部波形的机器学习,由此也可在分析对象波形中的多个局部波形中寻找与波峰开始点、波峰结束点对应的局部波形。

[0005] [现有技术文献]

[0006] [专利文献]

[0007] [专利文献1]国际公开第2021/064924号

[0008] [非专利文献]

[0009] [非专利文献1]“Peakintelligence for LCMS LabSolutions LCMS,用于LabSolutions Insight的波形处理可选软件”,[在线],[2023年3月16日检索],岛津制作所股份有限公司,国际互联网<URL:<https://www.an.shimadzu.co.jp/products/liquid-chromatograph-mass-spectrometry/lc-ms-software/peakintelligence/index.html>>

[0010] [非专利文献2]奥拉夫·龙内贝格尔(Olaf Ronneberger)外两名,“U-Net:卷积网络在生物医学图像分割中的应用”,[在线],[2015年5月18日提交],arXiv.org,国际互联网<URL:<https://arxiv.org/pdf/1505.04597.pdf>>

发明内容

[0011] [发明所要解决的问题]

[0012] 在色谱等波形中,经常观测到来源于多个成分的波峰重合。因此,在专利文献1中记载的波形分析方法中,也示出了为了对重叠波峰进行分离而可进行拖尾处理、完全分离、

垂直分割等处理。在利用机器学习的波峰检测中,通过学习各种重叠波峰的波形形状与波峰开始点、结束点等,可判定分析对象的重叠波峰通过哪种分离方法被最适当地分离。

[0013] 在通过气相色谱仪质量分析装置(GC-MS)或液相色谱仪质量分析装置(LC-MS)对成分浓度特别低的样本进行分析而获得的色谱中,来源于目标成分的离子的数量少,因此波峰有时以多峰形状出现。多峰形状的波峰(以下称为“多峰性波峰”)在外观上难以与重叠波峰区分。因此,在以前的使用机器学习的波峰检测法中,存在将多峰性波峰的谷部分判断为波峰的结束点及开始点的情况,此成为波峰误检测的一个因素。

[0014] 本发明的目的在于提供一种波形分析方法及波形分析装置,在利用了机器学习的波峰检测处理中,即便在由于成分浓度特别低等理由而波峰成为多峰形状的情况下,也可减轻是重叠波峰的误判定,准确地识别多峰性波峰。

[0015] [解决问题的技术手段]

[0016] 本发明的波形分析方法的一形态是对作为色谱或光谱的信号波形进行分析的波形分析方法,所述波形分析方法包括:

[0017] 模型制作步骤,通过使用多个组的机器学习,来制作对所输入的波形中所含的波峰部分进行确定的学习完毕模型,所述组包含通过对波峰部分的位置为已知的参照波形进行分割而制作的多个局部波形;

[0018] 区域推测步骤,将分析对象波形分割为多个局部波形,使用所述学习完毕模型来判定所述多个局部波形各自是否为波峰部分,基于所述判定的结果来推测所述分析对象波形中的包含单一波峰区域、重叠波峰区域、及非波峰区域的多个不同种类的区域;以及

[0019] 多峰性判定步骤,对于在所述区域推测步骤中推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰,使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、多个波峰中的邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者所述谷的底部与夹着所述谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一个信息,来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。

[0020] 本发明的波形分析装置的一形态是对作为色谱或光谱的信号波形进行分析的波形分析装置,所述波形分析装置包括:

[0021] 区域推测部,将分析对象波形分割为多个局部波形,使用通过利用了多个如下组,即,包含通过对波峰部分的位置为已知的参照波形进行分割而制作的多个局部波形的组的机器学习所制作的学习完毕模型,判定所述分析对象波形的多个局部波形各自是否为波峰部分,并基于所述判定的结果来推测所述分析对象波形中的包含单一波峰区域、重叠波峰区域、及非波峰区域的多个不同种类的区域;以及

[0022] 多峰性判定部,对于通过所述区域推测部推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰,使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、多个波峰中的邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者所述谷的底部与夹着所述谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一个信息,来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。

[0023] 进而,本发明的分析装置的一形态包括:本发明的波形分析装置的一形态作为数据分析部,其中,分析装置是色谱仪装置、质量分析装置、光学测定装置中的任一个。

[0024] [发明的效果]

[0025] 根据本发明的波形分析方法及波形分析装置的所述形态,即便在通过利用机器学习的波峰检测处理判定为来源于不同成分的波峰重合的重叠波峰的情况下,也可通过在所

述波峰检测处理后实施的波形处理来判定所述重叠波峰是否为来源于一个成分的多峰性波峰,并将此判定结果告知给用户或者无须施以人手而修正重叠波峰的推测结果。由此,例如也包括在成分浓度低的情况下容易出现的多峰性波峰在内,可通过自动化提高波峰检测的精度。

附图说明

[0026] 图1是实施本发明的波形分析方法的分析装置的一实施方式的概略结构图。

[0027] 图2是表示本实施方式的分析装置中的学习完毕模型制作处理的程序的流程图。

[0028] 图3是表示本实施方式的分析装置中的分析对象色谱波形上的波峰检测处理的程序的流程图。

[0029] 图4是表示多峰性波峰的判定处理的一例的波形图。

[0030] 图5是表示多峰性波峰的判定处理的一例的波形图。

[0031] 图6是表示多峰性波峰的判定处理的一例的波形图。

[0032] 图7是用于说明重叠波峰的分割方法的波形图。

[0033] 图8是用于说明多峰性波峰的整合方法的一例的图。

[0034] 图9是用于说明多峰性波峰的整合方法的一例的图。

[0035] [符号的说明]

[0036] 1:LC测定部

[0037] 2:数据分析部

[0038] 20:数据收集部

[0039] 21:波峰检测处理部

[0040] 210:波形预处理部

[0041] 211:判定部

[0042] 212:学习完毕模型存储部

[0043] 213:区域决定部

[0044] 214:多峰性波峰候补提取部

[0045] 215:多峰性波峰判定部

[0046] 216:多峰性波峰整合部

[0047] 22:定性/定量分析部

[0048] 23:结果显示处理部

[0049] 24:输入部

[0050] 25:显示部

[0051] 3:模型制作部

[0052] 30:学习数据存储部

[0053] 31:学习执行部

[0054] 32:模型存储部

具体实施方式

[0055] 本发明的所述形态的波形分析方法及波形分析装置中,信号波形除了包含利用包

含GC-MS的GC装置所获得的色谱、利用包含LC-MS的LC装置所获得的色谱以外,还包含利用电泳装置所获得的电泳图谱(electropherogram)等。在检测器为质量分析装置的GC装置、LC装置中,色谱包含总离子(总离子流(total ion current))色谱、提取离子色谱。而且,光谱包含利用质量分析装置所获得的质谱(尚未实施质心(centroid)处理的轮廓光谱(profile spectrum))、利用飞行时间型质量分析装置所获得的转换为质谱之前的飞行时间光谱、利用分光测定装置或荧光测定装置等光学测定装置所获得的光强度光谱、利用X射线分析装置所获得的X射线强度光谱等。

[0056] 以下,对于包含实施本发明的波形分析方法的波形分析装置的分析装置的一实施方式即LC系统,参照附图进行说明。

[0057] 图1是本实施方式的LC系统A以及制作被用于所述系统的学习完毕模型的系统B的概略结构图。

[0058] 本实施方式中的LC系统A包括LC测定部1、数据分析部2、输入部24及显示部25。虽未图示,但LC测定部1包含输液泵、注射器、管柱、柱温箱、检测器等,对所提供的样本执行LC分析,获取表示利用检测器所获得的信号强度的时间变化的色谱数据。检测器的种类或方式并无特别限定,例如可使用质量分析装置、光电二极管阵列(photo diode array,PDA)检测器等。

[0059] 数据分析部2包含数据收集部20、波峰检测处理部21、定性/定量分析部22、结果显示处理部23等功能块。波峰检测处理部21包含波形预处理部210、判定部211、学习完毕模型存储部212、区域决定部213、多峰性波峰候补提取部214、多峰性波峰判定部215、多峰性波峰整合部216等功能块。

[0060] 在数据分析部2中,数据收集部20收集利用LC测定部1所获得的色谱数据并对其进行存储。波峰检测处理部21根据利用输入部24从用户接受的指示,在包含所收集的色谱数据的色谱波形中自动检测波峰,并输出包含所检测出的波峰的开始位置及结束位置(保持时间)、波峰区域的范围等的波峰信息。定性/定量分析部22基于从波峰检测处理部21提供的波峰信息,鉴定与各波峰对应的成分(化合物),或者计算波峰高度值或波峰面积值,并根据此值来算出各成分的浓度或含量即定量值。结果显示处理部23将波峰检测结果或基于此算出的定量值等计算值以规定的形式显示于显示部25。

[0061] 一般而言,数据分析部2的实体是安装有规定软件(计算机程序)的个人计算机或性能更高的工作站、或者包含经由通信线路而与此种计算机连接的高性能计算机的计算机系统。即,数据分析部2中所含的各区块的功能是通过利用所述计算机来执行在单个计算机或包含多个计算机的计算机系统中搭载的软件而具现化。当然,也可使用数字信号处理器等专为特定运算设计的硬件电路来执行这些功能中的一部分。

[0062] 所述计算机程序例如可保存在只读光盘(Compact Disc Read Only Memory,CD-ROM)、只读数字多功能光盘(Digital Versatile Disc Read Only Memory,DVD-ROM)、存储卡、通用串行总线(Universal Serial Bus,USB)存储器(软件狗(dongle))等计算机可读的非暂时性的存储介质中提供给用户。而且,所述程序也可以经由国际互联网等通信线路的数据传输的形式提供给用户。再进而,所述程序也可在用户购入系统的时间点预先安装在作为系统的一部分的计算机(严格而言,是作为计算机的一部分的存储装置)中。

[0063] 图1中,独立于LC系统A而设的系统B包含模型制作部3,模型制作部3包含学习数据

存储部30、学习执行部31及模型存储部32作为功能块。在所述模型制作部3中制作的学习完毕模型被保存在LC系统A的数据分析部2中的学习完毕模型存储部212中。

[0064] 详情将后述,但一般而言,制作学习完毕模型的作业需要庞大的计算量。因此,系统B的实体为高性能计算机,通过利用所述计算机来执行安装在所述计算机中的软件,从而各区块的功能得以具现化。当然,也可使系统B与LC系统A一体化。

[0065] 接下来,对以数据分析部2的波峰检测处理部21为中心而执行的波峰检测处理进行说明。

[0066] 极概而言之,在波峰检测处理部21中,在将包含色谱数据的色谱波形图像化后,使用基于对位于图像上的物体的类别(category)及位置进行检测的机器学习的一种方法即深度学习(Deep Learning)的语义分割方法,由此来检测后述的多种区域各自的位置或范围。

[0067] [学习完毕模型的制作]

[0068] 如同广为人知的那样,在机器学习法中,必须使用大量的学习数据(训练数据及验证数据)来预先构建学习完毕模型。如上所述,所述学习完毕模型的构建作业并非在作为LC系统A的一部分的数据分析部2中进行,而是由包含其他计算机系统的模型制作部3来实施,并将其结果保存至学习完毕模型存储部212。图2是表示在模型制作部3中实施的学习完毕模型制作处理的概略程序的流程图。

[0069] 在制作学习完毕模型时,首先准备基于参照波形的学习数据(步骤S1)。此处,使用大量的多种多样的色谱波形来作为参照波形。此处所说的多种多样的色谱波形,优选为是指包含下述要素的色谱波形,即,实际实施波峰检测时的色谱波形中有可能出现的各种的噪声的混入、基线的变动(漂移)、多个波峰的重合或者波峰形状的变形等。但是,所述色谱波形数据也可为通过模拟制作的数据,而非通过实际的LC分析所收集的数据。

[0070] 对作为参照波形的色谱波形预先实施波峰检测,对于所述波形上的一个或多个波峰准确地求出开始点及结束点。所述色谱波形是以信号强度即图表中的纵轴经标准化的状态而图像化,进而沿横轴即时间轴方向分割为规定数的局部波形。所述分割数被规定为,各局部波形的宽度(时间轴方向的长度)至少小于波峰宽度。因而,分割数可根据所设想的波峰宽度的最小值来适当设定。

[0071] 一个色谱波形包含大量的局部波形。对于构成各局部波形的数据,关联有表示所述局部波形相当于多种区域的哪个区域的特性信息。此处,所谓所述多种区域,是指如下七种:与色谱波形上的波峰部分对应且所述波峰为无其他波峰重合的单一波峰的单一波峰区域、与色谱波形上的波峰部分对应且所述波峰与其他波峰重合而适合进行拖尾处理作为波峰的分割方法的拖尾处理波峰区域、与色谱波形上的波峰部分对应且所述波峰与其他波峰重合而适合进行完全分离作为波峰的分割方法的完全分离波峰区域、与色谱波形上的波峰部分对应且所述波峰与其他波峰重合而适合进行垂直分割作为波峰的分割方法的垂直分割波峰区域、包含波峰的开始点的波峰开始区域、包含波峰的结束点的波峰结束区域、并非波峰部分(通常为基线)的非波峰区域。另外,由于拖尾处理波峰区域、完全分离波峰区域、及垂直分割波峰区域是多个波峰重合的区域,因此将它们合在一起称为重叠波峰区域。

[0072] 此处,通过图7对波峰的分割方法进行简单说明。

[0073] 所谓拖尾处理,如图7的(A)所示,是将作为对象的重叠波峰的开始点直至结束点

为止设为一个波峰,以使另一个波峰重合于此波峰上的形式分割为两个波峰的方法。所谓完全分离,如图7的(B)所示,是依序以直线连结作为对象的重叠波峰的开始点、极小点、及结束点而分离为两个波峰的方法。所谓垂直分割,如图7的(C)所示,是利用通过作为对象的重叠波峰的极小点的垂线来分离两个波峰的方法。这些方法不限于使用机器学习的波峰检测法,而是在以前的一般的波峰检测中使用的方法。

[0074] 在拖尾处理中,关于两个波峰的开始点与结束点,从保持时间短的一侧开始,依序存在第一个波峰开始点与第二个波峰开始点,在其后依序存在第一个波峰结束点与第二个波峰结束点。另一方面,在完全分离或垂直分割中,从保持时间短的一侧开始,依序存在第一个波峰开始点与结束点,继而依序存在第二个波峰开始点与结束点。另外,除了通过这些分割方法以外,有时也通过使用高斯函数等模型函数的拟合来分离波峰。

[0075] 为了分类为如上所述的七种区域,作为参照波形,准备包含单一波峰的参照波形、包含通过拖尾处理、完全分离、垂直分割的各个方法进行了波峰分离的重叠波峰的参照波形,准备多组包含通过对所述参照波形进行分割而制作的多个局部波形的每个参照波形的组。在各局部波形中分别附加表示与哪个区域对应的特性信息。在学习数据存储部30中,汇总存储有分别构成大量色谱波形的局部波形数据和与其关联的特性信息。另外,学习数据也可预先分为训练用数据与验证用数据,还可不进行此种划分而在学习执行时适当地作为训练用数据或验证用数据的任一种来使用。

[0076] 当指示学习模型的制作开始时,学习执行部31准备未学习的学习模型(步骤S2)。对于所述学习模型,可使用能够执行语义分割的各种模型。语义分割一般被用来对包含二维分布的像素数据的图像进行分析,此处被适用于包含沿着时间轴呈一维排列的数据的色谱的波形分析。作为能够执行语义分割的学习模型,此处使用U-Net(参照非专利文献2),但也可为SeGNet、PSPNet等其他学习模型。

[0077] 接下来,学习执行部31从学习数据存储部30中读取学习数据(局部波形数据及特性信息)(步骤S3)。学习执行部31实施使用所读取的学习数据的机器学习,构建用于推测所提供的局部波形相当于哪个区域的学习模型(步骤S4)。此处,不对此学习程序进行详述,但例如可依据专利文献1所记载的程序来构建学习完毕模型。

[0078] 模型存储部32保存通过使用大量学习数据的机器学习所制作的学习完毕模型(步骤S5)。保存于模型存储部32中的学习完毕模型例如经由通信线路传输至LC系统A中的学习完毕模型存储部212中予以保存。

[0079] [针对分析对象波形的波峰检测处理]

[0080] 接下来说明由LC系统A中的数据分析部2所执行的、对目标样本所获得的色谱波形上的波峰检测处理。图3是表示在波峰检测处理部21中进行的波峰检测处理的概略流程的流程图。

[0081] 首先,波形预处理部210从数据收集部20中读取作为分析对象的色谱波形数据(步骤S11)。波形预处理部210对所读取的数据的信号强度进行标准化后将其图像化,进而将经图像化的色谱波形沿横轴(时间轴)方向分割为规定数的局部波形(步骤S12)。所述分割数也可与所述学习数据中的分割数相同,但只要局部波形的宽度小于波峰宽度,则也可不同的数。

[0082] 继而,判定部211从学习完毕模型存储部212中读出学习完毕模型,并将局部波形

依次输入至所述学习完毕模型。学习完毕模型判定所输入的局部波形是否相当于单一波峰区域、拖尾处理波峰区域、完全分离波峰区域、垂直分割波峰区域、波峰开始区域、波峰结束区域、非波峰区域此七种的各区域。具体而言,此处,判定部211使用学习完毕模型,针对每个局部波形而将表示相当于各区域的可能性的准确度信息算出为数值(步骤S13)。所述准确度的数值越高,则表示所述局部波形为所述区域的可能性越高。这样,从判定部211,关于构成所输入的色谱波形的所有局部波形,分别以赋予有单一波峰区域、波峰开始区域等各区域中的准确度信息的状态予以输出。

[0083] 区域决定部213接受来自判定部211的输出,针对每个局部波形而将表示最高准确度的区域判断为与此局部波形对应的区域,以决定相当于各局部波形的区域的种类(步骤S14)。由此,将构成色谱波形整体的所有局部波形分类为任一个区域。

[0084] 通常,虽通过使用学习完毕模型的判定相当准确地检测出色谱上的波峰,但来源于一个成分(化合物)的波峰分割为多个的多峰性波峰在外观上与重叠波峰类似,因此有时会将多峰性波峰误判定为重叠波峰。在本实施方式的系统中,为了提高波峰的检测精度,作为使用了机器学习的所述那样的判定的后处理,具有判定是否为多峰性波峰,在多峰性波峰的情况下将其整合修正为一个波峰的功能。

[0085] 例如在使用质量分析装置作为检测器的情况下,样本中的成分浓度低时容易出现多峰性波峰。这是因为,当成分浓度低时,在质量分析装置的离子源中生成的离子的数量原本就少,因此所述装置中的离子生成效率或通过效率、检测效率的变动等的影响容易显著地表现在检测信号的变动中。而且,所述波峰波形形状容易成为原本为一个的波峰的一部分缺损的(凹陷的)形状。因此,在步骤S13、步骤S14中误判定为拖尾处理波峰区域或完全分离波峰区域的情况少,大多有误判定为垂直分割波峰区域的倾向。

[0086] 因此,首先多峰性波峰候补提取部214接受区域决定部213的区域的决定结果,提取被判定为垂直分割波峰区域的波峰部分(通常是连续的多个局部波形)。进而,在提取后的各个波峰部分中,判定肩峰(搭乘在波高值比其他波峰大的波峰的下摆的波峰)的高度(垂直分割中的基线至峰顶(peak top)为止的高度)是否为规定的阈值以下,提取包含所述阈值以下的肩峰的波峰部分作为多峰性波峰候补(步骤S15)。后者是为了提取与浓度在一定程度上低的成分对应的波峰。

[0087] 接下来,多峰性波峰判定部215对多峰性波峰候补分别判定是否同时满足以下的三个条件,将满足三个条件的波峰判断为多峰性波峰(步骤S16)。

[0088] <条件1> 在一个多峰性波峰中,肩峰Ps的高度Hs为最高的主峰Pm的高度Hm的一定比率T以下(参照图4)。此处,比率T可适当决定,例如可规定为60%~95%左右的范围,作为一例可设为90%。

[0089] <条件2> 在时间方向即横轴上邻接的两个波峰之间的谷的深度为其中一个波峰的高度的一定比率以下。此处,如图5所示,判定主峰Pm与肩峰Ps之间的谷的深度(谷的底部与肩峰Ps的峰顶的高度的差)V是否为肩峰Ps的高度Hs的一定比率M以下。所述比率M也可适当决定,例如可规定为5%~30%左右的范围,作为一例可设为10%。

[0090] <条件3> 在所述条件2中的谷的底部与任一个的波峰(此处为肩峰Ps)的峰顶之间的时间W获得的数据点数为规定的阈值N以下(参照图6)。所述阈值N也可适当决定,例如可规定为3~10左右的范围,作为一例可设为5。

[0091] 在检测器为质量分析装置的情况下,如上所述由于所述装置中的离子的生成效率、通过效率等的变动,大多因检测出的离子数暂时减少而出现多峰性波峰。因此,在多峰性波峰中多个波峰的高度为相同程度的情况少。因此,通过施加条件1,可提取多个波峰的高度在一定程度以上存在差异的波峰。另外,在大多数情况下,在多峰性波峰中多个波峰之间的信号强度的下降小。因此,通过施加条件2,可提取多个波峰之间的信号强度的下降小的波峰。另外,通常由所述因素引起的信号强度的下降突然发生,并且其恢复也迅速。因此,通过施加条件3,可提取多个波峰之间的信号强度的下降或其恢复突然发生的波峰。

[0092] 另外,所述条件1~条件3可仅为任一个或两个,但优选为宜三个均施加。而且,若为可利用波峰的高度、多个波峰之间的谷的深度、谷的底部与峰顶之间的时间中的至少任一个来捕捉所述特征的方法,则可利用此处采用的以外的方法。

[0093] 作为所述条件1~条件3中的判定基准的T、M、N的各值也可由用户从输入部24变更。

[0094] 继而,多峰性波峰整合部216对判定为多峰性波峰的波峰执行将多个波峰整合为一个的处理(步骤S17)。作为对多个波峰进行整合的方法,可采用各种方法。

[0095] 图8是表示整合处理的一例的图。在图8所示的波峰在步骤S14中判定为垂直分割波峰的情况下,通常如图8所示,按照保持时间的顺序,处于按照波峰开始区域→垂直分割波峰区域→波峰结束区域→波峰开始区域→垂直分割波峰区域→波峰结束区域来决定区域的状态。现在,若在步骤S16中判定为所述波峰为多峰性波峰,则多峰性波峰整合部216删除两个垂直分割波峰区域所夹着的波峰开始区域及波峰结束区域,将第一个波峰开始区域与第二个波峰结束区域之间全部置换为单一波峰区域(参照图8)。结果,虽然波峰形状本身看起来是重叠波峰,但所述波峰被作为单一波峰来处理,看到所述波峰的用户可识别到其为来源于一个成分的多峰性波峰。

[0096] 当然,在波峰整合处理中,不限于区域的变更,如图9所示,例如也可通过平滑处理等适当的波形处理对波峰波形进行整形。

[0097] 在这样根据需要进行了多峰性波峰的整合处理后,结果显示处理部23将波峰检测处理部21所得出的波峰检测结果显示于显示部25的画面上(步骤S18)。而且,在为基于波峰检测结果而自动地执行定性分析的设定的情况下,定性/定量分析部22针对所检测出的每个波峰而求出例如如此波峰的峰顶的保持时间,并基于所述保持时间来确定与所述波峰对应的成分。而且,在为基于波峰检测结果而自动地执行定量分析的设定的情况下,定性/定量分析部22针对所检测出的每个波峰而求出波峰面积值或高度值,将所述面积值或高度值对照预先制作的检量线而计算与所述波峰对应的成分的浓度(含量)。结果显示处理部23将这样的定性分析或定量分析的结果与波峰检测结果一同显示于显示部25的画面上。

[0098] 如上所述,本实施方式的LC系统中,在使用机器学习自动地检测出的波峰中将多峰性波峰误判定为重叠波峰的情况下,可对此进行检测,根据需要准确地对波峰信息等进行修正而提供给用户。

[0099] 另外,所述说明中,自动地实施针对判定为多峰性的波峰的整合处理,但也存在下述情况,即,在用户确认是否真正为多峰性的基础上,根据需要实施整合处理或除此以外的处理。因此,也可并非自动地进行整合处理,而是在多峰性波峰判定部215中判定为多峰性波峰的情况下将所述波峰波形首先显示于显示部25,由此来通知给用户。并且,也可根据确

认了此结果的用户的指示来实施波峰整合处理,或者删除多峰性波峰的判定结果而作为重叠波峰进行处理。

[0100] 接下来对若干个优选的附加结构进行说明。以下说明的结构可与所述实施方式中说明的结构适当组合。而且,只要未进行相反的处理,则也可将多个附加结构加以组合。

[0101] 例如在所述实施方式中,对于被判定为作为重叠波峰之一的垂直分割波峰的具有多个顶部的波峰,基于波峰的高度、多个波峰之间的谷的深度、或者谷的底部与波峰的顶部之间的宽度等反映了波形形状的信息,判定是否为多峰性波峰。进而,也可参照其他信息来进行是否为多峰性波峰的判定。

[0102] 具体而言,也可计算垂直分割波峰区域中的信噪(signal noise, SN)比、分离度、对称系数、面积、或波峰宽度等反映了波峰的形状或特性等的数值信息,将所述数值超过或低于规定的阈值作为判定为多峰性波峰的条件之一。

[0103] 例如,如上所述,在成分浓度低的情况下容易出现多峰性波峰,在所述情况下,即便为波峰,SN比也大多较低。因此,也可判定根据垂直分割波峰区域与非波峰区域中的信号强度算出的SN比是否超过规定的阈值,在超过的情况下判定为并非为多峰性波峰。

[0104] 而且,对称系数是表示波峰的左右对称性的指标,例如在大于1的情况下为拖尾波峰。对于原本已知波峰的左右对称性差的化合物,在检测出的波峰的对称系数高的情况下,设想在所述波峰的拖尾部分产生的未分离波峰为来源于一个成分而非来源于其他成分的波峰的可能性高。因此,对于此种波峰,也能够利用对称系数作为判定为多峰性波峰并进行整合的判断基准。

[0105] 在质量分析装置中,通常能够观察由一个成分生成的 m/z 值不同的多种离子(它们被称作定量离子、确认离子)。因此,在GC-MS或LC-MS中,可针对相同的成分来制作定量离子的提取离子色谱与一个以上的确认离子的提取离子色谱。由于它们是来源于相同成分的色谱,因此波形应为相似形状。因此,也能够对关于同一成分的定量离子的色谱中的区域推测结果与确认离子的色谱中的区域推测结果进行比较,在多峰性波峰的判定中利用此比较结果。

[0106] 例如,即便在针对定量离子的色谱的波峰判定结果与针对同一成分的确认离子的色谱的波峰判定结果中的任一者中判定为多峰性波峰的情况下,在另一者中判定为并非多峰性波峰的情况下,也可修正被判定为多峰性波峰的结果。

[0107] 而且,也可附加地利用可事先知晓的、与样本中的目标化合物相关的化合物信息作为多峰性波峰判定时的条件。此处所说的化合物信息,例如除了包含化合物的浓度以外,还包含在化合物中是否存在异构体等的结构性信息、是否存在预处理的过程等中生成的衍生物等的信息。

[0108] 在质量分析装置中,存在根据化合物的特性容易离子化的物质与难以离子化的物质,因此即便是相同的浓度,也可存在根据化合物的种类而其波峰容易成为多峰形状的物质与难以成为多峰形状的物质。因此,也能够根据化合物的种类,施加变更多峰性波峰的判定基准等处理。

[0109] 而且,作为化合物信息而已知存在异构体的情况下,异构体彼此即便分子量相同,由于结构的不同等而在色谱上波峰多产生时间上的偏离。因此,对于被推测为与此目标化合物对应的波峰,能够判定是多峰性波峰的可能性低。

[0110] 而且,在实施基于规定的算法的平滑处理的情况下,在多峰性波峰与原本的垂直分割波峰(及除此以外的重叠波峰)中,有时在平滑处理前后的波形形状的差异的大小或出现方式的方面会产生明确的差异。因此,也能够多峰性波峰的判定中利用所述差异的大小或出现方式的差异。

[0111] 另外,关于所述的多峰性波峰为对象的波形分析处理,不仅可对测定未知样本而获得的色谱进行,而且也可对测定浓度已知的标准样本或不包含目标成分的空白样本而获得的色谱同样地进行。

[0112] 如此,在本实施方式的LC系统中,反映了所获取的波峰的波形形状的信息自不必说,组合除此以外的各种附加信息,由此可提高多峰性波峰的判定精度。由此,可向用户提供准确度更高的波峰信息。

[0113] 所述实施方式或变形例均为一例,可按照本发明的主旨来适当变更。在所述实施方式中,采用了将进行波峰检测的波形分析装置装入至与测定部相同的LC系统A的一部分的结构,但可构成为与LC系统A独立的波形分析装置。此时,只要可读取由LC测定部1预先获取的色谱数据来进行分析即可。

[0114] 而且,在所述实施方式中,以处理色谱波形的情况为例进行了说明,但明确的是,本发明能够适用于利用电泳装置所获得的电泳图谱、利用质量分析装置所获得的质谱(轮廓光谱)、利用分光测定装置所获得的分光光谱、利用荧光测定装置所获得的荧光光谱、利用X射线分析装置所获得的X射线强度光谱等利用各种分析装置所获得的、信号强度可对应于规定参数值的变化而变化的信号波形的波形分析中。

[0115] [各种形态]

[0116] 本领域技术人员当理解,所述例示性的实施方式为以下形态的具体例。

[0117] (第一项)本发明的波形分析方法的一形态是对作为色谱或光谱的信号波形进行分析的波形分析方法,所述波形分析方法包括:

[0118] 模型制作步骤,通过使用多个组的机器学习,来制作对所输入的波形中所含的波峰部分进行确定的学习完毕模型,所述组包含通过对波峰部分的位置为已知的参照波形进行分割而制作的多个局部波形;

[0119] 区域推测步骤,将分析对象波形分割为多个局部波形,使用所述学习完毕模型来判定所述多个局部波形各自是否为波峰部分,基于所述判定的结果来推测所述分析对象波形中的包含单一波峰区域、重叠波峰区域、及非波峰区域的多个不同种类的区域;以及

[0120] 多峰性判定步骤,对于在所述区域推测步骤中推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰,使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、多个波峰中的邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者所述谷的底部与夹着所述谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一个信息,来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。

[0121] (第十一项)本发明的波形分析装置的一形态是对作为色谱或光谱的信号波形进行分析的波形分析装置,所述波形分析装置包括:

[0122] 区域推测部,将分析对象波形分割为多个局部波形,使用通过利用了多个如下组,即,包含通过对波峰部分的位置为已知的参照波形进行分割而制作的多个局部波形的组的机器学习所制作的学习完毕模型,判定所述分析对象波形的多个局部波形各自是否为波峰部分,并基于所述判定的结果来推测所述分析对象波形中的包含单一波峰区域、重叠波峰

区域、及非波峰区域的多个不同种类的区域;以及

[0123] 多峰性判定部,对于通过所述区域推测部推测为重叠波峰区域的区域中所含的重叠波峰,使用多个波峰中的任一个或多个波峰的高度、多个波峰中的邻接的两个波峰之间的谷的深度、或者所述谷的底部与夹着所述谷的一个波峰的顶部之间的横轴方向的宽度中的至少任一个信息,来判定是否为基于一个成分的多峰性波峰。

[0124] 根据第一项所述的波形分析方法及第十一项所述的波形分析装置,即便在通过利用机器学习的波峰检测处理判定为来源于不同成分的波峰重合的重叠波峰的情况下,也可通过在所述波峰检测处理后实施的波形处理来判定所述重叠波峰是否为来源于一个成分的多峰性波峰,并将此判定结果告知给用户或者无须施以人手而修正重叠波峰的推测结果。由此,例如也包括在成分浓度低的情况下容易出现的多峰性波峰在内,可通过自动化提高波峰检测的精度。

[0125] (第二项) 第一项所述的波形分析方法中,可还包括:整合步骤,在所述多峰性判定步骤中判定为多峰性波峰的情况下,对所述多峰性波峰以作为单一波峰来处理的方式进行整合。

[0126] (第十二项) 而且第十一项所述的波形分析装置可还包括:整合部,在通过所述多峰性判定部判定为多峰性波峰的情况下,对所述多峰性波峰以作为单一波峰来处理的方式进行整合。

[0127] 根据第二项所述的波形分析方法及第十二项所述的波形分析装置,即便在通过利用机器学习的波峰检测误判定为重叠波峰的情况下,也可将所述波峰作为原本的单一波峰向用户提供波峰信息。

[0128] (第三项) 第二项所述的波形分析方法中,可根据用户的选择,来切换是否执行基于所述整合步骤的整合。

[0129] (第十三项) 而且第十二项所述的波形分析装置可还包括:操作部,接受用以切换是否执行利用所述整合部的整合的由用户进行的选择操作。

[0130] 根据第三项所述的波形分析方法及第十三项所述的波形分析装置,用户可决定是否修正使用了关于判定为多峰性波峰的波峰的学习完毕模型的推测结果。由此,例如对于判定为多峰性波峰的波峰,用户自身目视确认波形形状,进而考虑除此以外的各种信息,判断多峰性波峰的判定结果是否正确,结果,可对多峰性波峰进行整合或者不进行整合而保持原样。

[0131] (第四项) 第一项至第三项中任一项所述的波形分析方法中,可为:所述重叠波峰区域根据重叠波峰的分割方法被细分为包含垂直分割波峰区域的多种区域,在所述多峰性判定步骤中,对于与垂直分割波峰区域对应的波峰,判定是否为多峰性波峰。

[0132] (第十四项) 而且第十一项至第十三项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述重叠波峰区域根据重叠波峰的分割方法被细分为包含垂直分割波峰区域的多种区域,所述多峰性判定部对于与垂直分割波峰区域对应的波峰,判定是否为多峰性波峰。

[0133] 此处所说的重叠波峰的分割方法除了包含垂直分割以外,还包含例如拖尾处理、完全分离等。来源于一个成分的波峰被分为多个而产生的多峰性波峰大多在信号强度最大的主峰附近观测到信号强度较高的肩峰,容易被误判定为垂直分割波峰。根据第四项所述的波形分析方法及第十四项所述的波形分析装置,可在将多峰性波峰的可能性低的重叠波

峰除外后进行是否为多峰性波峰的判定,因此可提高多峰性波峰的判定的准确性。

[0134] (第五项) 第一项至第四项中任一项所述的波形分析方法中,可为:在所述多峰性判定步骤中,将主峰或肩峰的高度为规定的阈值以下作为多峰性波峰的条件之一。

[0135] (第十五项) 第十一项至第十四项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述多峰性判定部将主峰或肩峰的高度为规定的阈值以下作为多峰性波峰的条件之一。

[0136] 另外,在样本中所含的成分的浓度较低的情况下,即在色谱中波峰的高度低的情况下容易产生多峰性波峰。根据第五项所述的波形分析方法及第十五项所述的波形分析装置,在聚焦于浓度较低的成分之后进行多峰性波峰的判定,因此可进一步提高多峰性波峰的判定的准确性。

[0137] (第六项) 第一项至第五项中任一项所述的波形分析方法中,可为:在所述多峰性判定步骤中,使用主峰与肩峰的高度的比率、邻接的两个波峰之间的谷的深度与其中任一个波峰的高度的比率、或者所述谷的底部与任一个波峰的顶部之间的宽度中的至少任一个来进行多峰性波峰的判定。

[0138] (第十六项) 第十一项至第十五项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述多峰性判定部使用主峰与肩峰的高度的比率、邻接的两个波峰之间的谷的深度与其中任一个波峰的高度的比率、或者所述谷的底部与任一个波峰的顶部之间的宽度中的至少任一个来进行多峰性波峰的判定。

[0139] 根据第六项所述的波形分析方法及第十六项所述的波形分析装置,可更准确地识别多峰性波峰。

[0140] (第七项) 第一项至第六项中任一项所述的波形分析方法中,可为:在所述多峰性判定步骤中,计算重叠波峰区域中的信噪比、分离度、对称系数、面积、或波峰宽度中的任一个以上,在多峰性波峰的判定中一并利用此计算结果。

[0141] (第十七项) 第十一项至第十六项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述多峰性判定部计算重叠波峰区域中的信噪比、分离度、对称系数、面积、或波峰宽度中的任一个以上,在多峰性波峰的判定中一并利用此计算结果。

[0142] 根据第七项所述的波形分析方法及第十七项所述的波形分析装置,可利用波峰的高度或谷的深度以外的反映了波形的形状的特征的信息,提高多峰性波峰的判定精度。

[0143] (第八项) 第一项至第七项中任一项所述的波形分析方法中,可为:所述信号波形是通过色谱仪质量分析所获得的色谱,在所述多峰性判定步骤中,利用对关于同一成分的定量离子的色谱的判定结果与对确认离子的色谱的判定结果此两者来判定多峰性波峰。

[0144] (第十八项) 第十一项至第十七项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述信号波形是通过色谱仪质量分析所获得的色谱,所述多峰性判定部利用对关于同一成分的定量离子的色谱的判定结果与对确认离子的色谱的判定结果此两者来判定多峰性波峰。

[0145] 对于来源于同一成分的定量离子与确认离子,在提取离子色谱中应出现形状大致相似的波峰。因此,根据第八项所述的波形分析方法及第十八项所述的波形分析装置,例如即便在因某因素而在其中一个色谱中未能适当地检测出波峰的情况下,也可利用另一个色谱中的波峰检测结果来获得精度高的波峰信息。

[0146] (第九项) 第一项至第八项中任一项所述的波形分析方法中,可为:在所述多峰性判定步骤中,在多峰性波峰的判定中利用与目标化合物相关的化合物信息。

[0147] (第十九项) 第十一项至第十八项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述多峰性判定部在多峰性波峰的判定中利用与目标化合物相关的化合物信息。

[0148] 此处所说的“化合物信息”,除了包含浓度值等所述样本中所含的化合物自身的信息以外,例如还可包含所述化合物的异构体的信息、通过预处理等生成的衍生物的信息等。

[0149] 如上所述,在样本中的成分浓度低的情况下,来源于所述成分的波峰容易成为多峰形状。因此,例如若浓度值作为化合物信息已知,则通过仅在所述浓度值低于规定的阈值的情况下实施多峰性波峰的判定等,可避免徒劳地进行多峰性波峰判定,同时提高多峰性的判定的精度。

[0150] (第十项) 第一项至第九项中任一项所述的波形分析方法中,可为:在所述多峰性判定步骤中,在多峰性波峰的判定中利用对重叠波峰波形进行平滑处理前后的波形的差异。

[0151] (第二十项) 第十一项至第十九项中任一项所述的波形分析装置中,可为:所述多峰性判定部在多峰性波峰的判定中利用对重叠波峰波形进行平滑处理前后的波形的差异。

[0152] 根据第十项所述的波形分析方法及第二十项所述的波形分析装置,可识别因平滑而产生形状变化的程度小的多峰形状的波峰,由此可更准确地判别多峰性波峰。

[0153] (第二十一项) 而且,本发明的分析装置的一形态可设为包括根据第十一项至第二十项中任一项所述的波形分析装置作为数据分析部的色谱仪装置、质量分析装置、光学测定装置中的任一个。

[0154] 根据第二十一项所述的分析装置,可利用精度高的波峰信息来达成高的定性性能或定量性能。

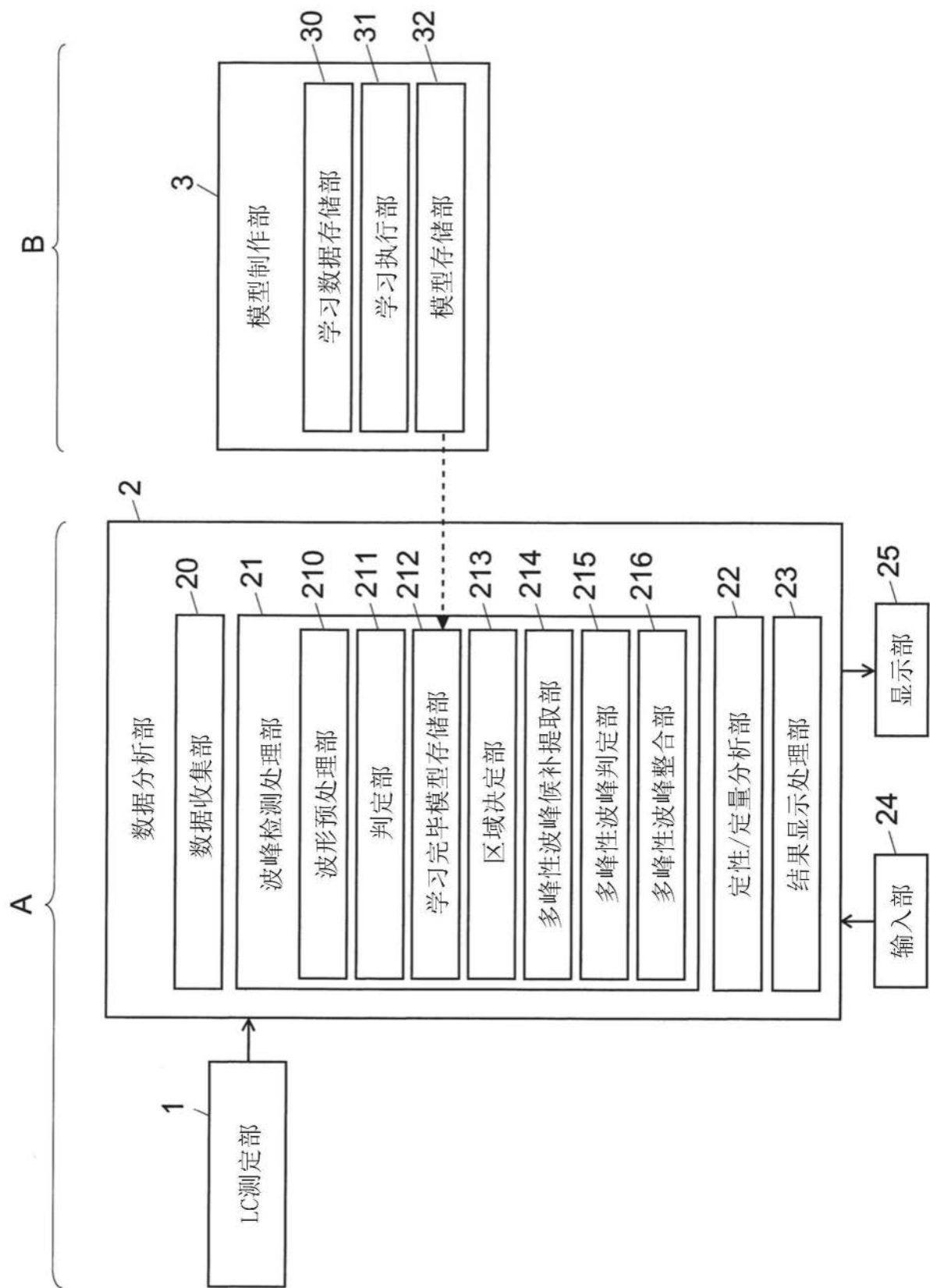


图1

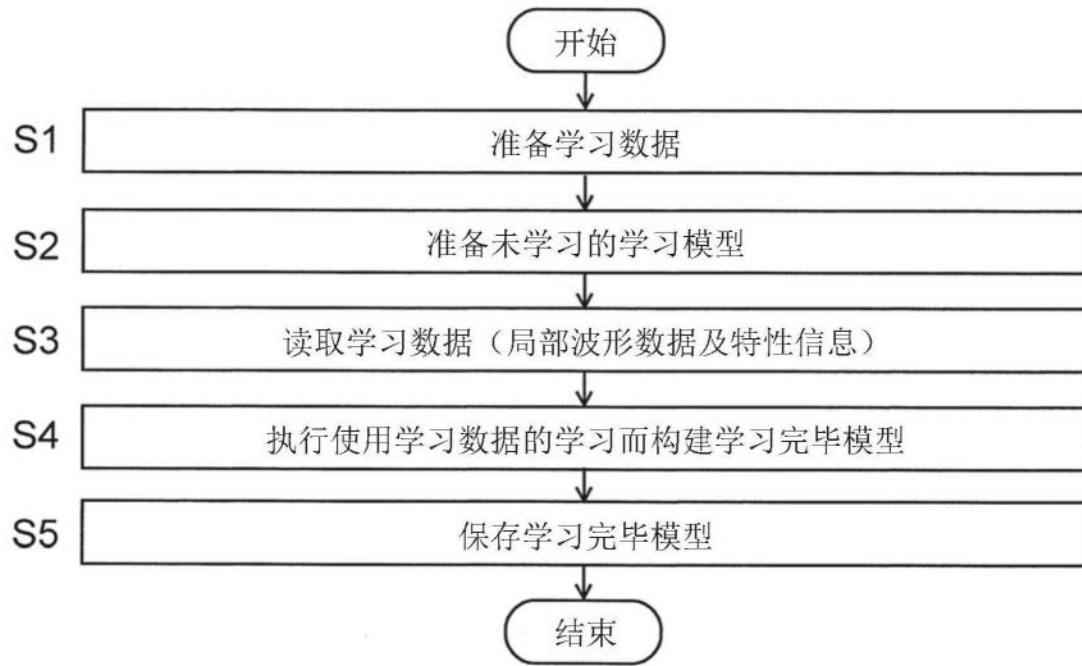


图2

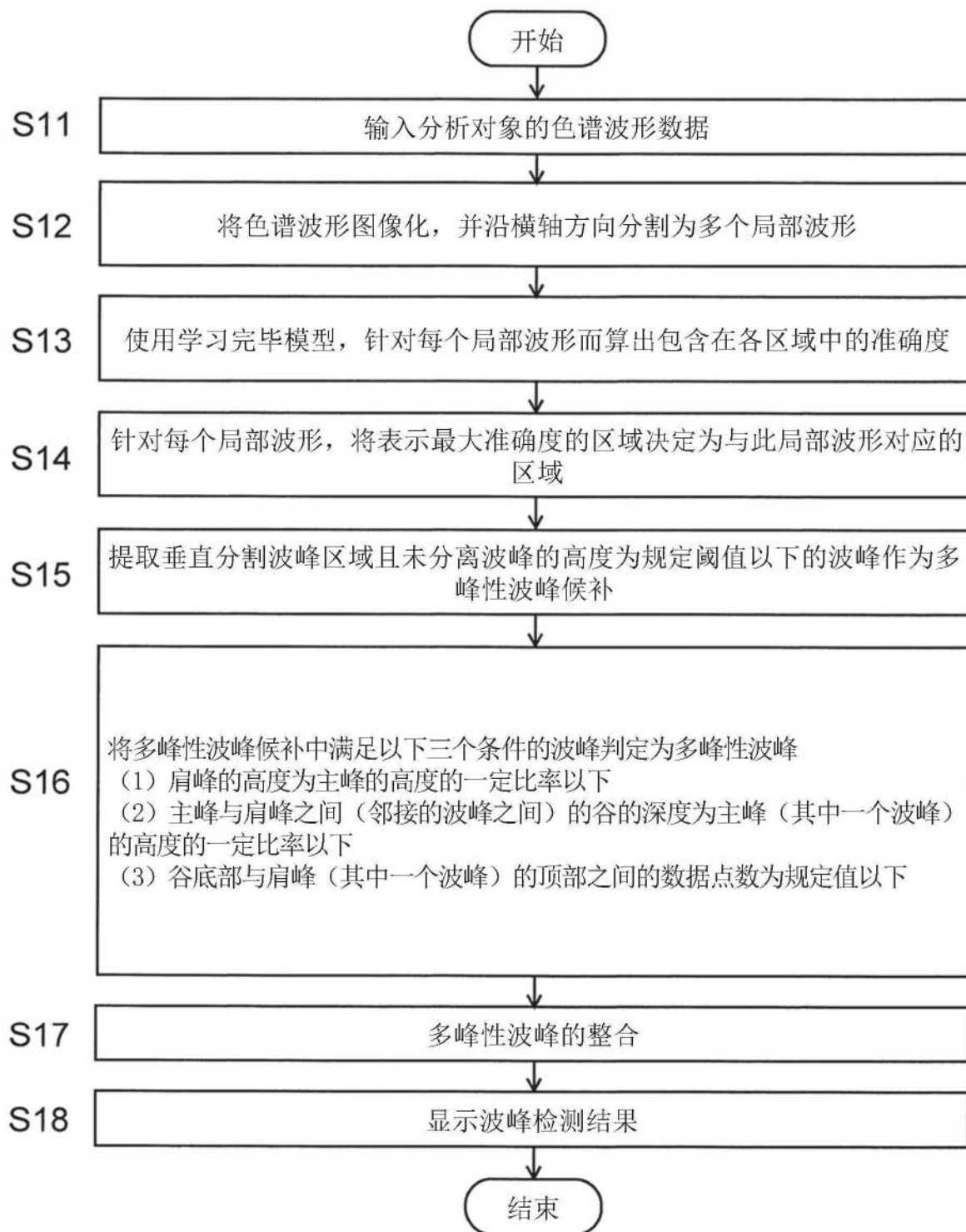


图3

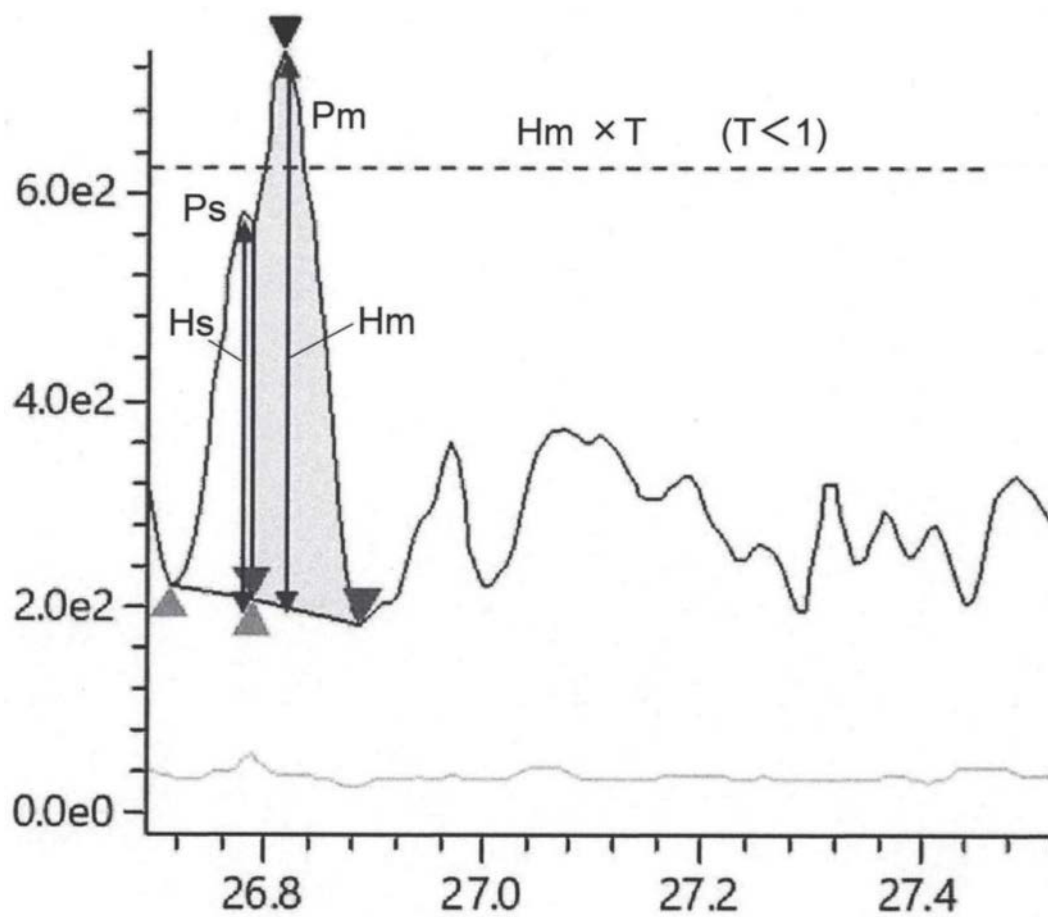


图4

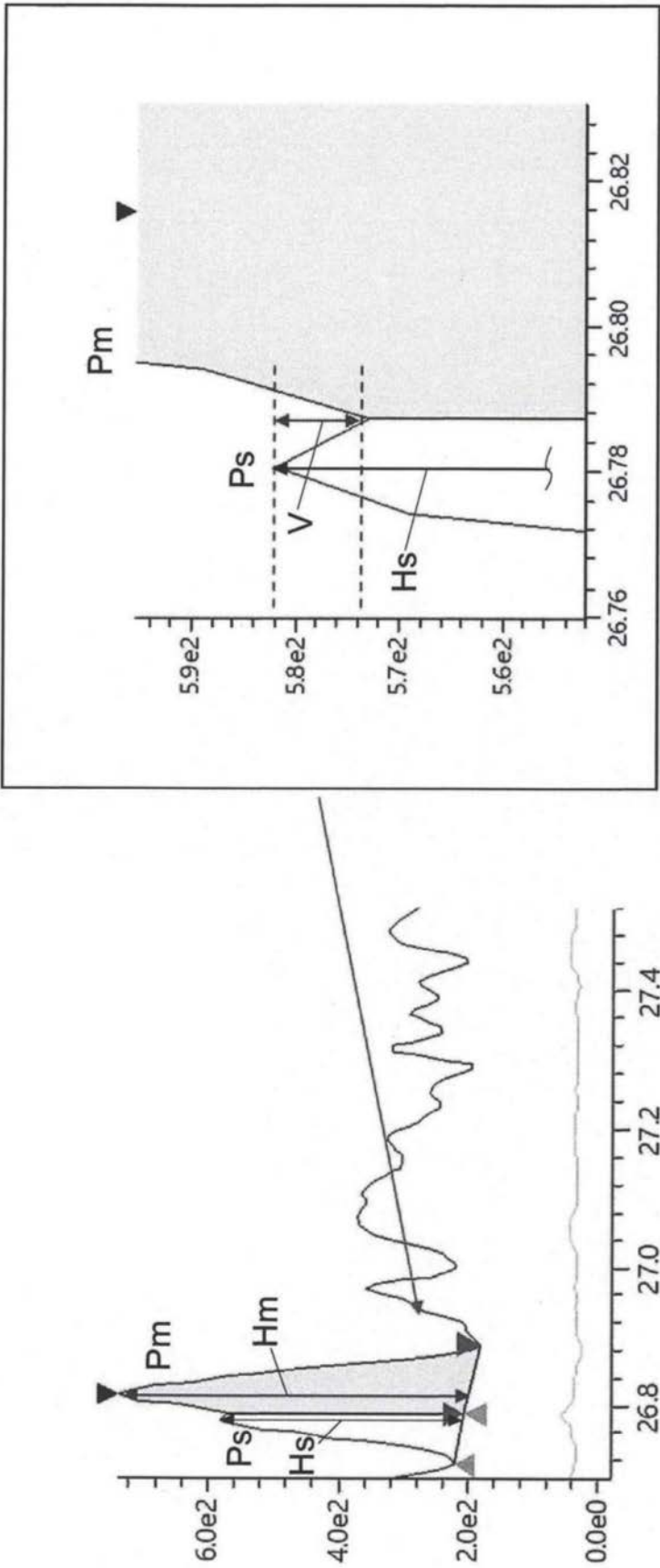


图5

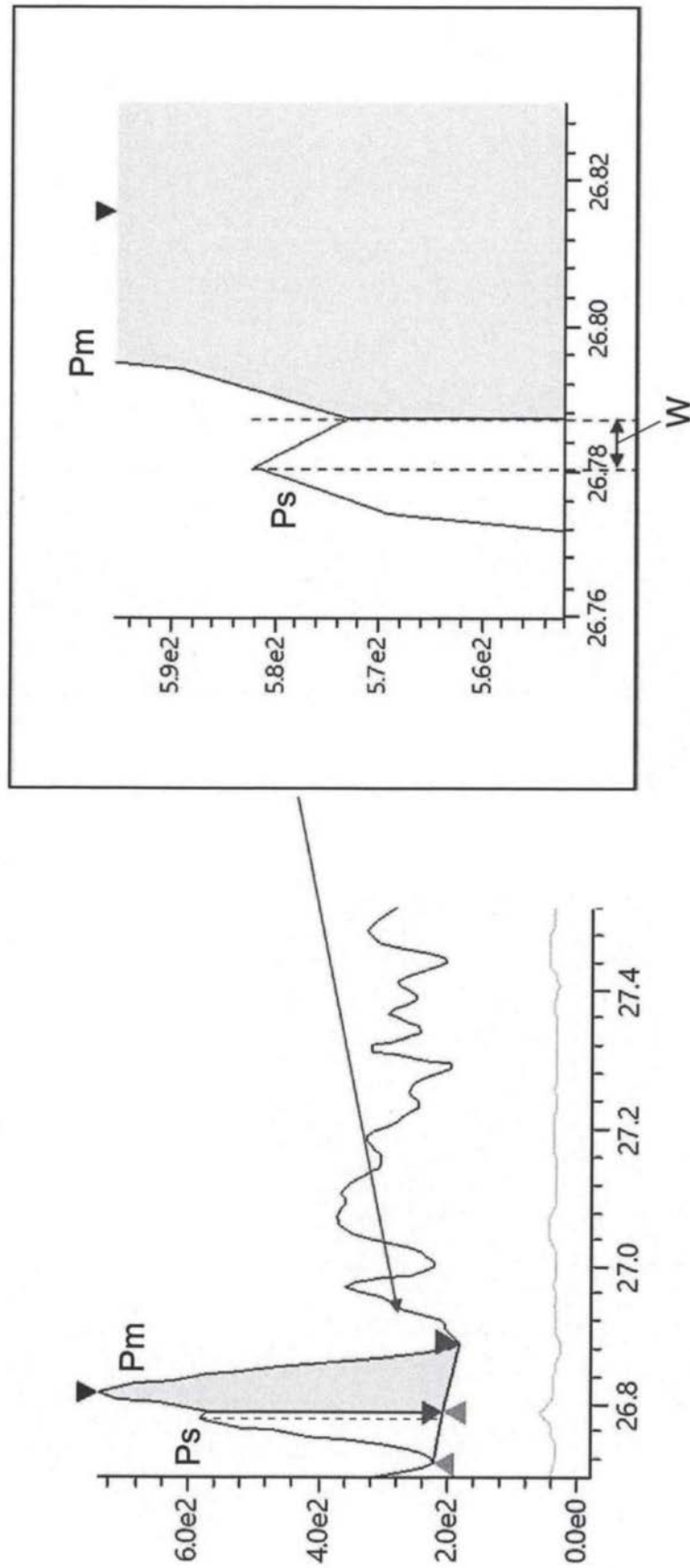
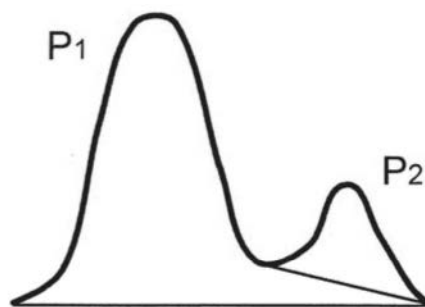
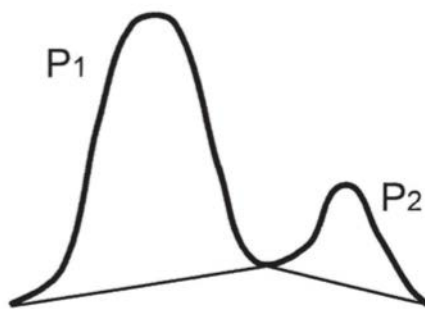


图6

(A) 拖尾处理



(B) 完全分离



(C) 垂直分割

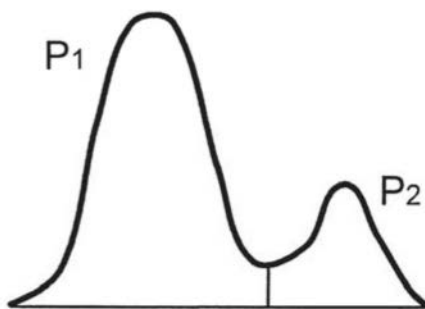


图7

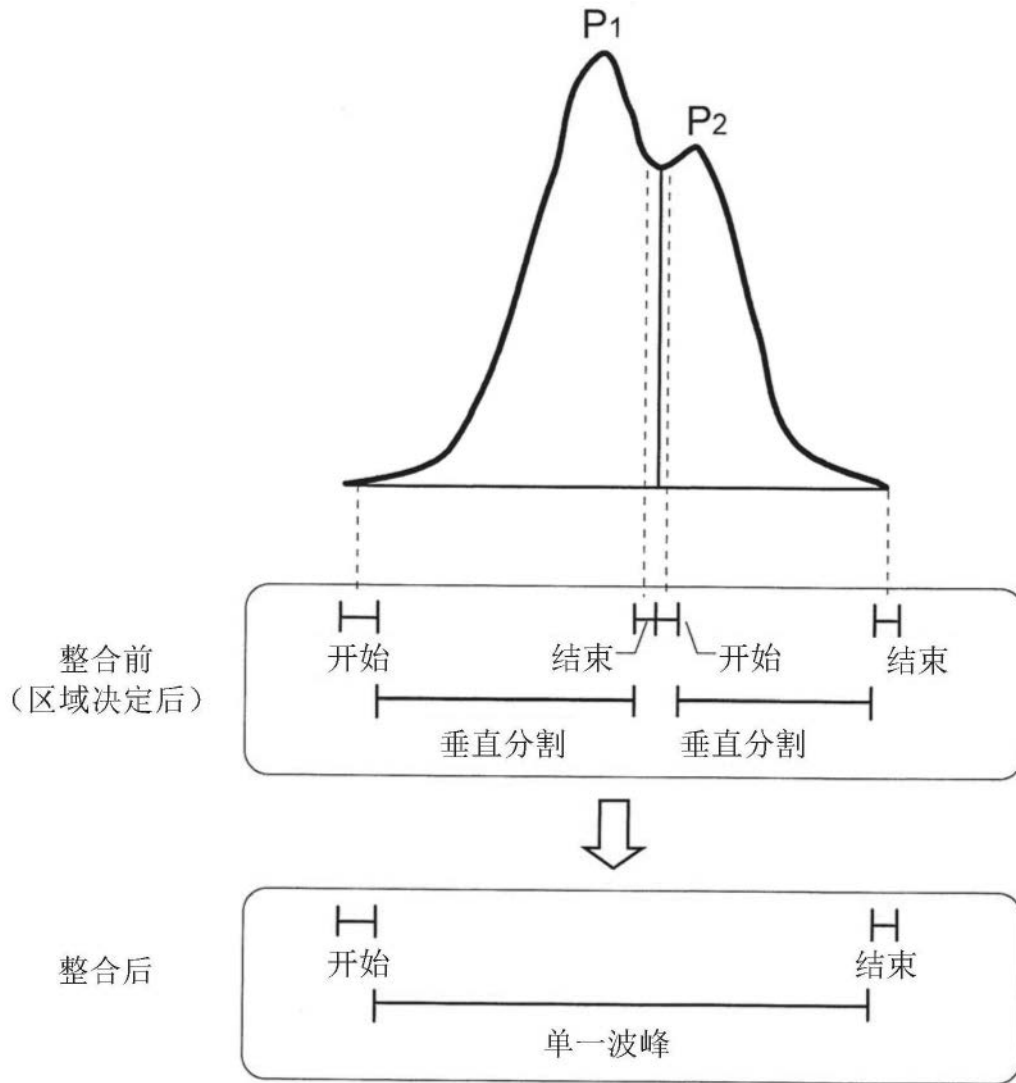


图8

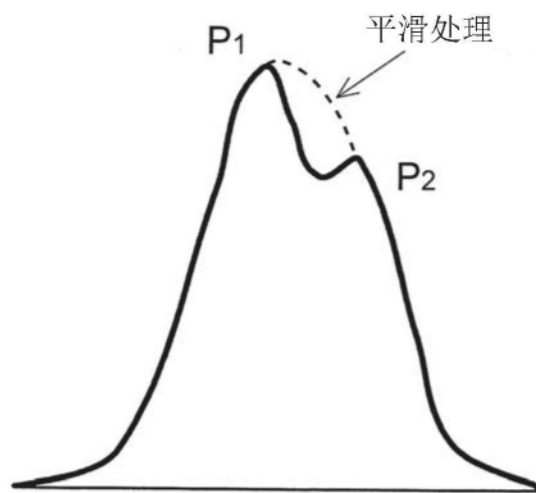


图9