

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

**特許第3733672号
(P3733672)**

(45) 発行日 平成18年1月11日(2006.1.11)

(24) 登録日 平成17年10月28日(2005.10.28)

(51) Int.Cl.

G 0 1 N 30/86 (2006.01)

F I

G 0 1 N 30/86

請求項の数 1 (全 8 頁)

(21) 出願番号	特願平8-358649	(73) 特許権者	000001993
(22) 出願日	平成8年12月27日(1996.12.27)		株式会社島津製作所
(65) 公開番号	特開平10-197509		京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地
(43) 公開日	平成10年7月31日(1998.7.31)	(74) 代理人	100095670
審査請求日	平成15年3月18日(2003.3.18)		弁理士 小林 良平
		(72) 発明者	西本 竜樹
			京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会
			社島津製作所 三条工場内
		審査官	竹中 靖典
		(56) 参考文献	特開平01-187451(JP,A)
			特開平08-077184(JP,A)
		(58) 調査した分野(Int.Cl., DB名)	
			G01N 30/86

(54) 【発明の名称】 分析装置のデータ管理装置

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

所定のスケジュールに従って複数の試料の分析を実行する分析部にて採取した分析データ及び該分析データを解析処理して得た結果を管理するデータ管理装置であって、

a) 分析データ又は解析処理の結果から成るデータファイルを格納しておく記憶領域を有する記憶手段と、

b) 階層的に構成された複数のテーブル内から所望のものを選択することにより目的とする分析の絞り込みを行なうための入力手段と、

c) 該入力手段にて選択された分析に関して複数の検索条件項目を取得する条件抽出手段と、

d) 該複数の検索条件項目に新たな検索条件項目を追加する手段と、

e) 該検索条件項目の各条件を満たす分析データを前記記憶手段から検索する検索手段と、を備えることを特徴とするデータ管理装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、試料を測定することにより採取したデータを解析処理して結果を得る分析装置において、種々のデータを保管し、必要に応じてデータ検索を行なうためのデータ管理装置に関する。このデータ管理装置は、例えば液体クロマトグラフ装置、ガスクロマトグラフ装置等、広範囲に利用することができる。

【 0 0 0 2 】

【 従来の技術 】

図 6 は、液体クロマトグラフ（ＬＣ）分析装置の一例を示す概略構成図である。ＬＣ分析装置は、目的試料の分析を行なう分析部 10 と分析部 10 で取得したデータを解析処理することにより定量又は定性等の解析結果を得るデータ処理部 20 とから成っている。分析部 10 に含まれる制御部 15 は、ユーザーにより入力設定された分析条件に従って分析部 10 の各部を適宜制御する。送液部 11 はカラム 13 に所定流量にて溶離液を供給し、オートインジェクタ 12 はこの溶離液中に一定量の液体試料を注入する。注入された液体試料は溶離液の流れに乗ってカラム 13 に送り込まれ、カラム 13 を通過する際に成分に応じて時間的に分離されてカラム 13 出口から溶出する。溶出液は分光光度計、電気伝導度 10
検出器等の各種の検出器 14 により検出され、検出信号がデータ処理部 20 へ送られる。

【 0 0 0 3 】

データ処理部 20 の中心はパーソナルコンピュータ（パソコン）21 であって、このパソコン 21 に所定のデータ処理プログラムが組み込まれ実行されることにより後述のデータ処理が行なわれる。検出器 14 で検出された信号はデジタルデータに変換されてパソコン 21 を介してハードディスク等の外部メモリ 22 に蓄積される。その後、パソコン 21 では、所定のデータ処理条件に基づき、蓄積されているデータからクロマトグラムが作成され、ピーク検出、各ピークの同定或いは定量等のデータ処理が実行される。そして、その解析結果がディスプレイ 23 に表示される。なお、図 6 の例では、同一の溶出液に対し 20
て同時に測定を行なうように 2 台の同一又は相違する種類の検出器 14 を並列に備える構成となっている。

【 0 0 0 4 】

上記装置で複数の試料の自動分析を行なうときには次のようにする。ユーザーはキーボードやマウス等から成る入力部 24 にて所定操作を行ない、サンプルスケジュールと呼ばれるスケジュール表をディスプレイ 23 に表示させる。このサンプルスケジュール画面上で、標準試料を含む複数の試料の番号や分析条件（例えば、試料の注入量）等を入力し分析の開始を指示すると、制御部 15 はサンプルスケジュールに従って各部を制御し、複数試料の一連の分析を自動的に行なう。同一又は他のユーザーが他の一連の分析を行なうときには、再びサンプルスケジュール画面を表示させ、スケジュール表に適当な入力設定を行なう。 30

【 0 0 0 5 】

ところで、上記ＬＣ分析装置による解析では、過去にクロマトグラフ分析を行なって取得したデータ（以下「分析データ」という）を用いデータ処理条件を変更して再解析処理を行なったり、過去の結果の信頼性を確認すべく標準試料や未知試料の分析過程を調べるために分析条件やデータ処理条件を調べたりすることが頻繁に行なわれる。従って、分析データは一旦データ処理が行なわれた後も外部メモリ 22 に保管され続け、また同一のデータに対してデータ処理条件を変更して解析処理された結果のデータ（以下「処理後データ」という）も破棄せずに外部メモリ 22 に保管しておくことが多い。このため、外部メモリ 22 に記憶しているデータ量は膨大なものとなり、分析データの再解析処理を行ないたい場合には、膨大なデータの中から所望のデータを検索しなければならない。 40

【 0 0 0 6 】

このようなデータの検索に関し、従来のＬＣ分析装置では、所望のデータの絞り込みを行なうのに 2 種類の方法が使用されている。その第 1 は属性による検索である。すなわち、検索対象の分析データは、或る特定のスケジュールに属する複数の分析（試料の注入）の中の或る特定の分析に属しており、更にその特定の分析の中の或る特定のチャンネル（ここでは、相違する検出器をチャンネルと呼ぶ）に属している。従って、ユーザーが所定の操作を行なって、スケジュール→分析→チャンネルという順序で所望の分析データを見つけ出して検索を指示すると、最終的にそのデータファイルが記憶されている外部メモリ 22 内の記憶位置から所望の分析データが読み出されてきてディスプレイ 23 に表示される。

【 0 0 0 7 】

このような検索を行なうためには、例えばスケジュール、分析等毎にそれぞれ相違するスケジュールや分析に関するユニークな識別子（ID）が利用される。スケジュールと分析、分析とチャンネルという上下層の対応関係が識別子の組又はその結合関係を示すテーブルにより管理されている。そして、最終的には、分析データの識別子とそのデータファイルの格納位置を記してあるテーブルを参照して、外部メモリ２２の格納位置からデータファイルを読み出すという処理を実行し検索を行なっている。

【 0 0 0 8 】

第２の検索方法は、検索条件項目を用いるものである。検索条件項目とは、スケジュール名、試料名、分析日時、分析者名、チャンネル番号（又は検出器名）等の分析データを特定し得る個別の項目であって、ユーザーが１つ以上の検索条件項目に関し所望の条件を入力設定し検索を指示すると、その条件に適合する分析データが１つ以上検索される。この検索方法では、検索条件項目を細かく設定しないと不所望の分析データも同時に検索されてしまうという不便さはあるが、例えば、いずれのスケジュールに属するのかに拘らず、或る特定の試料名に関するデータを全て検索したい等の場合には非常に有用である。

【 0 0 0 9 】

【 発明が解決しようとする課題 】

このように２つのデータ検索方法にはそれぞれ特長があり、ユーザーが所望のデータ検索を行なう際にはいずれか適当な方法を選択するようになっている。しかしながら、データ量が膨大になると、いずれかの方法でもうまく検索できないことがある。すなわち、属性による検索は上述のように自動的に付加される識別子を用いており、これは検索条件項目とは何等の関係も有していないので、例えば属性を利用して或る特定のスケジュールに属する分析データを絞り込んだ後に、更にその中で個別の検索条件項目で絞り込みを行なうことはできないという不便さが存在する。

【 0 0 1 0 】

本発明は上記課題を解決するために成されたものであり、その目的とするところは、データ検索の操作が容易になり効率的な分析作業が行なえる分析装置のデータ管理装置を提供することにある。

【 0 0 1 1 】

【 発明が解決しようとする課題 】

上記課題を解決するために成された本発明は、所定のスケジュールに従って複数の試料の分析を実行する分析部にて採取した分析データ及び該分析データを解析処理して得た結果を管理するデータ管理装置であって、

- a) 分析データ又は解析処理の結果から成るデータファイルを格納しておく記憶領域を有する記憶手段と、
- b) 階層的に構成された複数のテーブル内から所望のものを選択することにより目的とする分析の絞り込みを行なうための入力手段と、
- c) 該入力手段にて選択された分析に関して複数の検索条件項目を取得する条件抽出手段と、
- d) 該複数の検索条件項目に新たな検索条件項目を追加する手段と、
- e) 該検索条件項目の各条件を満たす分析データを前記記憶手段から検索する検索手段と、を備えることを特徴としている。

【 0 0 1 2 】

【 発明の実施の形態 】

本発明に係るデータ管理装置では、例えば、複数のスケジュールを列記したスケジュールテーブル、スケジュールテーブル内の任意のスケジュールにおける複数の試料分析を列記した分析テーブル、及び、分析テーブル内の任意の分析における検出器の相違する複数の分析データを列記した分析データテーブルというように階層的にテーブルが構成されており、ユーザーは入力手段により、特定のスケジュール、特定の分析というように順次選択を行なうことにより目的とする分析の絞り込みを行なう。

【 0 0 1 3 】

従来のデータ管理装置では、このような絞り込みに対して選択されたスケジュール、分析等の識別子を順次辿り、最終的に目的とする分析データのデータファイルの記憶位置の情報まで行き着く。これに対し、本発明のデータ管理装置では、条件抽出手段が、選択されたスケジュール、分析又は分析データに関してスケジュール名、分析日時、試料名等、種々の検索条件項目を取得する。そして、検索手段はこの複数の検索条件項目を受け取り、この条件を満たすような分析データを検索してそのデータファイルの記憶位置を探し出し、記憶手段の中のその記憶位置からデータファイルを読み出して出力する。

【 0 0 1 4 】

【 実施例 】

本発明に係るデータ管理装置を備える分析装置の一実施例であるＬＣ分析装置を図を参照して説明する。本実施例によるＬＣ分析装置の構成は図６に示したものと同一であるが、データ処理部２０においてデータ検索を行なう際の処理内容が異なる。この相違は、データ処理部２０を構成するパソコン２１の処理プログラムを変更することで対応することができる。

【 0 0 1 5 】

まず、この分析装置における分析作業の手順を図１のフローチャートに沿って説明する。分析の準備として、ユーザーは分析条件と処理条件とを入力設定する（ステップＳ１）。すなわち、ユーザーが入力部２４で所定の操作を行なうと、分析部１０の各部の分析条件設定のための対話画面がディスプレイ２３に表示される。ユーザーは、この画面上で送液部１１等に必要な分析条件を１項目ずつ入力する。また、処理条件に関しても、成分、分析時間、濃度等の必要な項目を入力する。そして、入力が終了したならば、適当なファイル名を決めて保存を指示する。パソコン２１は、この指示を受けて、入力された分析条件及び処理条件を一つの設定ファイル（メソッドファイル）として外部メモリ２２の所定領域に格納する（ステップＳ２）。

【 0 0 1 6 】

次に、上記のように作成した複数のメソッドファイルと試料との対応関係を規定するためにテンプレートと呼ばれる対応表を作成する（ステップＳ３）。すなわち、ユーザーが入力部２４にて所定の操作を行なうとテンプレート作成用の対話画面がディスプレイ２３に表示されるので、試料名（又は試料番号）を入力し、そのサンプルを分析する際に使用するメソッドファイルを選択する。パソコン２１は、この操作を受けて、試料の管理テーブル、メソッドファイルの管理テーブル、及び、試料とメソッドファイルとの対応関係を記述している結合管理テーブルを作成し、これを外部メモリ２２の所定領域に記憶する（ステップＳ４）。

【 0 0 1 7 】

各テーブルの詳細な説明は省略するが、結合管理テーブルは試料管理テーブルに記述されている各試料に対応するメソッドファイルを示しており、メソッドファイル管理テーブル中にはそのメソッドファイル本体が記憶されている外部メモリ２２の領域を示すポインタが記述されている。従って、試料管理テーブルから順に辿ると、所望の試料の分析に用いるメソッドファイルのポインタに到達する。

【 0 0 1 8 】

次に、ユーザーは複数の試料の分析順序を決めるためのスケジュールを作成する（ステップＳ５）。すなわち、ユーザーが入力部２４にて所定の操作を行なうとスケジュール作成用の対話画面がディスプレイ２３に表示されるので、分析対象の試料名を直接入力するか或いは予め登録している試料名の一覧表の中から所望のものを選択することにより分析順序を設定する。スケジュールが設定されると、パソコン２１は、上述の試料及びメソッド管理テーブル並びに結合管理テーブルを参照して、各試料に対応したメソッドファイルを検索する。

【 0 0 1 9 】

そして、分析開始の前にそのメソッドファイルを外部メモリ２２から読み出し、メソッドファ

10

20

30

40

50

イルに含まれている分析条件に基づき制御部 15 に対して指示信号を送出する。制御部 15 はこれに応じて送液部 11 等、各部の動作をそれぞれ制御し LC 分析を実行する（ステップ S6）。LC 分析により検出器 14 で得られた検出信号は A/D 変換されてパソコン 21 へ送られ、各分析毎に 1 つの分析データファイルとして外部メモリ 22 に蓄積される（ステップ S7）。その後、パソコン 21 では、このデータからクロマトグラムが作成され、このクロマトグラムに対しメソッドファイル中の処理条件に基づいて波形処理、演算処理が施され、定性又は定量解析が行なわれる（ステップ S8）。このようにして処理された結果は、各分析毎に 1 つの処理後データファイルとして外部メモリ 22 に保管される（ステップ S9）。

【0020】

10

例えば、分析データのデータファイルは次のようにして管理される。図 2 は、この分析装置における分析データのデータファイルを管理するためのデータベース構造の概念図の一例である。このデータベースは、以下の 4 つのテーブルから成る。

- (1) スケジュールの管理テーブル（@管理 / スケジュール）30
- (2) スケジュールの各行（分析又は試料注入）の管理テーブル（@管理 / 行）31
- (3) 分析データファイルの管理テーブル（@管理 / 分析データ）32
- (4) スケジュール及びスケジュールの行から成る連結キーと分析データファイルとの対応関係を記述している結合管理テーブル（@関係 / 行 - 分析）33

【0021】

三つの管理テーブル 30 ~ 32 はそれぞれ単独で完結しており、結合管理テーブル 33 は上位と下位の管理テーブルを関連付ける機能を有する。すなわち、スケジュールの各行で設定されている試料に対応した分析データファイルを示すのが結合管理テーブル 33 であり、その対応付けはユニークな識別子により成されている。

20

【0022】

次に、上述のようにして外部メモリ 22 に蓄積された分析データファイルを用いて再解析処理を行なう等の場合におけるデータ検索について説明する。本実施例の LC 分析装置においても、属性によりデータを絞り込む方法と、複数の検索条件項目を入力設定することによりその条件に適合するデータを検索する方法の 2 つを利用することができる。

【0023】

〔属性による検索〕

30

図 3 は、本実施例における属性を用いた検索方法の手順を示すフローチャートである。また、図 4 は、この検索時にディスプレイ 23 に表示されるデータ検索のためのテーブルの一例を概略的に示す模式図である。図 4 (a) はスケジュールテーブルであって、1 行が 1 つのサンプルスケジュールに対応し、過去に実行されたスケジュール名、実行日時、実行者等が列記されている。図 4 (b) は各サンプルスケジュール毎に作成される分析テーブルであって、1 行が一つの試料の分析に対応し、その試料名、分析日時、分析者等が列記されている。図 4 (c) は一つの試料の分析毎に作成されるデータテーブルであって、1 行が一つの検出器による検出に対応しており、異なるチャンネル番号が付されている。

【0024】

ユーザーが入力部 24 により適当な操作を行なうとディスプレイ 23 の画面には図 4 (a) のようなスケジュールテーブルが表示される。ユーザーは所望のスケジュールの行にカーソルを移動し、マウスをダブルクリック操作する。すると、この操作を受けて図 4 (b) のような分析テーブルがディスプレイ 23 の画面に表示される。次にユーザーは所望の分析の行にカーソルを移動し、マウスをダブルクリック操作する。すると、この操作を受けて図 4 (c) のようなデータテーブルがディスプレイ 23 の画面に表示される。ユーザーは所望の分析データの行にカーソルを移動し、マウスをダブルクリック操作する。このようにして、ユーザーは対象となる分析の選択を行なう（ステップ S10）。

40

【0025】

従来の属性による検索では、上記のような操作が行なわれると、ダブルクリックにより選択された対象（例えば分析）の識別子が検出され、図 2 に示した管理テーブル 30 ~ 32

50

及び結合管理テーブル 33 を参照してデータファイルの格納位置が検索される。しかしながら、本実施例では、パソコン 21 は、上記各テーブルでのダブルクリックの操作を受けて、各テーブルでの検索条件項目を取得する処理を実行する（ステップ S11）。すなわち、スケジュール名、そのスケジュールの実行日時、試料名等の各テーブルの記述されている項目に関し、選択されたスケジュール、分析、チャンネル毎にその条件が取得される。そして、ユーザーが検索動作を指示すると、パソコン 21 はその複数の検索条件項目に適合する分析データを検索する（ステップ S12）。このときの検索動作は次の検索条件項目による検索と同一である。

【0026】

〔検索条件項目による検索〕

図 5 は、検索条件項目を用いた検索方法の手順を示すフローチャートである。ユーザーは所定操作を行なうことにより検索条件項目を入力設定するための画面をディスプレイ 23 に表示し、適当な条件、例えばスケジュール名、試料名等を入力部 24 より入力する（ステップ S20）。パソコン 21 は、この設定された検索条件項目に適合する分析データファイルを検索する（ステップ S21）。検索条件項目から所望の分析データファイルの記憶領域を示すポインタを探索するためには、検索条件項目毎にフィルタリングにより適合するデータファイルを選び出す検索プログラムを用いるとよい。そして、ポインタが見つかったならば、外部メモリ 22 のそのポインタの領域を読み出すことにより所望のデータファイルを得て、これをディスプレイ 23 に表示する（ステップ S22）。

【0027】

以上のように、本実施例のデータ処理部 20 では、検索のためのユーザーの操作方法は従来の属性による検索方法と変わらないが、内部でのデータ検索は従来のように識別子を用いず、検索条件項目を用いて行なっている。従って、例えば、ユーザーの操作により図 4（b）のような分析テーブルにまで絞り込みを行なった後に、更に例えば試料名等の検索条件項目を用いて絞り込みを行ないたい場合には、既に取得されているスケジュール名等の検索条件項目に新たな検索条件項目を追加すればよいだけなので、操作上は属性での絞り込みと検索条件項目での絞り込みが関連をもって連続して行なえることになる。

【0028】

なお、上記実施例は一例であって、本発明の趣旨に沿った範囲で適宜変形や修正を行なえることは明らかである。

【0029】

【発明の効果】

以上のように、本発明に係る分析装置のデータ管理装置によれば、従来の属性による検索と検索条件項目による検索という 2 つの相違する検索方法の垣根が取り払われ、蓄積されているデータ量が庞大であっても所望のデータの絞り込みの操作が容易になる。このため、分析作業の効率が向上する。

【0030】

更に、このデータ管理装置によれば、操作上は属性と検索条件項目という異なる方法による検索となっているが実際のデータファイルを検索する処理は検索条件項目を参照しているだけであるので、従来の識別子を辿って検索を行なう検索プログラムが不要となり、プログラム量が少なくて済み、プログラムの作成の手間も軽減される。

【図面の簡単な説明】

【図 1】 本発明に係るデータ管理装置を備える分析装置の一実施例における分析作業の手順を示すフローチャート。

【図 2】 本実施例での分析データのデータベース構造の概念図。

【図 3】 本実施例における属性によるデータ検索処理の手順を示すフローチャート。

【図 4】 本実施例における属性によるデータ検索操作時に表示されるテーブルの一例を示す模式図。

【図 5】 本実施例における検索条件項目によるデータ検索処理の手順を示すフローチャート。

10

20

30

40

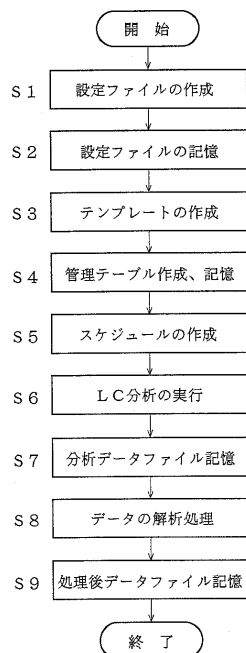
50

【図6】 液体クロマトグラフ分析装置の概略構成図。

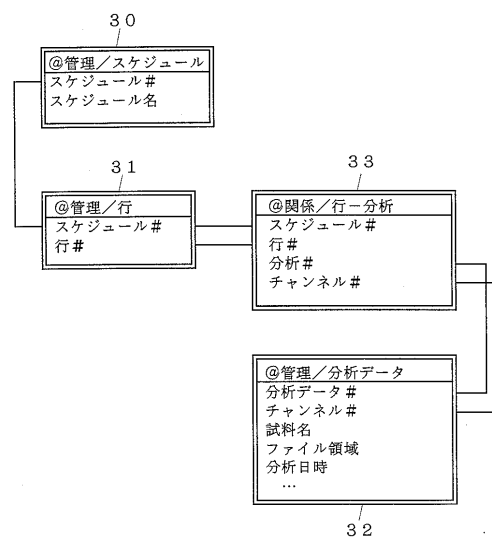
【符号の説明】

- 1 0 ... 分析部
 2 0 ... データ処理部
 2 1 ... パソコン
 2 2 ... 外部メモリ
 2 3 ... ディスプレイ
 2 4 ... 入力部

【図1】

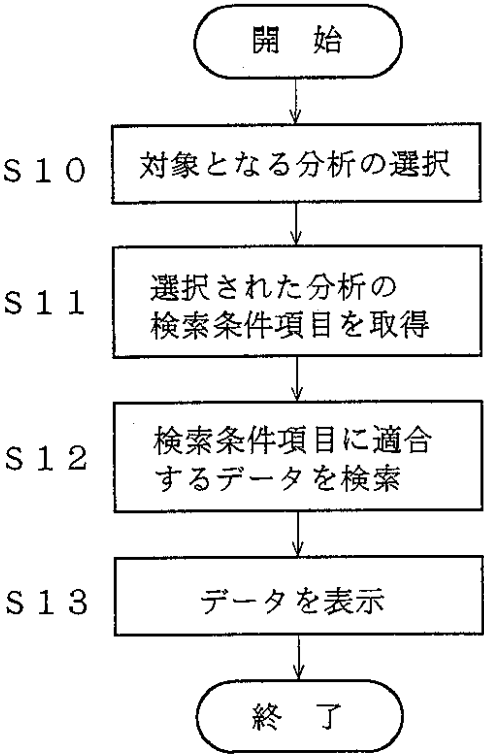


【図2】



スケジュール# : スケジュール識別子
 行# : 行(分析)識別子
 分析データ# : 分析データ識別子
 チャンネル# : チャンネル(検出器)識別子

【 図 3 】



【 図 4 】

(a)

	スケジュール名	実行日時	実行者	...
1				
2				
3				
⋮				

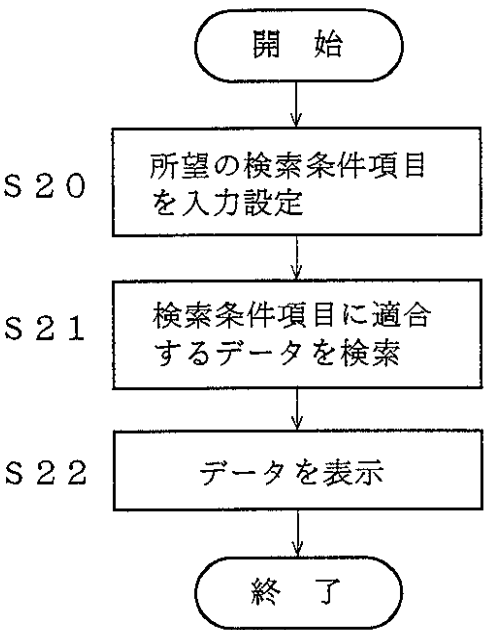
(b)

	試料名	分析日時	分析者	...
1				
2				
3				
⋮				

(c)

	試料名	分析日時	チャンネル	...
1				
2				
3				
⋮				

【 図 5 】



【 図 6 】

