



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 116754702 A

(43) 申请公布日 2023. 09. 15

(21) 申请号 202310096119.2

(22) 申请日 2023.02.10

(30) 优先权数据

2022-038973 2022.03.14 JP

(71) 申请人 株式会社岛津制作所

地址 日本国京都府

(72) 发明人 川北祥人 尾島典行

(74) 专利代理机构 上海立群专利代理事务所

(普通合伙) 31291

专利代理师 杨楷 毛立群

(51) Int.Cl.

G01N 30/88 (2006.01)

G01N 30/06 (2006.01)

G01N 30/86 (2006.01)

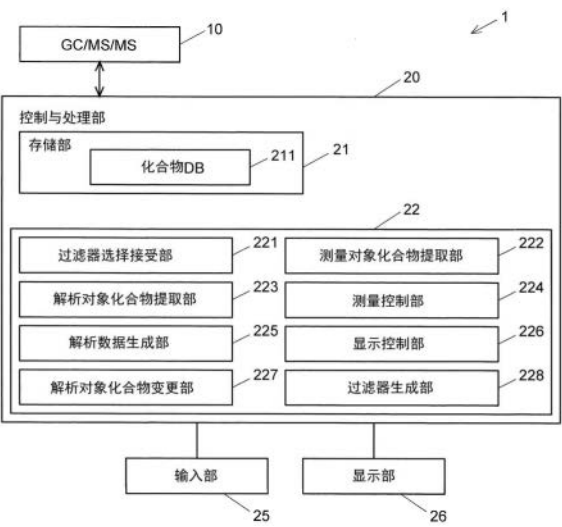
权利要求书2页 说明书11页 附图7页

(54) 发明名称

分析装置

(57) 摘要

本发明提供一种技术,即便数据库中保存的已知化合物的信息量很庞大,也能够简便地解析试样中包含的化合物。分析装置(1)具备:存储部(21),保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息、以及提取已知化合物的一部分的多个过滤器的信息;显示部(26);测量控制部(224),基于存储部中保存的测量条件进行测量而获取试样的测量数据;过滤器选择接受部(221),接受将多个过滤器中的某一个选择为解析过滤器的输入;解析对象化合物提取部(223),通过解析过滤器将所述多个已知化合物的一部分作为解析对象化合物进行提取;显示控制部(226),对显示解析对象化合物的测量数据的第1解析画面与显示所有测量数据的第2解析画面进行显示。



1. 一种分析装置,其特征在于,具备:

存储部,保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息、以及分别提取该多个已知化合物的一部分的多个过滤器的信息;

显示部;

测量控制部,基于所述存储部中保存的测量条件进行测量而获取试样的测量数据;

过滤器选择接受部,接受将所述多个过滤器中的某一个选择为对所述试样的测量数据的解析应用的解析过滤器的输入;

解析对象化合物提取部,通过所述解析过滤器将所述多个已知化合物的一部分作为解析对象化合物进行提取;

显示控制部,在所述显示部,对显示所述试样的测量数据中的所述解析对象化合物的测量数据的第1解析画面与显示所有测量数据的第2解析画面进行显示。

2. 如权利要求1所述的分析装置,其特征在于,

所述多个已知化合物的一部分或全部为代谢物,所述过滤器是根据试样的属性而生成的。

3. 如权利要求1所述的分析装置,其特征在于,

所述过滤器选择接受部进一步接受将所述多个过滤器中的某一个选择为对所述试样的测量应用的测量过滤器的输入,

所述分析装置还具备测量对象化合物提取部,通过所述测量过滤器将所述多个已知化合物的一部分作为测量对象化合物进行提取,

所述测量控制部使用保存于所述存储部的所述测量对象化合物的测量条件进行测量而获取所述试样的测量数据。

4. 如权利要求1所述的分析装置,其特征在于,

所述多个过滤器包括提取所述存储部所保存的多个已知化合物中的一部分的第1过滤器、与提取由该第1过滤器提取出的已知化合物中的一部分的第2过滤器。

5. 如权利要求3所述的分析装置,其特征在于,

所述多个过滤器包括提取所述存储部所保存的多个已知化合物中的一部分的第1过滤器、与提取由该第1过滤器提取出的已知化合物中的一部分的第2过滤器,

所述过滤器选择接受部在选择所述第1过滤器作为所述测量过滤器的情况下,作为所述解析过滤器接受对所述第1过滤器或所述第2过滤器的选择,在选择所述第2过滤器作为所述测量过滤器的情况下,作为所述解析过滤器接受对所述第2过滤器的选择。

6. 如权利要求1所述的分析装置,其特征在于,

还具备解析对象化合物变更部,接受所述解析对象化合物的追加及删除,

所述显示控制部将所述解析对象化合物变更部接受的变更后的解析对象化合物的测量数据显示在所述第1解析画面。

7. 如权利要求1所述的分析装置,其特征在于,

还具备过滤器生成部,根据识别过滤器的信息的输入及保存于所述存储部的多个已知化合物中的一部分的选择而生成新的过滤器并保存于所述存储部。

8. 如权利要求7所述的分析装置,其特征在于,

所述过滤器生成部基于利用所述解析方法对由所述测量控制部获取的试样的测量数

据进行解析来确定包含于该试样中的化合物而得的结果,选择保存于所述存储部的多个已知化合物中的一部分。

9.如权利要求8所述的分析装置,其特征在于,

所述过滤器生成部接受指定所述确定的化合物中的一部分的输入,并从所述确定的化合物中排除该指定的化合物,从而选择保存于所述存储部的多个已知化合物中的一部分。

10.一种过滤器的生成方法,所述过滤器用于从保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息的数据库中提取该多个已知化合物的一部分来作为试样的测量时的测量对象化合物或试样的测量数据的解析时的解析对象化合物,所述过滤器的生成方法的特征在于,

收集对于所述多个已知化合物的任一个记载的文献的信息;

基于所述文献中记载的信息,将该文献中记载的已知化合物与试样的属性相关联;

根据对所述试样的属性的选择,生成提取与该属性相关联的已知化合物的过滤器。

分析装置

技术领域

[0001] 本发明涉及分析试样中包含的化合物的分析装置。

背景技术

[0002] 代谢组学是一种对由生命活动产生的各种代谢物的种类或浓度进行全面的解析的方法,期待应用于各种领域。例如,在医疗领域,对于以疾病的早期发现为目的的生物标志物的探索或疾病的原因物质的确定等的应用备受期待。此外,在食品领域,能够应用于制造商之间的产品比较或原材料的产地比较等质量评价或质量预测、功能性成分的探索等。

[0003] 在代谢组学中,作为分析代谢物的方法之一存在有气相色谱仪质量分析。在使用气相色谱仪质量分析的代谢物的分析中,使用收录有大量已知的代谢物的各自的测量条件与解析方法的信息的数据库(例如非专利文献1)。在测量条件的信息中,包含有例如各代谢物的保留时间或赋予各代谢物特征的离子的质荷比的信息。在解析方法的信息中,包含有例如从测量数据中生成质量色谱图或总离子流色谱图、或者从色谱图中提取峰时的解析参数或旨在由峰的面积定量代谢物的标准曲线的信息。分析人员通过使用这些数据库中收录的测量条件或解析方法的信息,不必亲自研究测量条件或解析方法,便能够对试样中包含的各种代谢物进行全面的分析。

[0004] 现有技术文献

[0005] 非专利文献

[0006] 非专利文献1:“Smart Metabolites Database(智能代谢物数据库)”,[在线],株式会社岛津制作所,[2022年2月14日检索],互联网<URL:<https://www.an.shimadzu.co.jp/gcms/smartdb/metabolite.htm>>

发明内容

[0007] 发明要解决的技术问题

[0008] 代谢组学的对象涉及多方面,在对代谢物进行全面的解析的代谢组解析所使用的数据库中,登记有可能包含在各种属性的试样的某一个中的大量代谢物的信息。此外,随着代谢组学的对象的扩大,数据库中登记的代谢物的数量也在增加。因此,基于在这些数据库中登记的测量条件,能够全面地测量大量代谢物,而另一方面,为了解析庞大的测量数据,需要花费精力与时间。

[0009] 本发明要解决的技术问题在于提供一种技术,使得即便数据库中保存的已知化合物的测量条件及解析方法的信息量很庞大,也能够使用它来简便地解析试样中包含的化合物。

[0010] 用于解决上述技术问题的方案

[0011] 为了解决上述技术问题而完成的本发明的分析装置,具备:

[0012] 存储部,保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息、以及分别提取该多个已知化合物的一部分的多个过滤器的信息;

[0013] 显示部；

[0014] 测量控制部，基于所述存储部中保存的测量条件进行测量而获取试样的测量数据；

[0015] 过滤器选择接受部，接受将所述多个过滤器中的某一个选择为对所述试样的测量数据的解析应用的解析过滤器的输入；

[0016] 解析对象化合物提取部，通过所述解析过滤器将所述多个已知化合物的一部分作为解析对象化合物进行提取；

[0017] 显示控制部，在所述显示部，对显示所述试样的测量数据中的所述解析对象化合物的测量数据的第1解析画面与显示所有测量数据的第2解析画面进行显示。

[0018] 发明效果

[0019] 本发明的分析装置具备除了保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息、此外还保存有用于提取多个已知化合物中的一部分的多个过滤器的信息的存储部。在进行试样的分析时，基于保存于存储部的多个已知化合物的测量条件进行测量而获取试样的测量数据。此外，过滤器选择接受部接受例如使用者对解析过滤器的选择，解析对象化合物提取部提取与该解析过滤器相对应的1个或多个已知化合物(解析对象化合物)。并且，显示控制部对显示解析对象化合物的测量数据的第1解析画面与显示所有测量数据的第2解析画面进行显示。显示控制部可以将第1解析画面与第2解析画面切换显示于显示部，也可以将第1解析画面与第2解析画面并列地同时显示。第1解析画面与第2解析画面的显示基于例如使用者的指示进行。在本发明的分析装置中，例如使用者仅根据试样的分析内容选择解析用的过滤器而简便地锁定应该解析的化合物，即可显示出显示这些解析对象化合物的测量数据的第1解析画面，因此能够简便地解析这些化合物。此外，对于解析对象化合物以外的测量数据，也能够根据需要通过对第2解析画面进行确认。

附图说明

[0020] 图1是本发明的分析装置的一实施例的气相色谱仪质量分析装置的主要部分构成图。

[0021] 图2是本实施例中的化合物数据库的一例。

[0022] 图3是本实施例中的过滤器信息的一例。

[0023] 图4是本实施例中的第2解析画面的一例。

[0024] 图5是本实施例中的第1解析画面的一例。

[0025] 图6是在本实施例中将对象外化合物追加至解析对象化合物的画面的一例。

[0026] 图7是本实施例中的过滤器生成画面的一例。

[0027] 图8是本实施例中的过滤器编辑画面的一例。

具体实施方式

[0028] 以下参照附图对本发明的分析装置的一实施例进行说明。本实施例的分析装置用于对例如源自植物、动物等的试样或生物体试样等各种属性的试样分析该试样中包含的各种代谢物。像这样，对包含在试样中的各种代谢物的种类或浓度进行全面的解析的方法被称为代谢组学。通过分析生物体试样中包含的特定的代谢物，以实现疾病的早期发现，或者

通过分析食品试样中包含的特定的代谢物,用于评价该商品的质量或确定产地。在代谢组学中,作为测量的对象的代谢物为已知的化合物,在多数情况下,根据试样的属性(例如试样的种类)预先确定解析对象化合物。

[0029] 图1是本发明的分析装置的一实施例的气相色谱仪质量分析装置1的主要部分构成图。本实施例的气相色谱仪质量分析装置1大致由作为测量部的气相色谱仪质量分析部(GC/MS/MS)10、控制与处理部20构成。

[0030] GC/MS/MS10组合了用于分离试样中包含的各种化合物的气相色谱仪与按顺序分析由该气相色谱仪分离的化合物的质量分析部。在本实施例的质量分析部中,使用了具有能够实施MS/MS测量的构成的质量分析部(三重四极型质量分析装置、离子阱-飞行时间型质量分析装置等)与气相色谱仪相组合而成的质量分析部。在本实施例中,为了进行MRM测量或MS/MS扫描测量使用了这种构成,但在只进行S I M测量或MS扫描测量的情况下,也可以使用单四极型的质量分析装置等。

[0031] 控制与处理部20除存储部21之外,还具备过滤器选择接受部221、测量对象化合物提取部222、解析对象化合物提取部223、测量控制部224、解析数据生成部225、显示控制部226、解析对象化合物变更部227及过滤器生成部228作为功能模块。控制与处理部20的实体为个人计算机,通过由处理器执行预先安装的软件(程序),以具体实现上述的各功能模块。此外,在控制与处理部20连接有输入部25与显示部26。

[0032] 存储部21中保存有化合物数据库(化合物DB)211。图2中示出化合物数据库211的一例。在化合物数据库211中,对于从各种试样检测出的已知的大量代谢物(例如500~1000种),分别收录有测量信息与解析信息。在测量信息中,包含有在测量该代谢物时气相色谱仪中使用的色谱柱的种类与温度、载气的种类与流量、以及保留时间或质量分析部中的测量模式(S I M、MS扫描、MRM、MS/MS扫描等)与离子的质荷比(S I M测量时的质荷比、MS扫描测量时的质荷比的范围、MRM测量时的MRM转变的质荷比的组合、MS/MS测量时的前体离子的质荷比与产物离子的质荷比的范围等)的信息。此外,在解析信息中,包含有鉴定条件(S I M测量时的定量离子的测量强度与确认离子的测量强度之比的容许范围、MRM测量时的定量用MRM转变的测量强度与确认用MRM转变的测量强度之比的容许范围、MS扫描或MS/MS扫描测量时的MS谱或MS/MS谱与标准谱的一致度的阈值等)、标准曲线数据(色谱图的峰强度与定量值的关系等)、以及标准质谱(MS谱、MS/MS谱等)的信息。

[0033] 化合物数据库211还具有过滤器信息。过滤器信息根据试样的属性,从化合物数据库211中收录的大量化合物中提取与该属性的试样相关的测量对象化合物及/或解析对象化合物。试样的属性以属性A、属性B、属性C等的大分类;属性A-1、属性A-2、属性A-3等的中分类;属性A-1-1等的小分类的方式按层次设置。

[0034] 在图3示出过滤器信息的一例。在该例中以3个层次表示了试样的属性,但层次的数量是能够适当变更的。此外,也可以不设置层次结构,而仅设置为相当于上述大分类的分类(属性A、属性B、属性C等)。大分类是例如植物、动物之类,位于植物的下层的中分类是例如小麦、大麦、米、大豆之类,位于小麦的下层的小分类是例如北海道产的小麦、美国产的小麦之类。层次结构的过滤器是以位于越下层的过滤器提取的化合物(代谢物)越少的方式而构成的。例如,作为中分类的小麦的过滤器,是以提取由大分类的植物的过滤器提取出的化合物(代谢物)的一部分的方式而构成的。

[0035] 接下来,对本实施例的气相色谱仪质量分析装置1的动作进行说明。

[0036] 如果使用者发出执行分析的指示,则过滤器选择接受部221将选择测量过滤器的使用/不使用的画面显示在显示部26。如果在该画面中选择测量过滤器的使用,则接下来进入测量过滤器的选择画面。使用测量过滤器的情况下的流程将在后面叙述。

[0037] 接下来,测量控制部224从化合物数据库211中读出各化合物的测量信息。在该例中,由于不使用测量过滤器,因此读出化合物数据库211中收录的所有化合物的各自的测量信息,并生成执行这些信息的批处理文件。另外,如果测量的化合物的数量较多,则有时不能一次性测量所有化合物。例如,如果包含有大量保留时间相同的化合物,则在同一时间段内按顺序测量大量化合物,测量这些化合物的时间间隔变长。其结果是,构成质量色谱图的峰的测量点的数量不足,有可能导致峰的再现性变差。或者,如果为了使构成质量色谱图的峰的测量点的数量充足而缩短测量各化合物的时间间隔,则各化合物的每次的测量时间变短,灵敏度有可能变差。因此,测量控制部224对照规定的条件(例如,同一时间段内测量的化合物的数量不超过预先决定的上限数),根据需要生成多个方法文件,以通过多次测量获取所有化合物的测量数据的方式生成批处理文件。

[0038] 批处理文件生成后,如果使用者指示测量开始,则测量控制部224按顺序测量试样中包含的化合物(此处指化合物数据库211中收录的所有化合物)。由测量获取的数据依次保存于存储部21。

[0039] 测量结束后,显示控制部226首先将测量出的所有化合物的测量数据显示在显示部26。此时显示的画面相当于本发明中的第2解析画面。在图4示出第2解析画面的一例。在该画面例中,显示有测量的化合物(此处由于没有使用测量过滤器,因此指在化合物数据库211中收录的所有化合物)的一览,其下显示有各化合物的测量数据。例如,对于进行了MRM测量或S I M测量的化合物,作为测量数据显示有质量色谱图。此外,例如对于进行了MS扫描测量或MS/MS扫描测量的化合物,作为测量数据显示有总离子流色谱图。使用者通过确认在该画面中显示的各化合物的测量数据即质量色谱图或总离子流色谱图等中是否出现峰,能够确认该化合物是否包含于试样中。从图4的画面例可知,化合物3包含于试样中,而化合物1、2、5、6不包含于试样中。

[0040] 如果通过显示控制部226在显示部26中显示第2解析画面,则过滤器选择接受部221将由使用者选择解析过滤器的使用/不使用的画面显示在显示部26。如果使用者选择解析过滤器的使用,则过滤器选择接受部221将选择要使用的解析过滤器的画面显示在显示部26。如果使用者选择某一个解析过滤器,则过滤器选择接受部221将所选择的过滤器决定为解析过滤器。

[0041] 如果决定了解析过滤器,则解析对象化合物提取部223根据选择的解析过滤器的内容,将化合物数据库211中收录的大量化合物中的一部分化合物作为解析对象化合物进行提取。例如,如果选择属性A-1-1,则化合物3、7、13、18等作为解析对象化合物被提取。另外,在不使用解析过滤器的情况下,基于各化合物的解析信息,对化合物数据库211中收录的所有化合物的测量数据进行解析。由于测量过滤器与解析过滤器都没有使用的情况下的处理与以往相同,因此省略说明。

[0042] 如果通过解析对象化合物提取部223提取解析对象化合物,则解析数据生成部225使用该化合物的解析信息对由测量获取的测量数据中的解析对象化合物的测量数据进行

解析。例如,对于进行了MRM测量的化合物,从定量用MRM转换与确认用MRM转换的测量数据中得到的质量色谱图中提取峰,计算出定量用MRM转换的质量峰的面积与确认用MRM转换的质量峰的面积之比。然后,判定该比是否在作为鉴定条件确定的容许范围内。此外,将定量用MRM转换的质量色谱图的峰面积与标准曲线信息进行对照,计算出定量值。或者,例如对于进行了MS/MS扫描测量的化合物,从总离子流色谱图中提取峰,将在其峰顶的时间获取的MS/MS谱与标准谱进行对照,判定其一致度是否超过了预先决定的阈值。然后,将总离子流色谱图的质量峰的峰面积与标准曲线信息进行对照,计算出定量值。

[0043] 如果生成了对于解析对象化合物的解析数据,则显示控制部226将解析对象化合物的测量数据与解析数据显示在显示部26。该显示画面相当于本发明中的第1解析画面。在图5示出第1解析画面的一例。在该画面例中,在画面上部显示有由解析过滤器提取的化合物(解析对象化合物)的一览,其下显示有各解析对象化合物的测量数据(图5的例子中为质量色谱图)与解析结果(定量值)。使用者通过确认该画面中显示的内容,能够简便地确认作为目标的测量对象化合物的解析结果。

[0044] 像这样,在本实施例中,基于使用者的指示,显示控制部226对显示解析对象化合物的测量数据及解析结果的第1解析画面与显示测量的所有化合物的测量数据的第2解析画面进行显示。在本实施例中,显示控制部226首先显示第2解析画面,在使用者选择了解析过滤器的情况下,切换显示为第1解析画面,第1解析画面与第2解析画面的显示方式能够适当地变更。例如,显示控制部226可以在一定的时间间隔内自动地切换第1解析画面与第2解析画面的显示。或者,也可以并列地同时显示第1解析画面与第2解析画面。

[0045] 在第2解析画面中,例如对于在测量前并未设想到包含于试样中的化合物,在获知得到了有意义的测量数据的情况下,能够将该化合物单独地追加至解析对象化合物。如果使用者指示解析对象化合物的变更,则解析对象化合物变更部227显示在化合物数据库211收录的化合物中的、解析对象化合物与除此以外的化合物(对象外化合物)的一览。使用者在该一览显示中,选择例如对象外化合物中的某一个,通过进行追加至解析对象化合物的规定的操作,能够追加解析对象化合物。图6是将作为对象外化合物的化合物5追加至解析对象化合物的情况的例子。此外,也能够将解析对象化合物变更为对象外化合物。在解析对象化合物中追加的化合物其后将显示于第1解析画面。此外,从解析对象化合物中删除的化合物其后将不再显示于第1解析画面。

[0046] 在该例中,通过使用解析过滤器将化合物数据库211中收录的化合物的一部分作为解析对象化合物进行提取,由于在第1解析画面中只显示该解析对象化合物的测量数据及解析数据,能够容易地进行作为目标的化合物的解析。此外,通过确认第2解析画面,也能够确认在测量前并未设想到包含于试样中的化合物的测量数据。并且,通过解析对象化合物变更部227,还能够将这些化合物单独地追加至解析对象化合物。

[0047] 接下来,对使用者选择测量过滤器的使用的情况的例子进行说明。如果使用者选择测量过滤器的使用,则过滤器选择接受部221将选择要使用的测量过滤器的画面显示在显示部26。如果使用者选择某一个测量过滤器并决定,则过滤器选择接受部221将所选择的过滤器决定为测量过滤器。

[0048] 如果决定了测量过滤器,则测量对象化合物提取部222根据测量过滤器的内容,将化合物数据库211中收录的大量化合物中的一部分化合物作为测量对象化合物进行提取。

例如,在测量过滤器为属性A的情况下,化合物2、3、5-7、10-14、18等作为测量对象化合物被提取。

[0049] 接下来,测量控制部224读出记载有试样的测量条件的方法文件,并生成批处理文件。在该例中,由于使用了测量过滤器,因此读出分别对测量对象化合物(化合物2、3、5-7、10-14、18等)进行测量的方法文件,并生成执行这些文件的批处理文件。

[0050] 生成批处理文件后,如果使用者指示测量开始,则测量控制部224按顺序测量试样中包含的测量对象化合物。由测量获取的数据依次保存于存储部21。

[0051] 测量结束后,显示控制部226首先将由测量过滤器提取的测量化合物的测量数据显示在显示部26。此时显示的画面也是显示测量控制部224获取的关于由测量过滤器提取的测量对象化合物的所有测量数据的画面,相当于本发明中的第2解析画面。

[0052] 如果通过显示控制部226在显示部26显示第2解析画面,则过滤器选择接受部221将由使用者选择解析过滤器的画面显示在显示部26。此时,在画面中,与测量过滤器相同或与之相比位于下位层次的过滤器作为可选择的过滤器而显示出来。例如,在测量过滤器为属性A的情况下,作为可选择的解析过滤器,显示有属性A、属性A-1、属性A-1-1、属性A-2、属性A-3等。如果使用者从这些过滤器中选择解析过滤器并决定,则过滤器选择接受部221将所选择的过滤器决定为解析过滤器。

[0053] 如果决定了解析过滤器,则解析对象化合物提取部223根据解析过滤器的内容,将化合物数据库211中收录的化合物中的一部分作为解析对象化合物进行提取。例如,在解析过滤器为属性A-1-1的情况下,化合物3、7、13、18等作为解析对象化合物被提取。

[0054] 如果提取解析对象化合物,则解析数据生成部225从由测量获取的测量数据中读出解析对象化合物(化合物3、7、13、18等)的测量数据,并基于该化合物的解析信息对测量数据进行解析。

[0055] 如果生成对于解析对象化合物的解析数据,则显示控制部226将解析对象化合物的测量数据与解析数据作为第1解析画面显示在显示部26。在该例中,使用者也能够适当地进行解析对象化合物的追加或删除。

[0056] 在该例中,由于通过使用测量过滤器将化合物数据库211中收录的化合物的一部分作为测量对象化合物进行提取,因此与测量化合物数据库211中收录的所有化合物的情况相比,测量的化合物的数量较少。由此能够缩短测量时间。或者,与测量所有化合物的情况相比,能够延长各化合物的测量时间以提高测量灵敏度,或者缩短测量间隔以提高测量的再现性。此外,在该例中,由于通过解析过滤器将测量对象化合物的一部分作为解析对象化合物进行提取,在第1解析画面中只显示该解析对象化合物的测量数据及解析数据,因此能够容易地确认解析对象化合物(化合物3、7、13、18等)的测量数据及解析结果。此外,通过确认第2解析画面,并通过确认当初没有作为解析对象的化合物(化合物2、5、6、10-12、14等)的测量数据,能够确认这些化合物是否包含于试样中。

[0057] 接下来,对新生成化合物数据库211中使用的过滤器的步骤进行说明。

[0058] 使用者收集关于与化合物数据库211中收录的化合物记载的论文等文献等的信息。然后,确认这些化合物是否在与何种属性的试样相关的文献中被报告,将各化合物与试样的属性相关联。由此,能够得到例如将化合物1、5-9、13、15等与属性Z的试样相关联的信息。

[0059] 其后,如果使用者指示过滤器的生成,则过滤器生成部228将输入追加的过滤器名(试样的属性等识别过滤器的信息)的画面显示在显示部26。如果使用者输入过滤器名,则过滤器生成部228将化合物数据库211中收录的化合物的一览与复选框一并显示。在图7示出其中一例。使用者如果在显示的化合物中,基于由文献得到的信息,选择并决定包含在该属性的试样中的化合物的复选框,则生成将使用者输入的过滤器名(试样的属性)与所选择的化合物相关联的过滤器。

[0060] 此外,基于使用者进行的测量及解析的结果也能够生成过滤器。使用者对于想要新登记的属性的试样,使用化合物数据库211中收录的化合物的测量信息执行测量以获取测量数据。该测量也由测量控制部224执行。此外,解析数据生成部225使用这些化合物的解析信息生成解析数据。在最上位的层次中生成新的过滤器的情况下,则既不使用测量过滤器也不使用解析过滤器而进行试样的测量及解析。另一方面,在现有的过滤器的下位层次生成新的过滤器的情况下,也可以将想要生成的过滤器的上位层次的过滤器作为测量过滤器及解析过滤器而使用。过滤器生成部228根据由解析数据生成部225得到的解析结果,来确定包含在试样中的化合物。由此,能够得到将试样的属性与包含在该属性的试样中的化合物相关联的信息。其后,过滤器生成部228在化合物数据库211中收录的化合物中选择包含在该属性的试样中的化合物,与由使用者输入的过滤器名相关联并生成新的过滤器。

[0061] 在通过试样的测量及解析而从该试样中检测出的化合物中,有时会包含也可从空白试样检测出的化合物等。如果将这种化合物作为测量对象化合物或解析对象化合物进行提取,则在进行实际试样的测量及解析时,可能会产生假阳性的结果。因此,对于这些化合物,即使是从试样中检测出的化合物,也优选为从解析对象化合物中排除。因此,过滤器生成部228根据使用者的规定的输入操作,将确定为包含在试样中的化合物的一览显示在显示部26,由使用者指定删除对象的化合物。如果使用者指定删除对象的化合物,则过滤器生成部228从确定为包含在试样中的化合物中删除由使用者指定的化合物并生成新的过滤器。

[0062] 此外,也能够编辑化合物数据库211中已经保存的过滤器。如果使用者指示过滤器的编辑,则过滤器生成部228显示过滤器的一览,并促进使用者对编辑对象的过滤器进行选择。如果使用者选择过滤器,则将显示出与该过滤器相关联的化合物的一览。如果使用者看到该一览,选择可能产生假阳性的化合物,决定将其删除,则过滤器生成部228将删除所选择的化合物,更新过滤器的信息并保存至化合物数据库211。在图8示出过滤器编辑画面的一例。

[0063] 上述实施例是一例,且能根据本发明的主旨适当地进行变更。在上述实施例中,将化合物数据库211作为与代谢物相关的数据库,但在进行代谢物以外的已知化合物的分析的情况下也能够使用与上述同样的方式。

[0064] 上述实施例为气相色谱仪质量分析装置1,但也能够使用其他的分析装置以测量试样中包含的化合物。在该情况下,只要对该分析装置使用事先准备的化合物数据库即可。

[0065] 上述实施例是本发明的优选的一实施方式,但无需具备上述实施例中说明的全部构成要素。例如,根据不具有测量对象化合物提取部222、解析对象化合物变更部227及过滤器生成部228的装置也能够实施本发明。

[0066] 在上述实施例中,对于在解析了解析对象化合物的测量数据的基础上将其结果显

示在第1画面的情况进行了说明,但也可以不进行测量数据的解析,而只将解析对象化合物的测量数据显示在第1画面。在该情况下,只要进行例如基于使用者的追加指示来求得定量值等的解析处理即可,可以不具备解析数据生成部225。

[0067] 在上述实施例中,使用者选择了过滤器本身,但过滤器选择接受部221也可以通过其他方法来接受过滤器的选择。例如,也可以在试样的分析时,根据使用者输入的试样名自动地选择与该试样名相对应的过滤器等,根据预先决定的基准自动地选择过滤器。

[0068] 在上述实施例中,其构成为选择测量过滤器的使用/不使用并执行试样的测量后,选择解析过滤器的使用/不使用,但也可以在测量试样前选择解析过滤器的使用/不使用。此外,在上述实施例中,其构成为在试样的测量后显示第2解析画面,其后,在使用者选择解析过滤器的使用时显示第1解析画面,但在测量试样前选择解析过滤器的情况下,也可以在试样的测量后显示第1解析画面,其后,根据使用者的指示显示第2解析画面。

[0069] [方案]

[0070] 本领域技术人员可以理解,上述多个示例性的实施例为以下方案的具体例。

[0071] (第1项)

[0072] 本发明的一方案的分析装置,具备:

[0073] 存储部,保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息、以及分别提取该多个已知化合物的一部分的多个过滤器的信息;

[0074] 显示部;

[0075] 测量控制部,基于所述存储部中保存的测量条件进行测量而获取试样的测量数据;

[0076] 过滤器选择接受部,接受将所述多个过滤器中的某一个选择为对所述试样的测量数据的解析应用的解析过滤器的输入;

[0077] 解析对象化合物提取部,通过所述解析过滤器将所述多个已知化合物的一部分作为解析对象化合物进行提取;

[0078] 显示控制部,在所述显示部,对显示所述试样的测量数据中的所述解析对象化合物的测量数据的第1解析画面与显示所有测量数据的第2解析画面进行显示。

[0079] 第1项的分析装置具备除了保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息、此外还保存有用于提取多个已知化合物中的一部分的多个过滤器的信息的存储部。该过滤器基于例如过去进行的分析的结果或实际试样的测量及解析结果而生成。这些多个过滤器中能够使用例如按每个试样的属性生成的过滤器或按每个试样的分析目的生成的过滤器。或者,可以设为如下的过滤器:例如根据试样的属性(例如“植物”),从化合物数据库中提取除去难以认为包含于该属性的试样中的化合物(例如只从动物生成的代谢物)而得的化合物。在任何情况下,都能够从保存于存储部的多个过滤器中选择适合试样的属性或分析的目的的过滤器作为解析用的过滤器。

[0080] 在进行试样的分析时,使用保存于存储部的测量条件进行测量而获取试样的测量数据。过滤器选择接受部接受例如使用者对过滤器的选择。过滤器选择接受部不局限于接受使用者对过滤器的选择,也可以在试样的分析时根据使用者输入的试样名自动地选择与该试样名相对应的过滤器等,根据预先决定的基准自动地选择过滤器。

[0081] 生成的解析对象化合物的测量数据通过显示控制部作为第1解析画面显示在显示

部。此外,利用测量控制部获取的所有测量数据通过显示控制部显示为第2解析画面。通过显示控制部进行第1解析画面与第2解析画面的显示时,可以将它们切换显示在显示部,也可以将它们并列地同时显示。在第1项的分析装置中,例如使用者仅根据试样的分析内容选择解析用的过滤器而简便地锁定应该解析的化合物,即可显示出显示这些解析对象化合物的测量数据的第1解析画面,因此能够简便地解析这些化合物。此外,对于解析对象化合物以外的测量数据,也能够通过第2解析画面进行确认。

[0082] (第2项)

[0083] 在第1项所述的分析装置中,

[0084] 所述多个已知化合物的一部分或全部为代谢物,所述过滤器是根据试样的属性而生成的。

[0085] 在第2项的分析装置中,作为保存于存储部的多个过滤器,使用试样的属性不同的过滤器。第2项的分析装置能够优选地应用于对植物、动物等各种属性的试样中包含的代谢物进行解析的代谢组学。

[0086] (第3项)

[0087] 在第1项或第2项所述的分析装置中,

[0088] 所述过滤器选择接受部进一步接受将所述多个过滤器中的某一个选择为对所述试样的测量应用的测量过滤器的输入,

[0089] 所述分析装置还具备测量对象化合物提取部,通过所述测量过滤器将所述多个已知化合物的一部分作为测量对象化合物进行提取,

[0090] 所述测量控制部使用保存于所述存储部的所述测量对象化合物的测量条件进行测量而获取所述试样的测量数据。

[0091] (第4项)

[0092] 在第1项至第3项的任一项所述的分析装置中,

[0093] 所述多个过滤器包括提取所述存储部所保存的多个已知化合物中的一部分的第1过滤器、与提取由该第1过滤器提取出的已知化合物中的一部分的第2过滤器。

[0094] (第5项)

[0095] 在第3项所述的分析装置中,

[0096] 所述多个过滤器包括提取所述存储部所保存的多个已知化合物中的一部分的第1过滤器、与提取由该第1过滤器提取出的已知化合物中的一部分的第2过滤器,

[0097] 所述过滤器选择接受部在选择所述第1过滤器作为所述测量过滤器的情况下,作为所述解析过滤器接受对所述第1过滤器或所述第2过滤器的选择,在选择所述第2过滤器作为所述测量过滤器的情况下,作为所述解析过滤器接受对所述第2过滤器的选择。

[0098] 在第3项及第5项的分析装置中,不仅将保存于存储部的过滤器作为解析用的过滤器,也作为测量用的过滤器使用。在第3项及第5项的分析装置中,通过使用第1过滤器锁定要测量的化合物,能够延长各化合物的测量时间或缩短测量间隔,从而提高测量灵敏度或测量的再现性。

[0099] 此外,在第4项及第5项的分析装置中,由于第1过滤器与第2过滤器分层次设置,因此能够根据试样的属性或分析的目的而使用合适的过滤器。

[0100] (第6项)

- [0101] 在第1项至第5项的任一项所述的分析装置中，
- [0102] 还具备解析对象化合物变更部，接受所述解析对象化合物的追加及删除，
- [0103] 所述显示控制部将所述解析对象化合物变更部接受的变更后的解析对象化合物的测量数据显示在所述第1解析画面。
- [0104] 在第6项的分析装置中，在检测出测量前并未设想到包含在试样中、且在解析过滤器中没有提取到的化合物的情况下，通过将其追加至解析对象化合物，能够在第1解析画面中简便地确认该化合物的测量数据。
- [0105] (第7项)
- [0106] 在第1项至第6项的任一项所述的分析装置中，
- [0107] 还具备过滤器生成部，根据识别过滤器的信息的输入及保存于所述存储部的多个已知化合物中的一部分的选择而生成新的过滤器并保存于所述存储部。
- [0108] 在第7项的分析装置中，使用者能够生成所期望的过滤器并追加至化合物数据库。
- [0109] (第8项)
- [0110] 在第7项所述的分析装置中，
- [0111] 所述过滤器生成部基于利用所述解析方法对由所述测量控制部获取的试样的测量数据进行解析来确定包含于该试样中的化合物而得的结果，选择保存于所述存储部的多个已知化合物中的一部分。
- [0112] (第9项)
- [0113] 在第8项所述的分析装置中，
- [0114] 所述过滤器生成部接受指定所述确定的化合物中的一部分的输入，并从所述确定的化合物中排除该指定的化合物，从而选择保存于所述存储部的多个已知化合物中的一部分。
- [0115] 在第8项的分析装置中，基于由实际试样的测量得到的测量数据的解析结果，能够在化合物数据库中追加过滤器。另外，测量控制部在测量实际试样时，可以测量保存于存储部的多个化合物的全部，也可以使用测量过滤器等，只测量保存于存储部的多个化合物中的一部分。此外，典型地，对于测量的所有化合物使用保存于存储部的解析方法来获取解析结果，但也可以只针对测量的化合物中的一部分使用保存于存储部的解析方法来获取解析结果。
- [0116] 在第8项的分析装置中，典型地，基于上述解析结果，生成对确定为包含于实际试样中的所有化合物进行提取的过滤器，但如第9项的分析装置那样，也可以排除所确定的化合物的一部分而生成过滤器。在第9项的分析装置中，在实际试样的测量及解析中检测出的化合物中，由使用者指定也可从空白试样中检测出的化合物等，通过生成对从上述所确定的化合物中除去该指定的化合物而得的化合物进行提取的过滤器，能够降低在进行试样的测量及解析时产生假阳性的结果的可能性。
- [0117] (第10项)
- [0118] 本发明的另一方案是生成过滤器的方法，所述过滤器用于从保存有多个已知化合物的测量条件及解析方法的信息的数据库中提取该多个已知化合物的一部分来作为试样的测量时的测量对象化合物或试样的测量数据的解析时的解析对象化合物，
- [0119] 所述生成过滤器的方法收集对于所述多个已知化合物的任一个记载的文献的信

息；

[0120] 基于所述文献中记载的信息，将该文献中记载的已知化合物与试样的属性相关联；

[0121] 根据对所述试样的属性的选择，生成提取与该属性相关联的已知化合物的过滤器。

[0122] 在第10项的方法中，能够基于论文等文献中发表的测量结果或解析结果来生成新的过滤器。

[0123] 附图标记说明

[0124] 1气相色谱仪质量分析装置

[0125] 10测量部(气相色谱仪质量分析部)

[0126] 20控制与处理部

[0127] 21存储部

[0128] 211化合物数据库

[0129] 221过滤器选择接受部

[0130] 222测量对象化合物提取部

[0131] 223解析对象化合物提取部

[0132] 224测量控制部

[0133] 225解析数据生成部

[0134] 226显示控制部

[0135] 227解析对象化合物变更部

[0136] 228过滤器生成部

[0137] 25输入部

[0138] 26显示部。

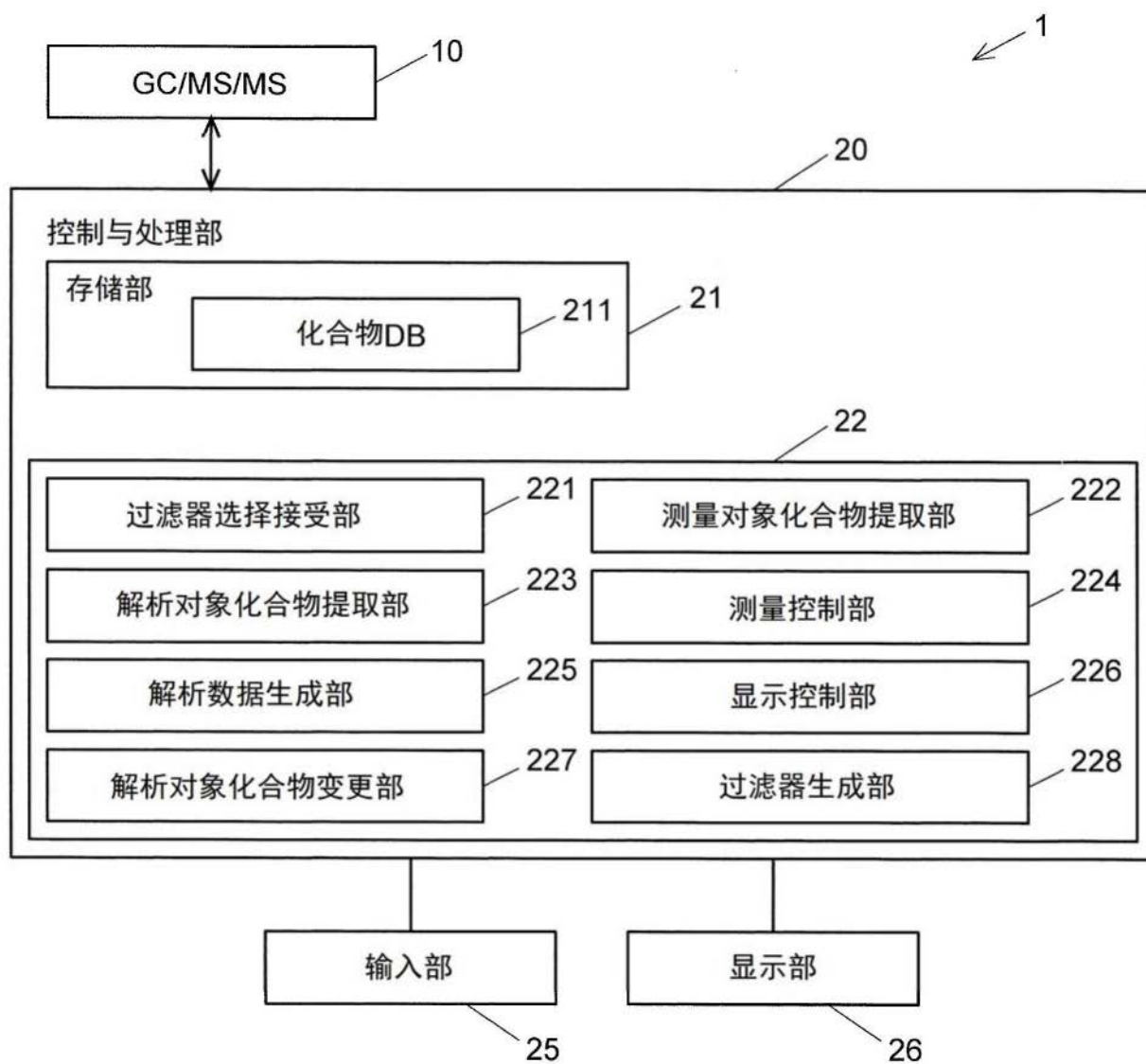


图1

No	化合物名	测量信息				解析信息			
		保留时间	测量模式	定量离子	确认离子	测量数据	定量/确认	标准曲线	
1	化合物1	t1s - t1e	MRM	Pre1a > Pro1a	Pre1b > Pre1b	质量色谱图	Ra	标准曲线1	
2	化合物2	t2s - t2e	MRM	Pre2a > Pro2a	Pre2b > Pre2b	质量色谱图	Rb	标准曲线2	
3	化合物3	t3s - t3e	MRM	Pre3a > Pro3a	Pre3b > Pre3b	质量色谱图	Rc	标准曲线3	
4	化合物4	t4s - t4e	MRM	Pre4a > Pro4a	Pre4b > Pre4b	质量色谱图	Rd	标准曲线4	
5	化合物5	t5s - t5e	MRM	Pre5a > Pro5a	Pre5b > Pre5b	质量色谱图	Re	标准曲线5	
6	化合物6	t6s - t6e	MRM	Pre6a > Pro6a	Pre6b > Pre6b	质量色谱图	Rf	标准曲线6	
7	化合物7	t7s - t7e	MRM	Pre7a > Pro7a	Pre7b > Pre7b	质量色谱图	Rg	标准曲线7	
8	化合物8	t8s - t8e	MRM	Pre8a > Pro8a	Pre8b > Pre8b	质量色谱图	Rh	标准曲线8	
9	化合物9	t9s - t9e	MRM	Pre9a > Pro9a	Pre9b > Pre9b	质量色谱图	Ri	标准曲线9	
10	化合物10	t10s - t10e	MRM	Pre10a > Pro10a	Pre10b > Pre10b	质量色谱图	Rj	标准曲线10	
11	化合物11	t11s - t11e	MRM	Pre11a > Pro11a	Pre11b > Pre11b	质量色谱图	Rk	标准曲线11	
12	化合物12	t12s - t12e	MRM	Pre12a > Pro12a	Pre12b > Pre12b	质量色谱图	RI	标准曲线12	
13	化合物13	t13s - t13e	MRM	Pre13a > Pro13a	Pre13b > Pre13b	质量色谱图	Rm	标准曲线13	
14	化合物14	t14s - t14e	MRM	Pre14a > Pro14a	Pre14b > Pre14b	质量色谱图	Rn	标准曲线14	
15	化合物15	t15s - t15e	MRM	Pre15a > Pro15a	Pre15b > Pre15b	质量色谱图	Ro	标准曲线15	
16	化合物16	t16s - t16e	MRM	Pre16a > Pro16a	Pre16b > Pre16b	质量色谱图	Rp	标准曲线16	
17	化合物17	t17s - t17e	MRM	Pre17a > Pro17a	Pre17b > Pre17b	质量色谱图	Rq	标准曲线17	
18	化合物18	t18s - t18e	MRM	Pre18a > Pro18a	Pre18b > Pre18b	质量色谱图	Rr	标准曲线18	
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

图2

No	化合物名	过滤器信息										
		属性A	属性A-1	属性A-1-1	...	属性A-2	属性A-3	...	属性B	...	属性C	...
1	化合物1								○			
2	化合物2	○				○			○		○	
3	化合物3	○	○	○		○	○		○		○	
4	化合物4											
5	化合物5	○	○				○					
6	化合物6	○	○			○	○		○		○	
7	化合物7	○	○	○		○			○			
8	化合物8											
9	化合物9											
10	化合物10	○	○			○	○					
11	化合物11	○	○			○	○		○		○	
12	化合物12	○	○			○	○		○		○	
13	化合物13	○	○	○		○	○		○		○	
14	化合物14	○	○			○	○		○			
15	化合物15								○			
16	化合物16										○	
17	化合物17										○	
18	化合物18	○	○	○			○				○	
...	...	...	...			...	...	...	...	...	...	...

图3

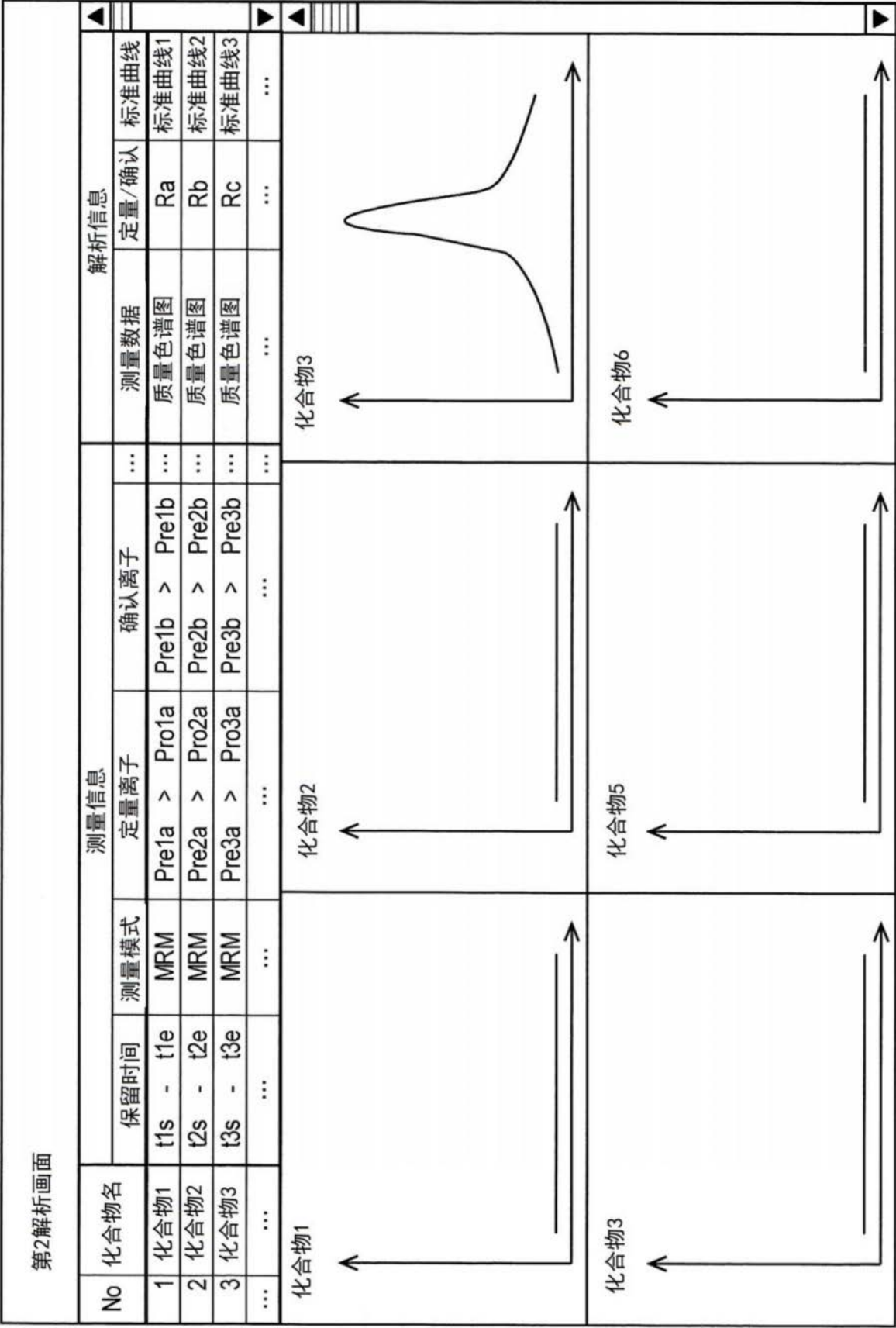


图4

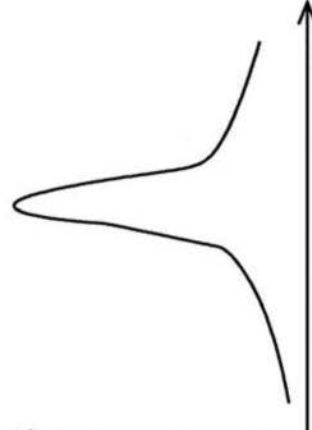
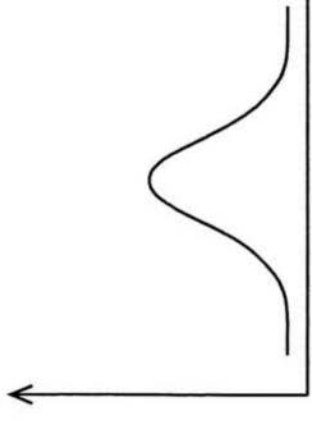
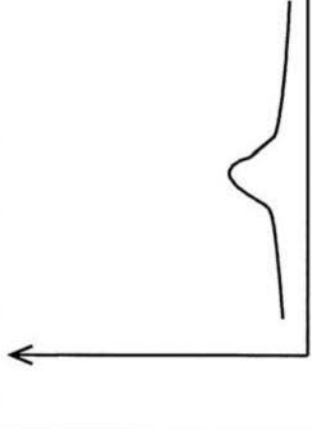
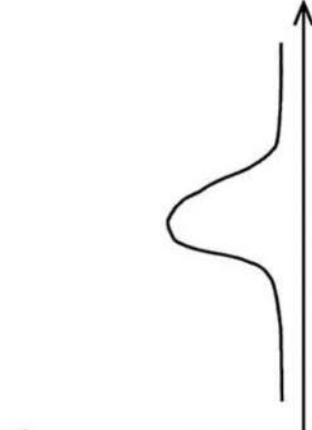
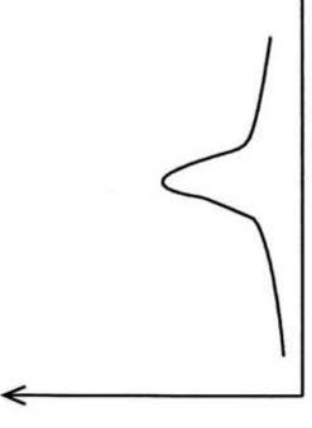
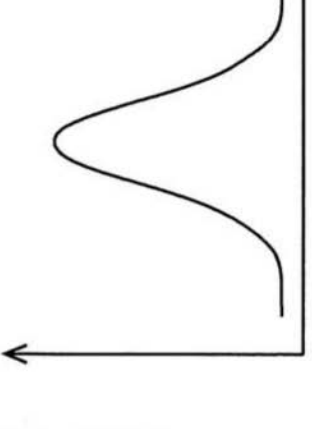
第1解析画面									
No	化合物名	测量信息			解析信息			解析结果	
		保留时间	测量模式	定量离子	确认离子	测量数据	定量/确认	标准曲线	定量/确认 定量值
3	化合物3	t3s - t3e	MRM	Pre3a > Pro3a	Pre3b > Pre3b	质量色谱图	Rc	标准曲线3	0 Qc
13	化合物13	t13s - t13e	MRM	Pre13a > Pro13a	Pre13b > Pre13b	质量色谱图	Rm	标准曲线13	0 Qm
18	化合物18	t18s - t18e	MRM	Pre18a > Pro18a	Pre18b > Pre18b	质量色谱图	Rr	标准曲线18	0 Qr
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
化合物3		定量值Qc			化合物13 定量值Qm			化合物18 定量值Qr	
									
化合物19		定量值Qs			化合物24 定量值Qx			化合物25 定量值Qy	
									

图5

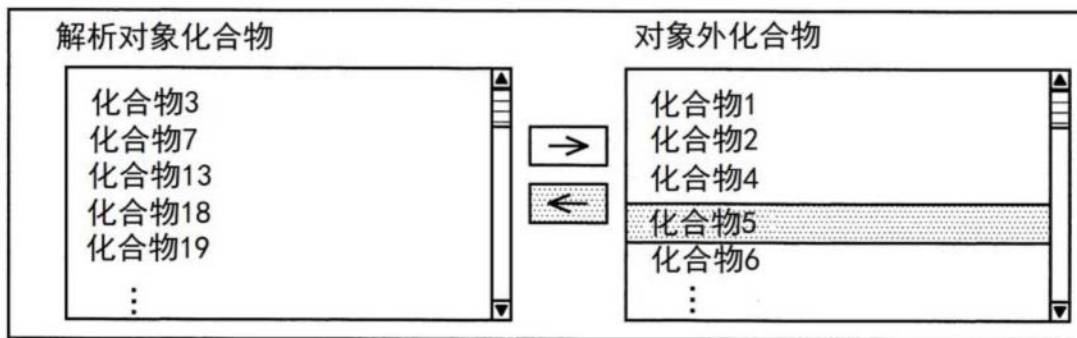


图6

过滤器生成

No	化合物名	过滤器信息
		过滤器Z
1	化合物1	☒
2	化合物2	☐
3	化合物3	☐
4	化合物4	☐
5	化合物5	☒
6	化合物6	☒
7	化合物7	☒
8	化合物8	☒
9	化合物9	☒
10	化合物10	☐
11	化合物11	☐
12	化合物12	☐
13	化合物13	☒
14	化合物14	☐
15	化合物15	☒
16	化合物16	☐
17	化合物17	☐
18	化合物18	☐
...	...	...

图7

过滤器编辑

No	化合物名	过滤器信息
		过滤器Z
1	化合物1	☐
5	化合物5	☐
6	化合物6	☒
7	化合物7	☐
8	化合物8	☐
9	化合物9	☐
13	化合物13	☐
15	化合物15	☐
...	...	...

取消 删除

图8