

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6007855号
(P6007855)

(45) 発行日 平成28年10月12日 (2016. 10. 12)

(24) 登録日 平成28年9月23日 (2016. 9. 23)

(51) Int. Cl.	F I
GO 6 F 3/0484 (2013. 01)	GO 6 F 3/0484
GO 1 N 21/27 (2006. 01)	GO 1 N 21/27 Z
GO 1 N 27/62 (2006. 01)	GO 1 N 27/62 Y

請求項の数 7 (全 24 頁)

(21) 出願番号	特願2013-93280 (P2013-93280)	(73) 特許権者	000001993
(22) 出願日	平成25年4月26日 (2013. 4. 26)		株式会社島津製作所
(65) 公開番号	特開2014-75114 (P2014-75114A)		京都府京都市中京区西ノ京桑原町 1 番地
(43) 公開日	平成26年4月24日 (2014. 4. 24)	(74) 代理人	110001069
審査請求日	平成27年7月10日 (2015. 7. 10)		特許業務法人京都国際特許事務所
(31) 優先権主張番号	特願2012-202325 (P2012-202325)	(72) 発明者	宇都宮 真一
(32) 優先日	平成24年9月14日 (2012. 9. 14)		京都市中京区西ノ京桑原町 1 番地 株式会
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		社島津製作所内

審査官 西田 聡子

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 グラフ表示処理装置

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、そのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a) 表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウのそれぞれを、操作者の操作に応じて任意の位置に移動させるための初期位置指定手段と、

b) 該初期位置指定手段による移動後の複数の前記ウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する初期位置情報取得手段と、

c) 操作者が表示画面上で整列表示の様式を定めるべく操作するための整列表示様式指定手段と、

d) 前記初期位置情報取得手段により得られた各ウインドウの初期位置情報と前記整列表示様式指定手段により指定された整列表示様式とに基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

e) 該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、を備えることを特徴とするグラフ表示処理装置。

【請求項 2】

請求項 1 に記載のグラフ表示処理装置であって、

10

20

前記複数のウインドウを整列表示する表示枠を操作者が表示画面上で指定するための表示枠指定手段をさらに備え、

前記整列後表示情報算出手段は、前記表示枠指定手段により指定された表示枠を表示すべきウインドウ数及び整列表示様式に応じて複数の区切って、各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算することを特徴とするグラフ表示処理装置。

【請求項 3】

請求項 2 に記載のグラフ表示処理装置であって、

前記整列表示様式指定手段は、前記表示枠を複数の区切ることで形成される各領域のサイズを調整するためのサイズ特定情報の指定を可能とし、

前記整列後表示情報算出手段は、前記サイズ特定情報に基づいて前記表示枠を複数の区切ることを特徴とするグラフ表示処理装置。

10

【請求項 4】

試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、特定の整列表示様式に従ってそれらのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a) 表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウのそれぞれを、操作者の操作に応じて任意の位置に移動させるための初期位置指定手段と、

b) 該初期位置指定手段による移動後の複数の前記ウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する初期位置情報取得手段と、

c) 該初期位置情報取得手段により得られた各ウインドウの初期位置情報と、予め定められた整列表示様式とに基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

20

d) 該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、
を備えることを特徴とするグラフ表示処理装置。

【請求項 5】

試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、そのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

30

a) 表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウのそれぞれを、操作者の操作に応じて任意の位置に移動させるための初期位置指定手段と、

b) 該初期位置指定手段による移動後の複数の前記ウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する初期位置情報取得手段と、

c) 表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウの全てについて、各ウインドウに予め付与されている、ウインドウ内に配置されたグラフの種別及び該グラフの由来を示す情報を少なくとも含むウインドウ属性情報を収集し、収集した複数のウインドウに対応するウインドウ属性情報に基づいて整列表示様式を決定する整列表示様式決定手段と、

d) 前記初期位置情報取得手段により得られた各ウインドウの初期位置情報と前記整列表示様式決定手段により決定された整列表示様式とに基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

40

e) 該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、
を備えることを特徴とするグラフ表示処理装置。

【請求項 6】

試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、そのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a) 表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウの全てについて、各ウインドウに

50

予め付与されている、ウインドウ内に配置されたグラフの種別及び該グラフの由来を示す情報を少なくとも含むウインドウ属性情報を収集し、収集した複数のウインドウに対応するウインドウ属性情報に基づいて整列表示様式を決定するとともに、該ウインドウ属性情報に基づいて各ウインドウの整列順序を決定する整列表示則決定手段と、

b) 該整列表示則決定手段により決定された整列表示様式及び整列順序に基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

c) 該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、
を備えることを特徴とするグラフ表示処理装置。

10

【請求項 7】

請求項 1 ～ 6 のいずれかに記載のグラフ表示処理装置であって、

前記整列表示処理手段は、操作者の操作に応じて、2 次元的な整列表示様式の行方向と列方向とを入れ替える、又は、2 次元的な整列表示様式の行方向と列方向との少なくとも一方の整列順序若しくは 1 次元的な整列表示様式の整列順序を逆にする表示規則反転手段を含むことを特徴とするグラフ表示処理装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計等の様々な分析装置や計測装置で収集されたデータに基づいて作成されるクロマトグラムやスペクトル、或いはマッピング画像など各種のグラフを表示画面上に表示するためのグラフ表示処理装置に関する。

20

【背景技術】

【0002】

クロマトグラフと質量分析計とを組み合わせた液体クロマトグラフ質量分析計 (LC/MS) やガスクロマトグラフ質量分析計 (GC/MS) では、試料に対する分析により得られたデータに基づいて、任意の時刻におけるマススペクトルを作成することが可能であるほか、トータルイオンクロマトグラムや任意の質量電荷比 m/z に対するマスクロマトグラムなどのクロマトグラムを作成することが可能である。また、紫外可視分光光度計やフーリエ変換赤外分光光度計などの分析装置では、試料に対する分析により得られたデータに基づいて吸収スペクトルや反射スペクトルなどを作成することが可能である。

30

【0003】

近年、こうした分析装置におけるデータ処理には、殆どの場合、汎用のパーソナルコンピュータが利用されており、パーソナルコンピュータにインストールされた専用の制御・処理アプリケーションソフトウェアを実行することで、各種のデータ解析やその結果の表示が実行されるようになってきている。また、こうした解析結果は表示されるだけでなく、報告書やプレゼンテーション資料等の文書に貼り付けて使用されることもある。

【0004】

上述したような分析装置により得られた分析結果を解析したり複数の試料に対する分析結果同士を比較したりする際に、分析担当者は、スペクトルやクロマトグラムなどの様々なグラフを適宜取捨選択した上で画面上に表示させ、それらグラフ上で目的とする個所の波形を子細に観察したり複数の波形形状等の比較を行ったりする。こうした解析作業が円滑に行えるように、従来の分析装置では、クロマトグラムやマススペクトルなどのグラフがそれぞれ配置されたウインドウをモニタ画面上に複数表示できるようにし、各ウインドウのサイズや位置を分析担当者が適宜に調整することにより、比較対照等の作業が容易に行えるようにしている。

40

【0005】

例えば特許文献 1 及び特許文献 2 には、一つの大きなウインドウの内部を複数に区分した各領域 (この「領域」は特許文献 2 では「タイルウインドウ」と呼ばれている) 内にそ

50

れぞれクロマトグラムやマススペクトルなどのグラフを表示する表示制御装置が開示されている。このような表示形式においては、マウス等のポインティングデバイスを用い各領域を区分する枠線をドラッグ操作することで、各領域のサイズを簡単に変更することが可能である。その反面、各領域にそれぞれ表示されているグラフの位置を入れ替えるといった操作は面倒であり、そうした点で複数のグラフ配置の自由度は低いといえる。なお、一般に、このような表示はタイル型ウインドウマネージャと呼ばれるソフトウェアで実現される。

【 0 0 0 6 】

一方、特許文献 3 に開示されているような、グラフ毎に完全に独立したウインドウを開くようにした表示形式も知られている。こうした表示方式では、ポインティングデバイスを用いたドラッグアンドドロップ操作により各ウインドウを表示画面上の任意の位置に移動させることが可能であり、また、各ウインドウのサイズの拡大・縮小も簡便に行える。そのため、上述したタイルウインドウ型の表示方式に比べて、表示や操作上の自由度が大きいといえる。一般に、このような表示はコンジョイント型ウインドウマネージャと呼ばれるソフトウェアで実現される。

【 0 0 0 7 】

後者のように、各グラフがそれぞれ独立したウインドウ内に配置され表示される場合でも、同じ試料に対し異なる条件下で分析された結果を比較する場合や目的試料と参照試料との結果を比較する場合などにおいては、比較すべき複数のグラフがそれぞれ配置された複数のウインドウを、例えば同じサイズに揃えて上下或いは左右に整列表示させる必要がある。この種の表示制御が可能な多くのアプリケーションソフトウェアにおいて、こうした整列表示は以下のような操作及び手順により実現されている。

【 0 0 0 8 】

(1) 操作者はまず、ポインティングデバイスを用いたクリック操作等により、表示画面上に表示されている複数のウインドウについて、整列させたい順番に対象ウインドウを指定する。こうした入力操作を受けて、コンピュータ内部では、それらウインドウの指定された順序をウインドウ整列順指定情報として記憶する。

(2) 操作者は次に、操作メニュー選択等により、縦 (垂直) 方向、横 (水平) 方向等の整列表示様式を指定する。この入力操作を受けてコンピュータ内部では、指定された整列表示様式に応じて、上記のウインドウ整列順指定情報をウインドウ整列表示に必要な空間的ウインドウ整列表示情報に変換する。

(3) 算出された空間的ウインドウ整列表示情報に従って複数の対象ウインドウを並べ替えるとともに整列させ、これを表示部の画面上に表示する。

【 0 0 0 9 】

図 9 は上記手順に従ったウインドウ整列表示の一例を示す図である。これは、質量分析計で作成された MS / MS スペクトルがそれぞれ配置された 3 個のウインドウ 1 0 1、1 0 2、1 0 3 を、質量走査の順番を示すスキャン (Scan) 番号順に縦方向に整列表示させる例である。いま、表示画面上の各ウインドウの配置の初期状態が、図 9 (a) である状態、つまり、各ウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 のサイズは統一されておらず、且つその一部が重なった不揃いの状態であるものとする。この状態において操作者は、各ウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 を並べたい順にクリック操作する。ここでは、図 9 (a) の右方に記した [1] [2] [3] の順に、3 個のウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 がクリック操作されたものとする。

【 0 0 1 0 】

次に、操作者が所定の操作を行うと、図 4 に示すような整列表示様式指定ダイアログ 1 1 0 が表示画面上に表示されるので、操作者は所望の整列表示様式の選択肢を指定する。ここでは、整列表示様式指定ダイアログ 1 1 0 で「上下に並べて表示」の選択肢が選択指定されたものとする。この指定に応じて各ウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 のサイズは同一サイズに調整され、さらに図 9 (b) に示すように、指定された順序に並べ替えられて整列表示される。整列表示様式指定ダイアログ 1 1 0 において「左右に並べて表示」の選択肢が

選択指示された場合には、横方向の幅が等しく調整された 3 個のウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 を横に整列表示した表示画像が描出される。

【 0 0 1 1 】

しかしながら、上記のような従来の操作及び処理によるウインドウ整列表示処理には次のような問題がある。

【 0 0 1 2 】

(1) 操作者による複数のウインドウの整列順序の指定は時系列に従った指定であるのに対し、実際のウインドウの整列は空間的な順序に従った配置である。ソフトウェアにおいては時系列情報と空間的系列情報との対応関係は明確に定まっているものの、一般的に操作者はこの対応関係を誤認し易い。例えば上述したような縦方向のウインドウ整列表示機能では、配置順序指定時の各ウインドウに対するクリック操作の古い順(時間的に早い順)に、ウインドウを下から上に向かって順番に配置していくが、操作者によっては、逆にウインドウが上から下に向かって順番に配置されるものと誤認してしまう場合がある。この場合、操作者が意図するところとは逆の整列表示結果となってしまうことになる。

【 0 0 1 3 】

(2) 操作者が複数のウインドウを順番に指定する際に、その操作者は既に自分が指定したウインドウの順番を覚えておきつつ指定操作を繰り返さなければならない。このため、整列対象のウインドウ数が多くなると整列順序の指定忘れや重複指定などの間違いが生じ易くなり、その結果、操作者の意図を十分に反映した整列表示結果が得られにくくなる。また、ウインドウを順番に指定する途中でその順序の間違いに気付いたときには再度全ての指定操作をやり直す必要があり、操作が面倒で手間が掛かる。また、そうした順序を途中で簡単に修正ができないことは、操作者にとって心理的な負担にもなる。

【 0 0 1 4 】

(3) 上下整列や左右整列など 1 次元的な整列の場合には、整列順序指定の時系列情報とウインドウ整列の空間的系列情報との対応関係が比較的分かり易いが、上下方向の行数及び左右方向の列数を定めた上でウインドウを 2 次元的に整列表示したい場合には、操作は非常に煩雑になり、操作者が直観的に操作を理解するのは困難である。何故なら、ウインドウの指定順序として、例えば整列したい順に上から下方に各行を指定するとともに各行の中では左から右方に指定する、等の規則を定めておけばよいが、指定方法としてはこれ以外にも何通りかの方法が考えられ、定められた指定方法がいずれであるのかを操作者が覚えておく必要があるからである。そのため、2 次元的な整列表示の際の操作性は良好でなく、操作上の間違いを防止することも難しい。

【先行技術文献】

【特許文献】

【 0 0 1 5 】

【特許文献 1】特開 2 0 0 6 - 3 1 8 1 9 9 号公報

【特許文献 2】特開 2 0 0 8 - 5 2 5 8 0 号公報

【特許文献 3】特開 2 0 1 0 - 5 4 3 1 8 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【 0 0 1 6 】

本発明は上記課題を解決するためになされたものであり、その主な目的は、それぞれスペクトルやクロマトグラム又はデータ値を表示輝度で示したマッピング画像等のグラフが配置された複数のウインドウを所望の状態に整列表示する際に、操作性を向上させることで作業効率を改善するとともに、作業誤りの発生、つまりは意図しない整列状態となることを回避することができるグラフ表示処理装置を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【 0 0 1 7 】

上記課題を解決するために成された本発明の第 1 の態様は、試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置

10

20

30

40

50

し、そのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a)表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウのそれぞれを、操作者の操作に応じて任意の位置に移動させるための初期位置指定手段と、

b)該初期位置指定手段による移動後の複数の前記ウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する初期位置情報取得手段と、

c)操作者が表示画面上で整列表示の様式を定めるべく操作するための整列表示様式指定手段と、

d)前記初期位置情報取得手段により得られた各ウインドウの初期位置情報と前記整列表示様式指定手段により指定された整列表示様式とに基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

e)該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、を備えることを特徴としている。

【0018】

本発明に係るグラフ表示処理装置において、初期位置指定手段は例えば、マウス等のポインティングデバイスと、操作者による該デバイスのドラッグアンドドロップ操作を受けて、その操作量や操作方向等の情報に基づき表示画面上に表示されているウインドウを移動させるユーザインターフェイスと、を含む。

【0019】

それぞれ1以上のグラフが描画されている複数のウインドウを整列表示したい場合、操作者は初期位置指定手段により、表示画面上に表示されている複数のウインドウを、おおよその所望の位置に並べ替える。このとき、各ウインドウのサイズは様々である場合もあるから、略矩形形状であるウインドウのいずれかのコーナー部を各ウインドウの代表点と定めておき、その代表点で以て各ウインドウの概略的なレイアウトが定まるようにするとよい。このように、本発明の第1の態様では、操作者の操作に応じた整列前のウインドウの初期配置が表示画面上に表示されるため、操作者はこれを目視で確認しながらおおまかな配置を指定すればよい。したがって、操作者は整列後の表示状態を容易に予想することができ、クリック操作の順序で整列順序を指定していた従来の手法で生じる整列方向の誤認は生じない。

【0020】

上記のような操作者の操作に応じて複数のウインドウの初期位置が定まると、初期位置情報取得手段はそれら複数のウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する。例えば各ウインドウの代表点の位置座標を初期位置情報とすればよい。また、操作者は整列表示様式指定手段により、整列表示の様式を指定する。ここでいう整列表示様式とは、1次元方向の整列であれば縦又は横の整列方向、2次元方向の整列であれば縦方向の行数及び横方向の列数、を含むものとすることができる。

【0021】

整列表示様式が定まると、整列後表示情報算出手段は、複数のウインドウを整列表示すべく予め与えられている表示枠を、該整列表示様式と表示すべきウインドウの数とに応じて区切ることで各ウインドウの表示位置情報を求め、同時に各ウインドウの表示サイズも求める。そして、整列表示処理手段は、算出された表示サイズに従って各ウインドウをグラフとともに拡大又は縮小し、その拡大又は縮小されたウインドウを整列後表示位置情報に従って整列表示させてその結果を表示画面上に描出する。

【0022】

なお、複数のウインドウが配置される上記表示枠はそのサイズが固定されていてもよいが、操作者がそのサイズを自由に調整できるほうが便利である。そこで、本発明の第1の態様による装置では、前記複数のウインドウを整列表示する表示枠を操作者が表示画面上で指定するための表示枠指定手段をさらに備え、前記整列後表示情報算出手段は、前記表

示枠指定手段により指定された表示枠を表示すべきウインドウ数及び整列表示様式とに応じて複数に区切り、各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する構成とするとよい。これは、以下の第2乃至第4の態様による装置でも同様である。

【0023】

これにより、例えば操作者が表示画面上で別の情報と併せて複数のウインドウ内に配置されたグラフを見たい場合には、その別の情報と重ならないように表示枠のサイズを調整すればよい。また、各ウインドウに配置されるグラフの種類などに応じて、各グラフが見易い又は不自然でない縦横比になるように表示枠のサイズを適宜に調整することもできる。

【0024】

また一般的には、同種のグラフをそれぞれ配置した複数のウインドウを整列表示する場合、全てのウインドウのサイズを揃える、つまり同一とすると見易いことが多い。そのため、通常、上述したような構成で充分であるものの、異なる種類のグラフ、例えばクロマトグラムとマッピング画像とをそれぞれ配置した複数のウインドウを整列表示するような場合には、そのグラフの種類などに応じてウインドウのサイズを調整したほうが、解析作業に適していることもある。

【0025】

そこで、本発明の第1の態様による装置では、前記整列表示様式指定手段は、前記表示枠を複数に区切ることで形成される各領域のサイズを調整するためのサイズ特定情報の指定を可能とし、前記整列後表示情報算出手段は、前記サイズ特定情報に基づいて前記表示枠を複数に区切る構成とするとさらに好ましい。このサイズ特定情報としては、例えば縦方向及び横方向にそれぞれ複数配置されるウインドウの高さ及び幅の比率などとすればよい。

【0026】

これにより、例えば特に重要であるグラフや情報量が多い細かいグラフが配置されたウインドウに対しては他のウインドウよりも大きなサイズを割り当てることで、解析作業などに好適な表示を行うことができる。また、こうした表示結果を報告等を目的として紙などに出力する際にも、バランスが良好で見栄えのよい報告書を簡便な操作で迅速に作成することができる。

【0027】

なお、操作者が一旦定めた整列表示様式を繰り返し使用する場合や、装置に既定の整列表示様式を使用する場合には、整列表示様式指定手段は必ずしも必要ない。

【0028】

そこで、上記課題を解決するために成された本発明の第2の態様であるグラフ表示処理装置は、試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、特定の整列表示様式に従ってそれらのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a)表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウのそれぞれを、操作者の操作に応じて任意の位置に移動させるための初期位置指定手段と、

b)該初期位置指定手段による移動後の複数の前記ウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する初期位置情報取得手段と、

c)該初期位置情報取得手段により得られた各ウインドウの初期位置情報と、予め定められた整列表示様式とに基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

d)該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、を備えるものとすることができる。

【0029】

即ち、整列後表示情報算出手段は、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情

10

20

30

40

50

報を計算する際に、整列表示様式指定手段により指定された整列表示様式ではなく、予め定められた整列表示様式を参照する。

【0030】

上記本発明の第2の態様による装置では、操作者が随時、整列表示様式を指定する必要はないものの、例えば表示したいグラフの個数やグラフの種別などが変更されたときには、使用する整列表示様式を変更する操作が必要となる場合がある。特に、整列表示様式を定めるために縦方向の行数及び横方向の列数を操作者が指定する必要がある場合には、そうした操作は操作者にとって煩雑でミスも生じ易い。

【0031】

そこで、上記課題を解決するために成された本発明の第3の態様であるグラフ表示処理装置は、試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、そのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a)表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウのそれぞれを、操作者の操作に応じて任意の位置に移動させるための初期位置指定手段と、

b)該初期位置指定手段による移動後の複数の前記ウインドウの位置情報を初期位置情報として取得する初期位置情報取得手段と、

c)表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウの全てについて、各ウインドウに予め付与されている、ウインドウ内に配置されたグラフの種別及び該グラフの由来を示す情報を少なくとも含むウインドウ属性情報を収集し、収集した複数のウインドウに対応するウインドウ属性情報に基づいて整列表示様式を決定する整列表示様式決定手段と、

d)前記初期位置情報取得手段により得られた各ウインドウの初期位置情報と前記整列表示様式決定手段により決定された整列表示様式とに基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

e)該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、

を備えることを特徴としている。

【0032】

ウインドウ属性情報は少なくとも、ウインドウ内に配置されたグラフの種別、例えばクロマトグラム、マススペクトル、吸光度スペクトル、二次元マッピング等を示す情報と、各グラフの由来、例えば該グラフ作成の元データが得られた装置の種類や試料の種類などを示す情報を含む。ウインドウ属性情報は任意の一つのグラフが配置されたウインドウが生成される時点で、自動的に又は手動で作成され、ウインドウに対応付けて例えばプロパティとして記録されるようにしておけばよい。

【0033】

第3の態様による装置において整列表示様式決定手段は、整列対象である全てのウインドウに付与されているウインドウ属性情報を収集し、そのウインドウ属性情報を解析することで自動的に整列表示様式を決定する。例えば、全ウインドウのウインドウ属性情報に含まれるグラフの種別情報及びグラフ由来情報を解析することで2次元整列表示の行数と列数とを決定する。例えば、グラフの種別が3種であって、グラフ作成の元データが得られた試料が2種であることが判明したならば、3行2列又は2行3列の整列表示様式とすればよい。このため、操作者自身が整列表示様式を選択指示したり整列表示様式を定める情報を入力したりする必要はない。

【0034】

さらにまた、上記課題を解決するために成された本発明の第4の態様であるグラフ表示処理装置は、試料に対する分析や計測により収集されたデータに基づいて作成されるグラフをそれぞれ一つのウインドウ内に配置し、そのウインドウを表示画面上に複数表示する処理を行うグラフ表示処理装置において、

a)表示画面上に表示されている複数の前記ウインドウの全てについて、各ウインドウに

予め付与されている、ウインドウ内に配置されたグラフの種別及び該グラフの由来を示す情報を少なくとも含むウインドウ属性情報を収集し、収集した複数のウインドウに対応するウインドウ属性情報に基づいて整列表示様式を決定するとともに、該ウインドウ属性情報に基づいて各ウインドウの整列順序を決定する整列表示則決定手段と、

b)該整列表示則決定手段により決定された整列表示様式及び整列順序に基づいて、整列後の各ウインドウの表示サイズ及び表示位置情報を計算する整列後表示情報算出手段と、

c)該整列後表示情報算出手段により算出された表示サイズに従って各ウインドウを拡大又は縮小するとともに、その拡大又は縮小されたウインドウを、同じく整列後表示情報算出手段により算出された整列後表示位置情報に従って整列表示する整列表示処理手段と、
を備えることを特徴としている。

10

【0035】

本発明の第4の態様に係る装置は、上記第1乃至第3の態様とは異なり初期位置指定手段を備えず、それ故に、操作者による初期的なおおまかなウインドウの移動操作も不要である。操作者によるウインドウの移動操作の代わりに、整列表示則決定手段は、ウインドウに対応するウインドウ属性情報に基づいて整列表示様式を決定するのみならず、各ウインドウに付与されているグラフの種別情報及びグラフ由来情報に従って各ウインドウを割り当てる行番号及び列番号を決定する。なお、グラフの種別情報やグラフ由来情報に従って具体的にどのような順番にするのか、例えば、グラフ種別がクロマトグラム及びマススペクトルであるときに、いずれを1番目とするのかは、予め定めておけばよい。これは、ユーザが定めるのではなく、メーカー側で定めておいてもよい。

20

また、このようにして定められた表示順、又は2次元的な整列表示様式において縦横いずれの方向にどちらの情報を配するか、といった表示規則がユーザの意に沿わない場合にのために、ユーザの操作に応じて事後的な処理を行うための表示規則反転手段、即ち、2次元的な整列表示様式の行方向と列方向とを入れ替える、又は、2次元的な整列表示様式の行方向と列方向との少なくとも一方の整列順序若しくは1次元的な整列表示様式の整列順序を逆にする手段、を設けるようにしてもよい。

【発明の効果】

【0036】

本発明の第1乃至第4の態様に係るグラフ表示処理装置によれば、それぞれスペクトルやクロマトグラムなどのグラフが配置された複数のウインドウを、操作者が容易に理解できる簡便な操作方法で以て、所望の通りに整列表示できるようになる。特に、表示すべき対象ウインドウが多数になっても、操作ミスが少なくなり、また、操作をやり直す際にも少ない労力で済むようになる。また、縦方向の行数と横方向の列数を指定した2次元的な整列表示など、複雑な表示レイアウトの整列表示も、操作者が直感的に理解し易く且つ簡便な操作で以て実現できるようになる。

30

【0037】

特にLC/MSやGC/MSを用いた癌などの疾病診断の分野においては、健常者サンプルの計測結果と患者サンプルの計測結果との比較分析や、既知サンプルの計測結果と未知サンプルの計測結果との比較分析、複数サンプルの計測結果からの共通特性探索などがよく行われるが、そうした際には、複数段階のMSⁿスペクトルやクロマトグラム、或いは保持時間と質量電荷比とをそれぞれ軸とする2次元マッピング画像、さらには多変量解析等の統計解析結果などの様々なグラフが配置された多数のウインドウを表示画面上で並べて比較表示する必要がある場合が多い。本発明に係るグラフ表示処理装置によれば、こうした場合に、操作者にとって理解が容易であり実際の操作も簡便である方法が提供されるので、操作者の負担が軽減され、作業効率を向上させることができるとともに分析結果の品質向上も期待できる。

40

【0038】

また特に本発明の第2の態様に係るグラフ表示処理装置によれば、例えば操作者が一旦定めた整列表示様式を繰り返し使用する場合や、装置に既定の整列表示様式を使用する場合には、整列表示様式を選択指示したり整列表示様式を定める情報を入力したりする必要

50

はなくなるので、操作者の負担はさらに軽減される。

【 0 0 3 9 】

また特に本発明の第 3 の態様に係るグラフ表示処理装置によれば、ウインドウに配置されたグラフの種別などに拘わらず、操作者が整列表示様式を選択指示したり整列表示様式を定める情報を入力したりする必要はなくなる。このため、操作者の負担はさらに軽減される。

【 0 0 4 0 】

また特に本発明の第 4 の態様に係るグラフ表示処理装置によれば、操作者による初期的なおおまかなウインドウの移動操作も不要になるので、操作者の負担は一層軽減されることになり、きわめて簡便に複数のウインドウを整列表示させることが可能となる。

10

【図面の簡単な説明】

【 0 0 4 1 】

【図 1】本発明の第 1 実施例によるグラフ表示処理装置を含む LC / MS システムの要部の構成図。

【図 2】第 1 実施例の LC / MS システムにおけるグラフ表示のウインドウ整列表示処理手順を示すフローチャート。

【図 3】第 1 実施例の LC / MS システムにおけるグラフ表示のウインドウ整列表示処理の一例を示す模式図。

【図 4】整列表示様式指定ダイアログの一例を示す図。

【図 5】第 1 実施例の LC / MS システムにおいて、複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の処理の説明図。

20

【図 6】第 1 実施例の LC / MS システムにおいて、マススペクトルが配置された複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図。

【図 7】第 1 実施例の LC / MS システムにおいて、複数のウインドウを 2 次元的に且つ各ウインドウのサイズを調整して整列表示させる場合の処理の説明図。

【図 8】第 1 実施例の LC / MS システムにおいて、吸光スペクトルが配置された複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図。

【図 9】従来の一般的な手順に従ったウインドウ整列表示の一例を示す図。

【図 10】本発明の第 2 実施例によるグラフ表示処理装置を含む LC / MS システムの要部の構成図。

30

【図 11】第 2 実施例の LC / MS システムにおけるグラフ表示のウインドウ整列表示処理手順を示すフローチャート。

【図 12】第 2 実施例の LC / MS システムにおいて、複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図。

【図 13】本発明の第 3 実施例によるグラフ表示処理装置を含む LC / MS システムの要部の構成図。

【図 14】第 3 実施例の LC / MS システムにおけるグラフ表示のウインドウ整列表示処理手順を示すフローチャート。

【図 15】第 3 実施例の LC / MS システムにおいて、複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図。

40

【図 16】第 3 実施例の変形例である LC / MS システムにおいて、複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図。

【図 17】ウインドウ属性情報の一例を示す図。

【発明を実施するための形態】

【 0 0 4 2 】

[第 1 実施例]

以下、本発明に係るグラフ表示処理装置を含む LC / MS システムの一実施例（第 1 実施例）について、添付図面を参照して説明する。図 1 は第 1 実施例の LC / MS システムの要部の構成図である。

【 0 0 4 3 】

50

このLC/MSシステムは、試料中の含有成分を時間的に分離する液体クロマトグラフ（LC部）1と、分離された各成分を質量電荷比 m/z に応じて分離して検出する質量分析計（MS部）2と、MS部2で取得されたデータを処理するデータ処理部3と、測定データを記憶するための測定データ記憶部4と、このシステムに特徴的な表示制御を行う表示制御部5と、キーボードやマウス等のポインティングデバイスである入力部6と、表示モニタである表示部7と、を含む。データ処理部3は、測定データに基づいてマススペクトルや各種クロマトグラムなどのグラフを作成するグラフ作成部31を含む。また、表示制御部5は、整列前初期位置指示受付部51、整列表示様式指示受付部52、整列表示情報算出部53、整列実行処理部54などの機能ブロックを備える。

【0044】

10

なお、データ処理部3、測定データ記憶部4、表示制御部5は、パーソナルコンピュータをハードウェア資源とし、パーソナルコンピュータに予めインストールされた専用の制御・処理用アプリケーションソフトウェアをコンピュータ上で実行することにより具現化されるものとして行うことができる。

【0045】

この第1実施例のLC/MSシステムでは、次のようにして測定データが取得され、測定データ記憶部4に格納される。即ち、LC部1に試料が導入されると、該試料中の含有成分は図示しないカラムを通過する間に時間的に分離されて溶出する。MS部2は、予め設定された1乃至複数の質量電荷比におけるイオン量に対応した信号強度を所定時間間隔で繰り返し測定（つまりはSIM測定）する。MS部2では、所定の質量電荷比範囲のスキャン測定を繰り返すようにしてもよい。

20

【0046】

上記測定により、1乃至複数の質量電荷比毎に試料注入時点から試料溶出終了時点までのクロマトグラムデータが得られる。一つの試料に対し実行された1回の測定で収集されたデータは1個のデータファイルに集約され、測定データ記憶部4に格納される。別の試料がLC部1に導入されクロマトグラムデータが収集されると、それらデータは別の1個のデータファイルに集約され、測定データ記憶部4に格納される。したがって、測定対象の試料の数だけデータファイルが作成され、測定データ記憶部4に保存される。

【0047】

次に、第1実施例のLC/MSシステムにおいて実行される特徴的な表示制御について、図2、図3を参照して説明する。図2はこのシステムで実施されるグラフ表示のウィンドウ整列表示処理の手順を示すフローチャート、図3は第1実施例のLC/MSシステムにおけるグラフ表示のウィンドウ整列処理の一例を示す模式図である。

30

【0048】

ここでは、測定データ記憶部4に格納されているデータに基づいてグラフ作成部31によりそれぞれ作成される3個のマススペクトルを整列表示させる場合を例に挙げて説明する。いま、操作者が入力部6により観察したいデータファイルを指定した上で、任意の3つの時点におけるマススペクトルの作成及び表示を指示すると、グラフ作成部31は測定データ記憶部4から該当するデータを読み出してマススペクトルを作成し、表示制御部5は、その3個のマススペクトルを図3(a)に示すようにそれぞれ独立したウィンドウ101～103中に配置した表示画像を形成し、これを表示部7の画面上に表示する。このとき、各ウィンドウ101～103の位置やサイズはデフォルトであるか又は例えばカーソルの位置などに応じたものとなる。ここでは、図3(a)に示すように、ウィンドウ101～103のサイズは不揃いである状況であるとする。

40

【0049】

操作者はまず、入力部6に含まれるマウス等のポインティングデバイスで表示部7の画面上に表示されている主表示枠100のコーナー部や各辺をドラッグ操作することにより、主表示枠100のサイズを適宜調整する（ステップS1）。もちろん、主表示枠100のサイズ調整が不要である場合にはこのステップS1は省略できる。

【0050】

50

次に操作者は、表示部 7 の画面上に表示されている複数（図 3（a）の例では 3 個）ウインドウ 101～103 をマウス等のポインティングデバイスによりドラッグアンドドロップ操作することで、各ウインドウ 101～103 をおおよそ並べたいレイアウトに配置する（ステップ S2）。この各ウインドウ 101～103 の並べ替えは、例えば図示しない「確定」ボタンが操作されるまで自由に行うことができる。また、一旦「確定」ボタンが操作されたあとでも、別の「確定キャンセル」ボタンを操作することで確定状態を取り消して、再び各ウインドウ 101～103 の自由な移動を可能とするとよい。いずれにしても、並べ替え操作が確定されると、整列前初期位置指示受付部 51 は、画面上に配置された各ウインドウ 101～103 の位置に基づいて整列前位置初期値を算出する（ステップ S3）。

10

【0051】

具体的には、矩形状である一つのウインドウのいずれかのコーナー部の点を位置座標取得点として整列前位置初期値を求めればよい。例えば図 3 の例では、各ウインドウ 101～103 の左上コーナー部の点（図 3（b）において印で示した位置）を位置座標取得点としており、ポインティングデバイスを用いて各ウインドウ 101～103 をそれぞれ図 3（b）に示すような位置に移動させたとすると、表示画面上における各ウインドウ 101～103 の左上コーナー部の位置座標（アドレス）から、整列前位置初期値として座標（ $X[s]$ 、 $Y[s]$ ）（ただし $s = 0, 1, 2$ ）が得られる。

【0052】

次に操作者が入力部 6 により所定の操作を行うと、整列表示様式指示受付部 52 は図 4 に示すような整列表示様式指定ダイアログ 110 を表示部 7 の画面上に表示させる。操作者はこの整列表示様式指定ダイアログ 110 においてポインティングデバイスにより所望の整列表示様式を選択指示し、整列表示様式指示受付部 52 はその選択指示を受けて整列表示様式を確定する（ステップ S4）。

20

【0053】

図 4 に示した例は、4 種の整列表示様式の中から 1 種を操作者が選択するものである。4 種の整列表示様式のうち「上下に並べて表示」と「左右に並べて表示」はそれぞれ、主表示枠 100 内の表示領域全体を縦方向又は横方向の一方向に、表示対象であるウインドウの数で以て等分割して表示する整列表示様式である。また、「重ねて表示」は、各ウインドウの一部を重ねながら表示する整列表示様式である。さらにまた、「並べて表示」は、表示対象のウインドウ数に応じて、主表示枠 100 内の表示領域全体の縦方向及び横方向の分割数を自動的に決定し、2 次的にレイアウトする整列表示様式である。この他にも、適宜の整列配列様式を加えることができる。例えば「行数と列数を指定して並べて表示」という整列表示様式を加え、この様式が選択指示された場合には、複数のウインドウの 1 次的又は 2 次的配置のための縦方向の行数及び／又は横方向の列数を、数値で入力指定できるようにするとよい。この具体例についてはあとで述べる。

30

なお、整列表示様式として一旦定めたものを繰り返し使う場合には、ステップ S4 の処理を省略することもできる。また、整列表示様式が予め定められていて操作者自身が指定する必要がない場合にも、ステップ S4 の処理は省略される。

【0054】

40

また、この例に示すように通常は、整列表示時の各ウインドウのサイズ（高さ、幅とも）は同一でありステップ S5 の処理は省略される。しかしながら、各ウインドウのサイズを変更する際には操作者による入力が必要であり、操作者は、入力部 6 より、各ウインドウのサイズ特定情報を入力する（ステップ S5）。サイズ特定情報は例えば、整列表示時の各行において横方向に配置される複数のウインドウ間の幅の比、及び、各列において縦方向に配置される複数のウインドウ間の高さの比、とするのが一般的であるが、これに限らない。また、1 列目の各ウインドウの幅及び 1 行目の各ウインドウの高さのみを固定し、2 列目以降及び 2 行目以降の残りの各ウインドウの表示領域を等分割するような指定を可能としてもよい。

【0055】

50

続いて整列表示情報算出部 5 3 は、指定された整列指定様式及びサイズ特定情報、並びにステップ S 3 で算出された各ウインドウの整列前位置初期値に基づいて、各ウインドウの整列表示情報を算定する（ステップ S 6）。具体的には、整列表示情報はウインドウ毎の表示サイズと表示位置座標とを含み、整列表示情報算出部 5 3 は、整列表示様式及びサイズ特定情報と表示対象であるウインドウの数とに応じて一つのウインドウの表示サイズ（幅及び高さ）を定める。さらに、各ウインドウの整列前位置初期値に基づいてウインドウ同士の相対的な位置関係を定め、この位置関係と各ウインドウの表示サイズとから、各ウインドウの表示位置を決定する。この表示位置とは、整列表示後の各ウインドウの位置座標取得点の位置座標である。

【 0 0 5 6 】

10

整列表示情報算出部 5 3 における整列表示情報、つまり表示サイズ及び表示位置の算出例を説明する。いま、ステップ S 1 におけるサイズ調整後の主表示枠 1 0 0 の幅が $D X$ 、高さが $D Y$ であるとする。また、図 3 (b) に示すように 3 個のウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 の整列前位置初期値 ($X [s]$, $Y [s]$) (ただし $s = 0, 1, 2$) が与えられ、整列表示様式指示受付部 5 2 により、整列表示様式指定ダイアログ 1 1 0 上の「縦方向に並べる」整列様式が選択指示された場合を考える。整列表示情報算出部 5 3 はまず、整列後の一つのウインドウの表示サイズ（幅 $W X$ 、高さ $W Y$ ）を次のように計算する。

$$W X = D X$$

$$W Y = D Y / 3$$

即ち、単純に縦方向一列に整列させる場合には、主表示枠 1 0 0 の高さをウインドウ数で除した結果が一つのウインドウの高さ ($W Y$) となり、主表示枠 1 0 0 の幅がそのまま各ウインドウの幅 ($W X$) となる。

20

【 0 0 5 7 】

このように一つのウインドウの表示サイズが定まれば、主表示枠 1 0 0 内で 3 個のウインドウにそれぞれ割り当てられる表示エリアは確定し、表示対象である 3 個のウインドウのそれぞれ表示位置座標も自ずと定まる。即ち、主表示枠 1 0 0 内の表示領域全体の高さを三つに分割して形成される各領域が、1 個のウインドウに割り当てられる表示エリアである。そして、その 3 個の矩形領域の左上コーナー部の位置座標が 3 個のウインドウの座標である。したがって、それ以外にウインドウの整列に必要な要素は 3 個のウインドウの表示の順番のみであるが、縦方向（又は横方向）の一列整列である場合には表示順は簡単に決定できる。

30

【 0 0 5 8 】

即ち、縦方向の表示順は、3 個のウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 の整列前位置初期座標 ($X [s]$, $Y [s]$) (ただし $s = 0, 1, 2$) の $Y [s]$ の値が小さい順にソートすることによって定めることができる。この例では、 $Y [0] < Y [2] < Y [1]$ であるから（ただし、主表示枠 1 0 0 の左上コーナー部を Y 軸座標の原点とする）、3 個のウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 の表示順は、上から $Window [0]$, $Window [2]$, $Window [1]$ となる。

【 0 0 5 9 】

整列実行処理部 5 4 は上述したように整列表示情報算出部 5 3 で算定された整列表示情報を用いて、各ウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 が一つのウインドウの幅 ($W X$) 及び高さ ($W Y$) で定まるサイズになるように拡大（又は縮小）処理を行い、そのあとに各ウインドウの表示位置座標及び表示順に応じて並べ替えて配置する。そして、その結果を表示部 7 の画面上に表示する（ステップ S 7）。上記例の整列表示の結果を図 3 (c) に示す。主表示枠 1 0 0 内に上から順に、 $Window [0]$, $Window [2]$, $Window [1]$ が表示される。

40

【 0 0 6 0 】

以上のようにして、操作者は表示画面上の X 軸（横軸）、 Y 軸（縦軸）といった座標軸の向き等を何ら意識することなく、図 3 (b) に示した、手作業でのウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 の入れ替えなどの作業時に目視で確認したのと同じ相対位置関係を有する整列表示

50

結果を得ることができる。

【 0 0 6 1 】

図 3 に示した例は 3 個のウインドウ 1 0 1 ~ 1 0 3 を縦一列に整列させるものであったが、より複雑である、表示整列様式として行数及び列数を定めた 2 次元的な整列表示の例について、図 5 を参照して次に説明する。

【 0 0 6 2 】

いま、主表示枠 1 0 0 のサイズは、図 5 (a) に示すように、幅 $D X$ 、高さ $D Y$ であるとし、整列表示様式として、行数 = N 、列数 = M (ただし N 、 M とも 2 以上の整数) が指定されたものとする。このとき、整列後の一つのウインドウの表示サイズ (幅 $W X$ 、高さ $W Y$) は次のように計算される。

$$W X = D X / M$$

$$W Y = D Y / N$$

即ち、主表示枠 1 0 0 の高さをウインドウの行数で除した結果が一つのウインドウの高さ ($W Y$) となり、主表示枠 1 0 0 の幅をウインドウの列数で除した結果が一つのウインドウの幅 ($W X$) となる。このように一つのウインドウの表示サイズが定まれば、主表示枠 1 0 0 内で $M \times N$ 個のウインドウにそれぞれ割り当てられる表示エリアは確定し、その $M \times N$ 個のウインドウそれぞれの表示位置座標も自ずと定まる。したがって、それ以外にウインドウの整列に必要な要素は、縦方向、横方向それぞれのウインドウの表示順番のみである。

【 0 0 6 3 】

整列対象のウインドウ数 $M \times N = S_{\max}$ 個のウインドウの表示順番は、例えば次のような手順で決めることができる。

いま、 $Window[s]$ (ただし $s = 0, 1, 2, \dots, S_{\max} - 1$) の整列前位置初期座標を ($X[s]$, $Y[s]$)、整列表示エリア $Area[m][n]$ (ただし $m = 0, 1, 2, \dots, M - 1$, $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$) に対する縦方向、横方向の表示順番を ($m[s]$, $n[s]$) とする。ここで、 $m[s]$, $n[s]$ は整数であり、また、 $//$ は整数同士の除算結果の商たる整数を表すものとする。

【 0 0 6 4 】

(1) まず、 $X[s]$ ($s = 0, 1, 2, \dots, S_{\max} - 1$) を小さい順にソートした結果の順位を $m[s]$ とする。0 $m[s]$ $S_{\max} - 1$ となる。

(2) 次に、1 列を N 行で構成するため、 $m[s]$ $m[s] // N$ 、とする。これにより、0 $m[s]$ $M - 1$ となる。

(3) そして、 $m[s]$ が同値なる $Y[s]$ 毎にソートの結果順位を求め $n[s]$ とする。0 $n[s]$ $N - 1$ となる。

【 0 0 6 5 】

図 5 は、 $M = 2$ 、 $N = 2$ である場合のウインドウの整列表示例であり、(a) はステップ $S 2$ において操作者による大まかな整列位置が指定された状態である。上記の算定手順は本事例では下記のとおりである。

(1) $X[s]$ (ただし $s = 0, 1, 2, 3$) に従ったソート結果の順位は、 $m[0] = 3$ 、 $m[1] = 1$ 、 $m[2] = 2$ 、 $m[3] = 0$ 、となる。

(2) 1 列を 2 行で構成するため、 $m[s]$ を 2 で除し、その結果、 $m[0] = 1$ 、 $m[1] = 0$ 、 $m[2] = 1$ 、 $m[3] = 0$ 、となる。

(3) $m[s]$ が同値なる $s = 1, 3$ と $s = 0, 2$ とで $Y[s]$ に従ってソートし、 $n[0] = 1$ 、 $n[1] = 0$ 、 $n[2] = 0$ 、 $n[3] = 1$ となる。

$Area(m[s], n[s])$ に $Window[s]$ を整列表示させた結果は、図 5 (b) となる。大まかに各ウインドウの左右及び上下の関係を決めるように各ウインドウを配置しておきさえすれば、その相対関係を維持した整列表示結果を得ることができる。また、誤操作があった場合でも、ステップ $S 2$ に戻り、誤っていたウインドウの位置関係のみを正して上記整列表示処理を再実行すれば、簡単に修正することができる。

【 0 0 6 6 】

図 6 は、上記の 2 次元的整列を 4 個のマススペクトルの表示に適用した例であり、図 6 (b) の整列後の状態では、上行に目的サンプル、下行に参照サンプル、右列にプリカーサイオンが現れるマススペクトル、左列に該プリカーサイオンに対する MS / MS スペクトルを配置している。このように整列配置することで、目的サンプルと参照サンプルの MS / MS スペクトル同士の比較、マススペクトル同士の比較が容易となることが分かる。

【 0 0 6 7 】

上記例では、いずれも主表示枠 1 0 0 内に配置されるウインドウのサイズを等しくしている。つまり、ステップ S 5 で設定されるサイズ特定情報が実質的にない (デフォルトである) 場合の表示例である。これに対し、表示されるウインドウのサイズが異なるものとなるように、サイズ特定情報が指定された場合の整列表示例について図 7 を参照して説明する。

【 0 0 6 8 】

この例では、整列表示様式は図 5 の例と同様に 2 行 2 列であるが、上述したように、各行における複数のウインドウ同士及び各列におけるウインドウ同士の縦方向及び横方向の表示サイズ比などをサイズ特定情報として指定することで、ウインドウ毎に別々の表示サイズとなるようにしている。図 7 の例では、横方向 1 列目、2 列目の幅がそれぞれ $W \times 1$ 、 $W \times 2$ (ただし $W \times 1 < W \times 2$)、縦方向 1 行目、2 行目の高さがそれぞれ $W \times 1$ と $W \times 2$ (ただし $W \times 1 < W \times 2$) となる。もちろん、 $W \times 1$ と $W \times 2$ 、 $W \times 1$ と $W \times 2$ のいずれかを等しくしてもよい。

【 0 0 6 9 】

このように整列表示の際のウインドウのサイズを適宜調整可能としておけば、例えば目的サンプルと参照サンプルとについてそれぞれ複数のグラフを表示したいが、特に比較に着目すべきグラフについてはウインドウのサイズを大きくして見やすい表示とすることができる。それによって、解析効率が向上するのみならず、こうした表示をそのまま印刷して報告書などに利用する場合にバランスが良く見栄えもよい資料が作成できる。

【 0 0 7 0 】

上記実施例は、本発明に係る分析データ表示処理を LC / MS 測定データに適用したものであるが、他の分析装置による測定データにも本発明を用いた整列表示は有用である。図 8 はフーリエ変換赤外分光光度計で得られたデータに基づいて作成される吸光スペクトルの表示例である。

【 0 0 7 1 】

フーリエ変換赤外分光光度計はサンプル計測結果と試料無しのバックグラウンド計測結果とを比較して試料の吸光度波長依存性を計測する装置であり、計測結果から水蒸気や二酸化炭素など定常的に発生するノイズ成分の影響を補正する大気補正機能を有している。図 8 では、左右方向の 1 列目及び 2 列目をそれぞれサンプル計測及びバックグラウンド計測に割り当て、上下方向の 1 行目及び 2 行目をそれぞれ大気補正前及び大気補正後に割り当てて、該当するデータから作成される吸光スペクトルをそれぞれの列位置及び行位置に表示している。

【 0 0 7 2 】

[第 2 実施例]

上記第 1 実施例の LC / MS システムでは、グラフ表示のウインドウ整列表示処理に際し、ステップ S 4 に係る操作、つまり操作者が所望の整列表示様式を選択指示するという操作が必要となる。これに対し、本発明の別の実施例 (第 2 実施例) の LC / MS システムでは、操作者が事前に整列表示様式を選択指示することを省略しながら、操作者が見やすいような表示を提供することができる。

【 0 0 7 3 】

図 1 0 は第 2 実施例の LC / MS システムの要部の構成図、図 1 1 はこのシステムで実施されるグラフ表示のウインドウ整列表示処理の手順を示すフローチャート、図 1 2 はこのシステムにおいて複数のウインドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図、である。図 1 0 において、図 1 に示した第 1 実施例の LC / MS システムと同一の又は相

10

20

30

40

50

当する構成要素には同じ符号を付し、特に要しない限り、それら構成要素の説明を省略する。また、図 1 1 において、図 2 に示した第 1 実施例の LC / MS システムにおける処理内容と同一の処理内容には同じステップ番号を付している。

【 0 0 7 4 】

この第 2 実施例のシステムでは、表示対象のウインドウはそれぞれ、そのウインドウ内に表示される情報種別、即ちグラフの種別を特定する情報種別 ID (info ID) と、その情報の取得元などのグラフの由来を特定するデータ種別 ID (Data ID) とを少なくとも含むウインドウ属性情報をプロパティとして有する。図 1 7 (a) はこの例で定められている情報種別 ID を示す図、図 1 7 (b) はこの例で定められているデータ種別 ID を示す図である。ここでは、データ種別 ID はデータの取得元である試料の種類を示しているが、これに限らず例えばデータを取得した装置の種別などを特定するものでもよい。これら ID は任意に決めておくことができる。

10

【 0 0 7 5 】

図 1 0 に示したように、第 2 実施例のシステムは第 1 実施例のシステムにない構成要素として、整列配置対象である各ウインドウに付与された上記ウインドウ属性情報を収集するウインドウ属性情報収集部 5 5 を備える。また、整列表示情報算出部 5 3 は、整列前位置初期値などとともにウインドウ属性情報収集部 5 5 により収集されたウインドウ属性情報を利用して整列表示情報を算出する。

【 0 0 7 6 】

図 1 2 (a) は、操作者が表示部 7 の画面上に表示されている複数 (図 1 2 (a) の例では 6 個) のウインドウをおおよそ並べたいレイアウトに配置した状態を示す図である。即ち、図 1 2 (a) は、操作者のマウス操作等によるステップ S 2 の処理が終了した時点での画面上の表示を示している。この図中に記載している Data ID 及び info ID は、各ウインドウに付与された図 1 7 (a) 及び (b) に示すウインドウ属性情報である。このように各ウインドウの初期位置が決まると、整列前初期位置指示受付部 5 1 は画面上に配置された各ウインドウの位置に基づいて整列前位置初期値を算出する (ステップ S 3) 。さらに整列表示様式指示受付部 5 2 は、整列表示様式が操作者の操作に依らない「自動整列」の機能が設定されているか否かを判定する (ステップ S 1 1) 。「自動整列」の機能は、操作者或いはシステム管理者などが事前に設定しておくようにすることができる。

20

30

【 0 0 7 7 】

「自動整列」の機能が設定されていない (ステップ S 1 1 で No である) 場合には、すでに説明した図 2 中のステップ S 4 へと進み、操作者による整列表示様式の選択指示を待つ。一方、予め「自動整列」の機能が設定されている (ステップ S 1 1 で Yes である) 場合には、ステップ S 1 1 から S 1 2 へと進み、ウインドウ属性情報収集部 5 5 が画面上に配置された各ウインドウのウインドウ属性情報を全て収集して整列表示情報算出部 5 3 へ渡す。図 1 2 (a) の例においては、例えば Window [0] について Data ID = 1、info ID = 0 を、Window [1] について Data ID = 0、info ID = 0 を、ウインドウ属性情報として収集する。

【 0 0 7 8 】

40

次いで整列表示情報算出部 5 3 は、収集された全てのウインドウ属性情報を解析し、その解析結果に基づいて整列表示様式として必要な行数及び列数を定める (ステップ S 1 3) 。具体的には、図 1 2 (a) の例では、整列表示対象となる 6 個のウインドウの情報種別 ID が「 0 」、「 1 」、「 2 」の 3 種、データ種別 ID が「 0 」、「 1 」の 2 種であることが分かるから、相互比較のための整列表示に必要な縦 × 横の 2 次元表示の行数と列数とが、「 3 」と「 2 」であると定める。そして、各ウインドウを Window [i] (i = 0、1、2、...、5)、その初期位置を (X [i]、Y [i]) とし、ウインドウ属性情報それぞれについて同一の番号を持つウインドウ間で、ソート方向の初期位置に差異が少なくなる方を選択することにより、考え得る 2 通りの組合せについて、いずれを行数、列数とすべきかを決定する。その決定のための方法の一例は次のとおりである。

50

【 0 0 7 9 】

[A] 情報種別 I D を X 方向 (横軸方向) にソートし、データ種別 I D を Y 方向 (縦軸方向) にソートする場合

初期位置評価値 A を次式にて計算する。

【 数 1 】

$$\Delta A = \sum_{info=0}^{infoN-1} XDiff(info) + \sum_{Data=0}^{DataN-1} YDiff(Data)$$

但し、 $XDiff(iinfo)$ は情報種別 I D を持つウィンドウ $Window[i]$ 中の $X[i]$ 最大値と $X[i]$ 最小値との差、 $YDiff(Data)$ はデータ種別 I D を持つウィンドウ $Window[i]$ 中の $Y[i]$ 最大値と $Y[i]$ 最小値との差である。

10

【 0 0 8 0 】

[B] 情報種別 I D を Y 方向にソートし、データ種別 I D を X 方向にソートする場合

初期位置評価値 B を次式にて計算する。

【 数 2 】

$$\Delta B = \sum_{info=0}^{infoN-1} YDiff(info) + \sum_{Data=0}^{DataN-1} XDiff(Data)$$

但し、 $YDiff(Iinfo)$ は情報種別 I D を持つウィンドウ $Window[i]$ 中の $Y[i]$ 最大値と $Y[i]$ 最小値との差、 $XDiff(DataID)$ はデータ種別 I D を持つウィンドウ $Window[i]$ 中の $X[i]$ 最大値と $X[i]$ 最小値との差である。

20

【 0 0 8 1 】

図 1 2 (a) の例では、次の条件が満たされるので $A < B$ となり、上記 [B] よりも [A] の方が適切であると判定することができる。そしてその結果、縦方向：2 行 × 横方向：3 列と整列表示様式を決定することができる。

【 数 3 】

$$\sum_{info=0}^{infoN-1} XDiff(info) < \sum_{Data=0}^{DataN-1} XDiff(Data)$$

且つ

$$\sum_{Data=0}^{DataN-1} YDiff(Data) < \sum_{info=0}^{infoN-1} YDiff(info)$$

30

このようにして整列表示様式さえ決まれば、第 1 実施例において操作者が選択指定していた整列表示様式に代えて自動的に決定された整列表示様式を用い、ステップ S 6 以降、第 1 実施例と同様な処理を実行して、図 1 2 (b) に示す整列表示結果を得ることができる。図 1 2 (b) では、縦方向に同じ情報種のウィンドウが配置され、1 列目が $infoID = 0$ (クロマトグラム)、2 列目は $infoID = 1$ (2 次元マップ)、3 列目は $infoID = 2$ (スペクトル) である。一方、横方向には同じデータ種のウィンドウが配置され、1 行目は $DataID = 0$ (Treatment BSA)、2 行目は $DataID = 1$ (Control sample) である。

40

【 0 0 8 2 】

[第 3 実施例]

図 1 3 は本発明のさらに別の実施例 (第 3 実施例) の LC / MS システムの要部の構成図、図 1 4 はこのシステムで実施されるグラフ表示のウィンドウ整列表示処理の手順を示すフローチャート、図 1 5 はこのシステムにおいて複数のウィンドウを 2 次元的に整列表示させる場合の一例を示す図、である。この第 3 実施例のシステムは、第 1、第 2 実施例のシステムよりもさらに操作者の操作の手間を省いたものであり、換言すれば、装置における処理の自動化をさらに図ったものである。具体的にいうと、このシステムでは図 1 1 に示したフローチャート中のステップ S 2 に相当する操作、つまり操作者がウィンドウを

50

おおよそその位置へ移動させる操作、は省略される。

【 0 0 8 3 】

図 1 3 に示すように、第 3 実施例のシステムは第 1、第 2 実施例のシステムにある整列前初期位置指示受付部 5 1 を備えていない。整列表示情報算出部 5 3 は、上述した機能のほかに、整列前位置初期値とウインドウ属性情報収集部 5 5 により収集されたウインドウ属性情報に基づいて、各ウインドウの適切な整列順序を自動的に判断して決定する機能も有する。

【 0 0 8 4 】

図 1 5 (a) は、操作者によるウインドウ移動操作が全く行われていない状態の表示画面の一例を示す図である。このとき、各ウインドウに付与されたウインドウ属性情報はす

10

【 0 0 8 5 】

整列表示様式指示受付部 5 2 により「自動整列」の機能が設定されていると判定されると (ステップ S 1 1 で Y e s)、ウインドウ属性情報収集部 5 5 が画面上に配置された各ウインドウのウインドウ属性情報を全て収集して整列表示情報算出部 5 3 へ渡す (ステップ S 1 2)。次いで、整列表示情報算出部 5 3 は、収集された全てのウインドウ属性情報を解析し、その解析結果に基づいて整列表示様式として必要な行数及び列数を定めるとともに、次のようにして各ウインドウの整列順序を決定する (ステップ S 2 3)。

【 0 0 8 6 】

ここでは一例として、ウインドウ属性情報に含まれる情報種別 I D 及びデータ種別と整列方向との関係、並びに整列表示の順番を規定する「整列表示規則」を下記のように定めておくものとする。

20

< 規則 1 > 情報種別 I D を横軸方向、データ種別 I D を縦軸方向にソートする。

< 規則 2 > ソート方向は、縦軸方向、横軸方向ともに I D で示される数値の昇順とする。

各ウインドウのウインドウ属性情報を解析すると、整列表示対象となる 6 個のウインドウの情報種別 I D が「 0 」、「 1 」、「 2 」の 3 種、データ種別 I D が「 0 」、「 1 」の 2 種であることが分かるから、比較のための整列表示に必要な縦×横の 2 次元表示の行数と列数とは、「 3 」と「 2 」の組合せであると定めることができる。次に、各ウインドウの初期位置に依存することなく上記の「整列表示則」を利用することにより整列表示様式

30

【 0 0 8 7 】

整列表示様式が定まったならば、第 2 実施例のシステムと同様の、ステップ S 6 以降の処理を実行することで、図 1 5 (b) に示すような整列表示結果を得る。ただし、この場合には、整列前に各ウインドウがどの位置にあったのかに関係なく整列後の各ウインドウの位置が決まるため、整列前位置初期値は用いられず、単に整列表示情報に従って各ウインドウは整列される。

図 1 5 (b) の例では、 1 列目は $infoID = 0$ (クロマトグラム)、 2 列目は $infoID = 1$ (2 次元マップ)、 3 列目は $infoID = 2$ (スペクトル) である。また、 1 行目は $DataID = 0$ (Treatment BSA)、 2 行目は $DataID = 1$ (Control sample) である。

40

【 0 0 8 8 】

なお、例えば予め決められている「整列表示則」が操作者の要望と異なる場合のために、整列表示の実行後又は実行前に、「縦横の入れ替え」や「昇順、降順の切替え」などを操作者が簡単な操作で行えるような機能を付加してもよい。いずれにしても、一旦「整列表示則」を定めておけば、整列表示対象のデータや情報種別、或いはそれらの個数が変化しても、ウインドウの初期位置を操作者自身が設定する、図 2、図 1 1 中のステップ S 2 の処理を省略しながら整列表示結果を得ることができる。

【 0 0 8 9 】

図 1 6 は、情報種別 I D は「 2 」の 1 種のみであり、「 0 」及び「 1 」である 2 種のデ

50

ータ種別IDに対してさらに下位のサブデータ種別IDが定められている場合の2次元整列表示の例である。ウインドウ属性情報に含まれる情報種別ID及びデータ種別IDは図17(a)及び(b)に示したとおりであり、さらにウインドウ属性情報に含まれるサブデータ種別IDは、図17(c)に示すように、質量分析装置における繰り返し質量走査の際の何番目の走査であるのかを示すscan番号を示している。

【0090】

この場合、各ウインドウからウインドウ属性情報収集部55により収集されたウインドウ属性情報を解析すると、整列表示対象となる6個のウインドウの情報種別IDは1種のみ、データ種別IDは「0」、「1」の2種、サブデータ種別IDは「0」、「4」、「8」の3種であることが分かる。そこで、2次元整列表示における縦方向又は横方向へのソート対象のウインドウ属性情報がデータ種別IDとサブデータ種別IDであり、その整列の縦横の行数と列数が「3」と「2」との組合せであると定めることができる。これにより整列表示様式を自動的に定め、ウインドウを整列させれば図16に示したような表示を得ることができる。

10

【0091】

なお、この例では、各データ種別に対する下位のサブデータ種別IDの数(この例では「3」)は同じであるが、そうである必要はなく、それぞれのデータ種別毎に表示対象であるサブデータ種別が何個存在するかが判明しさえすれば、適切な整列表示様式を定めることができる。

一般的に言えば、3以上の複数のウインドウ属性情報が存在する場合に、そのウインドウ属性情報の中で表示対象であるウインドウ中のIDの数が多い順に2個のウインドウ属性情報を2次元整列表示時の2軸に選択する、と定めておけば、適切なウインドウ属性情報を選択した上でウインドウの自動整列を実現できる。

20

【0092】

なお、上記実施例はいずれも本発明の一例にすぎず、本発明の趣旨の範囲で適宜、変形、追加、修正を行っても本願特許請求の範囲に包含されることは当然である。

【符号の説明】

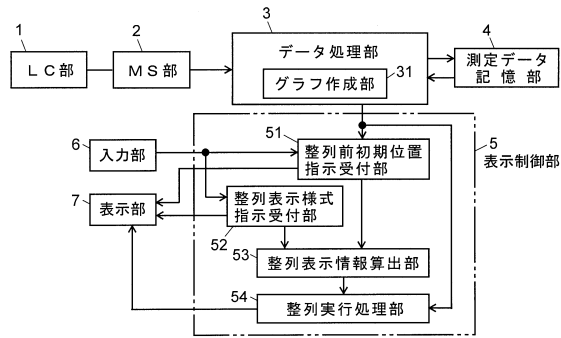
【0093】

- 1 ... LC部
- 2 ... MS部
- 3 ... データ処理部
- 3 1 ... グラフ作成部
- 4 ... 測定データ記憶部
- 5 ... 表示制御部
- 5 1 ... 整列前初期位置指示受付部
- 5 2 ... 整列表示様式指示受付部
- 5 3 ... 整列表示情報算出部
- 5 4 ... 整列実行処理部
- 5 5 ... ウインドウ属性情報収集部
- 6 ... 入力部
- 7 ... 表示部
- 1 0 0 ... 主表示枠
- 1 0 1 ~ 1 0 3 ... ウインドウ
- 1 1 0 ... 整列表示様式指定ダイアログ

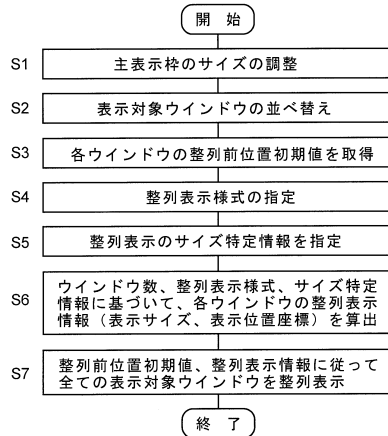
30

40

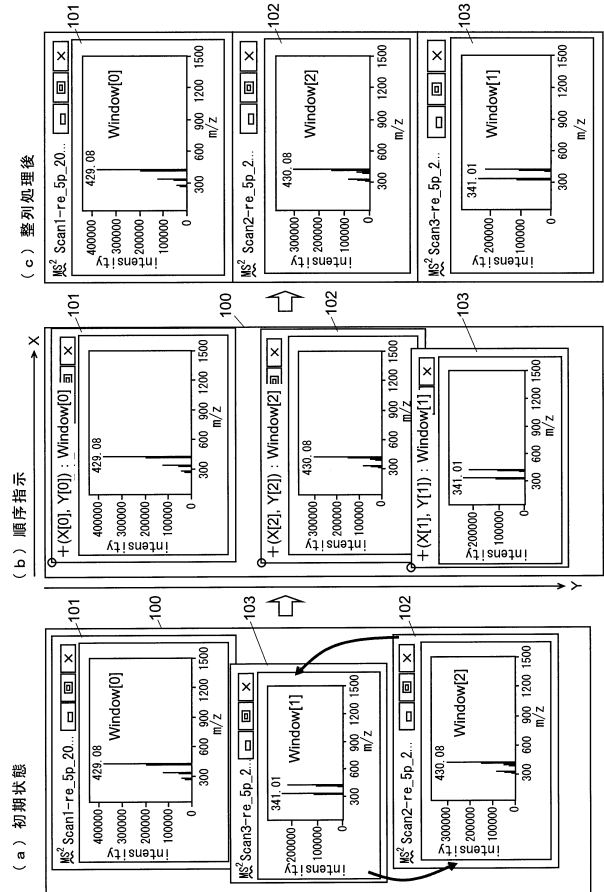
【図 1】



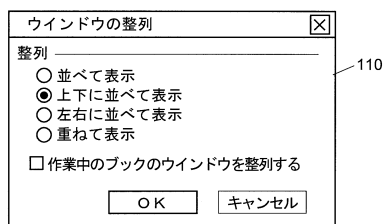
【図 2】



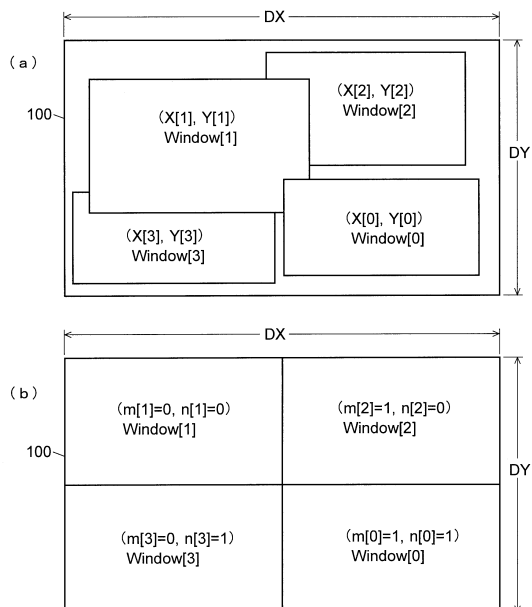
【図 3】



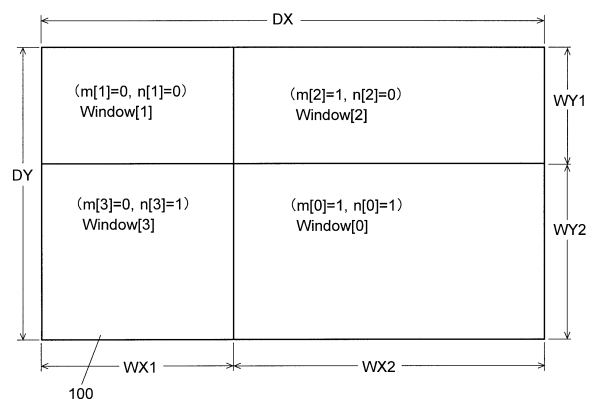
【図 4】



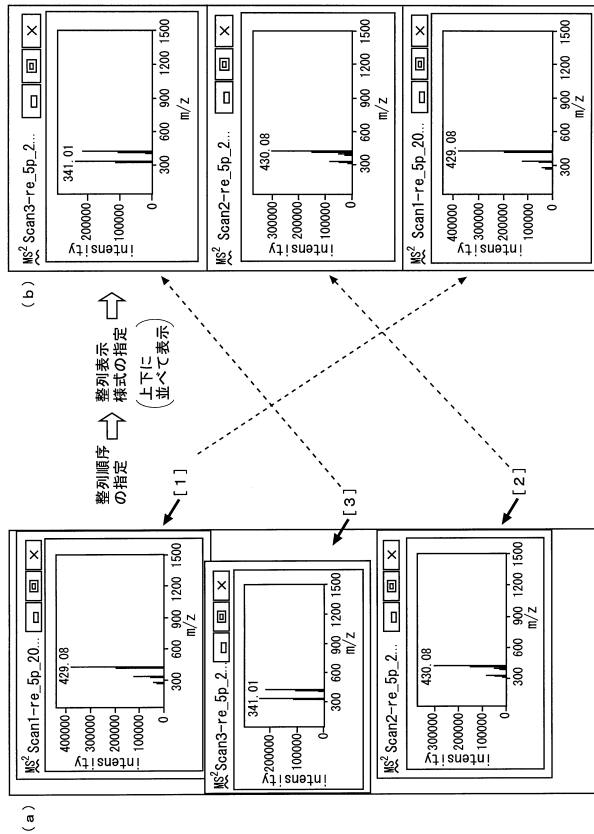
【図 5】



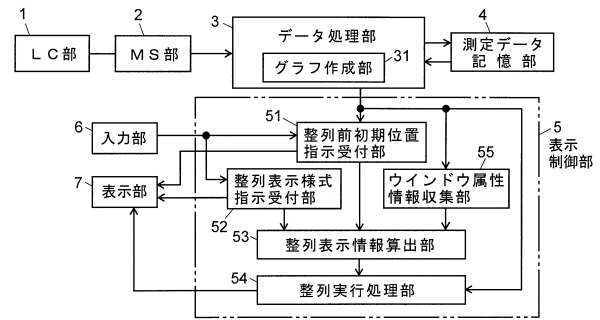
【図 7】



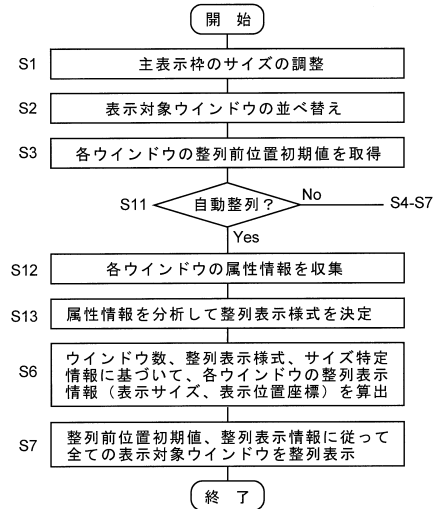
【図 9】



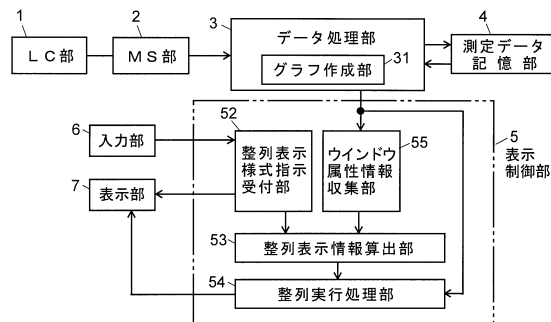
【図 10】



【図 11】



【図 13】



【図 17】

(a)

info ID	0	1	2	3
情報種別	クロマトグラム	2次元マップ	スペクトル

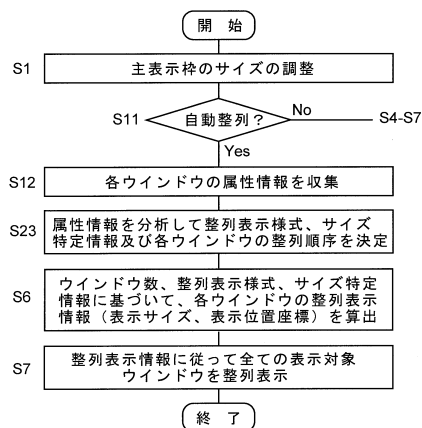
(b)

Data ID	0	1	2
データ名	Treatment BSA	Control sample

(c)

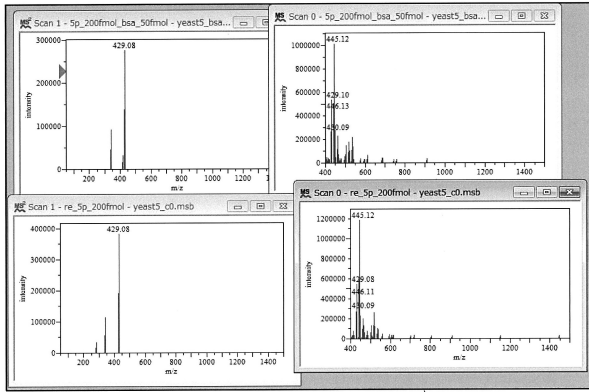
SubData ID	0	1	2	3	4	5
サブデータ	Scan0	Scan1	Scan2	Scan3	Scan4	Scan5

【図 14】

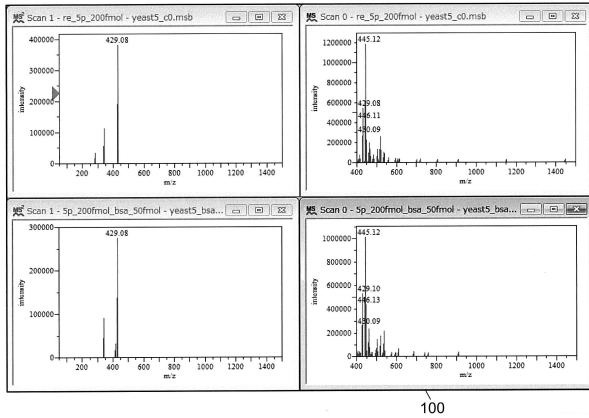


【図 6】

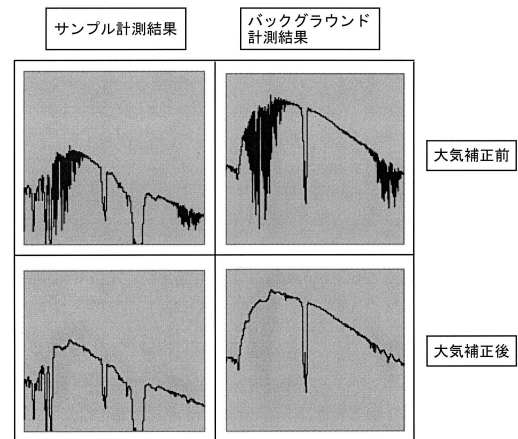
(a) 整列前



(b) 整列後

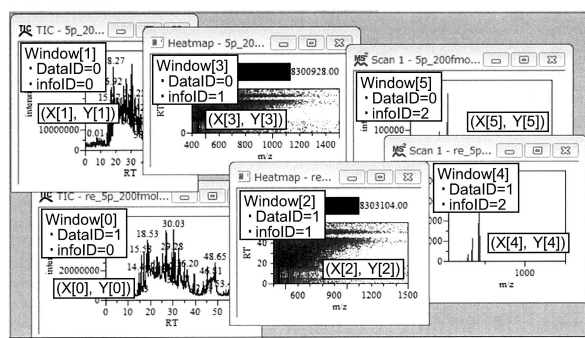


【図 8】

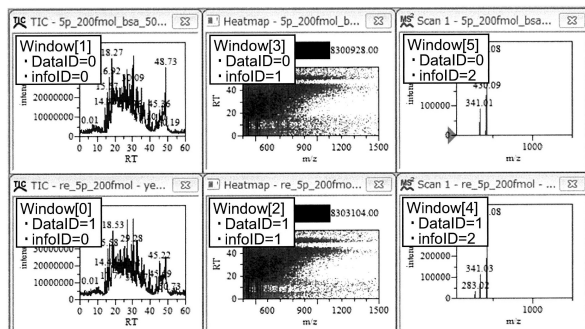


【図 12】

(a) 整列前表示

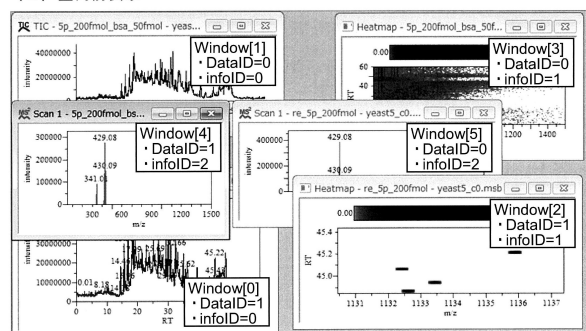


(b) 整列結果表示

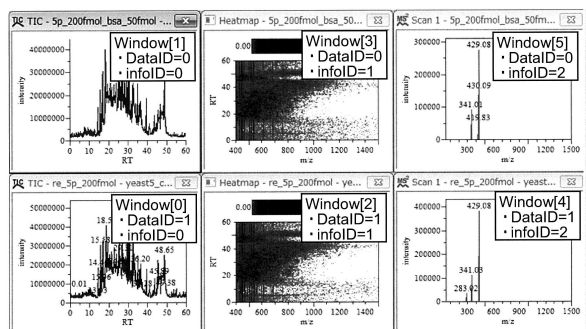


【図 15】

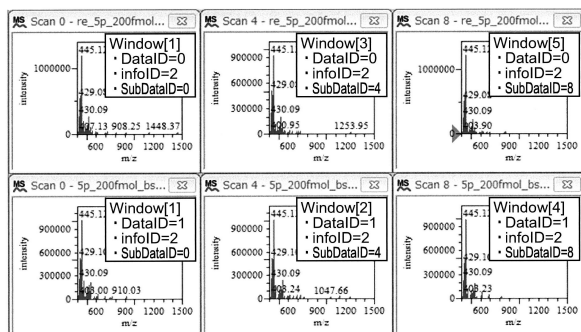
(a) 整列前表示



(b) 整列結果表示



【図 16】



フロントページの続き

(56)参考文献 国際公開第2009/025004(WO, A1)

特開2007-323343(JP, A)

特開平11-134159(JP, A)

特開2001-051824(JP, A)

特開平08-249148(JP, A)

特開2005-328287(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G06F 3/0484

G01N 21/27

G01N 27/62