

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2017年12月7日(07.12.2017)



(10) 国際公開番号

WO 2017/208304 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 30/86 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2016/065915

(22) 国際出願日: 2016年5月30日(30.05.2016)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(71) 出願人: 株式会社島津製作所 (SHIMADZU CORPORATION) [JP/JP]; 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 Kyoto (JP).

(72) 発明者: 金澤 慎司 (KANAZAWA, Shinji); 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内 Kyoto (JP).

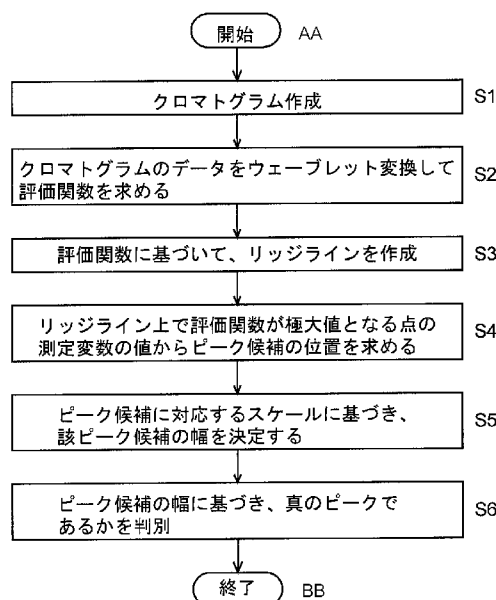
小澤 弘明 (KOZAWA, Hiroaki); 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内 Kyoto (JP).

(74) 代理人: 特許業務法人京都国際特許事務所 (KYOTO INTERNATIONAL PATENT LAW OFFICE); 〒6008091 京都府京都市下京区東洞院通四条下ル元悪王子町37番地 豊元四条烏丸ビル Kyoto (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR,

(54) Title: PEAK DETECTION METHOD AND DATA PROCESSING DEVICE

(54) 発明の名称: ピーク検出方法及びデータ処理装置



S1 Chromatogram creation
S2 Subject the chromatogram data to wavelet transformation and determine an evaluation function
S3 Create a ridge line on the basis of the evaluation function
S4 Determine a peak candidate position from the measurement variable value at which the evaluation function is at the maximum value on the ridge line
S5 Determine the width of the peak candidate on the basis of the scale corresponding to the peak candidate
S6 Determine whether the peak candidate is a true peak on the basis of the peak candidate width
AA Start
BB End

(57) Abstract: A peak detection method for detecting a peak from graph data expressing the variation of measurement values for a measurement variable, wherein the method comprises a wavelet transformation step (S2) for carrying out wavelet transformation on the data using a mother wavelet having only one maximum value and thereby determining an evaluation function having the scale and translation of the mother wavelet as parameters and peak candidate information acquisition steps (S3-S5) for determining a peak candidate position in the data on the basis of the translation for the part

KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME,
MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO,
NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU,
RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY,
TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC,
VN, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

- 一 国際調査報告（条約第21条(3)）

of the evaluation function having the maximum value and determining the width of the peak candidate on the basis of the scale corresponding to the peak candidate. Carrying out wavelet transformation makes it possible to detect a peak candidate regardless of peak strength, and the like, and it is possible to determine the width of the peak candidate, which serves as an index for determining whether the peak candidate is a true peak.

(57) 要約：本発明に係るピーク検出方法は、測定変数に対する測定値の変化を表すグラフのデータからピークを検出する方法であって、前記データに対して、極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いてウェーブレット変換を行うことにより、該マザーウェーブレットのスケール及びトランスレーションをパラメータとする評価関数を求めるウェーブレット変換ステップ（S2）と、前記評価関数が極大値を有するところのトランスレーションに基づいて前記データにおけるピーク候補の位置を求めると共に、該ピーク候補に対応するスケールに基づいて該ピーク候補の幅を決定するピーク候補情報取得ステップ（S3～S5）とを有する。ウェーブレット変換を行うことでピークの強弱等に関わらずピーク候補を検出することができ、且つ、ピーク候補が真のピークであるかを判別する指標となるピーク候補の幅を決定することができる。

明 細 書

発明の名称：ピーク検出方法及びデータ処理装置

技術分野

[0001] 本発明は、例えばクロマトグラフで得られるクロマトグラムや、質量分析装置や分光装置等で得られるスペクトルからピークを検出する方法及び該方法を実行するデータ処理装置に関する。

背景技術

[0002] 試料に含まれる成分を分析する装置の1つにクロマトグラフがある。クロマトグラフでは試料を移動相の流れに乗せてカラムに導入し、カラム内で試料中の各成分を時間的に分離した後、検出器で検出してクロマトグラムを作成する。そして、クロマトグラムからピークを検出し、ピーク位置から各成分を同定すると共に、ピーク高さや面積から当該成分の濃度を決定する（例えば特許文献1）。これらの操作のために、クロマトグラムからピークをソフトウェアで自動検出する処理が行われている。スペクトルに関しても同様にピークの自動検出が行われている。

[0003] 非特許文献1には、ウェーブレット変換を用いてマススペクトルのピークを検出することが記載されている。なお、当該方法はマススペクトルに限らず、波長スペクトルやクロマトグラム等にも適用可能である。一般に、ウェーブレット変換では、孤立した（時間的に局在した）波を表す変数 t の関数であって、横軸方向の拡大縮小を表すスケール(scale)と呼ばれる定数と、横軸方向の平行移動を表すトランスレーション(translation)と呼ばれる定数を有する、マザーウェーブレット $\phi(t)$ と呼ばれる関数を用いる。測定データを変換対象とする場合には、変数 t は測定変数であり、マススペクトルの場合には質量電荷比、光スペクトルの場合には波長、クロマトグラムの場合には時間が該当する。ウェーブレット変換では、変数 t を横軸とするグラフで表される対象データ $x(t)$ とマザーウェーブレット $\phi(t)$ の内積である評価関数 d

[数1]

$$d = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \overline{\psi(t)} dt \quad \cdots(1)$$

を計算する（上式中、 $\phi(t)$ の上に横線を付したものは、関数 $\phi(t)$ の複素共役である）。この評価関数 d はスケール及びトランスレーションをパラメータとする関数である。そして、スケール及びトランスレーションを変化させつつ d の値を計算する。こうしてウェーブレット変換により得られた評価関数 d につき、その値が極大値となるスケール及びトランスレーションを求める。このスケール及びトランスレーションをパラメータとして有するマザーウェーブレット $\phi(t)$ が、対象データ $x(t)$ との一致度が最も高いことになる。

[0004] マザーウェーブレット $\phi(t)$ の一例として、メキシカンハット関数

[数2]

$$\psi(t) = \left(1 - \left(\frac{t-b}{a}\right)^2\right) \exp\left(-\left(\frac{t-b}{a}\right)^2/2\right) \quad \cdots(2)$$

が挙げられる。ここで a はスケール、 b はトランスレーションである。非特許文献1では、メキシカンハット関数を用いてウェーブレット変換を行うことにより評価関数 d を求める。そのうえで、評価関数 d について、スケール a をある1つの値に固定して測定変数 t を変化させたときに極大値となる点を求める操作を、多数のスケール a の値について行う。こうして求めた点を、測定変数 t を横軸、スケール a を縦軸とするグラフ上に表すと、スケール a の方向に延びる1又は複数の線状となる。このように線状に表されるデータを「リッジライン」と呼ぶ。そして、リッジライン上で評価関数 d が極大値を有するところの測定変数 t の値を、対象データ（マススペクトル）におけるピークの位置（ t の値）と決定する。この方法によれば、対象データにおけるピークの強弱等に関わらず、ピークを検出することができる。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特開平07-098270号公報

非特許文献

- [0006] 非特許文献1: Pan Du 他2名、"Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching (連続ウェーブレット変換に基づくパターンマッチングを組み込むことによる、マススペクトルにおける改良されたピーク検出)", Bioinformatics、(英国)、オックスフォード大学出版、2006年7月4日、第22巻第17号2059~2065頁

発明の概要

発明が解決しようとする課題

- [0007] クロマトグラムには、成分に由来する本来のピークの他に、幅の狭いピーク状のノイズや、緩やかに立ち上がり幅が広いピーク状のバックグラウンドが重畳することがある。非特許文献1に記載の方法では、これらピーク状のノイズやバックグラウンドもピークとして検出してしまい、検出されたピークが真のピークであるのか、ノイズやバックグラウンドであるのかを判別することができない。スペクトルの場合も同様である。
- [0008] 本発明が解決しようとする課題は、ピークの強弱等に関わらずピークを検出することができ、且つ、検出されたピークが真のピークであるかを判別することができるピーク検出方法及びデータ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

- [0009] 上記課題を解決するために成された本発明に係るデータ処理方法は、測定変数に対する測定値の変化を表すグラフのデータからピークを検出する方法であって、
- a) 前記データに対して、極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いてウェーブレット変換を行うことにより、該マザーウェーブレットのスケール及びトランスレーションをパラメータとする評価関数を求めるウェーブレット変換ステップと、
 - b) 前記評価関数が極大値を有するところのトランスレーションに基づいて

前記データにおけるピーク候補の位置を求めると共に、該ピーク候補に対応するスケールに基づいて該ピーク候補の幅を決定するピーク候補情報取得ステップと

を有することを特徴とする。

[0010] ここで、測定変数とは例えばクロマトグラフの場合の時間、光スペクトルの場合の波長、質量電荷比スペクトルの場合の質量電荷比のことを指し、通常、グラフにおいて測定変数は横軸、測定値は縦軸として表現される。

[0011] 本発明では、極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いてウェーブレット変換を行い、評価関数が極大値を有するところのトランスレーションに基づいて前記データにおけるピーク候補の位置を求めると共に、該ピーク候補に対応するスケールに基づいて該ピーク候補の幅を決定する。こうして決定されたピーク候補の幅は、該ピーク候補が試料中の成分に由来する本来のピークであるのか、本来のピークとは異なるもの（ノイズやバックグラウンド等）であるのかを判別する指標となる。

[0012] スケールは、ピーク候補の幅と同じ値ではないものの、マザーウェーブレットが極大値を1つのみ有する場合には該幅との間で相関関係がある。なお、マザーウェーブレットが極大値が2つ以上有する場合には、該マザーウェーブレットが前記データにおける複数個のピークとの一致度が高いことを意味している可能性があるため、スケールとデータのピークを対応付けることができない。そのため、本発明では極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いる。

[0013] 前記マザーウェーブレットには、典型的にはメキシカンハット関数が挙げられる。あるいは、ガウス差分と呼ばれる、幅の異なる2つのガウス関数の差を取った関数を前記マザーウェーブレットして用いることもできる。以下、マザーウェーブレットとしてメキシカンハット関数を用いる場合を例として、ピーク候補の幅を決定する方法を説明する。ここでは、ガウス分布を有するピークが1個のみ存在するデータをモデルとして仮定し、該モデルのピークの幅を未知の値 σ_p とする。また、このモデルのデータに対してウェーブレッ

ト変換を行うと、内積 d_{top} は、スケールを σ_f として

[数3]

$$d_{\text{top}}(\sigma_p, \sigma_f) = \frac{1}{C} \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\sigma_p^2 + \sigma_f^2)^{3/2}} \quad \cdots(3)$$

と表される。ここで、

[数4]

$$C = - \frac{\sqrt{3}}{2^{3/2} \pi^{1/4} \sigma_f^{5/2}} \quad \cdots(4)$$

である。ここで、内積 d_{top} にスケール σ_f^m を乗じた評価関数

$$S(\sigma_p, \sigma_f, m) = \sigma_f^m d_{\text{top}}(\sigma_p, \sigma_f) \quad \cdots(5)$$

を導入する。この評価関数 S が σ_f の関数として極大値を取るとき、すなわち $(\partial S / \partial \sigma_f) = 0$ のとき、

$$\sigma_f = ((5+2m)/(1-2m))^{1/2} \sigma_p \quad \cdots(6)$$

となる。

[0014] (5)式の評価関数 S において $m=0$ とすれば、内積 d_{top} そのものが評価関数 S となる。この場合、評価関数 S の極大値におけるスケールを $\sigma_{f\text{max}}$ とすると、 $\sigma_p = 5^{-1/2} \sigma_{f\text{max}}$ となる。また、(5)式において $m=-1$ とすれば、 $\sigma_p = \sigma_{f\text{max}}$ となる。 m の値をこれら0及び-1以外の値とした場合にも、同様に $\sigma_{f\text{max}}$ と σ_p の関係を求めることができる。

[0015] そこで、実際のデータをウェーブレット変換することにより得られる内積 d から評価関数 S を求め、得られた評価関数 S からリッジラインを作成し、該リッジラインにおいて評価関数 S が極大値となるスケール $\sigma_{f\text{max}}$ を求めることにより、ピーク候補の幅 σ_p を決定することができる。

[0016] なお、メキシカンハット関数以外のウェーブレット関数を用いる場合にも、上記と同様の方法を用いてピーク候補の幅を決定することができる。

[0017] 本発明に係るピーク検出方法は、

複数の前記ピーク候補のうち前記スケールの値が小さい方から順に1又は複数のピーク候補を前記データから除去することにより、幅広ピーク候補検

出用データを作成し、

前記データを前記幅広ピーク候補検出用データに置き換えて、前記ウェーブレット変換ステップ及び前記ピーク候補情報取得ステップを行う
という処理を行うこともできる。

[0018] 一般に、幅の広いピーク候補ほどピーク強度が小さくなることから検出し難くなるが、この幅広ピーク候補検出用データを用いた処理によれば、幅の狭いピーク候補の影響を除去したうえで、ウェーブレット変換ステップ、ピーク候補位置決定ステップ及びピーク候補幅決定ステップを行うため、幅の広いピーク候補を検出し易くなる。なお、幅広ピーク候補検出用データを作成する際に一部のピーク候補を除去することは、当該ピーク候補を偽のピークと判別することを意味するのではない。それらのピーク候補については、前記データから除去される前に決定された幅に基づいて真偽を判別すればよい。

[0019] 本発明に係るデータ処理装置は、測定変数に対する測定値の変化を表すグラフのデータからピークを検出するデータ処理を行う装置であって、

a) 前記データに対して、極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いてウェーブレット変換を行うことにより、該マザーウェーブレットのスケール及びトランスレーションを変数とする評価関数を求めるウェーブレット変換部と、

b) 前記評価関数が極大値を有するところのトランスレーションに基づいて前記データにおけるピーク候補の位置を求めると共に、該ピーク候補に対応するスケールに基づいて該ピーク候補の幅を決定するピーク候補情報取得部と

を備えることを特徴とする。

発明の効果

[0020] 本発明によれば、ウェーブレット変換を行うことでピークの強弱等に関わらずピーク候補を検出することができ、且つ、検出されたピーク候補の幅を決定することができる。こうして決定されたピーク候補の幅に基づいて、該

ピーク候補が真のピークであるかを判別することができる。

図面の簡単な説明

[0021] [図1]本発明に係るデータ処理装置の第1実施形態を示す概略構成図。

[図2]本発明に係るデータ処理方法の第1実施形態を示すフローチャート。

[図3]第1実施形態のデータ処理方法による処理を行った実施例1における処理対象のデータを示すグラフ。

[図4]実施例1においてウェーブレット変換により得られた評価関数から、リッジライン及び該リッジライン上の評価関数の極大値の位置を求めた例を示すグラフ。

[図5]本発明に係るデータ処理装置の第2実施形態を示す概略構成図。

[図6]本発明に係るデータ処理方法の第2実施形態を示すフローチャート。

[図7]第2実施形態のデータ処理方法による処理を行った実施例2において、ウェーブレット変換により決定された幅に基づいて、元のデータから幅の狭いピークを除去した例を示すグラフ。

[図8]幅の狭いピークを除去したデータをウェーブレット変換することにより得られた評価関数から、幅の広いピークに対応するリッジライン及び該リッジライン上の評価関数の極大値の位置を求めた例を示すグラフ。

発明を実施するための形態

[0022] 図1～図8を用いて、本発明に係るピーク検出方法及びデータ処理装置の実施形態を説明する。

第1実施形態のデータ処理装置10は、データ記録部1、表示装置2及び入力装置3と共に用いられる。データ記録部1は、液体クロマトグラフやガスクロマトグラフ等が有する検出器によって測定時に得られたデータを記録する装置であり、ハードディスクやメモリ等から成る。データ記録部1は、図1に示した例ではデータ処理装置10の外に設けているが、データ処理装置10内に設けてもよい。表示装置2は、データ処理装置10によるデータ処理中の情報やデータ処理の結果を表示するディスプレイである。入力装置3は、ユーザが必要な情報をデータ処理装置10に入力するための装置であ

って、キーボードやマウス等から成る。

[0023] データ処理装置 10 は、クロマトグラム作成部 11、ウェーブレット変換部 12、ピーク候補情報取得部 13 及びピーク決定部 14 を有する。ピーク候補情報取得部 13 は、ピーク候補位置決定部 131 及びピーク候補幅決定部 132 を有する。これら各部は、実際にはコンピュータの CPU やメモリ等のハードウェア、及びソフトウェアにより具現化されている。以下、図 2 のフローチャートを用いて、本発明に係るデータ処理方法の第 1 実施形態を説明すると共に、第 1 実施形態のデータ処理装置 10 の各部の機能を説明する。

[0024] まず、クロマトグラム作成部 11 は、データ記録部 1 からデータを取得して、従来と同様の方法によりクロマトグラム $C(t)$ を作成する（ステップ S1）。このクロマトグラム $C(t)$ は上述の「測定値の変化を表すグラフのデータ」に該当し、 t は時間であって上述の測定変数に該当する。スペクトルについて処理を行う場合には、クロマトグラムを作成する操作は不要であり、データ記録部 1 からデータを取得すればよい

[0025] 次に、ウェーブレット変換部 12 は、クロマトグラム $C(t)$ をウェーブレット変換することにより、評価関数を求める（ステップ S2）。ウェーブレット変換では、前述の(1)式における対象データ $x(t)$ をクロマトグラム $C(t)$ とし、マザーウェーブレット $\phi(t)$ としてメキシカンハット関数やガウス差分等の極大値を 1 つのみ有する関数を用いて内積を求める。こうして求めた内積そのものを評価関数としてもよいし、(5)式に示したように内積に σ_f^m （ここで σ_f はスケール）を乗じたものを評価関数としてもよい。この評価関数は、スケール及びトランスレーションをパラメータとする関数である。

[0026] 続いて、ピーク候補情報取得部 13 は、ステップ S2 で求めた評価関数からリッジラインを作成し（ステップ S3）、得られたリッジライン上で評価関数の値が極大値となる点を求める。リッジラインは、スケール σ_f をある 1 つの値に固定して測定変数 t を変化させたときに極大値となる点を求める操作を、多数のスケール σ_f の値について行うことにより作成する。ここで得られる

リッジラインは1つには限られず、多くの場合には複数存在することから、リッジライン上で評価関数の値が極大値となる点は、それら極大値の各々について求める。ピーク候補位置決定部131は、こうして得られた極大値における測定変数の値をクロマトグラム $C(t)$ においてピーク候補が存在する位置（時間）として求め（ステップS4）、ピーク候補幅決定部132はピーク候補の各々についてスケールに基づきピーク候補の幅を決定する（ステップS5）。これらステップS3～S5は、前述のピーク候補情報取得ステップに該当する。なお、ステップS4とS5は同時並行で行ってもよいし、ステップS5の方を先に行ってもよい。ピーク候補の幅は、例えば(5)式及び(6)式を用いると、 $m=0$ （内積が評価関数）の場合には極大値におけるスケールの $5^{-1/2}$ 倍の値、 $m=-1$ の場合には極大値におけるスケールと同じ値となる。

[0027] その後、ピーク決定部27は、得られた幅の値から、対応するピーク候補が真のピークであるか、ノイズやバックグラウンド等、真のピークではないものであるかを判別し（ステップS6）、処理を終了する。真のピークであるか否かは、典型的には、幅の上限値及び下限値を定めておき、得られた幅が上限値と下限値の間にあれば真のピークであり、それらの間になれば真のピークではない、と判別する。あるいは、位置（時間）を複数の区間に分け、区間毎に幅の上限値及び下限値を定めてもよい。本実施形態ではピーク決定部14がこの判別を自動的に行うが、その代わりに、幅の値を表示装置2に表示したうえで人が判別を行うようにしてもよい。

[0028] 次に、第1実施形態のデータ処理方法によりピーク検出を行った例（実施例1）を説明する。実施例1では、図3のグラフに示したデータを処理対象とした。このデータには、10個のピーク（P01～P10）と、それらピークよりも幅が広い1個のピーク状プロファイルPB1が見られる。

[0029] 本実施例では、このデータに対して、メキシカンハット関数をマザーウェーブレットとするウェーブレット変換を行うことにより内積を求め、その内積に σ_f^{-1} （(5)式において $m=-1$ ）を乗じたものを評価関数とした。この例では、評価関数が極大値を有するところのスケールの値をそのまま、元のデータ

のピーク候補における幅と決定する。

[0030] 図4に、リッジラインを求めた結果を示す。図4では、2次元グラフの横軸に時間（測定変数。元のデータの横軸と同じ。）を、縦軸にスケール σ_f を取り（ σ_f は底が2の対数とした）、以下のようにデータを表した。まず、スケール σ_f を1つの値に固定し、測定変数を変化させることにより、当該スケール σ_f の値における評価関数が極大値となる点を求める。この操作を、スケール σ_f の値を少しずつ変えながら繰り返し行う。そうすると、図4のグラフには、縦軸方向に延びる点の列が1つのピーク候補につき1本ずつ現れる。これら点の列がリッジラインである。そして、各リッジラインにつきそれぞれ、評価関数が極大値となるスケール σ_f を求めることにより、図4の2次元グラフ上で極大値となる位置を特定することができる。

[0031] 図4のグラフより、評価関数が極大値となる10個の点（図中の×印）が得られた。これら10個の点はピークP01～P10に対応しており、いずれも σ_f 、すなわち元のデータの幅がほぼ同じ値となっている。このグラフには、符号Nを付した多数の点列が見られるが、これらはノイズである。

[0032] 一方、図4のグラフにはピーク状プロファイルPB1に対応する点列も見られるが、 σ_f が大きいところにおいてP05及びP06と重なることによる影響が大きいため、この実施例1からはピーク状プロファイルPB1に対応するピーク候補の幅を見積もることはできなかった。次に、このように他のピークとの重なりが場合にもピーク候補の幅を見積もることができる方法である、本発明に係る第2実施形態について説明する。

[0033] 第2実施形態に係るデータ処理装置20の概略構成を図5に示す。このデータ処理装置20は、第1実施形態のデータ処理装置10に幅広ピーク候補検出用データ作成部21を加えた構成を有する。以下、図6のフローチャートを用いて、本発明に係るデータ処理方法の第2実施形態を説明すると共に、幅広ピーク候補検出用データ作成部21の機能を説明する。

[0034] まず、ステップS11～S15では、第1実施形態のピーク処理方法のステップS1～S5と同様の操作を行うことにより、ピーク候補が存在する位

置（時間）及びピーク候補の幅を決定する。

[0035] 次に、幅広ピーク候補検出用データ作成部21が、ピーク候補のうち、決定された幅の値が小さいものから順に1又は複数個のピーク候補を選択する（ステップS16）。続いて、ステップS17において、幅広ピークの検出操作を実行するか判定する。この判定の方法として、例えば前述のようにピーク状プロファイルPB1のように極大値を求めることができなかった場合にYESとしたり、あるいは、データの内容に関わりなくステップS17を所定回数実行するまでYESとする、等が挙げられる。

[0036] ステップS17でYESの場合には、選択されたピーク候補について、真のピークであるか否かを判別する（ステップS18）。そして、クロマトグラムC(t)から、選択されたピーク候補の位置及び幅に対応する範囲内のデータを除去し、当該範囲内のデータを直線や曲線で補間することにより、幅広ピーク候補検出用データを作成する（ステップS19）。その後、ステップS12に戻り、幅広ピーク候補検出用データに基づいてステップS12～S16の操作を繰り返す。このとき、幅広ピーク候補検出用データでは元のデータよりもピーク又はピーク状プロファイルの数が少なくなっているため、幅の広いピークを検出し易くなる。これらステップS12～S16の操作は、ステップS17でN0となるまで繰り返し実行される。

[0037] 一方、ステップS17でN0の場合には、ピーク決定部が、その時点で残った全てのピーク候補について真のピークであるか否かを判別し（ステップS20）、処理を終了する。

[0038] 以下、第2実施形態のデータ処理方法によりピーク検出を行った例（実施例2）を説明する。実施例2では、実施例1と同様に図3のグラフに示したデータを処理対象とする。まず、実施例1と同じ方法により、10個のピークP01～P10を検出する。そして、検出されたピークP01～P10について求めた位置及び幅に基づいて、元の図3のデータからピークP01～P10の部分のデータを除去し、除去した部分を補間することにより幅広ピーク候補検出用データを作成した。作成した幅広ピーク候補検出用データのグラフを図7に示す。そ

して、この幅広ピーク候補検出用データに基づいてリッジラインを作成した。当該リッジラインを図8に示す。ピーク状プロファイルPB1に対応して縦軸方向に延びる点の列が1列形成され、評価関数が極大値となる位置が特定されている。この列の近傍には他の点列がなく、他のピーク等の影響を受けることなくピーク状プロファイルPB1の位置及び幅を決定することができた。なお、ピーク状プロファイルPB1に対応するもの以外の点列は、データの補間の際に生じた不連続性等によるノイズである。

符号の説明

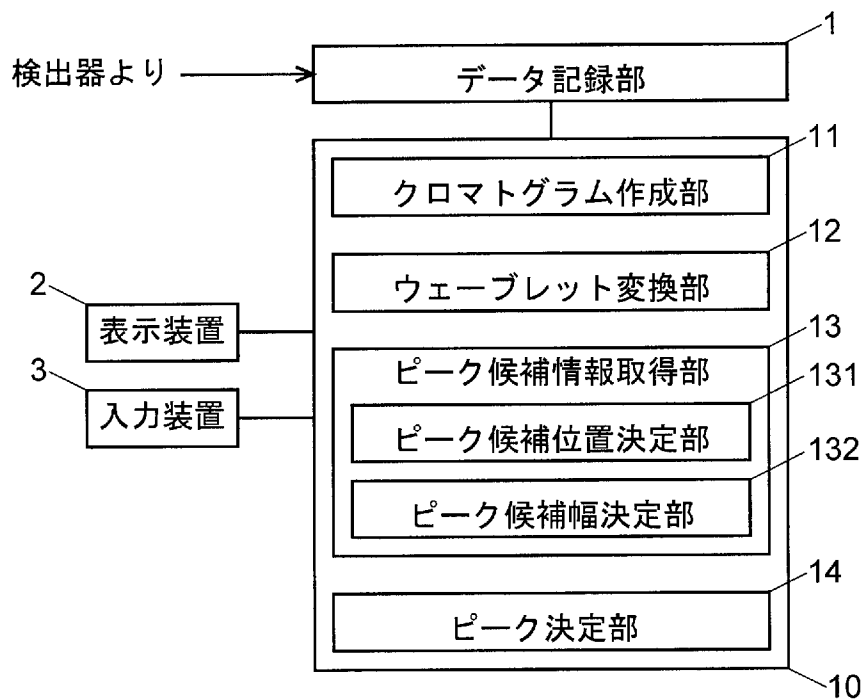
- [0039] 1…データ記録部
2…表示装置
3…入力装置
10、20…データ処理装置
11…クロマトグラム作成部
12…ウェーブレット変換部
13…ピーク候補情報取得部
131…ピーク候補位置決定部
132…ピーク候補幅決定部
14…ピーク決定部
21…幅広ピーク候補検出用データ作成部

請求の範囲

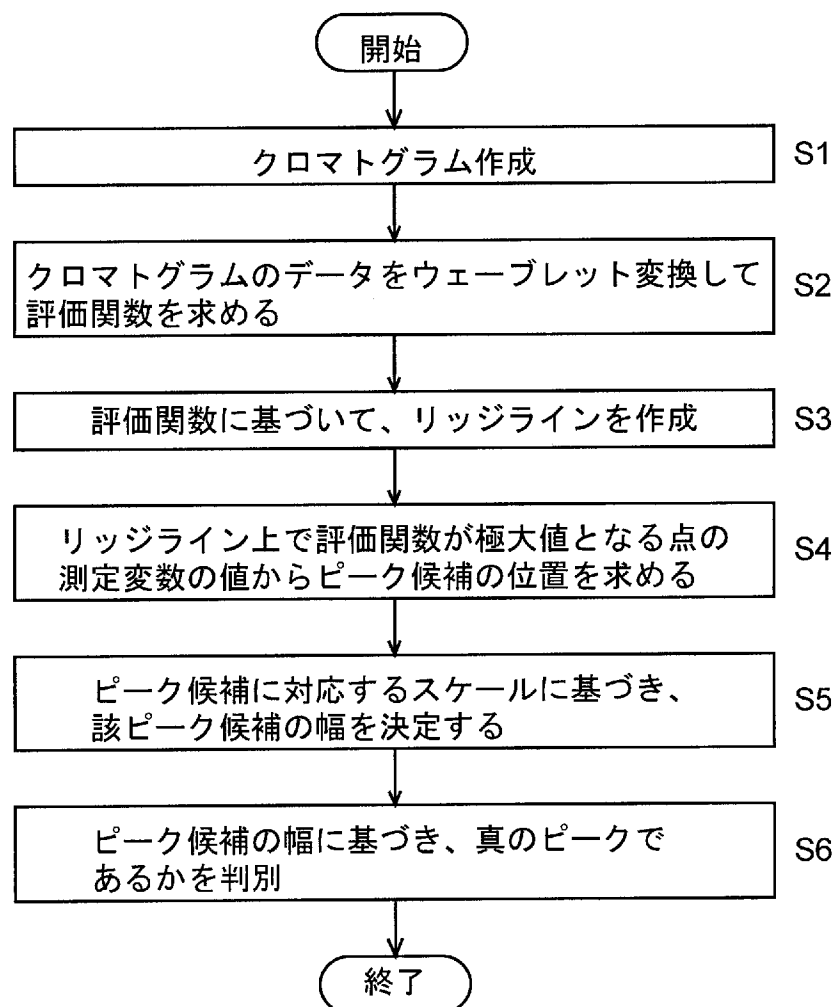
- [請求項1] 測定変数に対する測定値の変化を表すグラフのデータからピークを検出する方法であって、
- a) 前記データに対して、極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いてウェーブレット変換を行うことにより、該マザーウェーブレットのスケール及びトランスレーションをパラメータとする評価関数を求めるウェーブレット変換ステップと、
 - b) 前記評価関数が極大値を有するところのトランスレーションに基づいて前記データにおけるピーク候補の位置を求めると共に、該ピーク候補に対応するスケールに基づいて該ピーク候補の幅を決定するピーク候補情報取得ステップと
- を有することを特徴とするピーク検出方法。
- [請求項2] 複数の前記ピーク候補のうち前記スケールの値が小さい方から順に1又は複数個のピーク候補を前記データから除去することにより、幅広ピーク候補検出用データを作成し、
- 前記データを前記幅広ピーク候補検出用データに置き換えて、前記ウェーブレット変換ステップ及び前記ピーク候補情報取得ステップを行う
- ことを特徴とする請求項1に記載のピーク検出方法。
- [請求項3] 測定変数に対する測定値の変化を表すグラフのデータからピークを検出するデータ処理を行う装置であって、
- a) 前記データに対して、極大値を1つのみ有するマザーウェーブレットを用いてウェーブレット変換を行うことにより、該マザーウェーブレットのスケール及びトランスレーションを変数とする評価関数を求めるウェーブレット変換部と、
 - b) 前記評価関数が極大値を有するところのトランスレーションに基づいて前記データにおけるピーク候補の位置を求めると共に、該ピーク候補に対応するスケールに基づいて該ピーク候補の幅を決定する

ピーク候補情報取得部と
を備えることを特徴とするデータ処理装置。

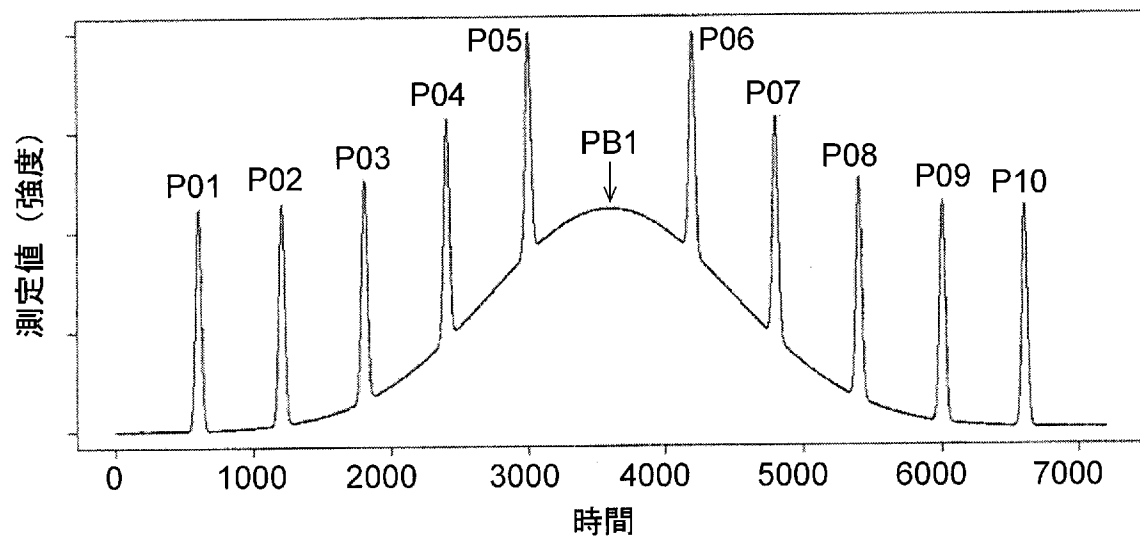
[図1]



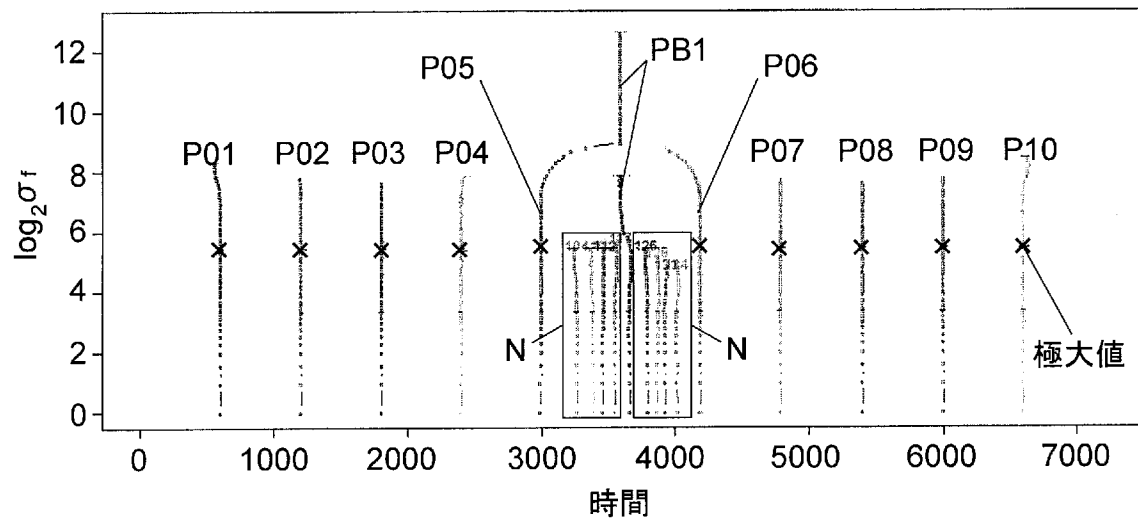
[図2]



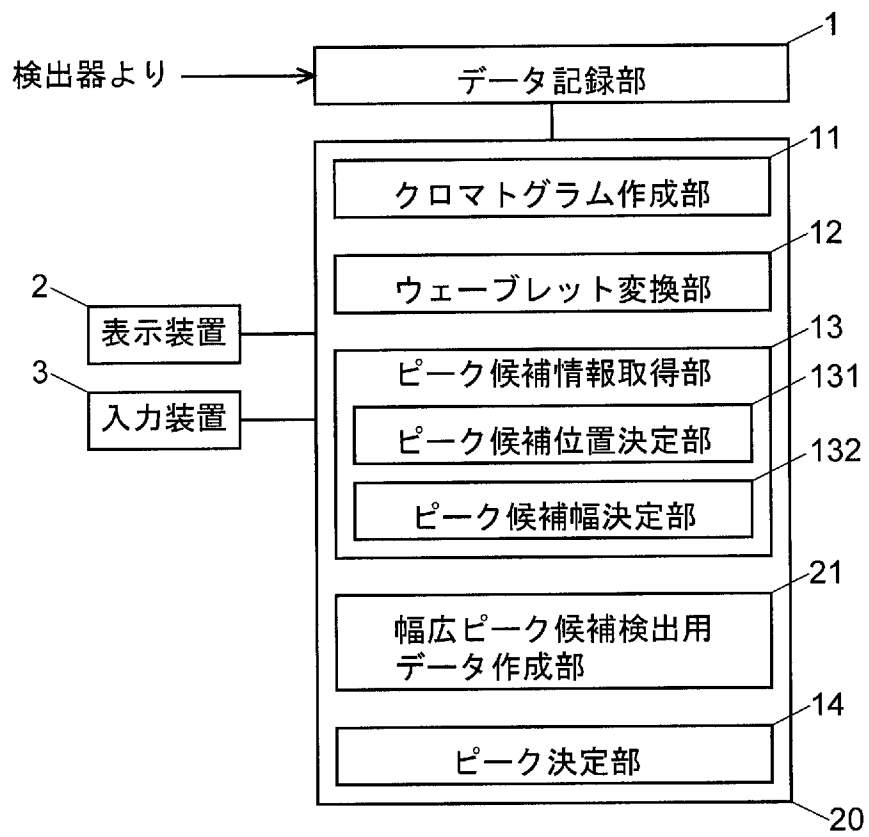
[図3]



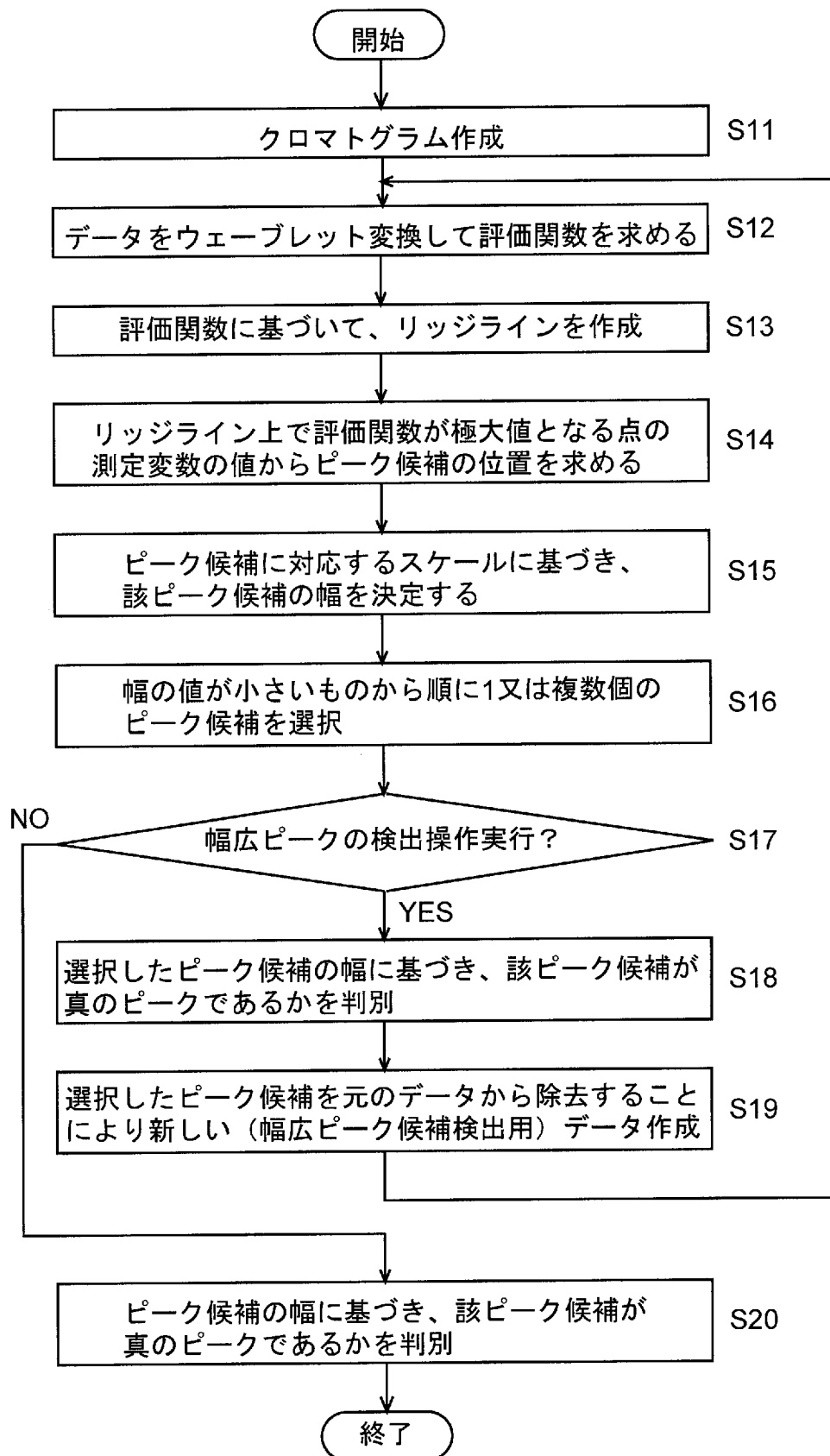
[図4]



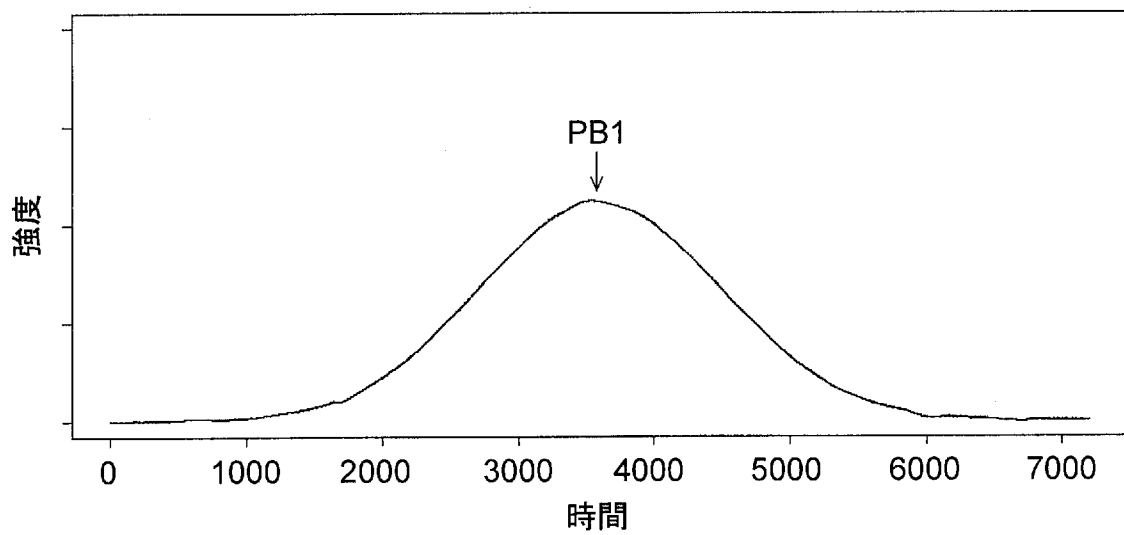
[図5]



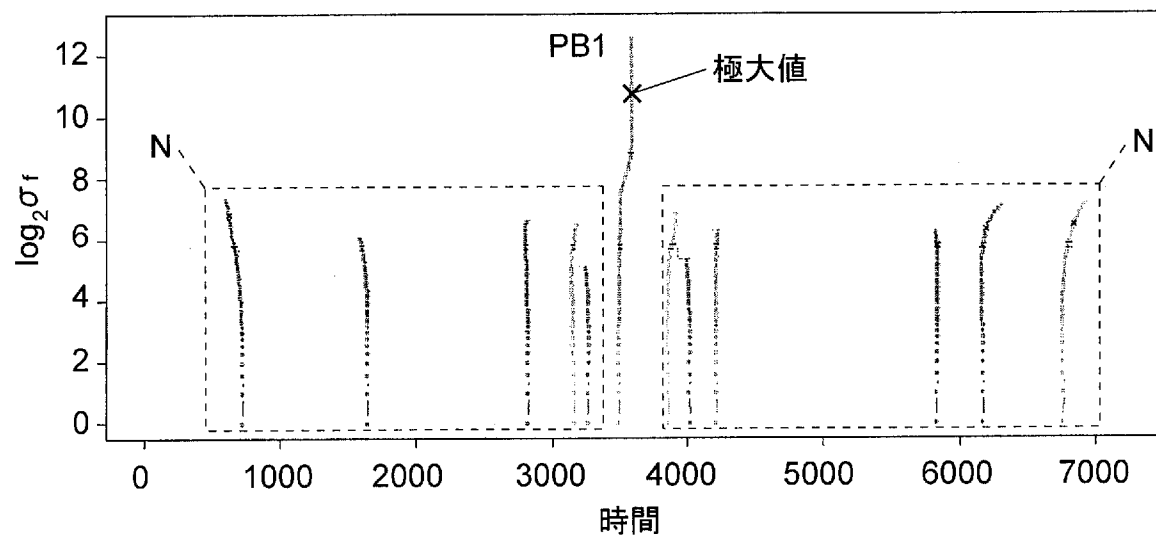
[図6]



[図7]



[図8]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/065915

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N30/86(2006.01) i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01N30/86

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2016 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2016

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	WO 2015/033478 A1 (Shimadzu Corp.), 12 March 2015 (12.03.2015), entire text; all drawings & CN 105518455 A	1, 3 2
A	DU P et al, Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching, Bioinformatics, 2006.09.01, 22(17), 2059-2065	1-3
A	US 2004/0102906 A1 (EFECKTA TECHNOLOGIES COOPERATION), 27 May 2004 (27.05.2004), entire text; all drawings & WO 2004/019003 A2 & AU 2003262835 A	1-3

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

26 July 2016 (26.07.16)

Date of mailing of the international search report

09 August 2016 (09.08.16)

Name and mailing address of the ISA/

Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/065915

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2000-18961 A (Yamatake Corp.), 21 January 2000 (21.01.2000), paragraphs [0032] to [0043] (Family: none)	2
A	JP 2001-218747 A (Tokyo Denki University), 14 August 2001 (14.08.2001), paragraphs [0046] to [0050] (Family: none)	2

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. G01N30/86(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

Int.Cl. G01N30/86

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2016年
日本国実用新案登録公報	1996-2016年
日本国登録実用新案公報	1994-2016年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X A	WO 2015/033478 A1（株式会社島津製作所）2015.03.12, 全文、全図 & CN 105518455 A	1, 3 2
A	DU P et al, Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching, Bioinformatics, 2006.09.01, 22(17), 2059-2065	1-3
A	US 2004/0102906 A1 (EFECKTA TECHNOLOGIES COOPERATION) 2004.05.27, 全文、全図 & WO 2004/019003 A2 & AU 2003262835 A	1-3

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

26.07.2016

国際調査報告の発送日

09.08.2016

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（ISA/JP）

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官（権限のある職員）

赤坂 祐樹

電話番号 03-3581-1101 内線 3252

2J

3316

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2000-18961 A (株式会社山武) 2000. 01. 21, 段落 0032-0043 (ファミリーなし)	2
A	JP 2001-218747 A (学校法人東京電機大学) 2001. 08. 14, 段落 0046-0050 (ファミリーなし)	2