(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
2025年1月2日(02.01.2025)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2025/004583 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 30/86 (2006.01) *G01N 27/624* (2021.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2024/017900

(22) 国際出願日： 2024年5月15日(15.05.2024)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2023-105633 2023年6月28日(28.06.2023) JP

(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: 河井 遥範 (**KAWAI, Harunori**); 〒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: 弁理士法人深見特許事務所 (**FUKAMI PATENT OFFICE, P.C.**); 〒5300005 大阪府大阪市北区中之島三丁目２番４号 中之島フェスティバルタワー・ウエスト Osaka (JP).

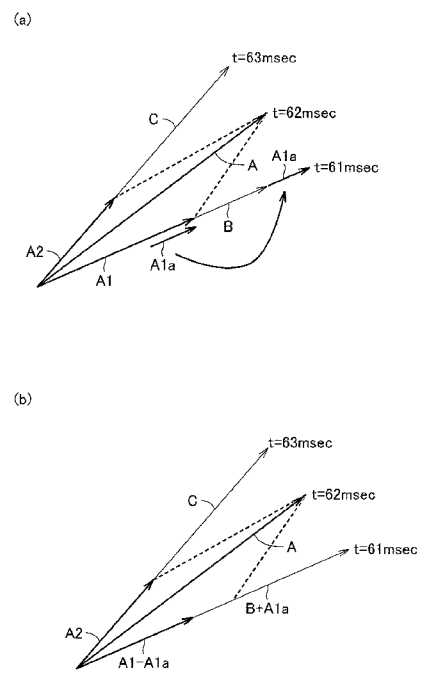
(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, 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, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, 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, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, 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,

(54) **Title:** PEAK ANALYSIS METHOD AND PEAK ANALYSIS DEVICE

(54) 発明の名称： ピーク解析方法、およびピーク解析装置

FIG.6



(57) **Abstract:** Provided are a peak analysis method and a peak analysis device that are capable of identifying, from a plurality of items of data obtained from a detection device, the number of peaks included in a spectrum required for performing peak separation processing and a target for the peak separation processing. This peak analysis method analyzes spectrum peaks in a plurality of items of data obtained from a detection device. The peak analysis method includes: a step for setting an analysis target spectrum vector and a non-target spectrum vector; a step for dividing the analysis target spectrum vector into components in the direction of the non-target spectrum vector; and a step for transferring prescribed proportions of the spectrum vectors between the non-target spectrum vector and the analysis target spectrum vector on the basis of comparison of components in the direction of the analysis target spectrum vector with the non-target spectrum vector.

WO 2025/004583 A1

［続葉有］

IT, LT, LU, LV, MC, ME, 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)）

(57) 要約：検出装置より得られた複数のデータから、ピーク分離の処理を行う上で必要となるスペクトルに含まれるピークの個数、ピーク分離の処理を行う対象を特定することができるピーク解析方法、およびピーク解析装置を提供する。ピーク解析方法は、検出装置より得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析方法である。ピーク解析方法は、解析対象スペクトルベクトル、対象外スペクトルベクトルを設定するステップと、解析対象スペクトルベクトルを、対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分けるステップと、解析対象スペクトルベクトルの方向の成分と対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを対象外スペクトルベクトルと解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡するステップと、を含む。

明　細　書

発明の名称 ： ピーク解析方法、およびピーク解析装置

技術分野

[0001]　本開示は、検出装置より得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析方法、およびピーク解析装置に関する。

背景技術

[0002]　フォトダイオードアレイ（ＰＤＡ）検出装置等のマルチチャンネル型検出装置や質量分析計を検出装置として用いた液体クロマトグラフ（ＬＣ）などで分析を行う場合、複数の化合物を含む試料に対し、含まれる化合物をそれぞれ分離して、定量的にまたは定性的に解析を行っている。しかし、試料に含まれる化合物が多い場合や、似たような物理的性質を持つ化合物が試料に含まれている場合には、検出装置より得られたスペクトルの１つのピークに複数の化合物を含んだものや、複数のピークの裾が重なったものなどが現れる。

[0003]　このような場合、得られたスペクトルに対してピーク分離の処理が行われる。ピーク分離の処理として、ピークデコンボリューション処理や、ピークの形状が複数のガウス関数を線形結合した混合ガウス分布であるとみなしてピークを分離する処理（特許第６２６０７０９号公報（特許文献１））などが知られている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：特許第６２６０７０９号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005]　しかし、これらのピーク分離の処理では、あらかじめスペクトルに含まれるピークの個数（化合物数）を設定して処理を行う必要があるが、実際の分析においては、試料に含まれる化合物数を事前に知ることができない。その

ため、あらかじめスペクトルに含まれるピークの個数を仮定した上でピーク分離の処理を行い、当該処理結果と実際のデータとを比較評価し、その評価値が事前に設定した閾値を満たすまで、仮定するピークの個数を変えてピーク分離の処理を繰り返す必要があった。

[0006] また、これらのピーク分離の処理では、演算処理において大量のメモリ容量を必要とするため、検出装置より得たデータ全体を対象に処理を行うことはハードウェア構成上困難であった。そのため、検出装置より得たデータの中からピーク分離の処理を行う対象ピークを事前に特定しておく必要があった。

[0007] 本開示は、かかる問題を解決するためになされたものであり、検出装置より得られた複数のデータから、ピーク分離の処理を行う上で必要となるスペクトルに含まれるピークの個数、ピーク分離の処理を行う対象を特定することができるピーク解析方法、およびピーク解析装置を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0008] 本開示のピーク解析方法は、検出装置より得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析方法である。ピーク解析方法は、複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定するステップと、解析対象スペクトルベクトルを、対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分けるステップと、解析対象スペクトルベクトルの方向の成分と対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを対象外スペクトルベクトルと解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡するステップと、を含む。

[0009] 本開示のピーク解析装置は、スペクトルのピークを解析するピーク解析装置である。ピーク解析装置は、検出装置より複数のデータを受け付ける入力部と、入力部で受け付けた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析する演算部と、を備える。演算部は、複数のデータから解析対象となる１つ

のデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定し、解析対象スペクトルベクトルを、対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分け、解析対象スペクトルベクトルの方向の成分と対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを対象外スペクトルベクトルと解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡する処理を行う。

発明の効果

[0010] 本開示では、検出装置より得られた複数のデータから、ピーク分離の処理を行う上で必要となるスペクトルに含まれるピークの個数、ピーク分離の処理を行う対象を容易に特定することができる。

図面の簡単な説明

[0011] [図1]実施の形態に従うピーク解析装置を含む液体クロマトグラフ装置の概略図である。

[図2]実施の形態に従うデータ処理部の概略図である。

[図3]実施の形態に従うピーク解析方法を示すフローチャートである。

[図4]実施の形態に従うスペクトルベクトルの一例を示す図である。

[図5]解析対象スペクトルベクトルの分解・比較の一例を示す図である。

[図6]解析対象スペクトルベクトルの一部の対象前スペクトルベクトルへの譲渡の一例を示す図である。

[図7]解析対象スペクトルベクトルの一部の対象後スペクトルベクトルへの譲渡の一例を示す図である。

[図8]譲渡後の解析対象スペクトルベクトルの一例を示す図である。

[図9]実施の形態に従うピーク解析方法の解析結果を説明するための図である。

[図10]変形例に従うピーク解析方法を示すフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0012] 以下、実施の形態について、図面を参照しながら詳細に説明する。なお、図中同一又は相当部分には同一符号を付してその説明は繰り返さない。

[0013] ［ピーク解析装置を含む液体クロマトグラフ装置］

本実施の形態では、液体クロマトグラフを含む検出装置から得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析装置を含む構成を一例に説明する。なお、ピーク解析装置を適用する検出装置は、液体クロマトグラフを含む検出装置に限定されず、フォトダイオードアレイ（ＰＤＡ）検出装置等のマルチチャンネル型検出装置や質量分析計等の検出装置に適用してもよい。図１は、実施の形態に従うピーク解析装置を含む液体クロマトグラフ装置の概略図である。

[0014] 液体クロマトグラフを含む検出装置（ＬＣ装置１）は、移動相が貯留されている移動相容器１１と、移動相を吸引して一定流速で送給する送液ポンプ１２と、送給される移動相中に試料を注入するインジェクター１３と、試料中の成分を時間方向に分離するカラム１４と、カラム１４からの溶出液中の成分を検出するＰＤＡ検出器１５と、ＰＤＡ検出器１５で検出したアナログデータをデジタルデータに変換するＡ／Ｄ変換器１６とを含む。

[0015] ＬＣ装置１には、ＬＣ装置１から得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析装置１０が接続されている。ピーク解析装置１０は、データ解析部２、入力部３、表示部４を含む、データ解析部２では、データ収集処理、波形処理、定性・定量解析処理を行っている。波形処理では、スペクトル収斂処理、ピーク分離処理、ピーク決定処理を行っている。また、ピーク解析装置１０には、分析者が各種入力操作を行うための入力部３と、処理結果などを表示するための表示部４と、が接続されている。

[0016] 図２は、実施の形態に従うデータ処理部の概略図である。データ解析部２で実行されるプログラムにより、ＬＣ装置１から得られた複数のデータに対してデータ収集処理、波形処理、定性・定量解析処理等の処理を行うことができる。データ解析部２は、プロセッサ１０２と、メインメモリ１０４と、入力Ｉ／Ｆ１０６と、出力Ｉ／Ｆ１０８と、ストレージ１１０と、外部ドライブ１１２とを含む。これらのコンポーネントは、プロセッサバス１１８を介して接続されている。

[0017] プロセッサ１０２は、ＣＰＵやＧＰＵなどで構成され、ストレージ１１０に記憶されたプログラム（一例として、ＯＳ１１０２およびプログラム１１０４）を読出して、メインメモリ１０４に展開して実行することができる。プロセッサ１０２では、入力Ｉ／Ｆ１０６を介してＬＣ装置１から得られた複数のデータに対して、波形処理、定性・定量解析処理等の処理を行うプログラム１１０４が実行される。

[0018] メインメモリ１０４は、ＤＲＡＭやＳＲＡＭなどの揮発性記憶装置などで構成される。ストレージ１１０は、例えば、ＨＤＤやＳＳＤなどの不揮発性記憶装置などで構成される。ストレージ１１０には、基本的な機能を実現するためのＯＳ１１０２に加えて、波形処理、定性・定量解析処理等の処理を行うプログラム１１０４などが記憶される。

[0019] 入力Ｉ／Ｆ１０６は、ＬＣ装置１だけでなく、分析者が各種入力操作を行うための入力部３が接続されている。出力Ｉ／Ｆ１０８は、表示部４と接続されており、波形処理、定性・定量解析処理等の処理結果を表示部４に表示させることができる。

[0020] ＬＣ装置１において、送液ポンプ１２は移動相容器１１から移動相を吸引し、インジェクター１３を介してカラム１４へと送給する。インジェクター１３は図示しない制御部からの指示に応じた所定のタイミングで、移動相中に所定量の試料を注入する。注入された試料は移動相の流れに乗ってカラム１４に導入され、カラム１４を通過する間に試料中の各種の成分は時間方向に分離される。こうして分離された成分を含む溶出液が、カラム１４の出口から出てＰＤＡ検出器１５に導入される。ＰＤＡ検出器１５は、図示しないが、溶出液が流通するセルと、光源と、セルを通過した光を波長分散させる分光器と、波長分散光を同時に検出するＰＤＡ素子と、を含む。

[0021] 光源から発した光はセルに照射され、該セル内を流れる溶出液中を通過する際に該溶出液中の成分に特有の吸収を受ける。そして、吸収後の光が分光器で波長分散され、所定の波長範囲の光は波長毎にそれぞれＰＤＡ素子で検出される。したがって、ＰＤＡ検出器１５では、所定の波長範囲に亘る吸光

スペクトルを反映した検出信号がほぼ同時に得られる。制御部からの制御に応じて、ＰＤＡ検出器１５は、こうした吸光測定を所定時間間隔で繰り返し実行する。Ａ／Ｄ変換器１６はＰＤＡ検出器１５から出力される検出信号をデジタルデータに変換し、ピーク解析装置１０に出力する。したがって、一つの試料に対するＬＣ測定によって、時間ｔ、波長λ、及び吸光度ｙ（信号強度）という三つのディメンジョンを有する３次元データが得られる。

[0022] ピーク解析装置１０では、ＬＣ装置１から得られた複数のデータに対して定性・定量解析処理を行う前に、波形処理でクロマトグラム及び吸光スペクトルにおいて重なっているピークを分離する。さらに、ピーク解析装置１０では、波形処理で決定した個々のピークに対して、ピークトップの位置（保持時間、吸収波長）、クロマトグラム上のピークの面積（又は高さ）を算出し、定性・定量解析処理で、ピーク位置に基づいて成分を定性し、ピーク面積又は高さに基いて成分を定量する。そして、ピーク解析装置１０は、表示部４に定性、定量結果を表示する。

[0023] ピーク解析装置１０は、波形処理でスペクトルにおいて重なっているピークを分離するピーク分離処理を行っている。このピーク分離処理では、あらかじめスペクトルに含まれるピークの個数（化合物数）を設定して処理を行う必要があるが、実際の分析においては、試料に含まれる化合物数を事前に知ることができない。そのため、あらかじめスペクトルに含まれるピークの個数を仮定した上でピーク分離の処理を行い、当該処理結果と実際のデータとを比較評価し、その評価値が事前に設定した閾値を満たすまで、仮定するピークの個数を変えてピーク分離の処理を繰り返す必要があった。

[0024] そこで、ピーク解析装置１０では、ピーク分離処理を行う前の前処理としてピークの個数を特定するためにスペクトル収斂処理を行う。スペクトル収斂処理では、検出装置より得たデータ全体を対象に処理を行うことができ、スペクトルにおいて重なっているピークの特定、および重なっているピークの個数を得ることができる。そのため、ピーク分離処理では、演算処理において大量のメモリ容量が必要となるため、検出装置より得たデータ全体を対

象に処理を行うことはハードウェア構成上困難であった課題を、前処理としてスペクトル収斂処理を行うことで解消することができる。

[0025] ［スペクトル収斂処理］

次に、スペクトル収斂処理について具体的に説明する。図３は、実施の形態に従うピーク解析方法を示すフローチャートである。まず、ピーク解析装置１０は、ＬＣ装置１から得た複数のデータをメインメモリ１０４に読み込む（ステップＳ１０１）。ＬＣ装置１から得た複数のデータを読み込めていない場合（ステップＳ１０１でＮＯ）、ピーク解析装置１０は、処理をステップＳ１０１に戻す。

[0026] ＬＣ装置１から得た複数のデータを読み込めた場合（ステップＳ１０１でＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、複数のデータの各時間ｔのスペクトルを１つのベクトル（スペクトルベクトル）としてみなす。つまり、ピーク解析装置１０では、ＬＣ装置１からクロマトグラムデータを、スペクトルベクトルの経時変化データとして扱っている。具体的に、図４は、実施の形態に従うスペクトルベクトルの一例を示す図である。図４に示す例では、ＰＤＡ検出器１５が２つの波長（Ｘｎｍ、Ｙｎｍ）における信号強度を測定したと単純化してある。そのため、横軸をＸｎｍ波長の信号強度とし、縦軸をＹｎｍ波長の信号強度として、時間ｔ＝６０ｍｓｅｃから時間ｔ＝６３ｍｓｅｃまでのスペクトルベクトルを図４に示す２次元のグラフにプロットすることができる。もちろん、実際の測定では、ＰＤＡ検出器１５が数百～数千の波長における信号強度を測定できるので、スペクトルベクトルの次元は、数百～数千次元になる。なお、ＰＤＡ検出器１５だけでなく、ＵＶ検出器や、質量検出器などの他の検出器においても同様に、測定した複数のデータをスペクトルベクトルとして扱うことができる。

[0027] 次に、ピーク解析装置１０は、複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとする（ステップＳ１０２）。ピーク解析装置１０は、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に前にあるデータを対象前スペクトルベクトルとし、解析対象スペクトルベクトル

に対して時間的に後にあるデータを対象後スペクトルベクトルと設定する（ステップＳ１０３）。ピーク解析装置１０は、解析対象スペクトルベクトルを、対象前スペクトルベクトルの第１方向の成分と、対象後スペクトルベクトルの第２方向の成分とに分ける（ステップＳ１０４）。ピーク解析装置１０は、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとを比較する。

[0028] 具体的に、図５は、解析対象スペクトルベクトルの分解・比較の一例を示す図である。図５（ａ）では、解析対象スペクトルベクトルとして時間ｔ＝６２ｍｓｅｃのスペクトルベクトルＡを選択している。時間ｔ＝６２ｍｓｅｃのスペクトルベクトルＡを解析対象スペクトルベクトルと選択した場合、対象前スペクトルベクトルが時間ｔ＝６１ｍｓｅｃのスペクトルベクトルＢと、対象後スペクトルベクトルが時間ｔ＝６３ｍｓｅｃのスペクトルベクトルＣと設定する。

[0029] 次に、図５（ａ）に示すスペクトルベクトルＡを、スペクトルベクトルＢの方向の成分Ａ１と、スペクトルベクトルＣの方向の成分Ａ２とに分解する。ピーク解析装置１０は、図５（ｂ）に示すように、分解した成分Ａ１と、スペクトルベクトルＢとを比較する。

[0030] 図３に戻って、ピーク解析装置１０は、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断する（ステップＳ１０５）。対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きい場合（ステップＳ１０５でＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の所定割合を対象前スペクトルベクトルに加算する（ステップＳ１０６）。一方、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさ以下の場合（ステップＳ１０５でＮＯ）、ピーク解析装置１０は、対象前スペクトルベクトルの所定割合を解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分に加算する（ステップＳ１０７）。ここで、所定割合とは、ベクトルを譲渡する割合（譲渡率）

である。所定割合は、一定値（たとえば、０．１，０．６など）でもよいが、対象前スペクトルベクトル（または対象後スペクトルベクトル）の大きさ、分解した成分の大きさなどの情報に基づいて、ベクトル毎に変動させてもよい。

[0031] 具体的に、図６は、解析対象スペクトルベクトルの一部の対象前スペクトルベクトルへの譲渡の一例を示す図である。図６（ａ）に示すように、分解した成分Ａ１と、スペクトルベクトルＢとを比較した場合、分解した成分Ａ１よりスペクトルベクトルＢの方が大きい。そのため、分解した成分Ａ１の所定割合（たとえば、０．１）のベクトルＡ１ａをスペクトルベクトルＢに譲渡して加算する。図６（ｂ）では、ベクトルＡ１ａをスペクトルベクトルＢに加算した後のスペクトルベクトルを示しており、分解した成分Ａ１は、成分Ａ１－Ａ１ａとなり、スペクトルベクトルＢは、スペクトルベクトルＢ＋Ａ１ａとなる。

[0032] なお、図３に示す処理では、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとの比較において、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断してステップＳ１０６に進むか、ステップＳ１０７に進むかを決定する一例を示した。しかし、この処理に限られず、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとの比較において、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさ以上か否かを判断してステップＳ１０６に進むか、ステップＳ１０７に進むかを決定してもよい。また、図３に示す処理では、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断してステップＳ１０６に進むか、ステップＳ１０７に進むかを決定する一例を示したが、当判断がＹＥＳの場合、ステップＳ１０６に進むが、ＮＯの場合、ステップＳ１０７に進まない処理でもよい。逆に、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断して、

当判断がＹＥＳの場合、ステップＳ１０６に進まないが、ＮＯの場合、ステップＳ１０７に進む処理でもよい。

[0033] 図３に戻って、ピーク解析装置１０は、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断する（ステップＳ１０８）。対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きい場合（ステップＳ１０８でＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の所定割合を対象後スペクトルベクトルに加算する（ステップＳ１０９）。一方、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさ以下の場合（ステップＳ１０８でＮＯ）、ピーク解析装置１０は、対象後スペクトルベクトルの所定割合を解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分に加算する（ステップＳ１１０）。

[0034] 具体的に、図７は、解析対象スペクトルベクトルの一部の対象後スペクトルベクトルへの譲渡の一例を示す図である。図７（ａ）に示すように、分解した成分Ａ２と、スペクトルベクトルＣとを比較した場合、分解した成分Ａ２よりスペクトルベクトルＣの方が大きい。そのため、分解した成分Ａ２の所定割合（たとえば、０．１）のベクトルＡ２ａをスペクトルベクトルＣに譲渡して加算する。図７（ｂ）では、ベクトルＡ２ａをスペクトルベクトルＣに加算した後のスペクトルベクトルを示しており、分解した成分Ａ２は、成分Ａ２－Ａ２ａとなり、スペクトルベクトルＣは、スペクトルベクトルＣ＋Ａ２ａとなる。

[0035] なお、図３に示す処理では、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分と対象後スペクトルベクトルとの比較において、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断してステップＳ１０９に進むか、ステップＳ１１０に進むかを決定する一例を示した。しかし、この処理に限られず、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分と対象後スペクトルベクトルとの比較にお

いて、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさ以上か否かを判断してステップＳ１０９に進むか、ステップＳ１１０に進むかを決定してもよい。また、図３に示す処理では、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断してステップＳ１０９に進むか、ステップＳ１１０に進むかを決定する一例を示したが、当判断がＹＥＳの場合、ステップＳ１０９に進むが、ＮＯの場合、ステップＳ１１０に進まない処理でもよい。逆に、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断して、当判断がＹＥＳの場合、ステップＳ１０９に進まないが、ＮＯの場合、ステップＳ１１０に進む処理でもよい。

[0036] 図３に戻って、ピーク解析装置１０は、ステップＳ１０１で読み込んだ複数のデータの各々を解析対象スペクトルベクトルとしてすべてのデータを処理したか否かを判断する（ステップＳ１１１）。すべてのデータを処理していない場合（ステップＳ１１１でＮＯ）、ピーク解析装置１０は、処理をステップＳ１０２に戻す。たとえば、図５に示す時間ｔ＝６２ｍｓｅｃのスペクトルベクトルを解析対象スペクトルベクトルとして処理した後、次に時間ｔ＝６３ｍｓｅｃのスペクトルベクトルを解析対象スペクトルベクトルとして処理する。

[0037] すべてのデータを処理していない場合（ステップＳ１１１でＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、加算後のデータに更新する処理を行う（ステップＳ１１２）。具体的に、図８は、譲渡後の解析対象スペクトルベクトルの一例を示す図である。図８では、成分Ａ１－Ａ１ａと成分Ａ２－Ａ２ａとを合成し、スペクトルベクトルＡａを更新後の時間ｔ＝６２ｍｓｅｃのスペクトルベクトルとする。なお、各時間のスペクトルベクトルは、ステップＳ１０２～ステップＳ１１１の処理でベクトルの譲渡を繰り返し行っているが、譲渡処理ごとにスペクトルベクトルの更新を行うのではなく、すべてのデータを処理した後に一斉にスペクトルベクトルの更新を行う。また、ピーク解析装置

１０は、ステップＳ１０２～ステップＳ１１１の処理を開始前にステップＳ１０１でデータをメインメモリ１０４上に読み出してコピーし、ベクトルの譲渡による加算・減算をコピーしたデータに対して行っている。これは、同一のデータに対してベクトルの譲渡による加算・減算を行うと、どの時間のスペクトルベクトルから処理を開始したかによって結果が変動してしまう不具合を防止するためである。

[0038] 図３に戻って、ピーク解析装置１０は、ステップＳ１０２～ステップＳ１１２の処理を所定回数（たとえば、数十～数百回）行ったか否かを判断する（ステップＳ１１３）。処理を所定回数行っていない場合（ステップＳ１１３でＮＯ）、ピーク解析装置１０は、処理をステップＳ１０２に戻す。本実施の形態では、ステップＳ１０２～ステップＳ１１２の処理が、１回のスペクトル収斂処理であり、このスペクトル収斂処理を複数回行うことで、測定したスペクトルからノイズ成分がキャンセルされ、ピーク分離処理を行う対象スペクトルを特定し、当該スペクトルに含まれるピークの個数を特定することができる。

[0039] 処理を所定回数行った場合（ステップＳ１１３でＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、別のデータを分析する必要があるか否かを判断する（ステップＳ１１４）。別のデータを分析する必要がある場合（ステップＳ１１４でＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、処理をステップＳ１０１に戻す。別のデータを分析する必要がない場合（ステップＳ１１４でＮＯ）、ピーク解析装置１０は、処理を終了する。

[0040] 次に、本実施の形態に従うピーク解析方法おいて、スペクトル収斂処理を行った解析結果を説明する。図９は、実施の形態に従うピーク解析方法の解析結果を説明するための図である。図９（ａ）は、ＬＣ装置１から得たクロマトグラムデータであり、丸枠で囲んだ３つのピークＩ～ＩＩＩは、それぞれピークの個数が１つのように見える。しかし、当該データに対してスペクトル収斂処理を２００回行った場合、図９（ｂ）に示すように、丸枠で囲んだ３つのピークＩ～ＩＩＩは、いずれもピークの個数が２つであることが分

かる。なお、図９（ａ）および図９（ｂ）は、横軸が時間、縦軸が信号強度である。

[0041] 図９（ｃ）は、図９（ｂ）で特定したピークＩＩＩのそれぞれのスペクトルを示している。図９（ｃ）は、横軸が波長、縦軸が信号強度である。本実施の形態に従うピーク解析方法では、スペクトル収斂処理を行うことでクロマトグラムに含まれる化合物数（ピークの個数）、各化合物の保持時間、各化合物のスペクトルが事前に特定することができ、ピーク分離処理（たとえば、デコンボリューション処理）を容易かつ正確に行うことが可能になる。特に、スペクトル収斂処理を事前に行うことで、ピーク分離処理において、あらかじめ化合物数を仮定する必要がなく、化合物数を仮定して結果を評価する試行錯誤の調整が不要となり、処理を高速化できる。また、スペクトル収斂処理を行うことで共溶出しているクロマトグラムの時間範囲を事前に把握することができるので、ピーク分離処理する際に必要な時間範囲のクロマトグラムを処理対象として絞り込むことで、演算処理に必要なメモリ量を減らすことができる。さらに、スペクトル収斂処理自体、あらかじめ化合物数を仮定する必要がなく、必要となるメモリ量も少なくクロマトグラムデータ全体を一度に処理することが可能である。スペクトル収斂処理は、クロマトグラムデータ全体を一度に処理することができるため、ピーク毎に処理を分けて実行する必要がない。

[0042] ［変形例］

（１）前述の実施の形態では、スペクトル収斂処理を所定回数繰り返す（ステップＳ１１３）と説明した。しかし、スペクトル収斂処理の繰り返し回数は、一定値（たとえば、１００，２００回など）ではなく、解析対象スペクトルベクトルの数に対する、スペクトルベクトルを譲渡する数の割合が所定閾値（たとえば、０．３，０．５など）以下となるまでの回数としてもよい。スペクトル収斂処理を繰り返し行うと、スペクトルベクトルを加算または減算する譲渡の回数が減り、スペクトルがある状態に収斂する。そのため、解析対象スペクトルベクトルの数に対する、スペクトルベクトルを譲渡す

る数の割合（譲渡割合）をモニタすることでスペクトルの収斂度合いを把握して、スペクトル収斂処理の繰り返し回数を変動させてもよい。

[0043] 具体的に、図１０は、変形例に従うピーク解析方法を示すフローチャートである。なお、図１０に示す処理ステップにおいて、図３に示す処理ステップと同じ処理ステップについては同じ符号を付して詳細な説明を繰り返さない。ピーク解析装置１０は、ステップＳ１０２～ステップＳ１１２の処理をにおいて、解析対象スペクトルベクトルの数に対して、スペクトルベクトルを譲渡した数の割合が所定閾値以下か否かを判断する（ステップＳ１１３ａ）。譲渡した数の割合が所定閾値より大きい場合（ステップＳ１１３ａでＮＯ）、ピーク解析装置１０は、処理をステップＳ１０２に戻す。一方、譲渡した数の割合が所定閾値以下の場合（ステップＳ１１３ａでＹＥＳ）、ピーク解析装置１０は、ピーク解析装置１０は、別のデータを分析する必要があるか否かを判断する（ステップＳ１１４）。

[0044] （２）前述の実施の形態では、対象前スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルより前の時間のスペクトルベクトルであると説明したが、解析対象スペクトルベクトルより前の複数の時間における平均スペクトルベクトルとしてもよい。同様に、対象後スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルより後の時間のスペクトルベクトルであると説明したが、解析対象スペクトルベクトルより後の複数の時間における平均スペクトルベクトルとしてもよい。

[0045] （３）前述の実施の形態では、検出装置より得られた複数のデータのすべてを解析対象としていたが、検出装置より得られた複数のデータから間引いたデータを解析対象としてもよい。たとえば、図４に示す時間ｔ＝６０ｍｓｅｃから時間ｔ＝６３ｍｓｅｃまでのスペクトルベクトルをすべて解析対象とするのではなく、時間ｔ＝６０ｍｓｅｃ、時間ｔ＝６２ｍｓｅｃのスペクトルベクトルを解析対象とする。これにより、スペクトル収斂処理の処理時間を短縮することができる。

[0046] （４）前述の実施の形態で説明した、所定割合（ベクトルを譲渡する割合

（譲渡率））は、大きくすることでスペクトル収斂処理の処理時間を短縮することができるが、ピークの個数を特定する精度が低下し、逆に小さくすることでスペクトル収斂処理の処理時間が長くなるが、ピークの個数を特定する精度が向上する。

[0047] （５）前述の実施の形態で説明した図３に示すスペクトル収斂処理のフローチャートでは、ピーク解析装置１０が、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断（ステップＳ１０５）と、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きいか否かを判断（ステップＳ１０８）との両方の処理を行っている。しかし、これに限られず、ピーク解析装置１０は、ステップＳ１０５またはステップＳ１０８の一方の処理を行うだけでもよい。

[0048] （６）前述の実施の形態で説明した対象前スペクトルベクトルおよび対象後スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと上位概念化することができる。そのため、検出装置より得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析方法は、複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定するステップと、解析対象スペクトルベクトルを、対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分けるステップと、解析対象スペクトルベクトルの方向の成分と対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを対象外スペクトルベクトルと解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡するステップと、を含むと上位概念化することができる。

[0049] ［態様］

上述した実施形態は、以下の態様の具体例であることが当業者により理解される。

[0050] （第１項）

一態様に係るピーク解析方法は、検出装置より得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析方法であって、複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定するステップと、解析対象スペクトルベクトルを、対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分けるステップと、解析対象スペクトルベクトルの方向の成分と対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを対象外スペクトルベクトルと解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡するステップと、を含む。

[0051] 第１項に記載のピーク解析方法によれば、検出装置より得られた複数のデータから、ピーク分離の処理を行う上で必要となるスペクトルに含まれるピークの個数、ピーク分離の処理を行う対象を容易に特定することができる。

[0052] （第２項）

第１項に記載のピーク解析方法であって、対象外スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に前にある対象前スペクトルベクトルと、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に後にある対象後スペクトルベクトルと、を含み、解析対象スペクトルベクトルを、対象前スペクトルベクトルの第１方向の成分と、対象後スペクトルベクトルの第２方向の成分とに分けるステップと、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとを比較し、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも大きい場合、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の所定割合を対象前スペクトルベクトルに加算するステップと、を含む。

[0053] （第３項）

第２項に記載のピーク解析方法であって、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分と対象後スペクトルベクトルとを比較し、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも大きい場合、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の所定割

合を対象後スペクトルベクトルに加算するステップをさらに含む。

[0054] （第４項）

第３項に記載のピーク解析方法であって、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとを比較し、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさ以下場合、対象前スペクトルベクトルの所定割合を解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分に加算するステップと、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分と対象後スペクトルベクトルとを比較し、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさ以下の場合、対象後スペクトルベクトルの所定割合を解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分に加算するステップと、をさらに含む。

[0055] （第５項）

第１項に記載のピーク解析方法であって、対象外スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に前にある対象前スペクトルベクトルと、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に後にある対象後スペクトルベクトルと、を含み、解析対象スペクトルベクトルを、対象前スペクトルベクトルの第１方向の成分と、対象後スペクトルベクトルの第２方向の成分とに分けるステップと、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとを比較し、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさよりも小さい場合、対象前スペクトルベクトルの所定割合を解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分に加算するステップと、を含む。

[0056] （第６項）

第５項に記載のピーク解析方法であって、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分と対象後スペクトルベクトルとを比較し、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさよりも小さい場合、対象後スペクトルベクトルの所定割合を解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分に加算するステップをさらに含む。

[0057] （第７項）

第６項に記載のピーク解析方法であって、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分と対象前スペクトルベクトルとを比較し、対象前スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の大きさ以上の場合、解析対象スペクトルベクトルの第１方向の成分の所定割合を対象前スペクトルベクトルに加算するステップと、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分と対象後スペクトルベクトルとを比較し、対象後スペクトルベクトルの大きさが解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の大きさ以上の場合、解析対象スペクトルベクトルの第２方向の成分の所定割合を対象後スペクトルベクトルに加算するステップと、をさらに含む。

[0058] （第８項）

第２項～第７項のいずれか１項に記載のピーク解析方法であって、対象前スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルより前の時間のスペクトルベクトル、または解析対象スペクトルベクトルより前の複数の時間における平均スペクトルベクトルである。

[0059] （第９項）

第２項～第８項のいずれか１項に記載のピーク解析方法であって、対象後スペクトルベクトルは、解析対象スペクトルベクトルより後の時間のスペクトルベクトル、または解析対象スペクトルベクトルより後の複数の時間における平均スペクトルベクトルである。

[0060] （第１０項）

第１項～第９項のいずれか１項に記載のピーク解析方法であって、検出装置より得られた複数のデータのすべてを解析対象とせず、間引いたデータを解析対象とする。

[0061] （第１１項）

第１項～第１０項のいずれか１項に記載のピーク解析方法であって、検出装置より得られた複数のデータに対して、所定回数、スペクトルのピークを解析する処理を繰り返して行う。

[0062] （第１２項）

第１１項に記載のピーク解析方法であって、所定回数は、解析対象スペクトルベクトルの数に対する、スペクトルベクトルを譲渡する数の割合が所定閾値以下となるまでの回数とする。

[0063] （第１３項）

第１項～第１２項のいずれか１項に記載のピーク解析方法であって、検出装置は、クロマトグラフであり、得られたクロマトグラムに対してスペクトルのピークを解析する。

[0064] （第１４項）

一態様に係るピーク解析装置は、スペクトルのピークを解析するピーク解析装置であって、検出装置より複数のデータを受け付ける入力部と、入力部で受け付けた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析する演算部と、を備え、演算部は、複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定し、解析対象スペクトルベクトルを、対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分け、解析対象スペクトルベクトルの方向の成分と対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを対象外スペクトルベクトルと解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡する処理を行う。

[0065] 今回開示された実施の形態は、すべての点で例示であって制限的なものではないと考えられるべきである。本発明の範囲は、上記した実施の形態の説明ではなくて請求の範囲によって示され、請求の範囲と均等の意味および範囲内でのすべての変更が含まれることが意図される。

符号の説明

[0066] １　ＬＣ装置、２　データ解析部、３　入力部、４　表示部、１０　ピーク解析装置、１１　移動相容器、１２　送液ポンプ、１３　インジェクター、１４　カラム、１５　ＰＤＡ検出器、１６　Ａ／Ｄ変換器、１０２　プロセッサ、１０４　メインメモリ、１０６　入力Ｉ／Ｆ、１０８　出力Ｉ／Ｆ

、１１０　ストレージ、１１２　外部ドライブ、１１８　プロセッサバス。

請求の範囲

[請求項1] 検出装置より得られた複数のデータに対してスペクトルのピークを解析するピーク解析方法であって、

前記複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、前記解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定するステップと、

前記解析対象スペクトルベクトルを、前記対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分けるステップと、

前記解析対象スペクトルベクトルの前記方向の成分と前記対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを前記対象外スペクトルベクトルと前記解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡するステップと、を含む、ピーク解析方法。

[請求項2] 前記対象外スペクトルベクトルは、

前記解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に前にある対象前スペクトルベクトルと、

前記解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に後にある対象後スペクトルベクトルと、を含み、

前記解析対象スペクトルベクトルを、前記対象前スペクトルベクトルの第１方向の成分と、前記対象後スペクトルベクトルの第２方向の成分とに分けるステップと、

前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分と前記対象前スペクトルベクトルとを比較し、前記対象前スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分の大きさよりも大きい場合、前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分の所定割合を前記対象前スペクトルベクトルに加算するステップと、を含む、請求項１に記載のピーク解析方法。

[請求項3] 前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分と前記対象

後スペクトルベクトルとを比較し、前記対象後スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分の大きさよりも大きい場合、前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分の前記所定割合を前記対象後スペクトルベクトルに加算するステップをさらに含む、請求項２に記載のピーク解析方法。

[請求項4] 前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分と前記対象前スペクトルベクトルとを比較し、前記対象前スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分の大きさ以下の場合、前記対象前スペクトルベクトルの前記所定割合を前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分に加算するステップと、

前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分と前記対象後スペクトルベクトルとを比較し、前記対象後スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分の大きさ以下の場合、前記対象後スペクトルベクトルの前記所定割合を前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分に加算するステップと、をさらに含む、請求項３に記載のピーク解析方法。

[請求項5] 前記対象外スペクトルベクトルは、

前記解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に前にある対象前スペクトルベクトルと、

前記解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に後にある対象後スペクトルベクトルと、を含み、

前記解析対象スペクトルベクトルを、前記対象前スペクトルベクトルの第１方向の成分と、前記対象後スペクトルベクトルの第２方向の成分とに分けるステップと、

前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分と前記対象前スペクトルベクトルとを比較し、前記対象前スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分の大

きさよりも小さい場合、前記対象前スペクトルベクトルの所定割合を前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分に加算するステップと、を含む、請求項１に記載のピーク解析方法。

[請求項6] 前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分と前記対象後スペクトルベクトルとを比較し、前記対象後スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分の大きさよりも小さい場合、前記対象後スペクトルベクトルの前記所定割合を前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分に加算するステップをさらに含む、請求項５に記載のピーク解析方法。

[請求項7] 前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分と前記対象前スペクトルベクトルとを比較し、前記対象前スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分の大きさ以上の場合、前記解析対象スペクトルベクトルの前記第１方向の成分の所定割合を前記対象前スペクトルベクトルに加算するステップと、

前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分と前記対象後スペクトルベクトルとを比較し、前記対象後スペクトルベクトルの大きさが前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分の大きさ以上の場合、前記解析対象スペクトルベクトルの前記第２方向の成分の所定割合を前記対象後スペクトルベクトルに加算するステップと、をさらに含む、請求項６に記載のピーク解析方法。

[請求項8] 前記対象前スペクトルベクトルは、前記解析対象スペクトルベクトルより前の時間のスペクトルベクトル、または前記解析対象スペクトルベクトルより前の複数の時間における平均スペクトルベクトルである、請求項２または請求項５に記載のピーク解析方法。

[請求項9] 前記対象後スペクトルベクトルは、前記解析対象スペクトルベクトルより後の時間のスペクトルベクトル、または前記解析対象スペクトルベクトルより後の複数の時間における平均スペクトルベクトルであ

る、請求項３または請求項６に記載のピーク解析方法。

[請求項10] 前記検出装置より得られた前記複数のデータのすべてを解析対象とせず、間引いたデータを解析対象とする、請求項１に記載のピーク解析方法。

[請求項11] 前記検出装置より得られた前記複数のデータに対して、所定回数、スペクトルのピークを解析する処理を繰り返して行う、請求項１に記載のピーク解析方法。

[請求項12] 前記所定回数は、前記解析対象スペクトルベクトルの数に対する、スペクトルベクトルを譲渡する数の割合が所定閾値以下となるまでの回数とする、請求項１１に記載のピーク解析方法。

[請求項13] 前記検出装置は、クロマトグラフであり、得られたクロマトグラムに対してスペクトルのピークを解析する、請求項１に記載のピーク解析方法。

[請求項14] スペクトルのピークを解析するピーク解析装置であって、

検出装置より複数のデータを受け付ける入力部と、

前記入力部で受け付けた前記複数のデータに対してスペクトルのピークを解析する演算部と、を備え、

前記演算部は、

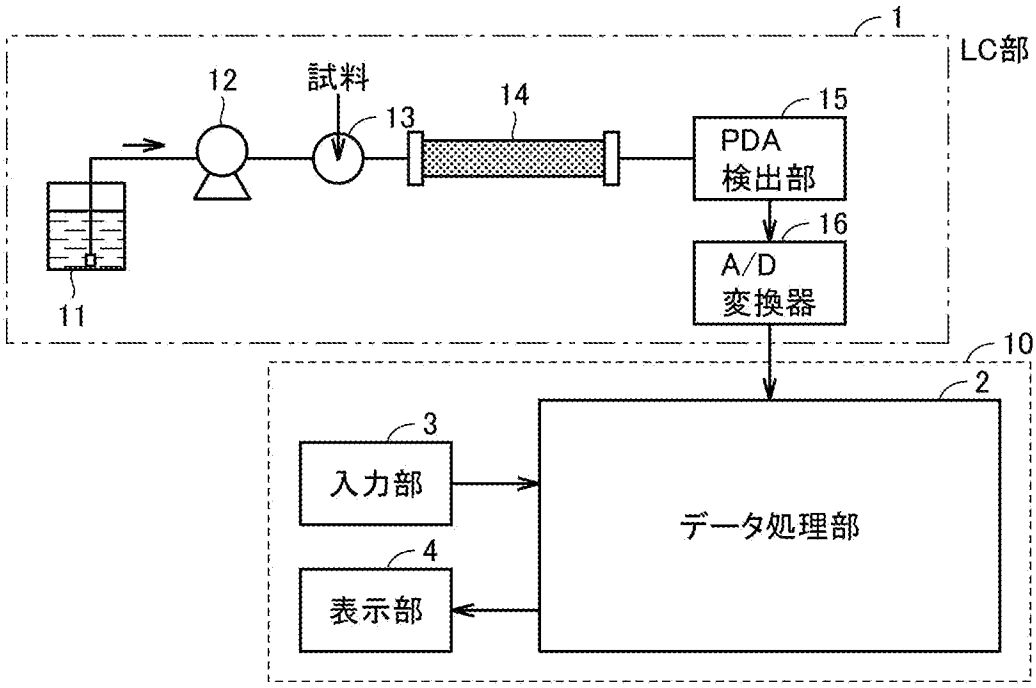
前記複数のデータから解析対象となる１つのデータを選択して解析対象スペクトルベクトルとし、前記解析対象スペクトルベクトルに対して時間的に異なるデータを対象外スペクトルベクトルと設定し、

前記解析対象スペクトルベクトルを、前記対象外スペクトルベクトルの方向の成分に分け、

前記解析対象スペクトルベクトルの前記方向の成分と前記対象外スペクトルベクトルとの比較に基づき、所定割合のスペクトルベクトルを前記対象外スペクトルベクトルと前記解析対象スペクトルベクトルとの間で譲渡する処理を行う、ピーク解析装置。

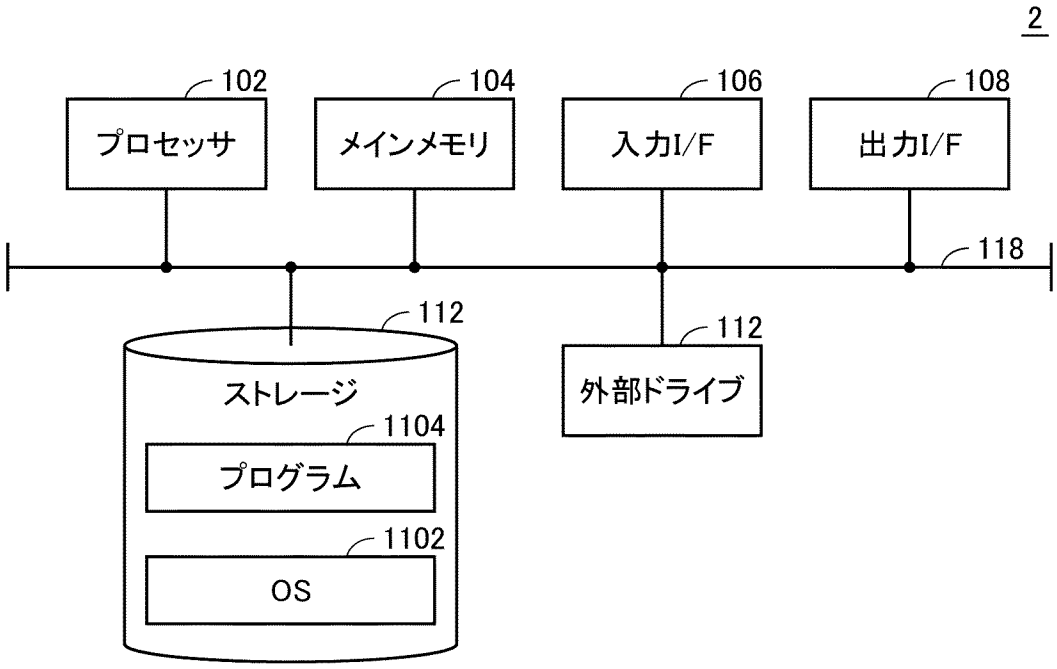
[図1]

FIG.1



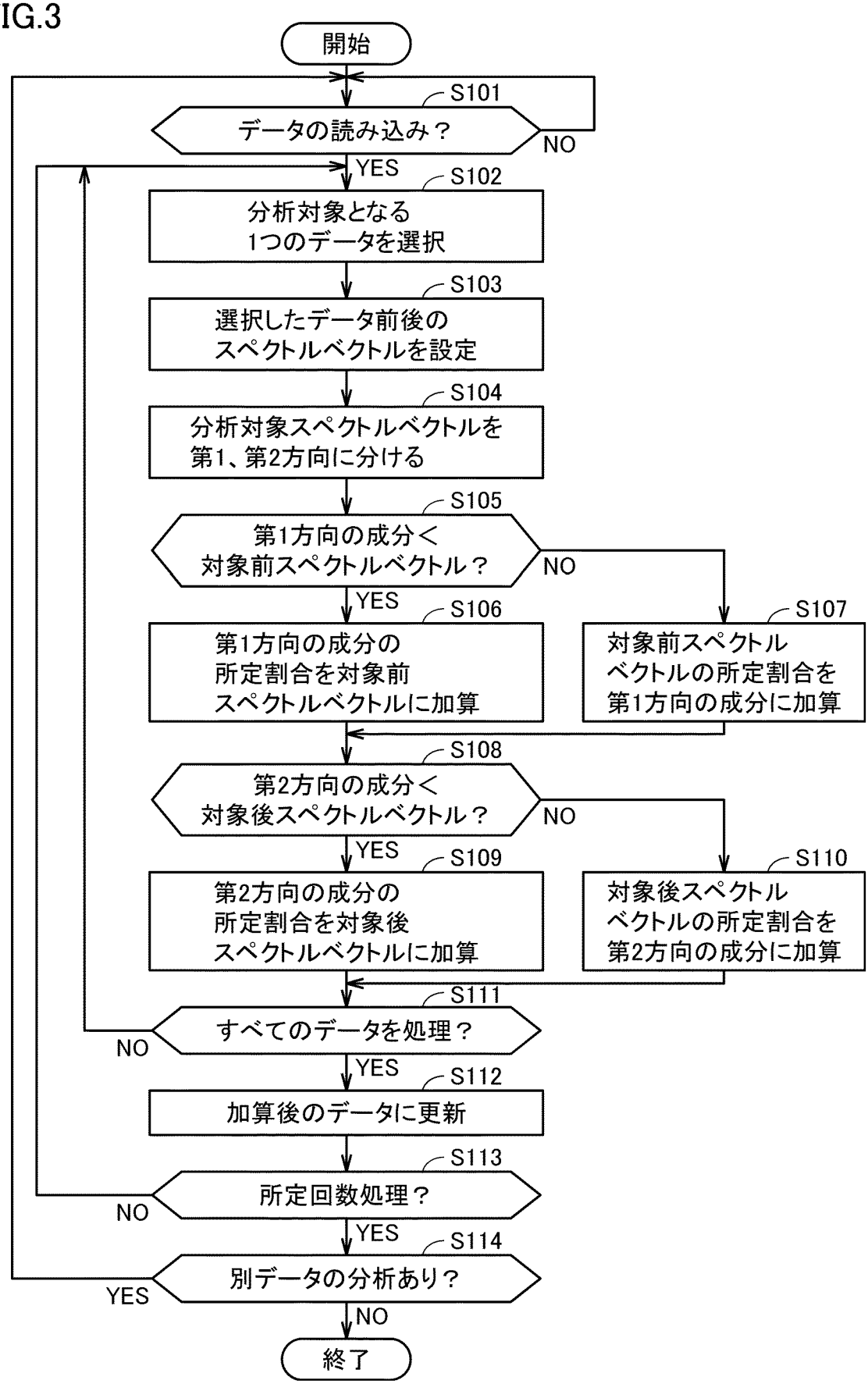
[図2]

FIG.2



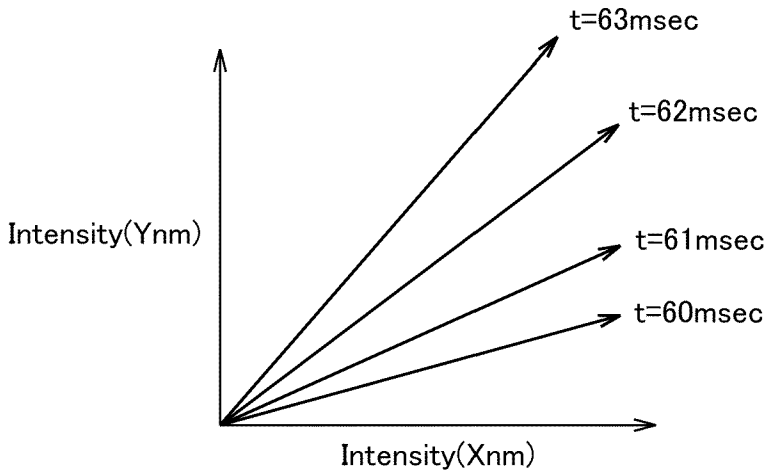
[図3]

FIG.3


開始
S101
データの読み込み？
NO
YES
S102
分析対象となる
1つのデータを選択
S103
選択したデータ前後の
スペクトルベクトルを設定
S104
分析対象スペクトルベクトルを
第1、第2方向に分ける
S105
第1方向の成分＜
対象前スペクトルベクトル？
NO
YES
S106
第1方向の成分の
所定割合を対象前
スペクトルベクトルに加算
S107
対象前スペクトル
ベクトルの所定割合を
第1方向の成分に加算
S108
第2方向の成分＜
対象後スペクトルベクトル？
NO
YES
S109
第2方向の成分の
所定割合を対象後
スペクトルベクトルに加算
S110
対象後スペクトル
ベクトルの所定割合を
第2方向の成分に加算
S111
すべてのデータを処理？
NO
YES
S112
加算後のデータに更新
S113
所定回数処理？
NO
YES
S114
別データの分析あり？
YES
NO
終了

[図4]

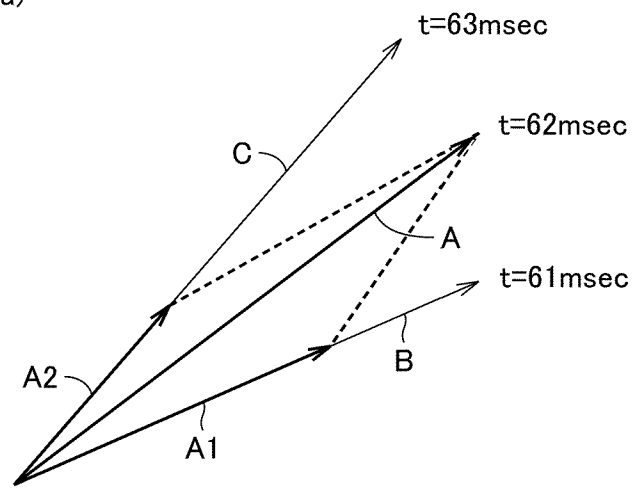
FIG.4


t=63msec
t=62msec
t=61msec
t=60msec
Intensity(Ynm)
Intensity(Xnm)

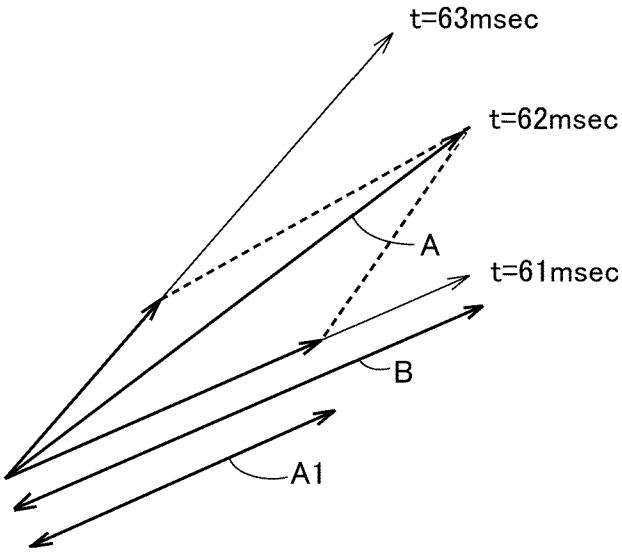
[図5]

FIG.5

(a)


t=63msec
t=62msec
C
A
t=61msec
B
A2
A1

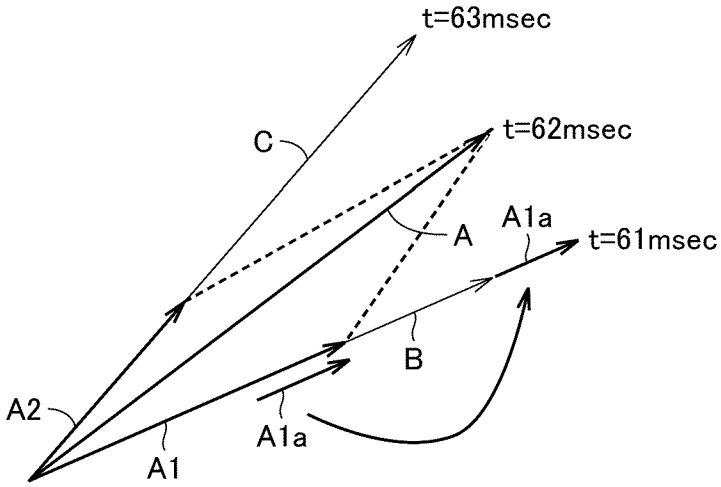
(b)


t=63msec
t=62msec
A
t=61msec
B
A1

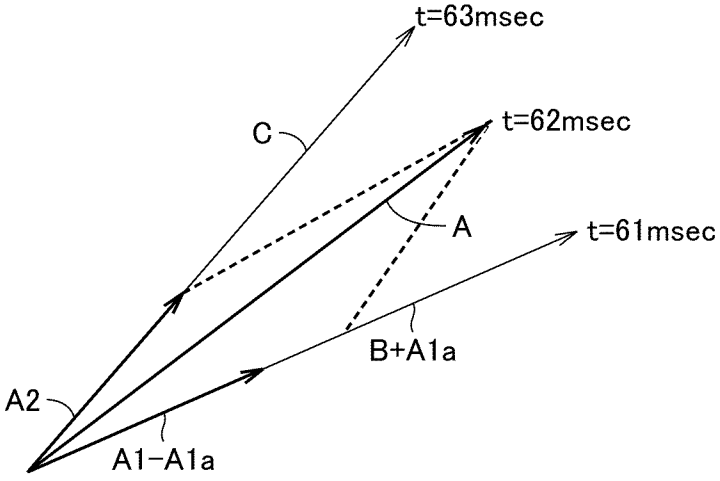
[図6]

FIG.6

(a)

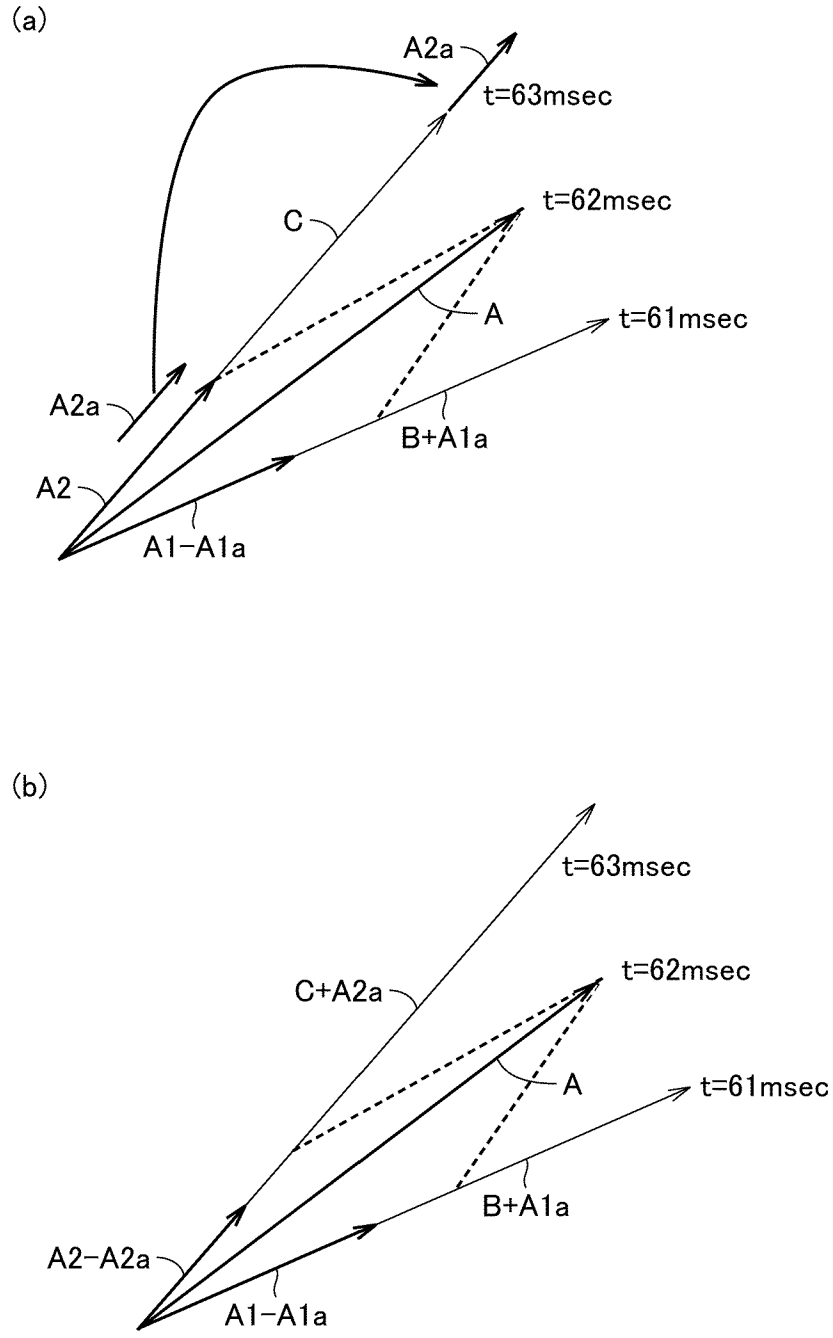

t=63msec
C
t=62msec
A
A1a
t=61msec
B
A2
A1a
A1

(b)


t=63msec
C
t=62msec
A
t=61msec
B+A1a
A2
A1−A1a

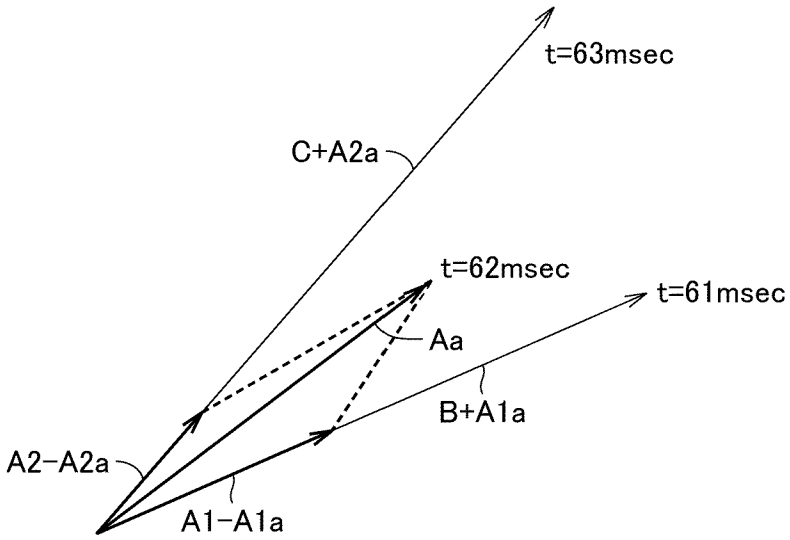
[図7]

FIG.7


(a)
A2a
t=63msec
t=62msec
C
A
t=61msec
A2a
B+A1a
A2
A1−A1a
(b)
t=63msec
t=62msec
C+A2a
A
t=61msec
B+A1a
A2−A2a
A1−A1a

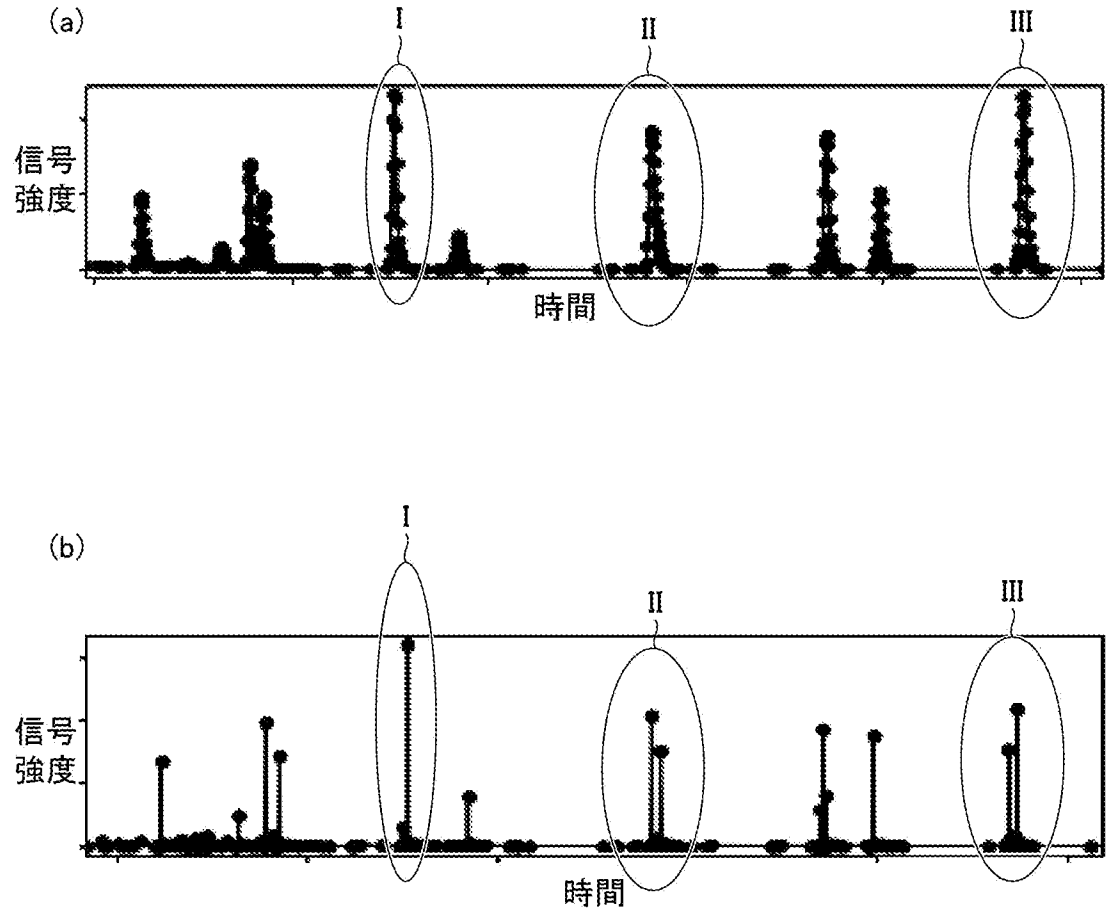
[図8]

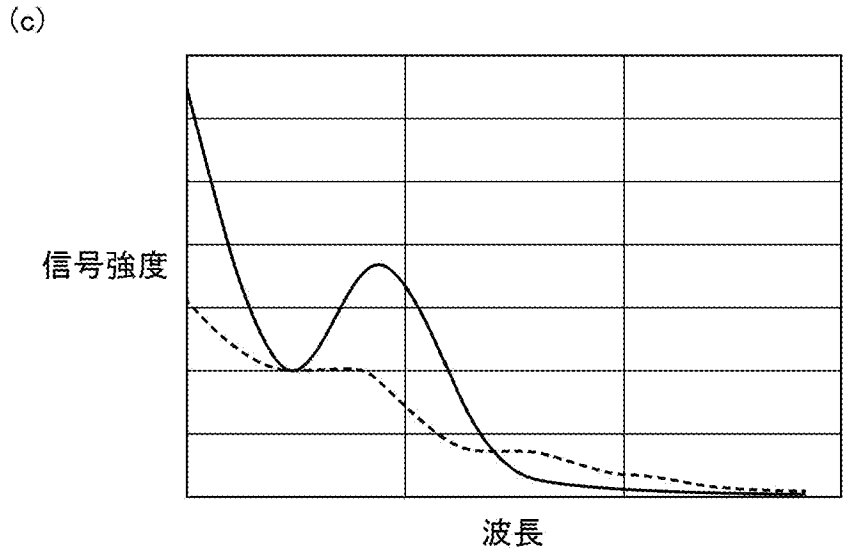
FIG.8



[図9]

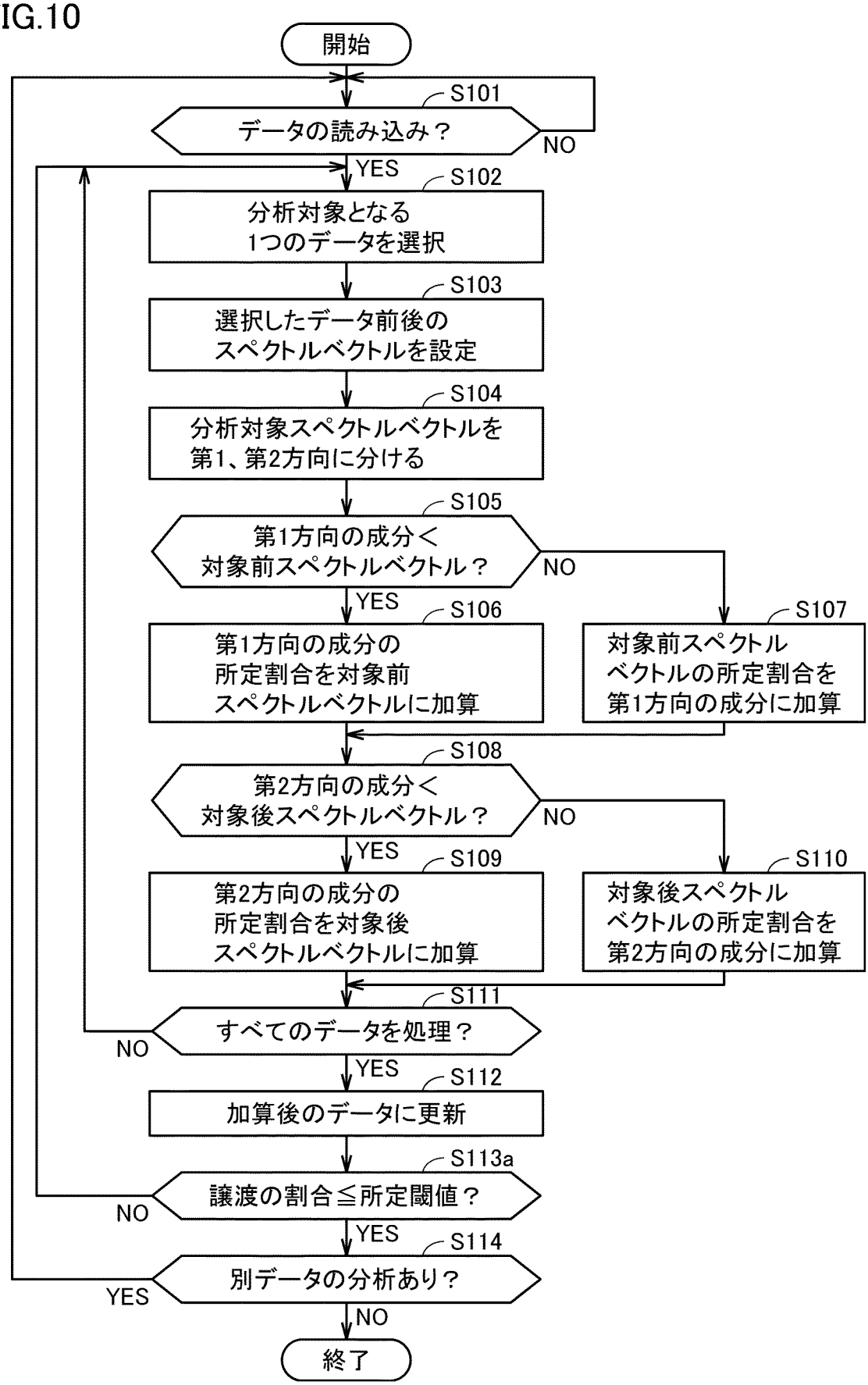
FIG.9





[図10]

FIG.10


開始
S101
データの読み込み？
NO
YES
S102
分析対象となる
1つのデータを選択
S103
選択したデータ前後の
スペクトルベクトルを設定
S104
分析対象スペクトルベクトルを
第1、第2方向に分ける
S105
第1方向の成分＜
対象前スペクトルベクトル？
NO
YES
S106
第1方向の成分の
所定割合を対象前
スペクトルベクトルに加算
S107
対象前スペクトル
ベクトルの所定割合を
第1方向の成分に加算
S108
第2方向の成分＜
対象後スペクトルベクトル？
NO
YES
S109
第2方向の成分の
所定割合を対象後
スペクトルベクトルに加算
S110
対象後スペクトル
ベクトルの所定割合を
第2方向の成分に加算
S111
すべてのデータを処理？
NO
YES
S112
加算後のデータに更新
S113a
譲渡の割合≦所定閾値？
NO
YES
S114
別データの分析あり？
YES
NO
終了

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2024/017900

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N 30/86(2006.01)i; ***G01N 27/624***(2021.01)i
FI: G01N30/86 B; G01N30/86 P; G01N27/624

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; G01N27/624

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

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024
Registered utility model specifications of Japan 1996-2024
Published registered utility model applications of Japan 1994-2024

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.
A	WO 2015/056311 A1 (SHIMADZU CORPORATION) 23 April 2015 (2015-04-23) fig. 4	1-14
A	JP 2011-185743 A (SHIMADZU CORPORATION) 22 September 2011 (2011-09-22) fig. 1	1-14
A	JP 2002-286704 A (SHIMADZU CORPORATION) 03 October 2002 (2002-10-03) fig. 9	1-14
A	JP 7-218491 A (SHIMADZU CORPORATION) 18 August 1995 (1995-08-18) fig. 7	1-14
A	JP 01-161123 A (SHIMADZU CORPORATION) 23 June 1989 (1989-06-23) fig. 1	1-14
A	CN 103278591 A (JIANGSU NORMAL UNIVERSITY) 04 September 2013 (2013-09-04) fig. 1-2	1-14

☐ 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
"D" document cited by the applicant in the international application
"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	Date of mailing of the international search report
22 July 2024	**06 August 2024**

Name and mailing address of the ISA/JP	Authorized officer
Japan Patent Office (ISA/JP) **3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915** **Japan**	Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2024/017900

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO 2015/056311 A1	23 April 2015	US 2016/0231297 A1 fig. 4 CN 105659081 A	
JP 2011-185743 A	22 September 2011	(Family: none)	
JP 2002-286704 A	03 October 2002	(Family: none)	
JP 7-218491 A	18 August 1995	US 5596135 A fig. 7 DE 19503006 A1	
JP 01-161123 A	23 June 1989	(Family: none)	
CN 103278591 A	04 September 2013	(Family: none)	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2024/017900

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

G01N 30/86(2006.01)i; G01N 27/624(2021.01)i
FI: G01N30/86 B; G01N30/86 P; G01N27/624

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））

G01N30/86; G01N27/624

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	１９７１－２０２４年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２４年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２４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
A	WO 2015/056311 A1 (株式会社島津製作所) 23.04.2015 (2015-04-23) 図4	1-14
A	JP 2011-185743 A (株式会社島津製作所) 22.09.2011 (2011-09-22) 図1	1-14
A	JP 2002-286704 A (株式会社島津製作所) 03.10.2002 (2002-10-03) 図９	1-14
A	JP 7-218491 A (株式会社島津製作所) 18.08.1995 (1995-08-18) 図7	1-14
A	JP 01-161123 A (株式会社島津製作所) 23.06.1989 (1989-06-23) 第1図	1-14
A	CN 103278591 A (JIANGSU NORMAL UNIVERSITY) 04.09.2013 (2013-09-04) 図1-2	1-14

☐ 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
“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献
“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抵触するものではなく、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	国際調査報告の発送日
22.07.2024	06.08.2024

名称及びあて先

日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）

高田　亜希 2J 5705

電話番号 03-3581-1101 内線 3255

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2024/017900

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2015/056311 A1	23.04.2015	US 2016/0231297 A1 Fig.4 CN 105659081 A	
JP 2011-185743 A	22.09.2011	（ファミリーなし）	
JP 2002-286704 A	03.10.2002	（ファミリーなし）	
JP 7-218491 A	18.08.1995	US 5596135 A Fig.7 DE 19503006 A1	
JP 01-161123 A	23.06.1989	（ファミリーなし）	
CN 103278591 A	04.09.2013	（ファミリーなし）	