

HPLC ピーク面積データサマライジングツール

HPLClusterTM

保存安定性試験での非効率な作業を解消します

保存安定性試験では、複数の条件（温度、時間、照度、湿度など）について HPLC や GC により分析が行われます。しかし、得られた複数の出力からそれらの保持時間とピーク面積や面積比について比較するのは容易な作業ではありません。例えば、得られたピーク面積を保持時間に合わせながら、エクセルなどに貼り付けるといった手作業では非常に効率が悪く、また入力ミスが発生する可能性もあります。

The screenshot shows the HPLCluster software window. A menu is open under the '表示 (V)' (Display) button, showing options: 'デフォルト' (Default), '平均保持時間' (Average Retention Time), '相対保持時間' (Relative Retention Time), '保持時間を横に並べる' (Arrange retention times horizontally), '保持時間を縦に並べる' (Arrange retention times vertically), '増減を色分けする' (Colorize increase/decrease), '色の設定...' (Color settings...), and 'Sample Nameで表示する' (Display by Sample Name). Below the menu, there are two data tables. The top table shows peak retention times for various conditions. The bottom table shows the same data with color-coded values indicating increases or decreases.

	4.94	6.961	6.986	10.290	10.526	10.534	10.542	10.544	10.569	11.721
Int_T4			99.646						0.211	
T4_25_1day					0.217					
T4_25_7day		99.496						0.204		
T4_25L_1day					0.217					
T4_25L_7day	0.0			0.049			0.192			0.053

	4.948 4.954	6.851 6.954	6.961 6.986	10.290	10.526 10.569	11.721	13.121 13.132
Int_T4			99.646		0.211		0.142
T4_25_1day		99.623			0.217		0.161
T4_25_7day	0.048		99.496		0.204		0.253
T4_25L_1day		99.634			0.217		0.149
T4_25L_7day	0.052	99.403		0.049	0.192	0.053	0.252

HPLCluster™ は、複数の条件下で得られた HPLC（あるいは GC）のピーク面積データを 1 つに集約することで、成分変化などの解析やレポート作成作業を効率化させるソフトウェアツールです。保存安定性試験における多数の HPLC（あるいは GC）データの集約や、化学反応の進行に伴う不純物の増減確認などに活用されています。

HPLCluster™ の概要

データの読み込みからグルーピング、解析、レポート用データ出力までを画面上で速やかに処理できます。

- 複数の条件下で得られた HPLC（あるいは GC）からの出力を同時に読み込み保持時間ごとにスプレッドシートに表示。
- 保持時間のばらつきを考慮して比較対象のピークを自動的にグルーピング。
- 正しくグルーピングされなかった部分はマウスを使って修正可能。
- 保存したファイルをエクセルに読み込んでレポート作成などに活用。
- 保存した解析結果（XML ファイル）を読み込んで再解析、結果を修正。

- 自動グルーピング機能

保持時間のばらつきを考慮して比較対象のピークを自動的にグルーピングします。

- 手動グルーピング機能

上記自動グループ化機能に加え、マウスで選択したピークのグルーピング、グループ解除機能があります。また、これらの操作に関するアンドゥ機能も用意されています。

- ピークの削除機能

ブランク由来のピークを削除することができます。ピークを削除した後、面積比は自動的に再計算されます。

- 保持時間の表示切替機能

グルーピングされたピークの保持時間は保持時間範囲・平均保持時間・相対保持時間を切り替えて表示することが可能です。相対保持時間は初期サンプルの大ピーク面積の保持時間を 1 として計算されます。

- 保持時間表示方向の切替機能

グルーピングされたピークの保持時間を縦方向あるいは横方向に切り替えて（行と列を入れ替えて）表示することが可能です。出力も同じ方向になります。

- ピーク面積・面積比の変化表示機能

Initial からのピーク面積・面積比の増減を色分けして表示します。

- ファイルの保存機能

グルーピングした結果を XML 形式で出力します。出力したファイルはエクセルに直接読み込むことが可能です。

- 解析結果の再解析機能

解析結果を保存した XML ファイル直接読み込んで、再解析を行い、結果を修正することが可能です。

- 分析データファイルのインポート機能

解析中あるいは、解析結果をインポートした後に分析データファイルを追加することができるようになりました。グループ化されているデータの情報はそのまま保持して、追加したデータを各グループに自動的に追加することが可能です。

- ヘッダ表示切替機能

ヘッダ表示をファイル名とサンプル名に切り替えることが可能です。

期待できる導入効果

- 分析データを紙で打ち出す必要がなくなりペーパーレス化を図れます。
- Excel 打ち込み時に比べ、飛躍的にミスを減らす事が可能となります。
- アルゴリズムを利用した精度の高いグルーピング能力で自動的にグルーピングし、手作業と比較し作業時間を大幅に短縮することが可能になります。

対応データ

- Shimadzu の LCSolution、あるいは LabSolutions からテキスト形式でエクスポートした txt ファイル
- ClassVP からエクスポートした are ファイル
- Agilent OpenLab からエクスポートされた txt ファイル
- Waters Empower からエクスポートした txt ファイル及び保持時間と % 面積がタブ区切りで入っている txt ファイル

※ 対応していないファイル形式もご依頼いただければ無償対応致します。また、HPLC、GC 以外の機器 (NMR など) データの解析にも応用可能であると考えられますので、ご要望があればお知らせください。

ライセンス形態

- 本製品はサイトライセンスでのご提供となります。

サイトライセンスについて：

購入いただいたサイト内であれば PC 台数の制限なく利用いただくことが可能です。

サイトの定義については、企業、官公庁の場合は同住所、大学、その他教育機関の場合は同学部となります。

- ご購入されたバージョンを利用できる期間に制限はありません。
- 購入後 1 年間の E-mail 等による技術サポート及びバグ修正版の配布が含まれます。

稼働環境：

Windows 10 / 8

Mac OS X 10.3.9 以上

Linux (RedHat EL、Fedora など)

製品トライアルについて

一ヶ月間の無償トライアルを実施いただけます。トライアル方法は、弊社 Web サイトからダウンロードや製品 CD からのインストールも可能です。ご希望される際は、弊社 Web サイトよりお問い合わせください。

■お問い合わせ先■

ノーザンサイエンスコンサルティング株式会社

〒060-0005 札幌市中央区北 5 条西 6 丁目 2-2 札幌センタービル

<https://www.northernsc.co.jp/>

Apr 2021