

Chart の FIA エクステンション



このガイドは、フローインジェクション解析の為に Chart FIA エクステンションのインストールと使い方を説明する解説書です。

はじめに

FIA エクステンションは Chart ソフトウェアを使ってフローインジェクション解析(FIA) などの実験から得られるピークの面積や高さを自動的に検出し算出する Chart 専用のソフトウェアです。検出するピークのキャリブレーションは簡単で、結果はピークレポートとしてユーザが設定する構成で表示します。ピークの

演算結果は別のアプリケーションにコピー & ペーストできますので、より詳細な解析に活用できます。

エクステンションのインストール

- Flow Analysis System インストラー CD から Chart ソフトウェアをインストールすると、FIA エクステンションと Event Manager エクステンションが自動的にインストールされます。
- または eDAQ ウェブサイト (www.eDAQ.com/chart_extns_list) から FIA エクステンションがダウンロードできます。インストラーを起動する前には必ず Chart は終了しておいて下さい。
- インストラーアイコンをダブルクリック (図 1) し 表示

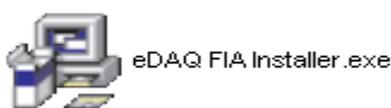


図 1. FIA インストラーアイコン



図 2. FIA エクステンションのセットアップウィザード

するセットアップ ウィザード(図 2)に従って操作して下さい。

Chart を始動すると、FIA エクステンションも自動的に読み込まれ、Chart の Window メニュー (図 3) に Flow Analysis コマンドが追加表示します。

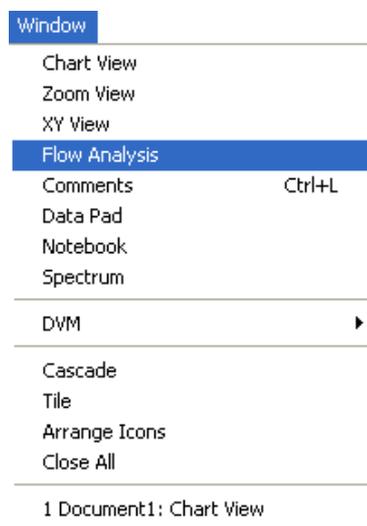


図 3. Window メニューに Flow Analysis が加わります

FIA エクステンションをアンインストールするには、FIA.edext ファイルをエクステンションホルダーから未使用ホルダー Extensions(unused) に移します。これらのフォルダーは Chart のアプリケーションホルダーの中にあります。

ハードウェアを FIA ディテクターに接続する

FIA ディテクターからのシグナルは ER282 Flow Analysis システムか e-corder システムを使って記録されます。ディテクターとの接続の詳細はそれらのハードウェアマニュアルを参考にして下さい。一般に、アナログ出力を持った多くの FIA ディテクター の出力電圧は ± 10 V が定格です。

シグナルを記録する

Chart の **Setup** メニューから **Channel Settings...** を選び、シグナルを記録するチャンネル数を設定します。

Chart は最大 16 チャンネル (使用するハードウェアユニットに依る) までのシグナルが記録できますが、FIA エクステンションは一度に1チャンネル分のデータしか解析できません。

ディテクターに接続したチャンネルの **Channel Function** ポップアップメニューから **Input Amplifier...** ダイアログボックスを開くとシグナルがプレビューできます。ゲインのレンジを、予想されるディテクターからの最大出力の約2倍程度に設定します。

必要に応じて、**Units...** ボタンをクリックし標準の電圧表示から適した単位表示に変換します。

生信号のノイズが多い場合は、ここでシグナルのフィルター処理も調整できます。

Rate ポップアップメニューから収録する FIA サンプルング速度を設定して下さい。ここでの速度は、ピークの形状がはっきりと規定できる程度の速さにする必要がありますが、サンプルング速度が速過ぎるとピーク検出のアルゴリズムに問題が生ずる恐れがあります。最適な速度は 20 から 100 データポイント/秒の間です。

記録を開始する準備ができたなら、**Chart** 画面の **Start** ボタンをクリックします。

一つのデータブロックに複数のサンプルインジェクションのシグナルを記録するか、それともブロック毎に一つのサンプルインジェクションのピークを記録しそれに必要な記録時間の幅 (delay) を Chart で設定します。Chart で設定した delay 時間だけディテクターからのシグナルを記録します。

どのピークがどのインジェクションに対応しているのかをトレースするのに、Chart の **Add Comment...** コマンドを使ってそのサンプルに関するインフォメーションをインジェクション時に添付すると便利です。

記録の開始やコメントの挿入は、インジェクターからの TTL 信号か接点リレーの信号をトリガーとすることができます。トリガーに関する詳細は Chart ソフトウェアのマニュアルやハードウェアのマニュアルを参照して下さい。

サンプルの試験が終了したら **Stop** ボタンを押して下さい。収録したピークの形状は **Chart** の主画面でプレビューできますが、ピークをキャリブレーションするには **Flow Analysis ウィンドウ** が必要です。

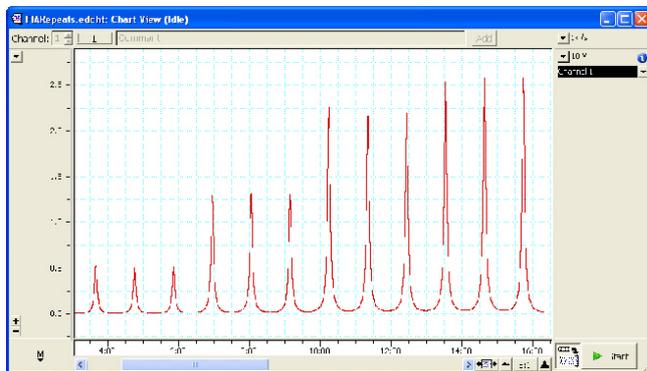


図 4. Chart 主画面のブロック内での複数ピーク

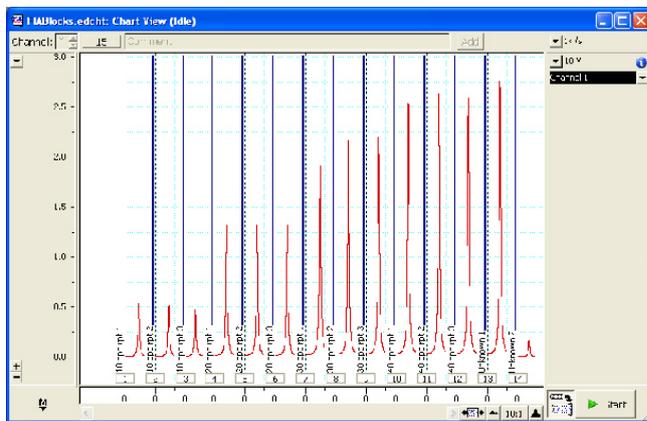


図 5. Chart 主画面での各ブロックに一つのピーク

Flow Analysis ウィンドウ

Chart の **Window** メニューから **Flow Analysis** を選び **Flow Analysis ウィンドウ** (図 6) を開いて下さい。

Channel Selection ポップアップメニューから、解析したいピークのチャンネルを選びます。Chart の主画面のプロット表示が **Flow Analysis ウィンドウ** に変換されます。

自動ピークディテクション

自動ピークディテクション (**Automatic Peak Detection**) ボタン  をクリックしてピークディテクションのアルゴリズムを機能させます。検知されたピークは、ピークの開始ポイントと終了ポイントを示すグレーの垂直線が入り青色に塗りつぶされて表示します。ピークには順に番号が付き、ピークテーブル (図 6) にリスト表示され、s の表記列にはサンプルを示すチェックマークが入ります。

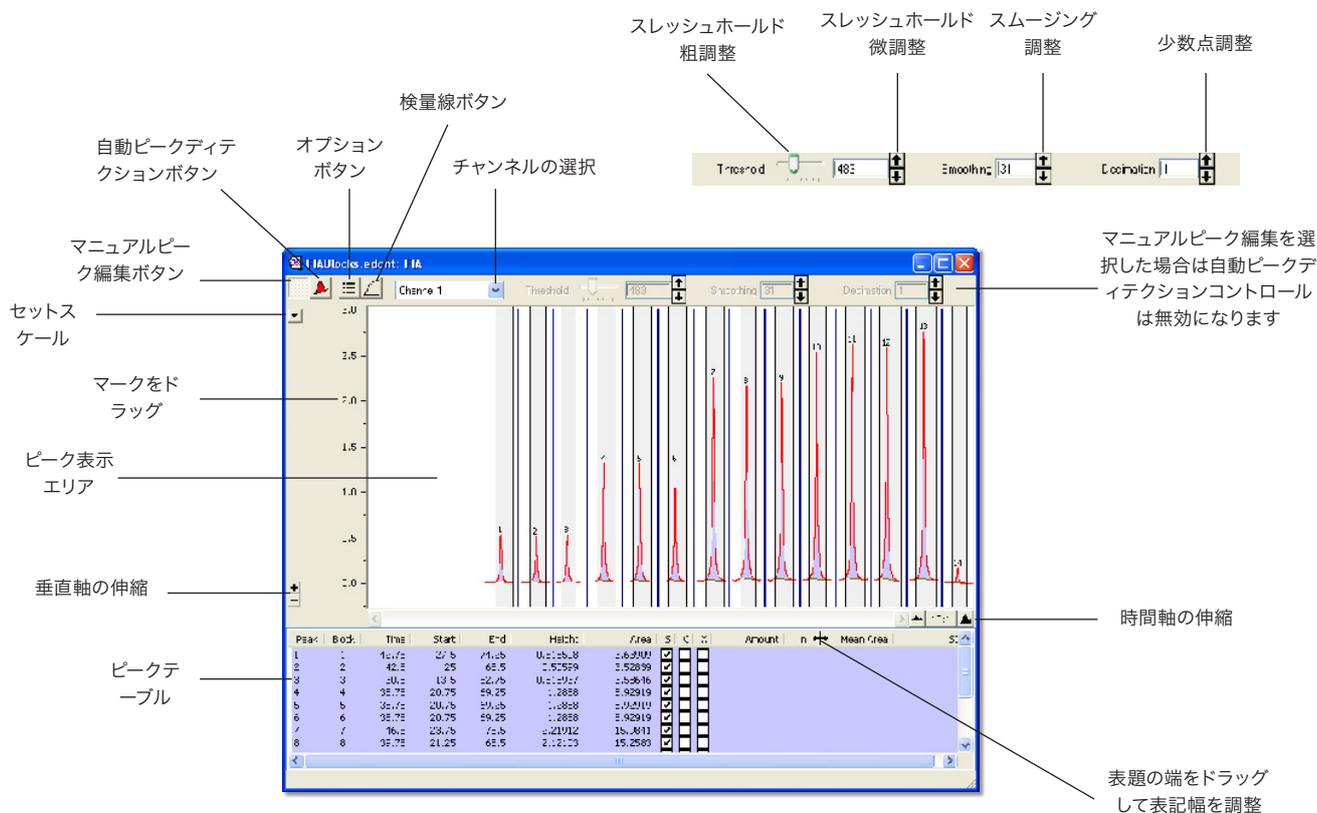


図 6. Flow Analysis ウィンドウとピークテーブル内の表記幅の調整

初期設定ではピークが十分に規定されない場合は（即ちピークが検出されない、検出ピークが多過ぎる、開始終了ポイントが不適格など）、ピークディテクションパラメータが調整できます。ディテクションパラメータを調整する一般的な手順は：

1. スレッシュホールド(Threshold) 水平スライダバーを使ってスレッシュホールド値を大まかに調整し、次にスレッシュホールド(Threshold) テキストボックスの横の上下矢印で正確なスレッシュホールド値を設定します。
2. スムージング(Smoothing) テキストボックス横の上下矢印でスムージング数を設定します。
3. それでもピーク検出が不満足の場合は、記録時のサンプリング速度が速すぎたのかも知れません。Decimation を調整して、ピークディテクションのアルゴリズムに導入したデータポイント数を減らすことができます。

Smoothing や Decimation を調整しても内部処理なので、ピークエリア(面積)やハイ(高さ)には影響しません。

ピークエリアやピークハイはいつも生データから決定されます。

マニユア編集

マニュアルピーク編集ボタン をクリックして下さい。手動でピークの開始点及び終了点が修正できピークを追加したり削除できます。マウスカーソルが十字+ に変わります。自動ピークディテクションは無効となり開始点及び終了点を示す垂直線は黒に変わります。

ピークの開始点や終了点を調整するには、それに対応する黒の垂直線上をマウスでクリックしてホールドします。カーソルの表示が水平二頭矢印 に変わります。その垂直線を望みのポイントまでドラッグしてマウスボタンを放します(図 7)。

ピークを追加するには、Flow Analysis ウィンドウ内のピークの開始点と想定する場所をクリックしそのポイントをホールドし望みの終了点までドラッグしてマウスを放します。新たなピークが順次番号付けされてピークテーブルに追加表示します。

ピークを削除するには、まずピーク表示エリアのピーク内をクリックするかピークテーブル内の削除するピークに相当する行をクリックします。次にキーボードの <Delete> ボタンを押すか、Edit メニューからDelete Selected Peaks を選択します。プロットは変更しませんがピーク表示はしません。

マニュアル調整した後に自動ピークディテクションボタン をクリックすると、実行した変更が無視されて最後にピーク検出で用いた設定でピークディテクションアルゴリズムが再導入されピークが自動検出されます。警告ダイアログが表示し、マニュアル調整を無効にして処理するのを訪ねます (図 8)。

また、Chart 主画面で解析したチャンネルのデータを変更すると Flow Analysis ウィンドウの全ピークが無効となります。

ピークの割当

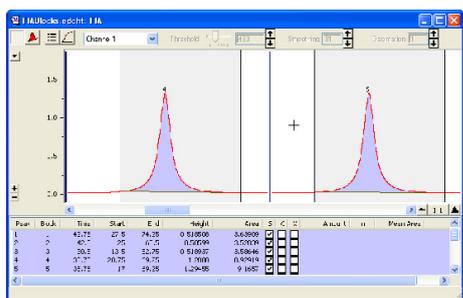
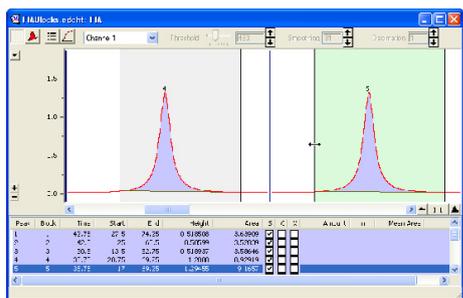
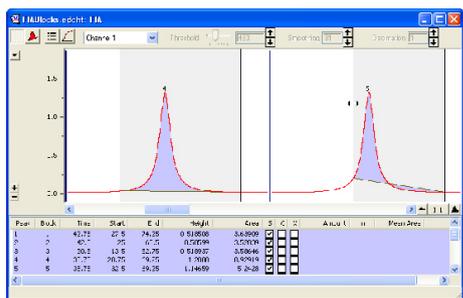
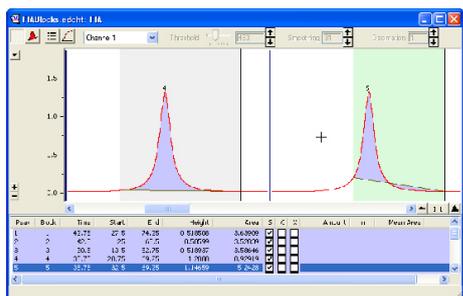


図 7. マニュアルピーク編集

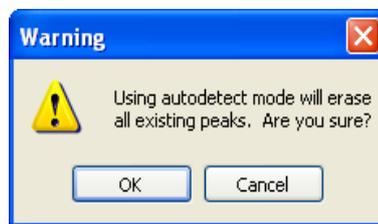


図 8. 自動ピークディテクションの警告

ピークテーブルにリスト表示したピークはサンプル (S)、キャリブレーション (C)、除外 (X) の何れかに割当て登録します (図 9)。

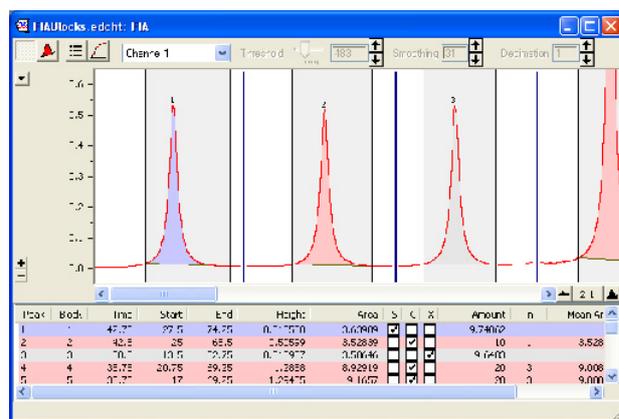


図 9. 3分類されたピークを表示

初期設定ではピークの類別は総てサンプルピークとされ、ピーク表示エリアに青色のハイライト表示になります。

既知の量をインジェクションしたピークをキャリブレーションとして割当てると、赤でハイライト表示します。

除外するピークはグレーでハイライト表示され、演算には含まれません。

キャリブレーションの値を入力する

キャリブレーションとして登録したピークには、ピークテーブル (図 10) の Amount 欄の対応するセルに既知のキャリブレーション量を手入力します。同量のインジェクションを反復してキャリブレーションした場合は、Amount 欄に同じ量を手入力すれば自動的にそれを認知し、反復した回数が <n> 欄に入ります。

次の二つの段落はピークエリアかピークハイの平均値と標準偏差を表示します。

後で説明するようにピークエリア、又はピークハイのどちらで校正するかを Flow Analysis オプションウィンドウで選びますが、そのキャリブレーション単位が設定できます。

検量線

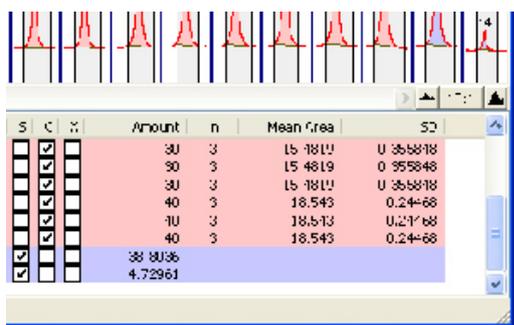


図 10. 反復したキャリブレーションを入力

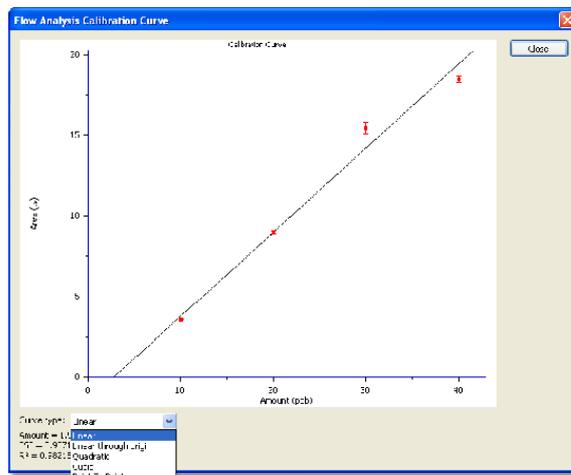


図 11. Flow Analysis 検量線ウィンドウ

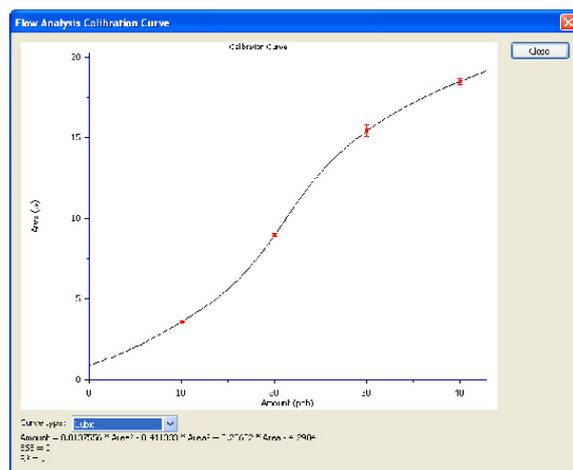


図 12. 4点のキャリブレーションポイントを通る3次曲線

検量線ボタン をクリックすると Flow Analysis 検量線ウィンドウ (図 11) が表示します。

初期設定は直線 (linear) で各キャリブレーションポイントの平均を通る直線に適化しますが、Curve Type ポップアップメニュー (図 12) から別の関数も選べます。

最新二乗法回帰処理でデータを適化し、適化した関数式が検量線の下に表示され、適化した SSE 値と R^2 値も記載されます。算出したサンプルピークのピークエリアかピークハイをこの数式に代入してインジェクションしたサンプル量が算出されます。

キャリブレーションの数値を入力すると、算出したサンプル量が自動的にピークテーブルに表示します。

垂直の誤差バーは複数のキャリブレーションピークの平均ピークエリアか平均ピークハイの標準偏差を表したものです。

利用できる検量線関数は：

直線 Linear

キャリブレーションポイントを通る直線に適化

$$y = ax + b$$

a は直線の勾配で b は y の切片

原点を通る直線 Linear through origin

強制的に原点とキャリブレーションを結ぶ直線に適化させます。

$$y = ax$$

a は直線の勾配を表します。

二次関数 Quadratic

キャリブレーションポイントを通る二次関数に適化します。

$$y = ax^2 + bx + c$$

a, b 及び c は適化係数です。

三次関数 Cubic

キャリブレーションポイントを通る三次関数に適化します。

$$y = ax^3 + bx^2 + cx + d$$

a, b 及び c は適化係数です。

点渡り曲線 Point to Point

1組ずつのキャリブレーションポイント間に直線を引き、最初と最後の線分間で補外してキャリブレーションレンジから外れるピークエリア(又はピークハイ)を適化させます。

Flow Analysis オプションウィンドウ

Flow Analysis オプションボタン  をクリックすれば Flow Analysis オプションウィンドウ (図 13) が開き、ピーク検出の形式、ディスプレイや印刷オプションが変更できます。

このウィンドウは6つのセクションから成っています：

ピーク検出 Peak Detection

Automatic ラジオボタンを選択すると、ピークデテクションのアルゴリズムに基づき一つのブロック内に複数のピークを検出します。

ブロック毎にインジェクションし一定の時間に一つのピークが出る場合は **Peak-per-Block** を選択します。Delay 欄に入力した時間後にピークの演算が始まり(ピーク開始点)、Width 欄に設定した時間に終了(ピーク終了点)します。

印刷項目 Print Items

印刷するレポートに含めたい項目を選びます。選択できる三つの項目は検量線、キャリブレーションテーブル、及びレポートテーブル (図 15) です。

ピークの記載 Peak Description

印刷するレポートのレポートテーブルや、クリップボードにコピーしたりペーストするのに含めるピークデータを選択します。

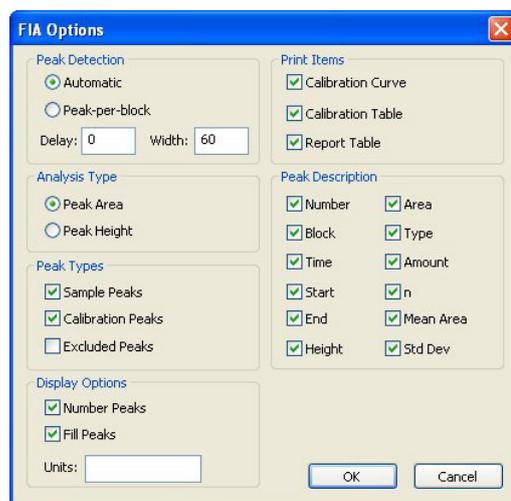


図 13. Flow Analysis オプションウィンドウ

表示オプション Display Options

ピーク番号を表示するかを選択、ピークの塗りつぶし表示の有無、キャリブレーションに使う単位表示を選択します。

ピークの形式 Peak Type

レポートテーブルの印刷やクリップボードに含めるピーク形式を選択します。

解析の形式 Analysis Type

ピークエリアで校正するのか、ピークハイで校正するのかを選択します。

レポートの印刷

Flow Analysis ウィンドウがアクティブの時にFileメニューから Print FIA を選ぶか、Ctrl+P を押せばレポートが印刷できます。

初期設定では、検量線、キャリブレーションテーブル及びレポートテーブルが印刷されます。レポートに含めたい項目を選択するには、Flow Analysis オプションボタン をクリックして Flow Analysis オプションウィンドウ (図 13) を開きます。

レポートをプレビューしたい場合は File メニュー から Print Preview... を選んで下さい(図 14)。

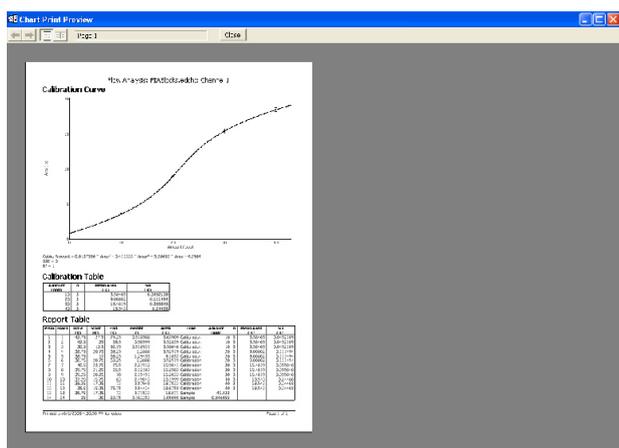


図 14. FIA レポート印刷のプレビュー

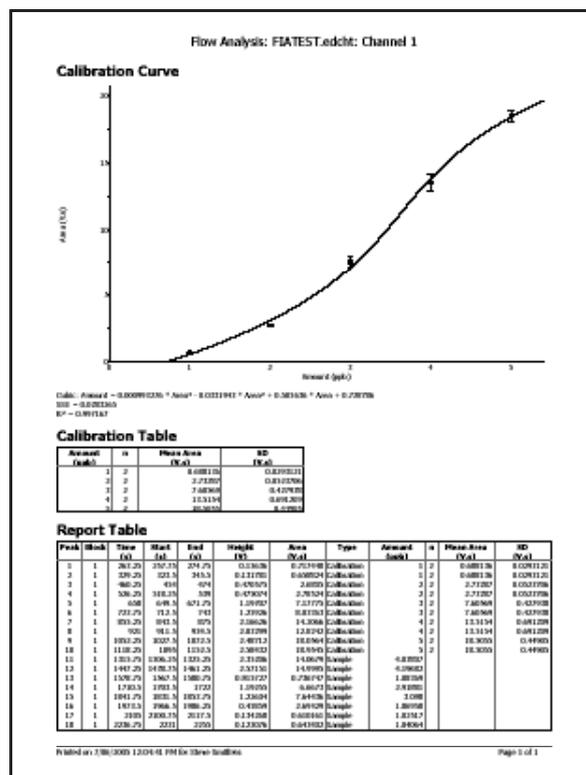


図 15. 標準的なレポートの印刷

FIA データを別のアプリケーションにエクスポート

FIA データをコピー & ペーストし別のアプリケーションに表示させて解析に活用できます。Flow Analysis ウィンドウをアクティブにし、Edit メニューから Copy FIA to Clipboard を選ぶか Ctrl+C を押すと、クリップボードに複写 (Copy to Clipboard) のダイアログボックス (図 16) が開きます。

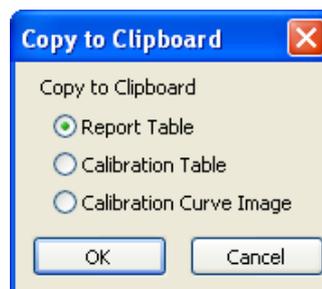


図 16. クリップボードに複写のダイアログボックス

クリップボードに複写のダイアログボックスにはコピーするデータの形式には三種類のオプションがあり選択できます:

レポートテーブル [Report Table](#)

[Report Table](#) を選択すると、レポートテーブルに表示するデータをタブ切りのテキスト段落としてクリップボードに複写します。複写される段落やピーク形式は Flow Analysis オプションウィンドウでの設定に従います。

キャリブレーションテーブル [Calibration Table](#)

[Calibration Table](#) を選ぶと、レポート印刷のキャリブレーションテーブルに表示されるデータに従いタブ切りのテキスト段落として複写します。

検量線イメージ [Calibration Curve Image](#)

別のアプリケーションドキュメントに検量線の画像をペーストしたい場合は [Calibration Curve Image](#) を選びます。

ピーク検出 [Peak detection](#)

ピークの立ち上がりは接線検索増加法(increasing tangents search)に従って検出し、連続して5データポイントで勾配が増加(及びスレッシュホールド値を超えると)するポイントとします。ピークエンドは連続して10ポイントの勾配がスレッシュホールド値以下になるポイントで決定します。

ピークの検出にはスレッシュホールド以外にスムージングと少数点処理の調整がありますが、ピークエリアやピークハイは常に生データから決定されます。

スムージングはデータポイントを内部的に平均処理しノイズの影響を減少させます。少数点処理(Decimation)はデータポイント数を減らして過剰なポイントをピークデテクションアルゴリズムから除外します。