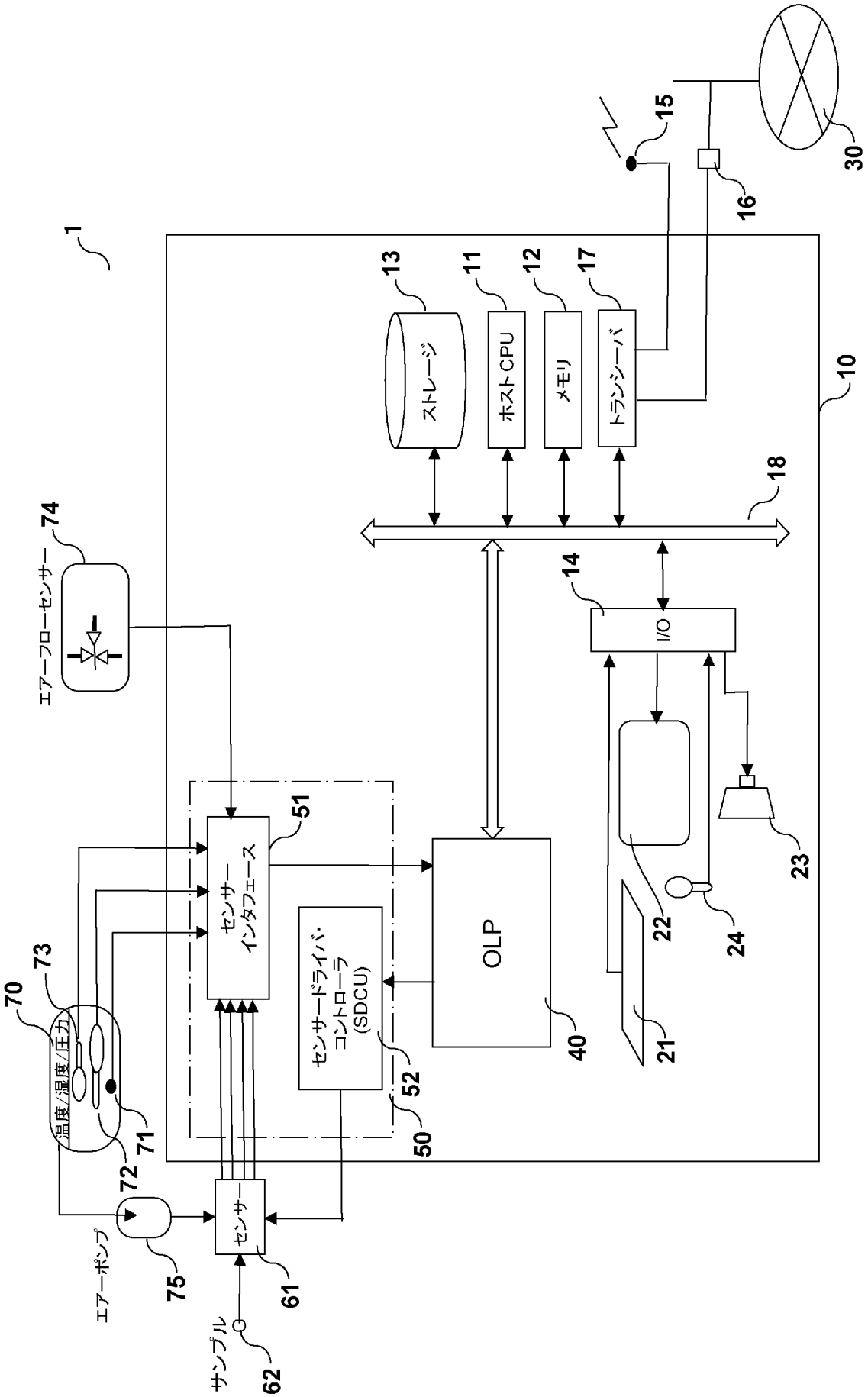
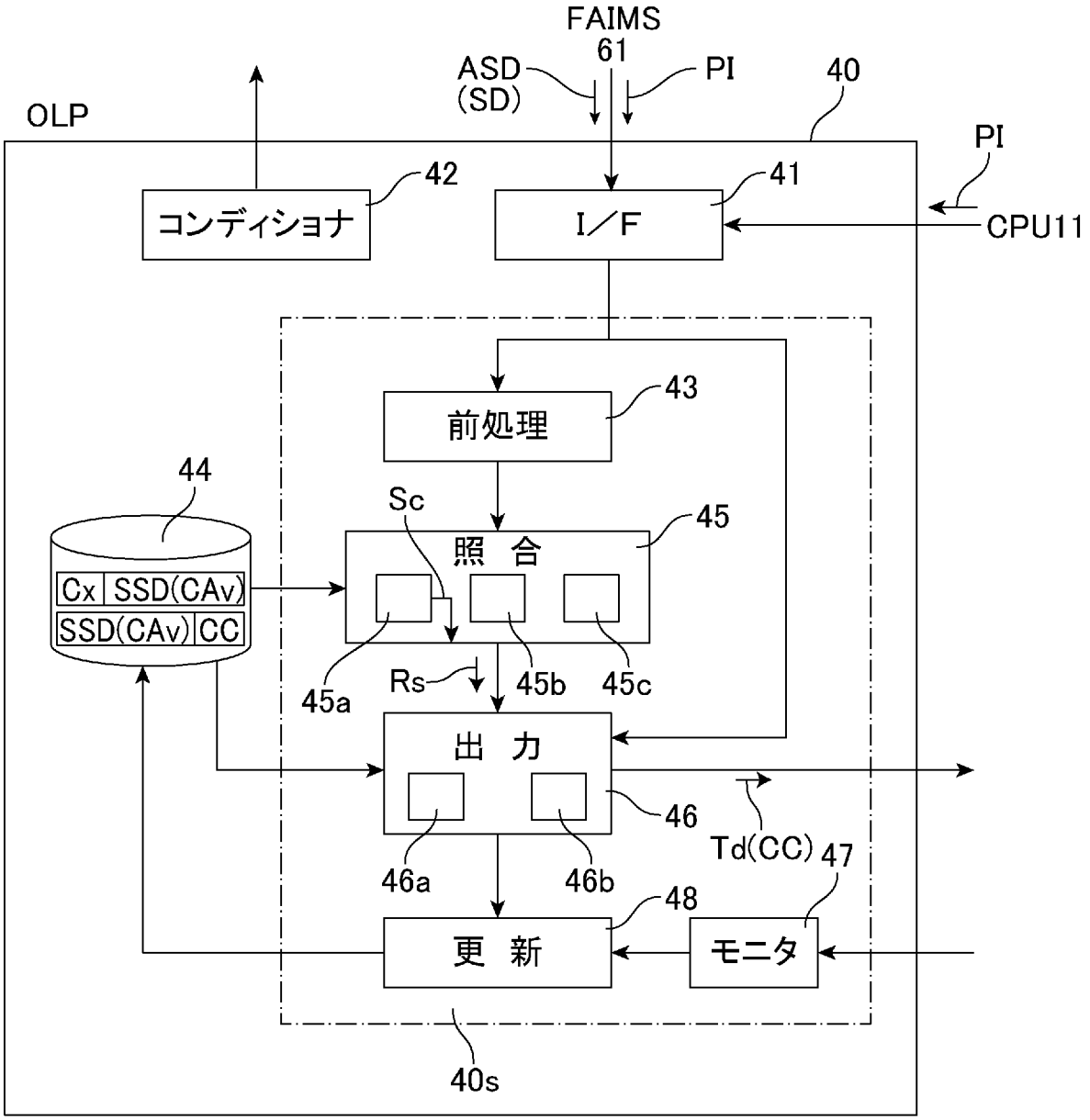
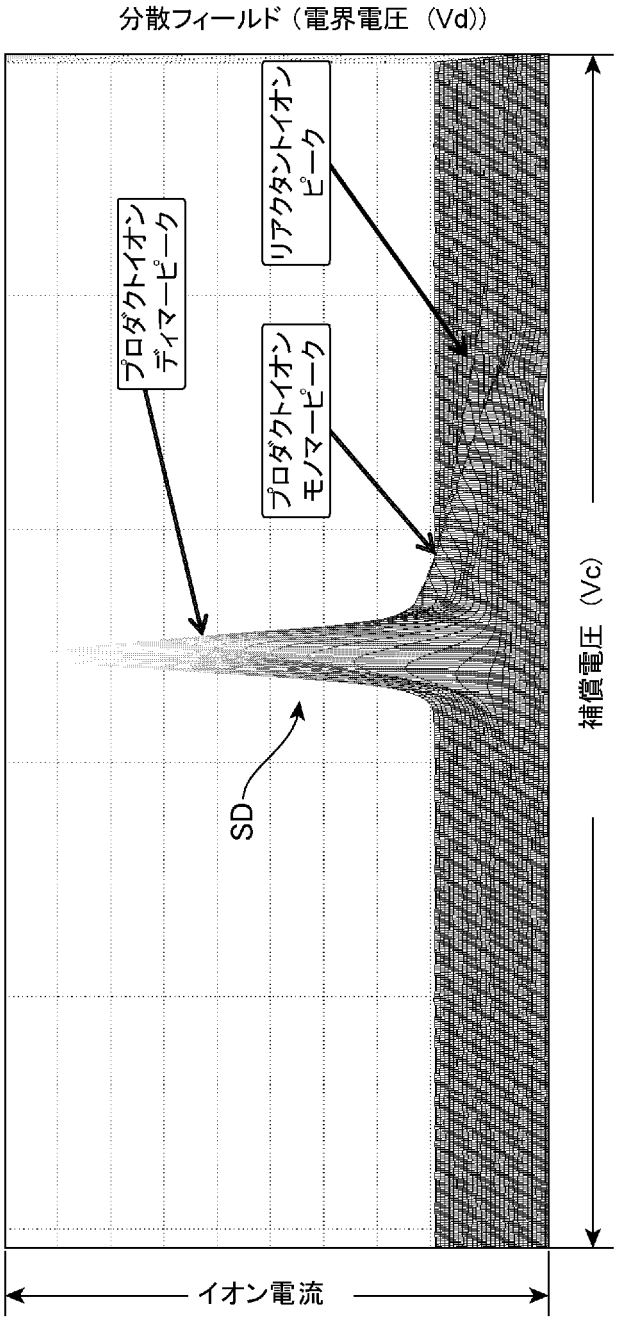
[図1]


1
10
11
12
13
14
15
16
17
18
21
22
23
24
30
40
50
51
52
61
62
70
71
72
73
74
75
ストレージ
ホストCPU
メモリ
トランシーバ
I/O
センサーインタフェース
センサードライバ・コントローラ (SDCU)
OLP
センサー
温度/湿度/圧力
エアーフローセンサー
エアーポンプ
サンプル

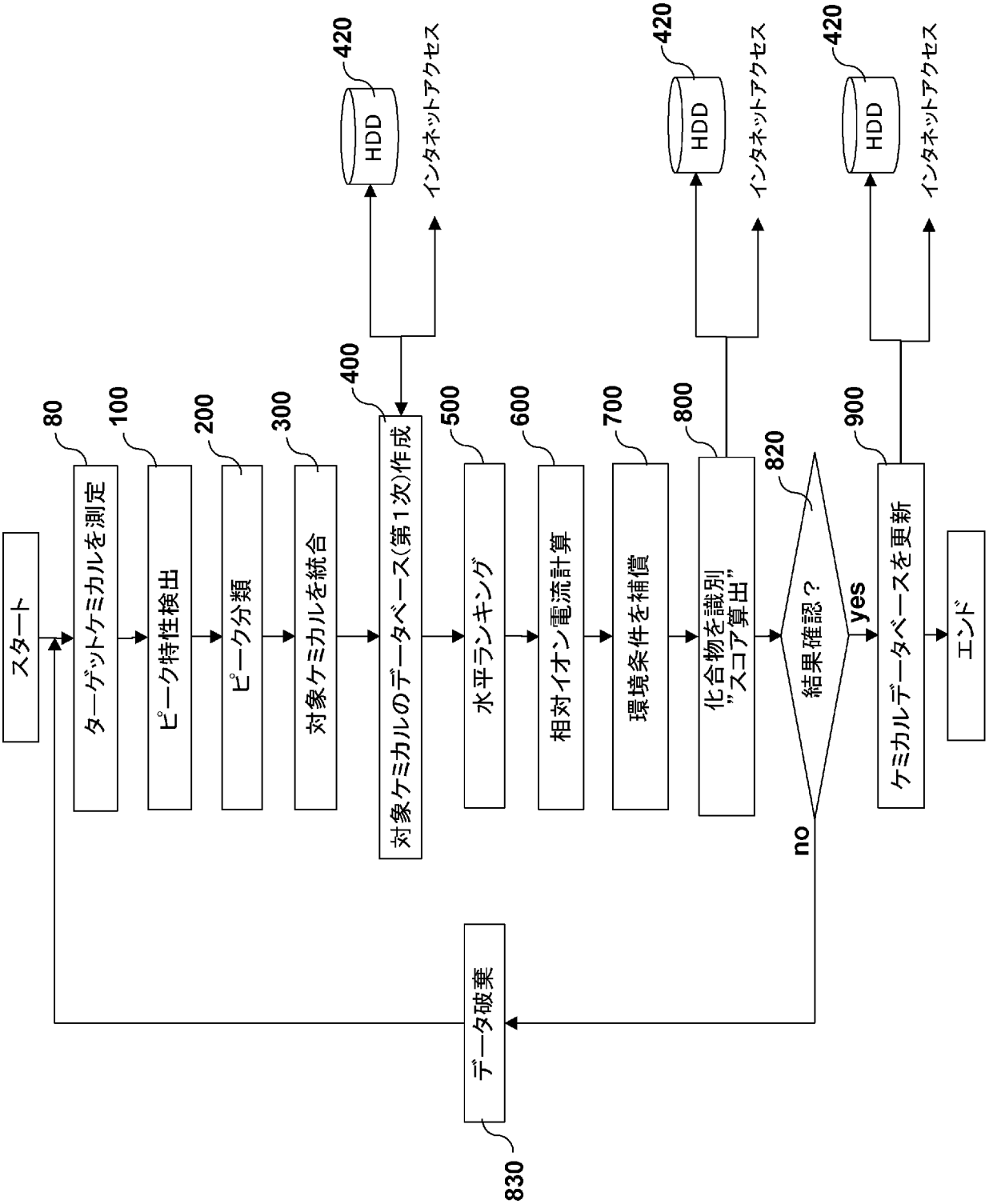
[図2]


FAIMS
61
ASD
(SD)
PI
40
OLP
PI
42
41
コンディショナ
I／F
CPU11
43
前処理
44
Sc
45
照　合
Cx
SSD(CAv)
SSD(CAv)
CC
45a
Rs
45b
45c
出　力
46
Td(CC)
47
46a
46b
48
更　新
モニタ
40s

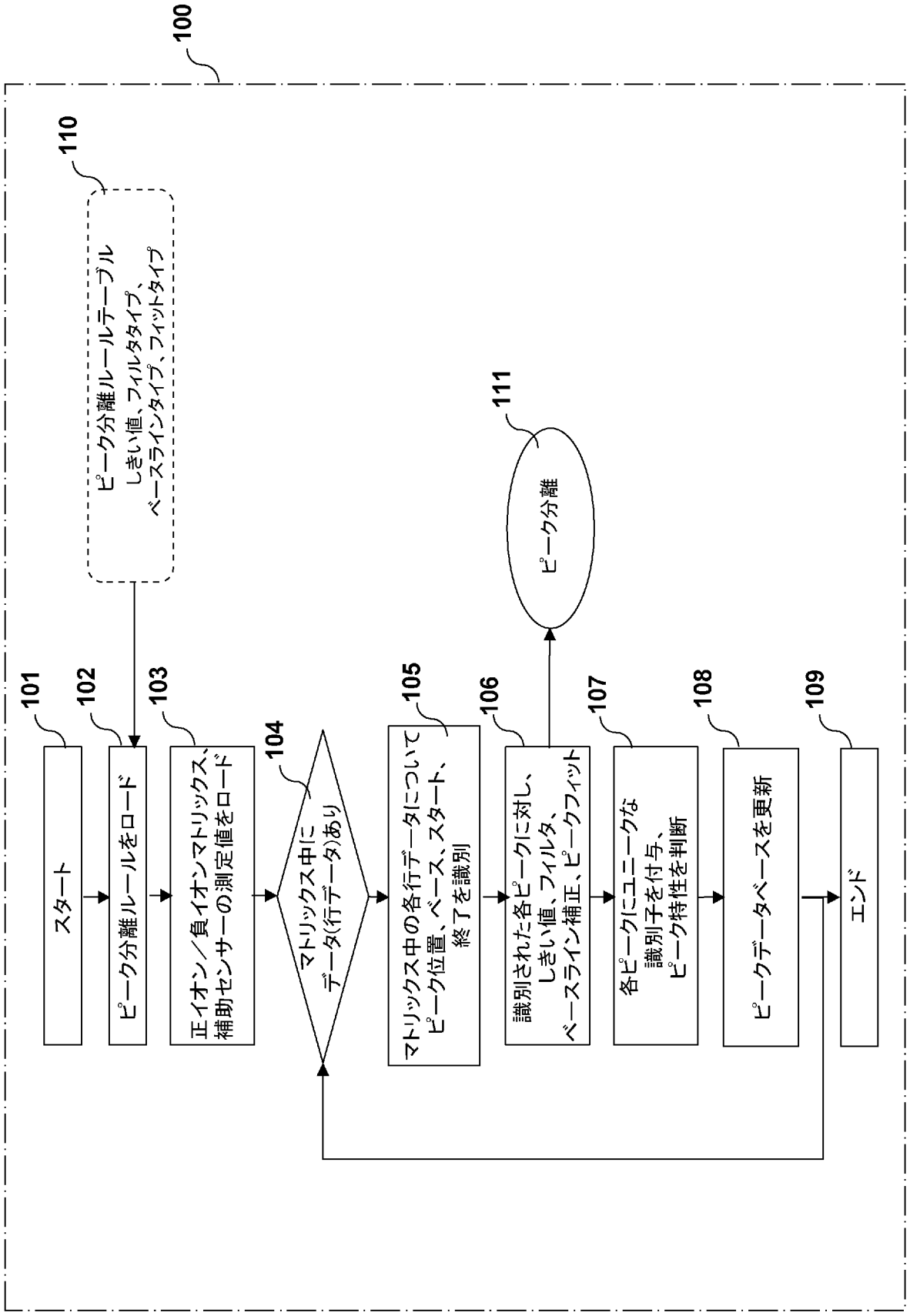
[図3]


分散フィールド（電界電圧（Vd））
プロダクトイオン
ディマーピーク
リアクタントイオン
ピーク
プロダクトイオン
モノマーピーク
SD
補償電圧（Vc）
イオン電流

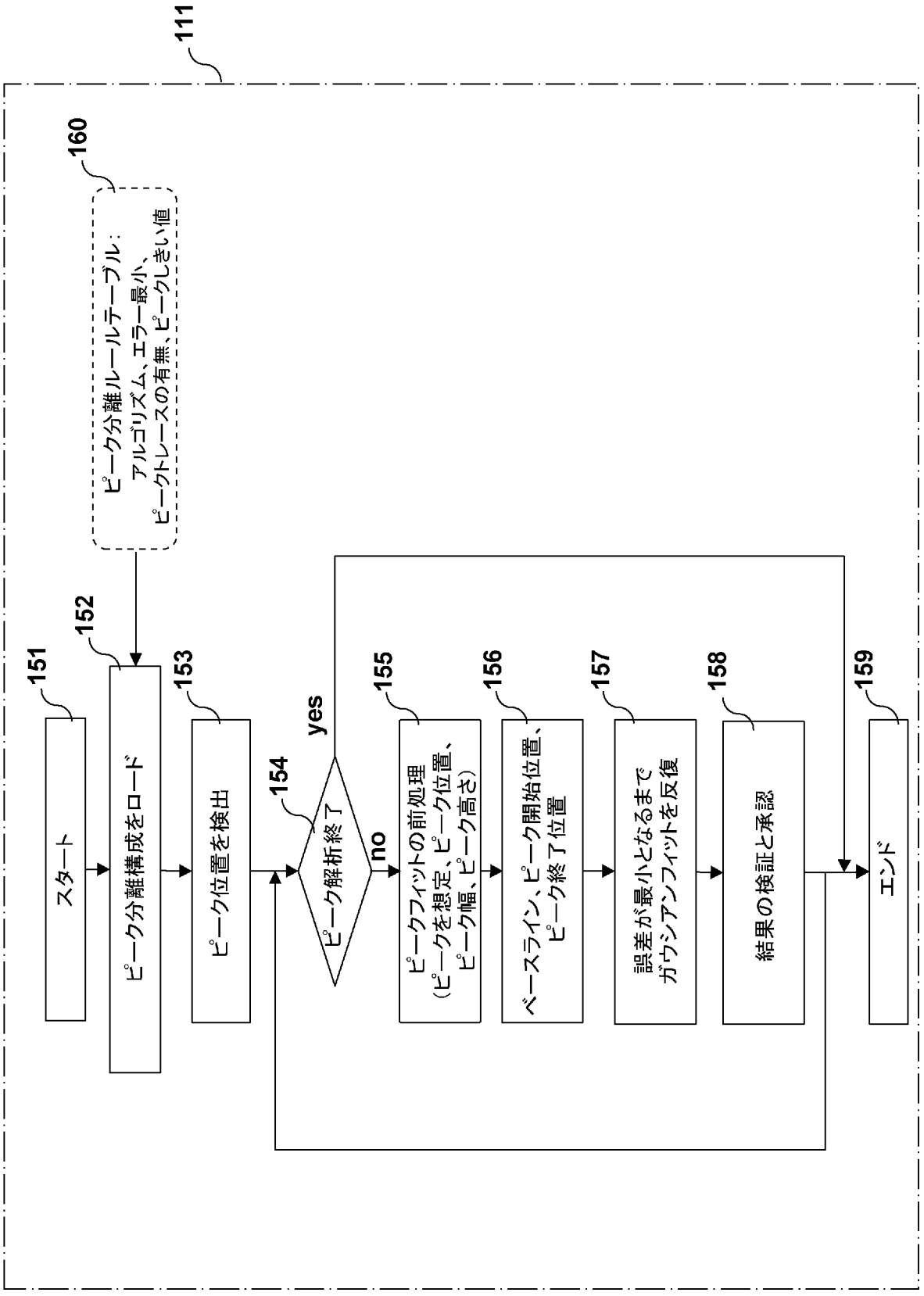
[図4]


スタート
80
ターゲットケミカルを測定
100
ピーク特性検出
200
ピーク分類
300
対象ケミカルを統合
400
対象ケミカルのデータベース(第1次)作成
500
水平ランキング
600
相対イオン電流計算
700
環境条件を補償
800
化合物を識別
"スコア算出"
820
結果確認？
yes
900
ケミカルデータベースを更新
エンド
no
データ破棄
830
HDD
420
インタネットアクセス

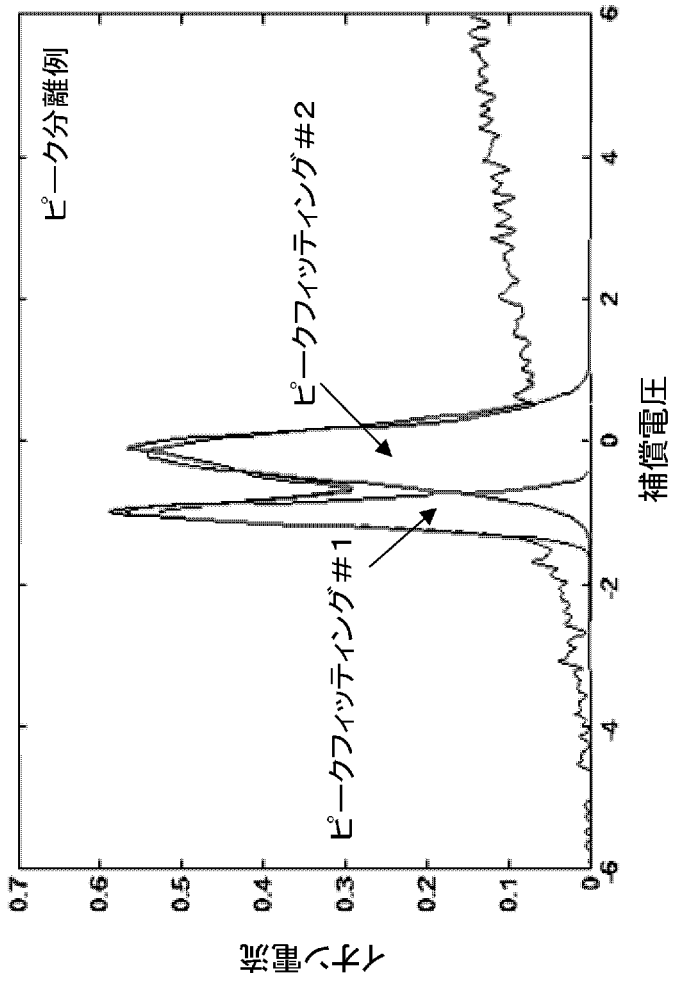
[図5]


100
110
ピーク分離ルールテーブル
しきい値、フィルタタイプ、
ベースラインタイプ、フィットタイプ
111
ピーク分離
101
スタート
102
ピーク分離ルールをロード
103
正イオン／負イオンマトリックス、
補助センサーの測定値をロード
104
マトリックス中に
データ(行データ)あり
105
マトリックス中の各行データについて
ピーク位置、ベース、スタート、
終了を識別
106
識別された各ピークに対し、
しきい値、フィルタ、
ベースライン補正、ピークフィット
107
各ピークにユニークな
識別子を付与、
ピーク特性を判断
108
ピークデータベースを更新
109
エンド

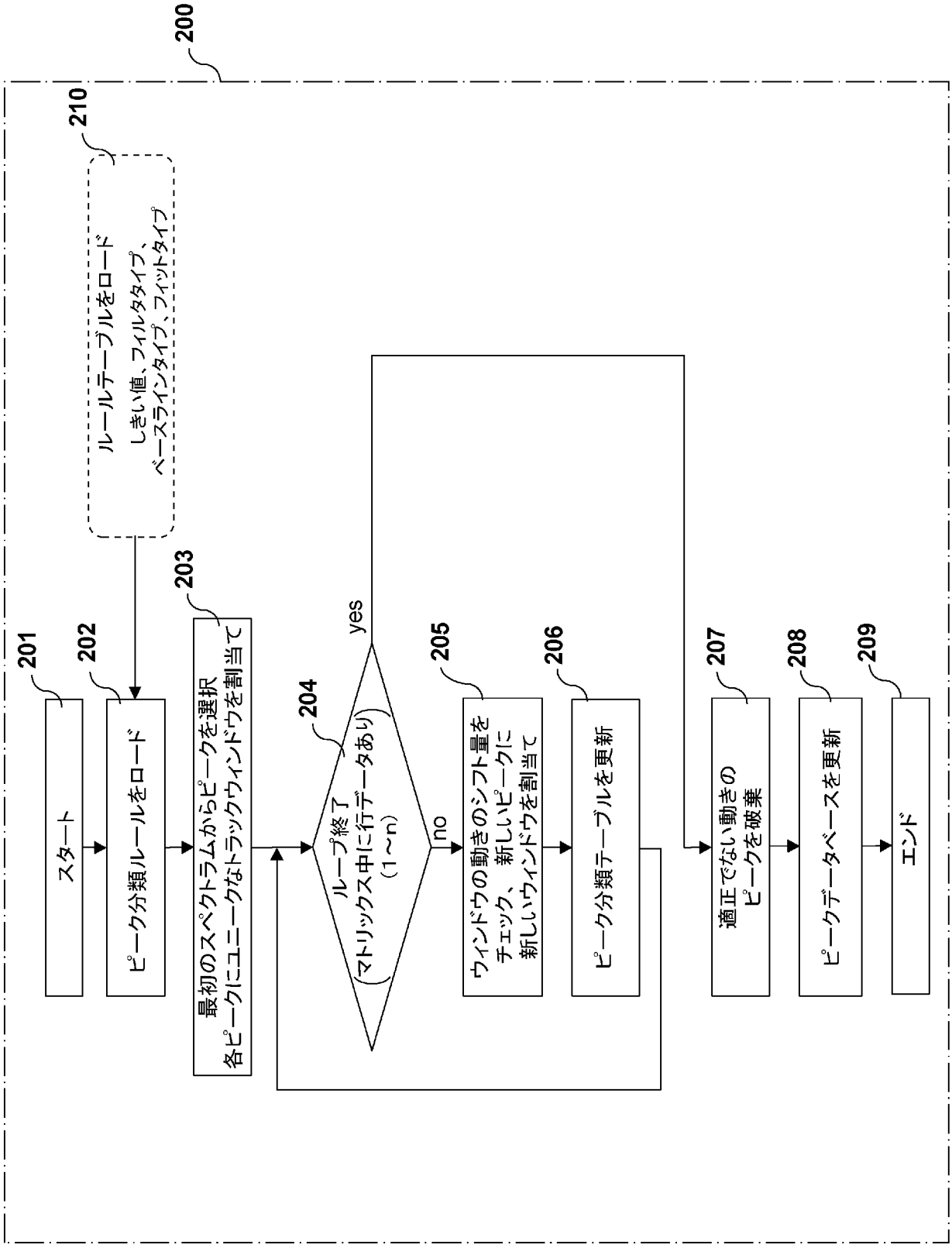
[図6]


111
160
ピーク分離ルールテーブル:
アルゴリズム、エラー最小、
ピークトレースの有無、ピークしきい値
151
スタート
152
ピーク分離構成をロード
153
ピーク位置を検出
154
ピーク解析終了
yes
no
155
ピークフィットの前処理
(ピークを想定、ピーク位置、
ピーク幅、ピーク高さ)
156
ベースライン、ピーク開始位置、
ピーク終了位置
157
誤差が最小となるまで
ガウシアンフィットを反復
158
結果の検証と承認
159
エンド

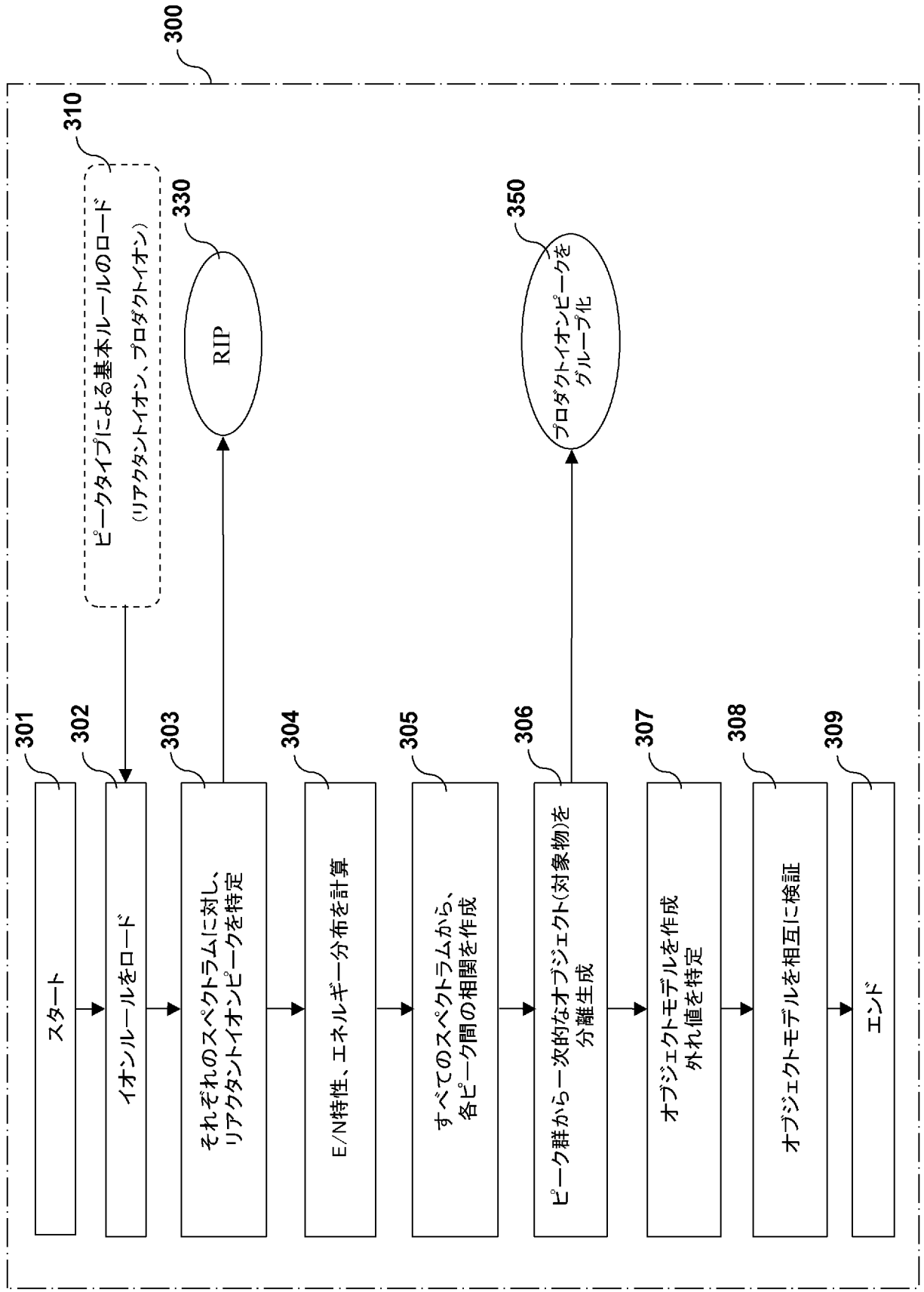
[図7]


ピーク分離例
ピークフィッティング＃2
ピークフィッティング＃1
イオン電流
補償電圧
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
-6
-4
-2
0
2
4
6

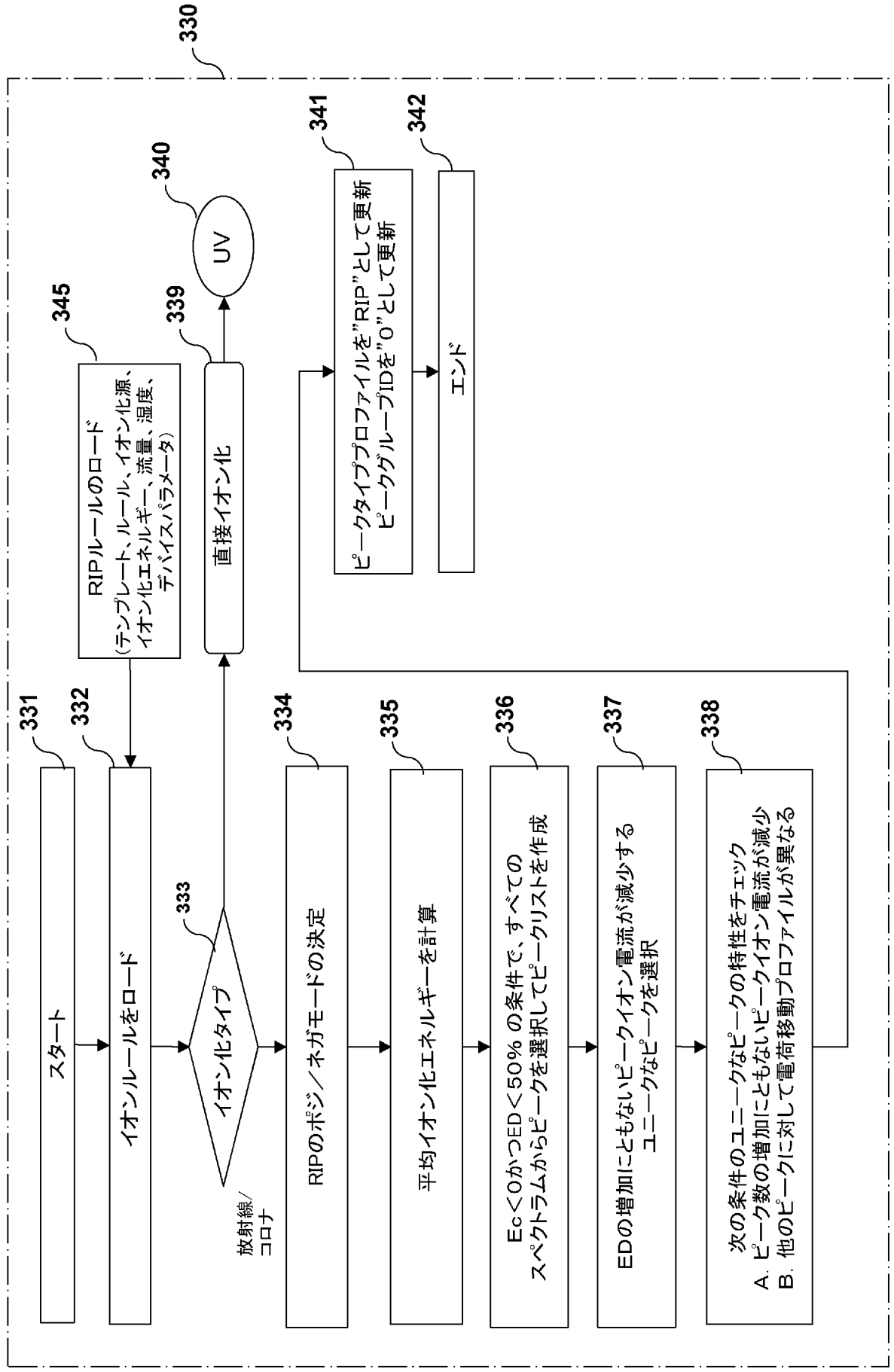
[図8]


200
210
ルールテーブルをロード
しきい値、フィルタタイプ、
ベースラインタイプ、フィットタイプ
201
スタート
202
ピーク分類ルールをロード
203
最初のスペクトラムからピークを選択
各ピークにユニークなトラックウィンドウを割当て
204
ループ終了
(マトリックス中に行データあり)
(1～n)
yes
no
205
ウィンドウの動きのシフト量を
チェック、新しいピークに
新しいウィンドウを割当て
206
ピーク分類テーブルを更新
207
適正でない動きの
ピークを破棄
208
ピークデータベースを更新
209
エンド

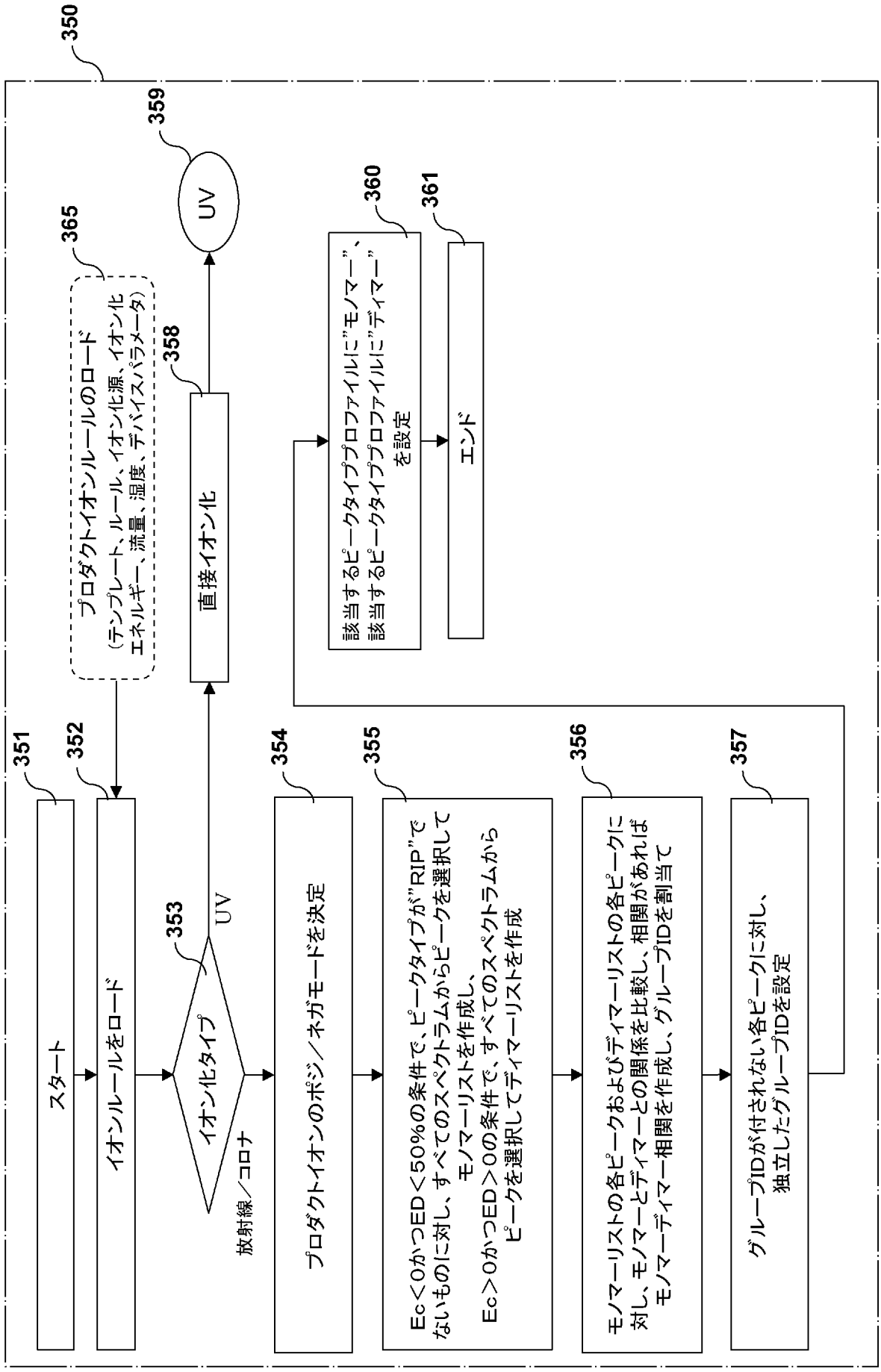
[図9]


300
310
ピークタイプによる基本ルールのロード
(リアクタントイオン、プロダクトイオン)
330
RIP
350
プロダクトイオンピークをグループ化
301
スタート
302
イオンルールをロード
303
それぞれのスペクトラムに対し、リアクタントイオンピークを特定
304
E/N特性、エネルギー分布を計算
305
すべてのスペクトラムから、各ピーク間の相関を作成
306
ピーク群から一次的なオブジェクト(対象物)を分離生成
307
オブジェクトモデルを作成
外れ値を特定
308
オブジェクトモデルを相互に検証
309
エンド

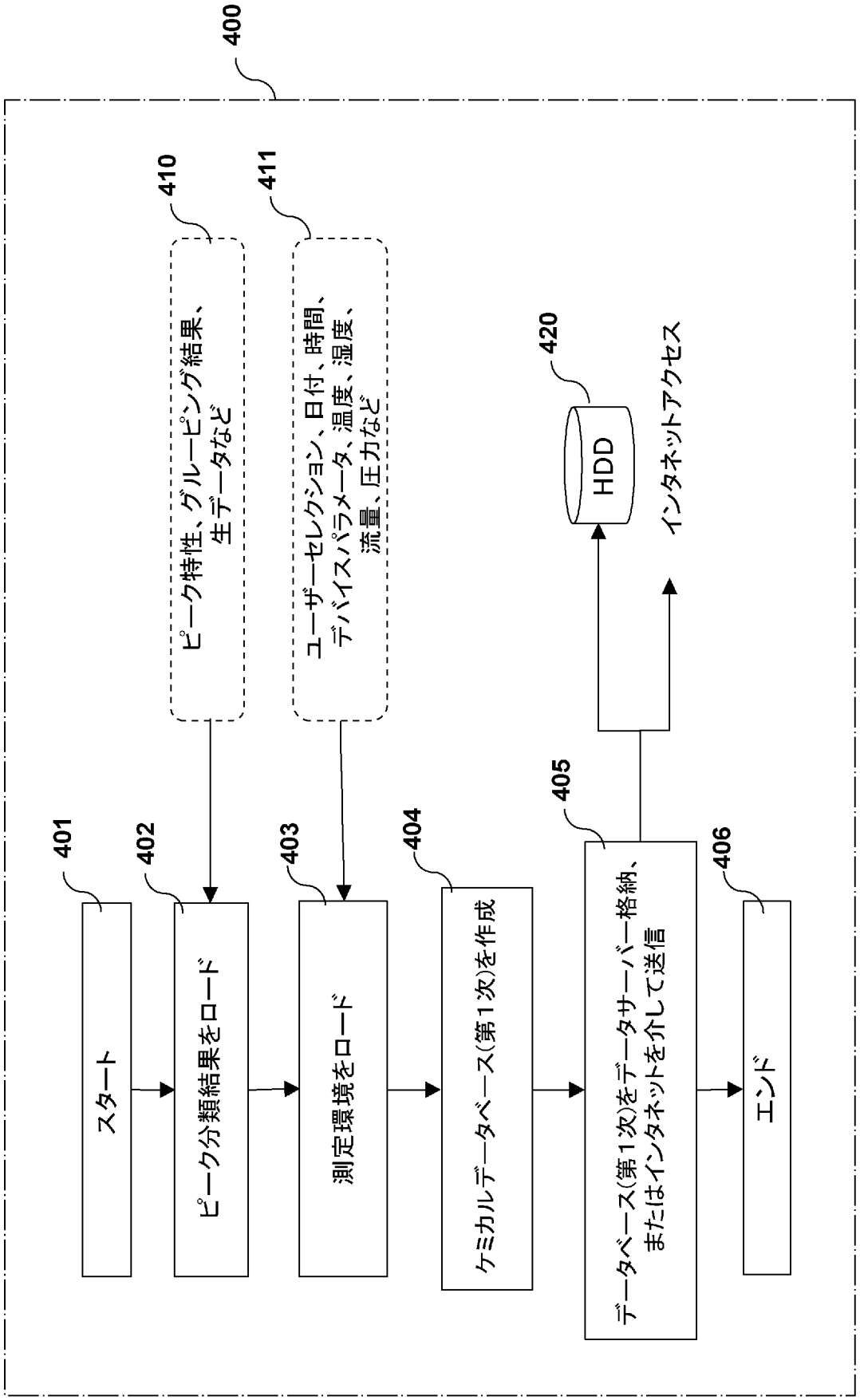
[図10]


330
スタート
331
イオンルールをロード
332
RIPルールのロード
(テンプレート、ルール、イオン化源、
イオン化エネルギー、流量、湿度、
デバイスパラメータ)
345
イオン化タイプ
333
放射線/
コロナ
直接イオン化
339
UV
340
RIPのポジ/ネガモードの決定
334
平均イオン化エネルギーを計算
335
Ec<0かつED<50% の条件で、すべての
スペクトラムからピークを選択してピークリストを作成
336
EDの増加にともないピークイオン電流が減少する
ユニークなピークを選択
337
次の条件のユニークなピークの特性をチェック
A. ピーク数の増加にともないピークイオン電流が減少
B. 他のピークに対して電荷移動プロファイルが異なる
338
ピークタイププロファイルを"RIP"として更新
ピークグループIDを"0"として更新
341
エンド
342

[図11]


350
スタート
351
イオンルールをロード
352
プロダクトイオンルールのロード
(テンプレート、ルール、イオン化源、イオン化エネルギー、流量、湿度、デバイスパラメータ)
365
イオン化タイプ
353
放射線／コロナ
UV
直接イオン化
358
UV
359
プロダクトイオンのポジ／ネガモードを決定
354
Ec＜0かつED＜50%の条件で、ピークタイプが"RIP"でないものに対し、すべてのスペクトラムからピークを選択してモノマーリストを作成し、
Ec＞0かつED＞0の条件で、すべてのスペクトラムからピークを選択してディマーリストを作成
355
モノマーリストの各ピークおよびディマーリストの各ピークに対し、モノマーとディマーとの関係を比較し、相関があればモノマーディマー相関を作成し、グループIDを割当て
356
グループIDが付されない各ピークに対し、独立したグループIDを設定
357
該当するピークタイププロファイルに"モノマー"、該当するピークタイププロファイルに"ディマー"を設定
360
エンド
361

[図12]

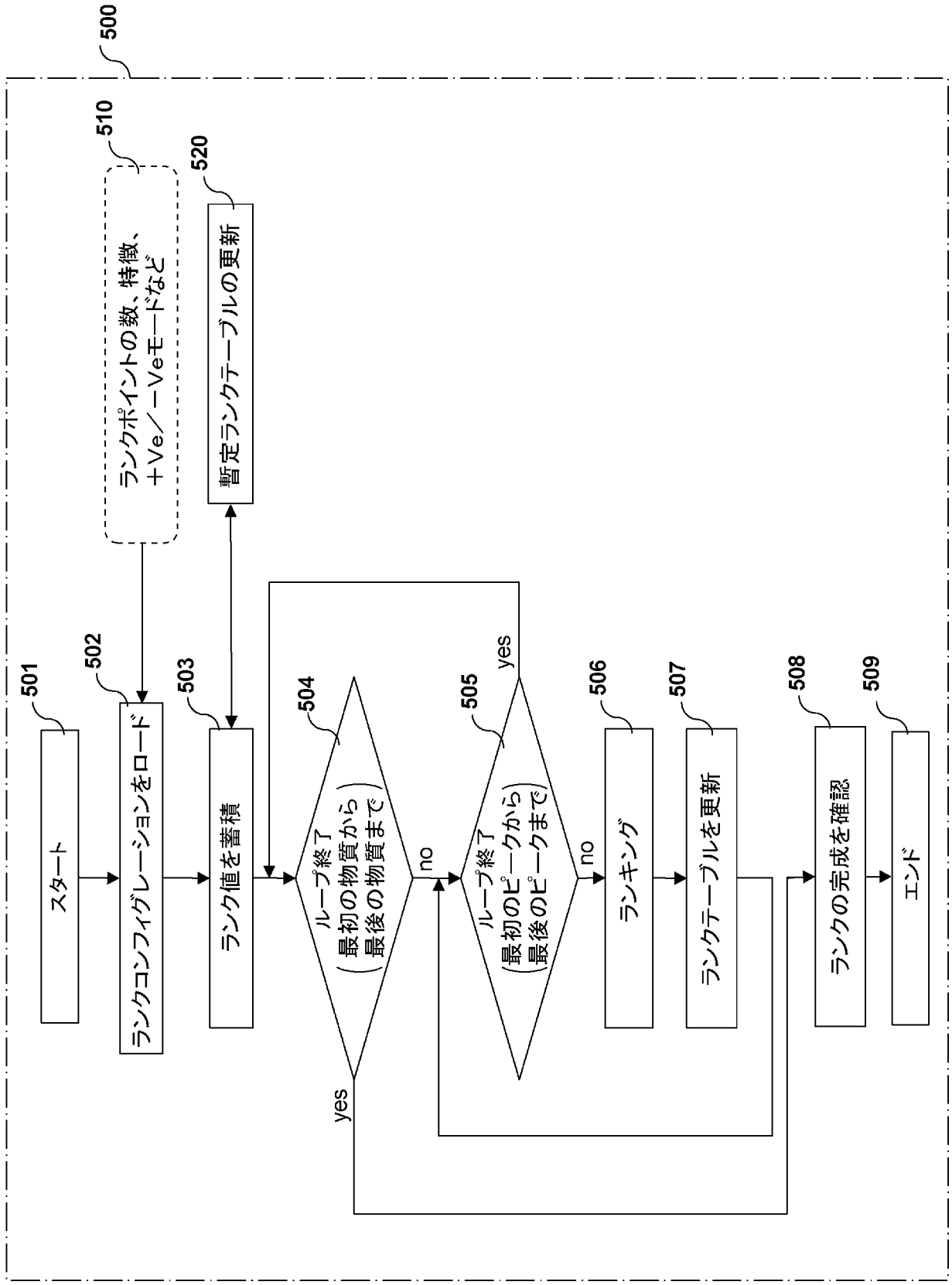

400
410
ピーク特性、グルーピング結果、
生データなど
411
ユーザーセレクション、日付、時間、
デバイスパラメータ、温度、湿度、
流量、圧力など
420
HDD
インタネットアクセス
401
スタート
402
ピーク分類結果をロード
403
測定環境をロード
404
ケミカルデータベース(第1次)を作成
405
データベース(第1次)をデータサーバー格納、
またはインタネットを介して送信
406
エンド

[図13]

450

No.	カテゴリー	コンテンツ	備考
1	アプリケーションプロファイルデータベース	嗅覚／健康／安全／科学	
2	固有のプロファイルデータ	スペクトラムランキング	*
3		ルールに基づいたケミカルオブジェクトツリー	**
4		インデックス生成関係	**
5		ケミカルファミリー及びAMUに基づく分類ツリー	**
6		指示された習得プロセス処理及び指示されていない習得プロセス分離	
7		アプリケーションプロファイルと関連付けられたデータベース	
8	センサーに非依存のデータ	化学物質	**
9		イオン移動度	*
10		キャリブレーション	
11		環境モデル	
12	センサー依存のデータ	電界電圧	
13		補償電圧	
14		イオン電流	
15		ピーク位置	
16		FWHM（半値幅）	
17		ピーク電流	
18		リニアリティ	
19		温度	
20		湿度	
21		圧力	
22		流量	
23		イオン化率	**

[図14]

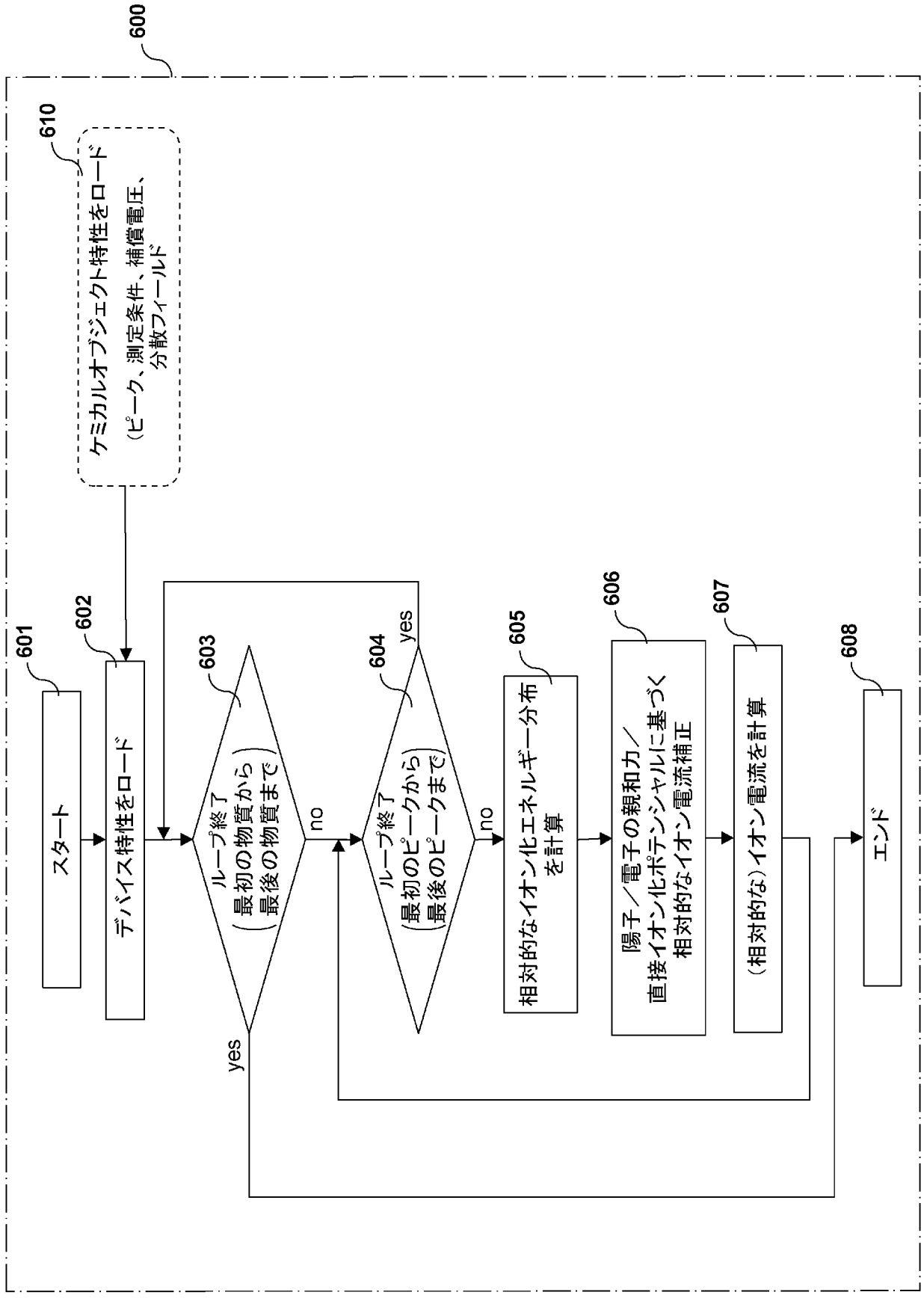

500
510
ランクポイントの数、特徴、
＋Ve／－Veモードなど
520
暫定ランクテーブルの更新
501
スタート
502
ランクコンフィグレーションをロード
503
ランク値を蓄積
504
ループ終了
（最初の物質から
最後の物質まで）
505
ループ終了
（最初のピークから
最後のピークまで）
506
ランキング
507
ランクテーブルを更新
508
ランクの完成を確認
509
エンド
yes
no
yes
no

[図15]

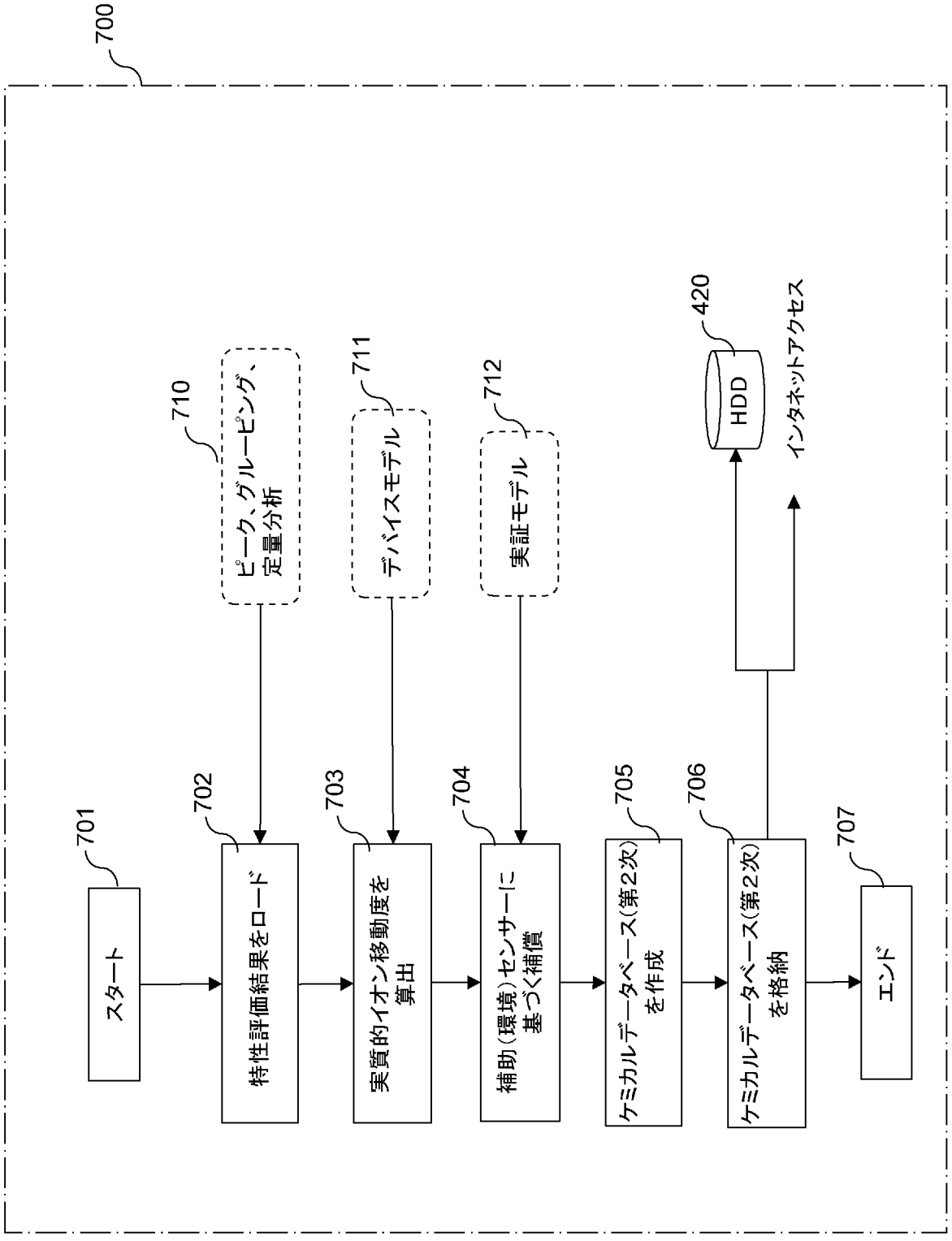
451

No.	Vd	Vc	イオン電流	FWHM	ランキング	例
1	Vd-1	Vc-11	Icurrent-11	FWHM-11	W-11	0.5
2		Vc-12	Icurrent-12	FWHM-12	W-12	0.6
3	Vd-2	Vc-21	Icurrent-21	FWHM-21	W-21	0.6
4		Vc-22	Icurrent-22	FWHM-22	W-22	0.7
5		Vc-23	Icurrent-23	FWHM-23	W-23	0.4
6	Vd-3	Vc-31	Icurrent-31	FWHM-31	W-31	1.2
7		Vc-32	Icurrent-32	FWHM-32	W-32	1.75
8		Vc-33	Icurrent-33	FWHM-33	W-33	0.6
9	Vd-4	Vc-41	Icurrent-41	FWHM-41	W-41	1.3
10		Vc-42	Icurrent-42	FWHM-42	W-42	1.8
11		Vc-43	Icurrent-43	FWHM-43	W-43	0.8
12	Vd-5	Vc-51	Icurrent-51	FWHM-51	W-51	1.1
13		Vc-52	Icurrent-52	FWHM-52	W-52	1.7
14	Vd-6	Vc-61	Icurrent-61	FWHM-61	W-61	0.9
15		Vc-62	Icurrent-62	FWHM-62	W-62	1.4
16	Vd-7	Vc-71	Icurrent-71	FWHM-71	W-71	0.7
17		Vc-72	Icurrent-72	FWHM-72	W-72	1.1
18	Vd-8	Vc-81	Icurrent-81	FWHM-81	W-81	0.9
19	Vd-9	Vc-91	Icurrent-91	FWHM-91	W-91	0.7

[図16]


600
610
ケミカルオブジェクト特性をロード
(ピーク、測定条件、補償電圧、
分散フィールド
601
スタート
602
デバイス特性をロード
603
ループ終了
(最初の物質から
最後の物質まで)
no
yes
604
ループ終了
(最初のピークから
最後のピークまで)
no
yes
605
相対的なイオン化エネルギー分布
を計算
606
陽子／電子の親和力／
直接イオン化ポテンシャルに基づく
相対的なイオン電流補正
607
(相対的な)イオン電流を計算
608
エンド

[図17]

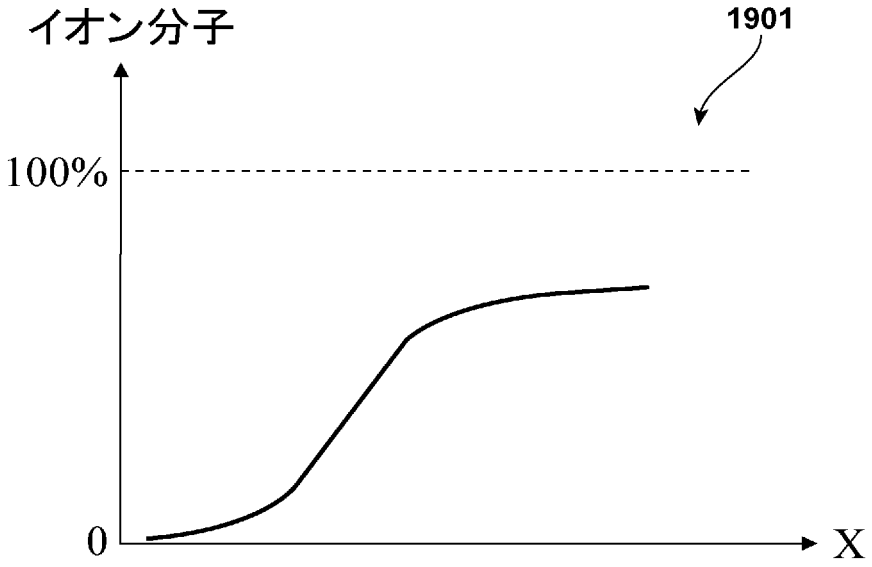

700
スタート
701
特性評価結果をロード
702
ピーク、グルーピング、定量分析
710
実質的イオン移動度を算出
703
デバイスモデル
711
補助（環境）センサーに基づく補償
704
実証モデル
712
ケミカルデータベース（第2次）を作成
705
ケミカルデータベース（第2次）を格納
706
HDD
420
インタネットアクセス
エンド
707

[図18]

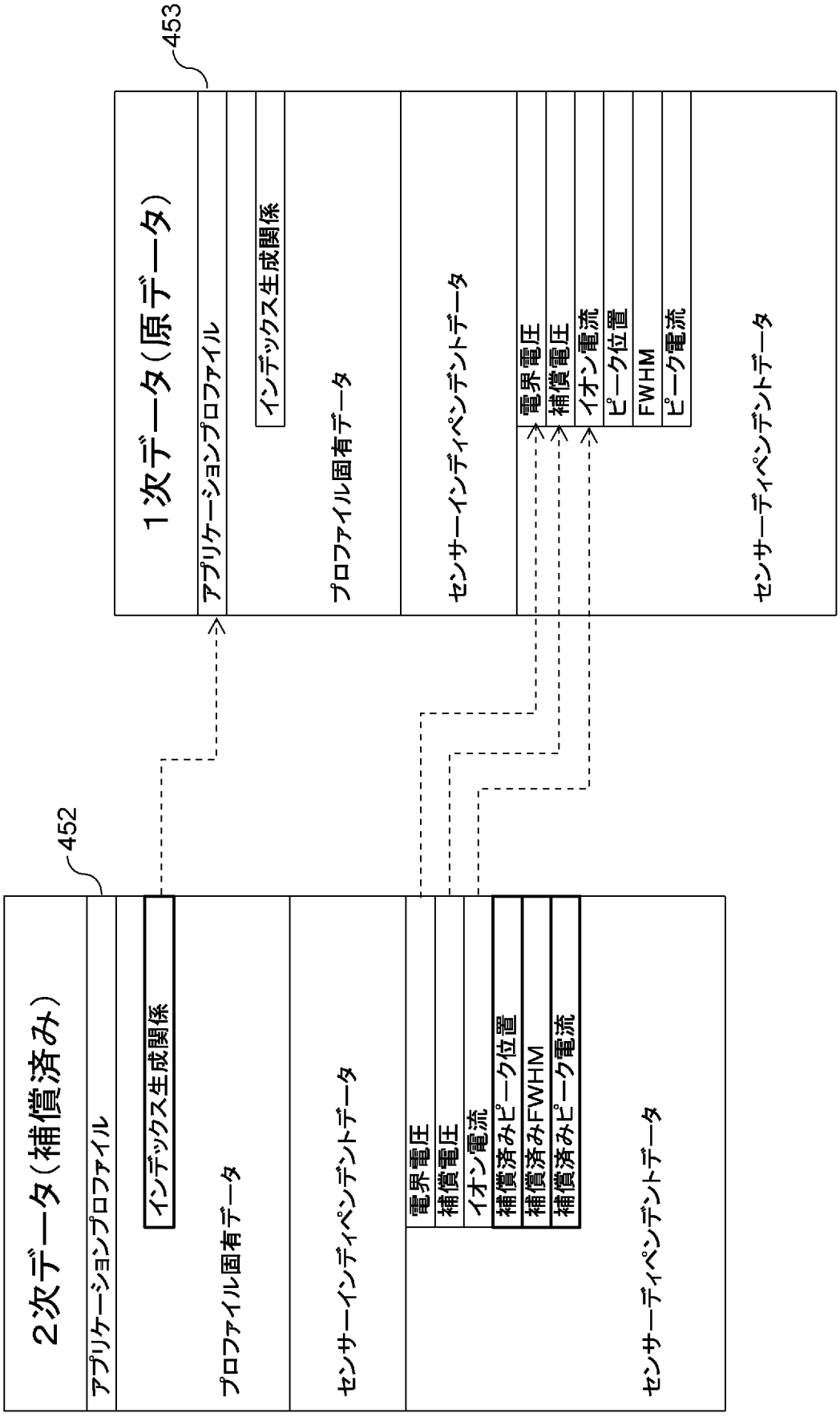
1801

気圧[,%]	イオン電流[相対値]	FWHM[相対値]
20	I_{20}	W_{20}
40	I_{40}	W_{40}
60	I_{60}	W_{60}
80	I_{80}	W_{80}

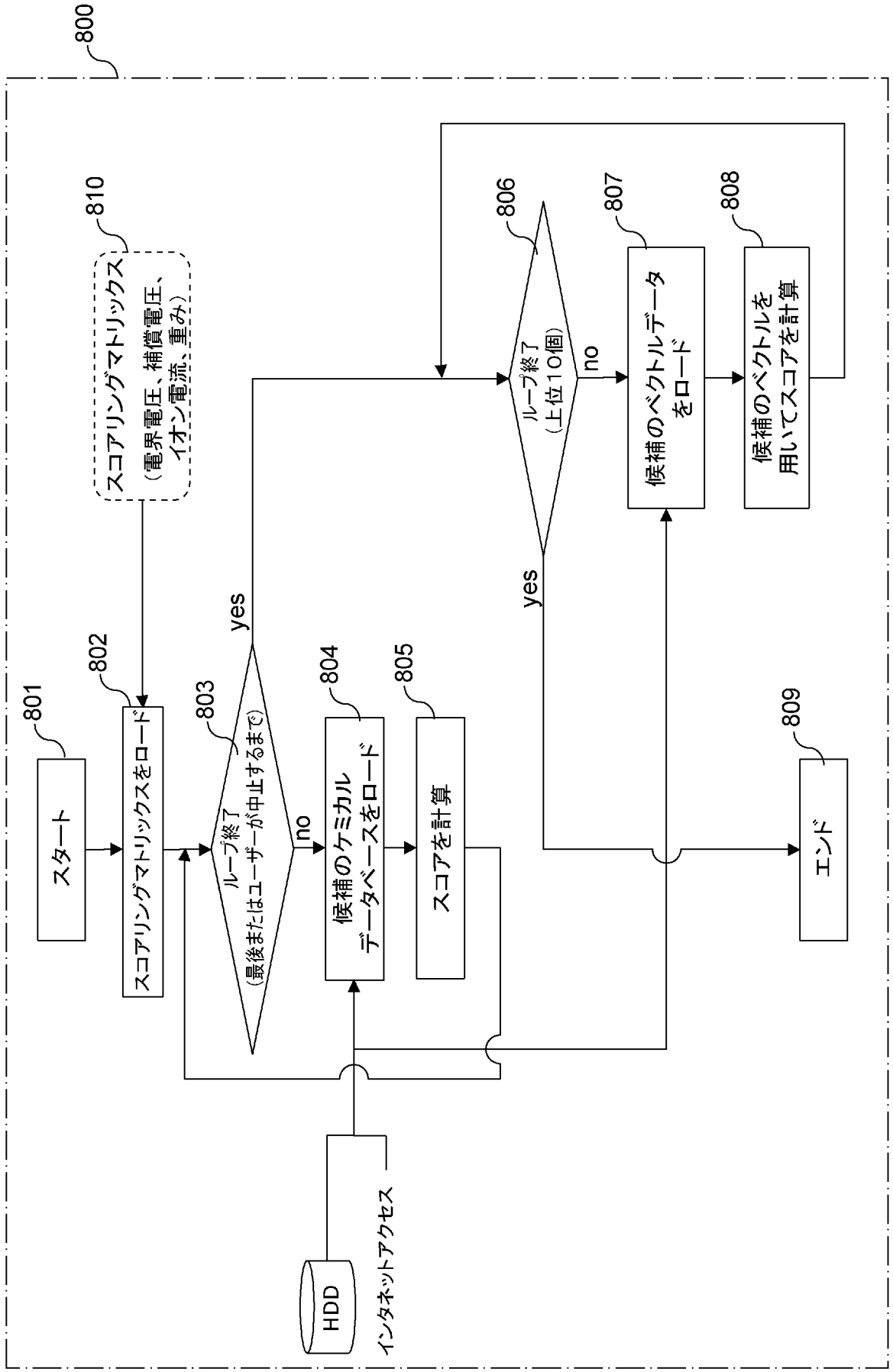
[図19]



[図20]


1次データ（原データ）
453
アプリケーションプロファイル
インデックス生成関係
プロファイル固有データ
センサーインディペンデントデータ
電界電圧
補償電圧
イオン電流
ピーク位置
FWHM
ピーク電流
センサーディペンデントデータ
2次データ（補償済み）
452
アプリケーションプロファイル
インデックス生成関係
プロファイル固有データ
センサーインディペンデントデータ
電界電圧
補償電圧
イオン電流
補償済みピーク位置
補償済みFWHM
補償済みピーク電流
センサーディペンデントデータ

[図21]


800
スタート
801
スコアリングマトリックスをロード
802
ループ終了
（最後またはユーザーが中止するまで）
803
yes
no
候補のケミカル
データベースをロード
804
スコアを計算
805
ループ終了
（上位10個）
806
yes
no
候補のベクトルデータ
をロード
807
候補のベクトルを
用いてスコアを計算
808
エンド
809
スコアリングマトリックス
（電界電圧、補償電圧、
イオン電流、重み）
810
HDD
インタネットアクセス

[図22]

454

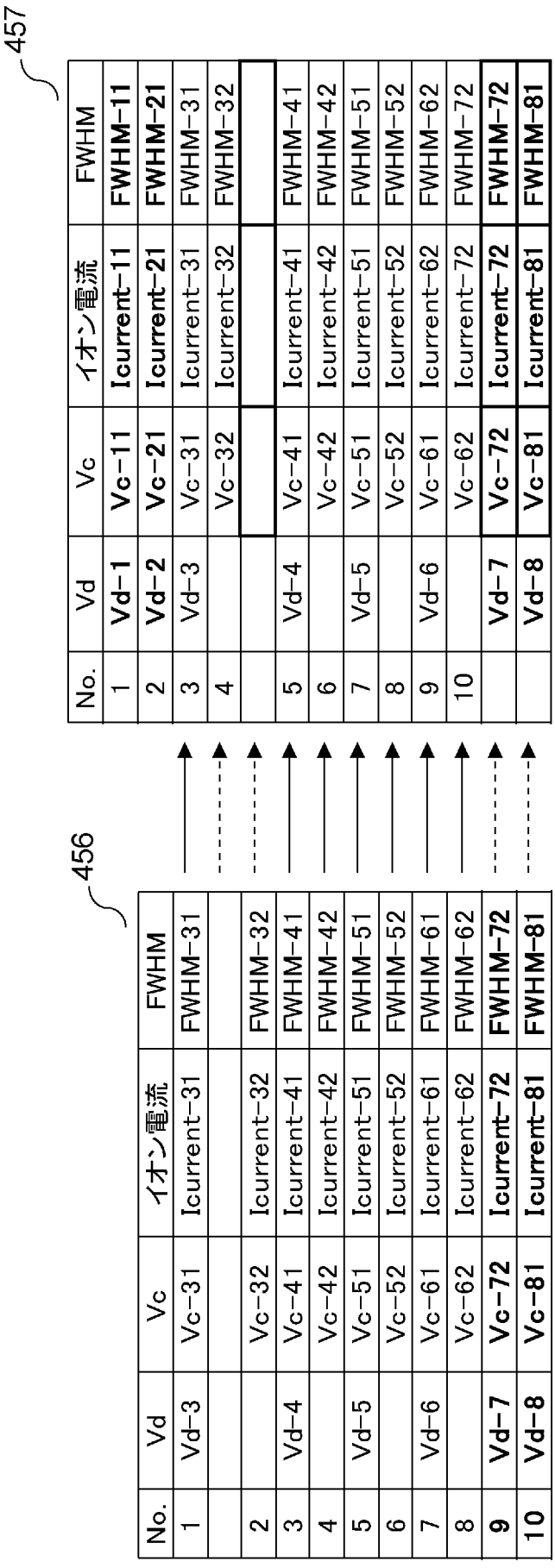
No.	Vd	Vc	イオン電流	FWHM	重み
1	Vd-3	Vc-31	Icurrent-31	FWHM-31	W-31
2		Vc-32	Icurrent-32	FWHM-32	W-32
3	Vd-4	Vc-41	Icurrent-41	FWHM-41	W-41
4		Vc-42	Icurrent-42	FWHM-42	W-42
5	Vd-5	Vc-51	Icurrent-51	FWHM-51	W-51
6		Vc-52	Icurrent-52	FWHM-52	W-52
7	Vd-6	Vc-61	Icurrent-61	FWHM-61	W-61
8		Vc-62	Icurrent-62	FWHM-62	W-62
9	Vd-7	Vc-72	Icurrent-72	FWHM-72	W-72
10	Vd-8	Vc-81	Icurrent-81	FWHM-81	W-81

[図23]

455

No.	Vd	Vc	イオン電流	FWHM	ランキング
1	**Vd-1**	**Vc-11**	**Icurrent-11**	**FWHM-11**	**W-11**
2	**Vd-2**	**Vc-21**	**Icurrent-21**	**FWHM-21**	**W-21**
3	Vd-3	Vc-31	Icurrent-31	FWHM-31	W-31
4		Vc-32	Icurrent-32	FWHM-32	W-32
5	Vd-4	Vc-41	Icurrent-41	FWHM-41	W-41
6		Vc-42	Icurrent-42	FWHM-42	W-42
7	Vd-5	Vc-51	Icurrent-51	FWHM-51	W-51
8		Vc-52	Icurrent-52	FWHM-52	W-52
9	Vd-6	Vc-62	Icurrent-62	FWHM-62	W-62
10		Vc-72	Icurrent-72	FWHM-72	W-72

[図24]


456
No.
Vd
Vc
イオン電流
FWHM
1
Vd-3
Vc-31
Icurrent-31
FWHM-31
2
Vc-32
Icurrent-32
FWHM-32
3
Vd-4
Vc-41
Icurrent-41
FWHM-41
4
Vc-42
Icurrent-42
FWHM-42
5
Vd-5
Vc-51
Icurrent-51
FWHM-51
6
Vc-52
Icurrent-52
FWHM-52
7
Vd-6
Vc-61
Icurrent-61
FWHM-61
8
Vc-62
Icurrent-62
FWHM-62
9
Vd-7
Vc-72
Icurrent-72
FWHM-72
10
Vd-8
Vc-81
Icurrent-81
FWHM-81
457
No.
Vd
Vc
イオン電流
FWHM
1
Vd-1
Vc-11
Icurrent-11
FWHM-11
2
Vd-2
Vc-21
Icurrent-21
FWHM-21
3
Vd-3
Vc-31
Icurrent-31
FWHM-31
4
Vc-32
Icurrent-32
FWHM-32
5
Vd-4
Vc-41
Icurrent-41
FWHM-41
6
Vc-42
Icurrent-42
FWHM-42
7
Vd-5
Vc-51
Icurrent-51
FWHM-51
8
Vc-52
Icurrent-52
FWHM-52
9
Vd-6
Vc-61
Icurrent-61
FWHM-62
10
Vc-62
Icurrent-72
FWHM-72
Vd-7
Vc-72
Icurrent-72
FWHM-72
Vd-8
Vc-81
Icurrent-81
FWHM-81

[図25]

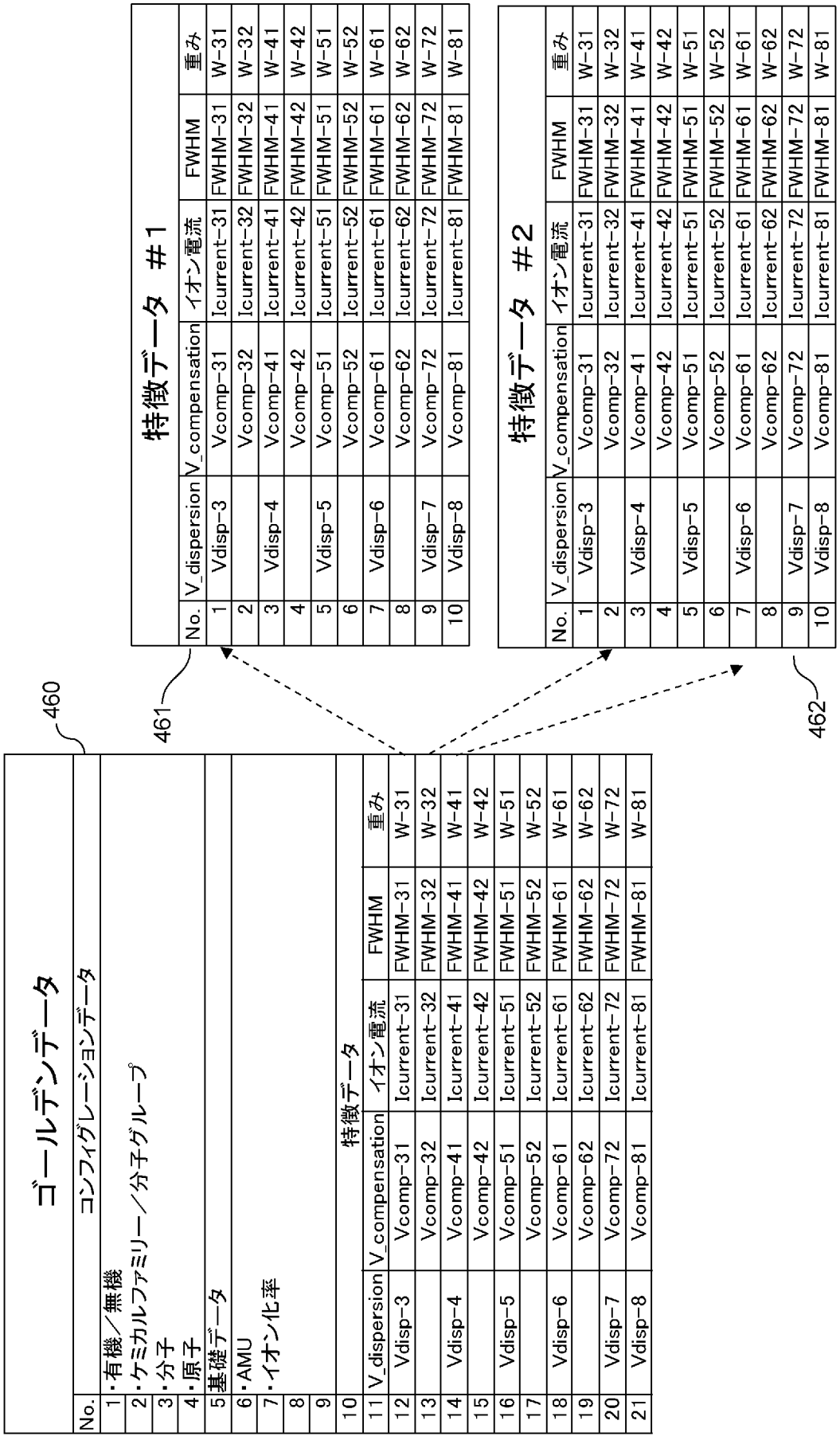
458

No.	Vd	Vc	イオン電流	FWHM
	Vd-1	**Vc-11**	**Icurrent-11**	**FWHM-11**
	Vd-2	**Vc-21**	**Icurrent-21**	**FWHM-21**
1	Vd-3	Vc-31	Icurrent-31	FWHM-31
2		Vc-32	Icurrent-32	FWHM-32
3	Vd-4	Vc-41	Icurrent-41	FWHM-41
4		Vc-42	Icurrent-42	FWHM-42
5	Vd-5	Vc-51	Icurrent-51	FWHM-51
6		Vc-52	Icurrent-52	FWHM-52
7	Vd-6	Vc-61	Icurrent-61	FWHM-61
8		Vc-62	Icurrent-62	FWHM-62
9	**Vd-7**	**Vc-72**	**Icurrent-72**	**FWHM-72**
10	**Vd-8**	**Vc-81**	**Icurrent-81**	**FWHM-81**

459

No.	Vd	Vc	イオン電流	FWHM
1	**Vd-1**	**Vc-11**	**Icurrent-11**	**FWHM-11**
2	**Vd-2**	**Vc-21**	**Icurrent-21**	**FWHM-21**
3	Vd-3	Vc-31	Icurrent-31	FWHM-31
4		Vc-32	Icurrent-32	FWHM-32
5	Vd-4	Vc-41	Icurrent-41	FWHM-41
6		Vc-42	Icurrent-42	FWHM-42
7	Vd-5	Vc-51	Icurrent-51	FWHM-51
8		Vc-52	Icurrent-52	FWHM-52
9	Vd-6	Vc-61	Icurrent-62	FWHM-62
10		Vc-62	Icurrent-72	FWHM-72
	Vd-7	**Vc-72**	**Icurrent-72**	**FWHM-72**
	Vd-8	**Vc-81**	**Icurrent-81**	**FWHM-81**

[図26]



ゴールデンデータ

No.	コンフィグレーションデータ
1	・有機／無機
2	・ケミカルファミリー／分子グループ
3	・分子
4	・原子
5	基礎データ
6	・AMU
7	・イオン化率
8	
9	
10	特徴データ

11	V_dispersion	V_compensation	イオン電流	FWHM	重み
12	Vdisp-3	Vcomp-31	Icurrent-31	FWHM-31	W-31
13		Vcomp-32	Icurrent-32	FWHM-32	W-32
14	Vdisp-4	Vcomp-41	Icurrent-41	FWHM-41	W-41
15		Vcomp-42	Icurrent-42	FWHM-42	W-42
16	Vdisp-5	Vcomp-51	Icurrent-51	FWHM-51	W-51
17		Vcomp-52	Icurrent-52	FWHM-52	W-52
18	Vdisp-6	Vcomp-61	Icurrent-61	FWHM-61	W-61
19		Vcomp-62	Icurrent-62	FWHM-62	W-62
20	Vdisp-7	Vcomp-72	Icurrent-72	FWHM-72	W-72
21	Vdisp-8	Vcomp-81	Icurrent-81	FWHM-81	W-81

460

461

特徴データ　#1

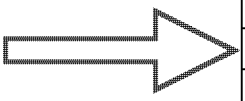
No.	V_dispersion	V_compensation	イオン電流	FWHM	重み
1	Vdisp-3	Vcomp-31	Icurrent-31	FWHM-31	W-31
2		Vcomp-32	Icurrent-32	FWHM-32	W-32
3	Vdisp-4	Vcomp-41	Icurrent-41	FWHM-41	W-41
4		Vcomp-42	Icurrent-42	FWHM-42	W-42
5	Vdisp-5	Vcomp-51	Icurrent-51	FWHM-51	W-51
6		Vcomp-52	Icurrent-52	FWHM-52	W-52
7	Vdisp-6	Vcomp-61	Icurrent-61	FWHM-61	W-61
8		Vcomp-62	Icurrent-62	FWHM-62	W-62
9	Vdisp-7	Vcomp-72	Icurrent-72	FWHM-72	W-72
10	Vdisp-8	Vcomp-81	Icurrent-81	FWHM-81	W-81

462

特徴データ　#2

No.	V_dispersion	V_compensation	イオン電流	FWHM	重み
1	Vdisp-3	Vcomp-31	Icurrent-31	FWHM-31	W-31
2		Vcomp-32	Icurrent-32	FWHM-32	W-32
3	Vdisp-4	Vcomp-41	Icurrent-41	FWHM-41	W-41
4		Vcomp-42	Icurrent-42	FWHM-42	W-42
5	Vdisp-5	Vcomp-51	Icurrent-51	FWHM-51	W-51
6		Vcomp-52	Icurrent-52	FWHM-52	W-52
7	Vdisp-6	Vcomp-61	Icurrent-61	FWHM-61	W-61
8		Vcomp-62	Icurrent-62	FWHM-62	W-62
9	Vdisp-7	Vcomp-72	Icurrent-72	FWHM-72	W-72
10	Vdisp-8	Vcomp-81	Icurrent-81	FWHM-81	W-81

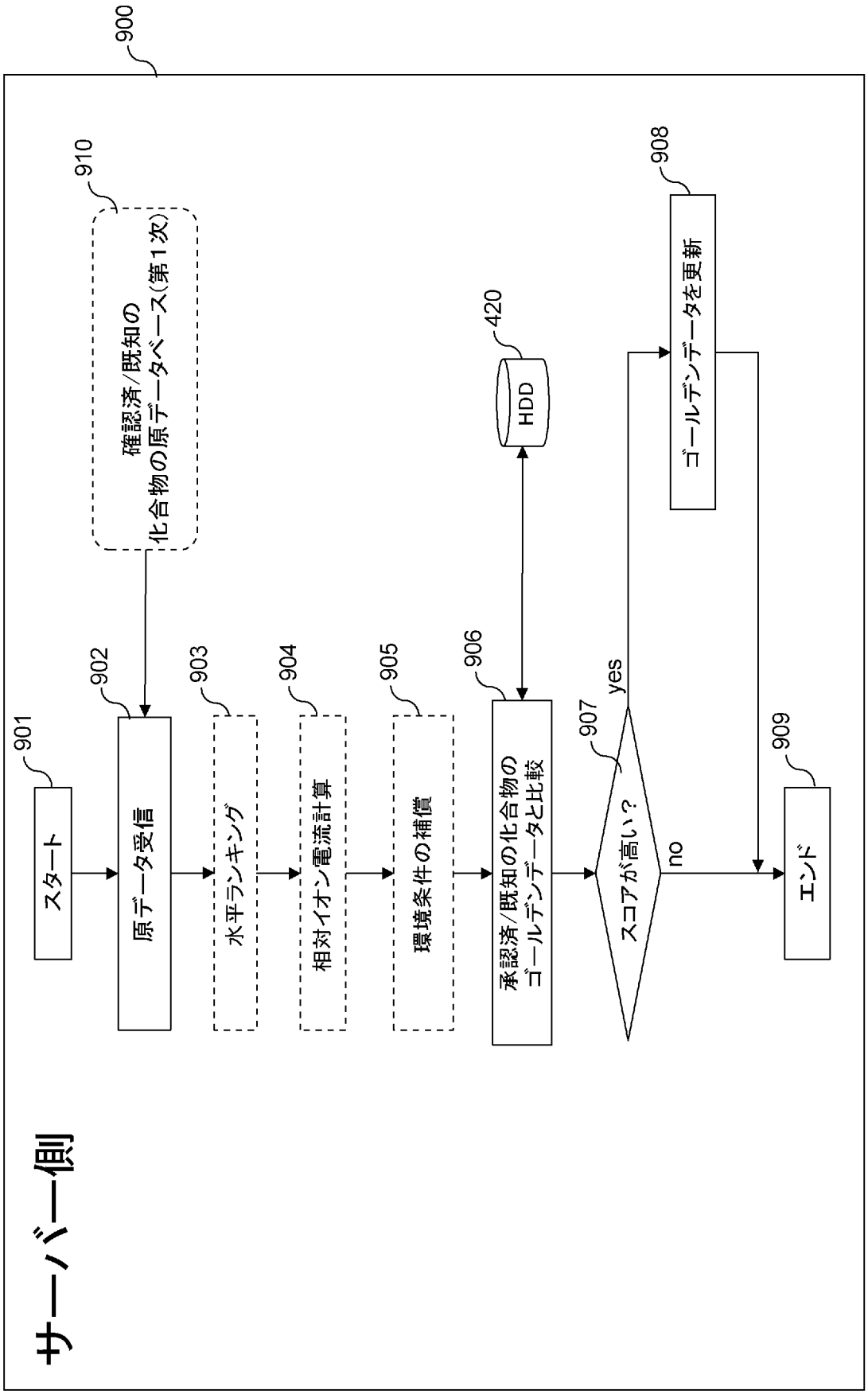
[図27]



垂直ランキング	
化学物質	同定回数
A	Na
B	Nb
C	Nc
D	Nd
E	Ne
F	Nf
G	Ng
H	**Nh**
I	Ni
J	Nj
K	Nk
L	Nl
M	Nm
N	Nn

463

[図28]


900
サーバー側
910
確認済/既知の
化合物の原データベース(第1次)
901
スタート
902
原データ受信
903
水平ランキング
904
相対イオン電流計算
905
環境条件の補償
906
承認済/既知の化合物の
ゴールデンデータと比較
420
HDD
907
スコアが高い?
yes
no
908
ゴールデンデータを更新
909
エンド

[図29]

（a）

2901

Vd[%]	P-キシレン	M-キシレン	O-キシレン	サンプル-A
40	0.17	-0.35	0.1	0.11
60	0.38	0.25	0.275	0.37
70	0.52	0.36	0.43	0.54
75	0.68	0.49	0.57	0.68
80	0.8	0.58	0.69	0.79
90	1.20	0.78	1.00	1.16

表1　正イオン移動度（Vc値）

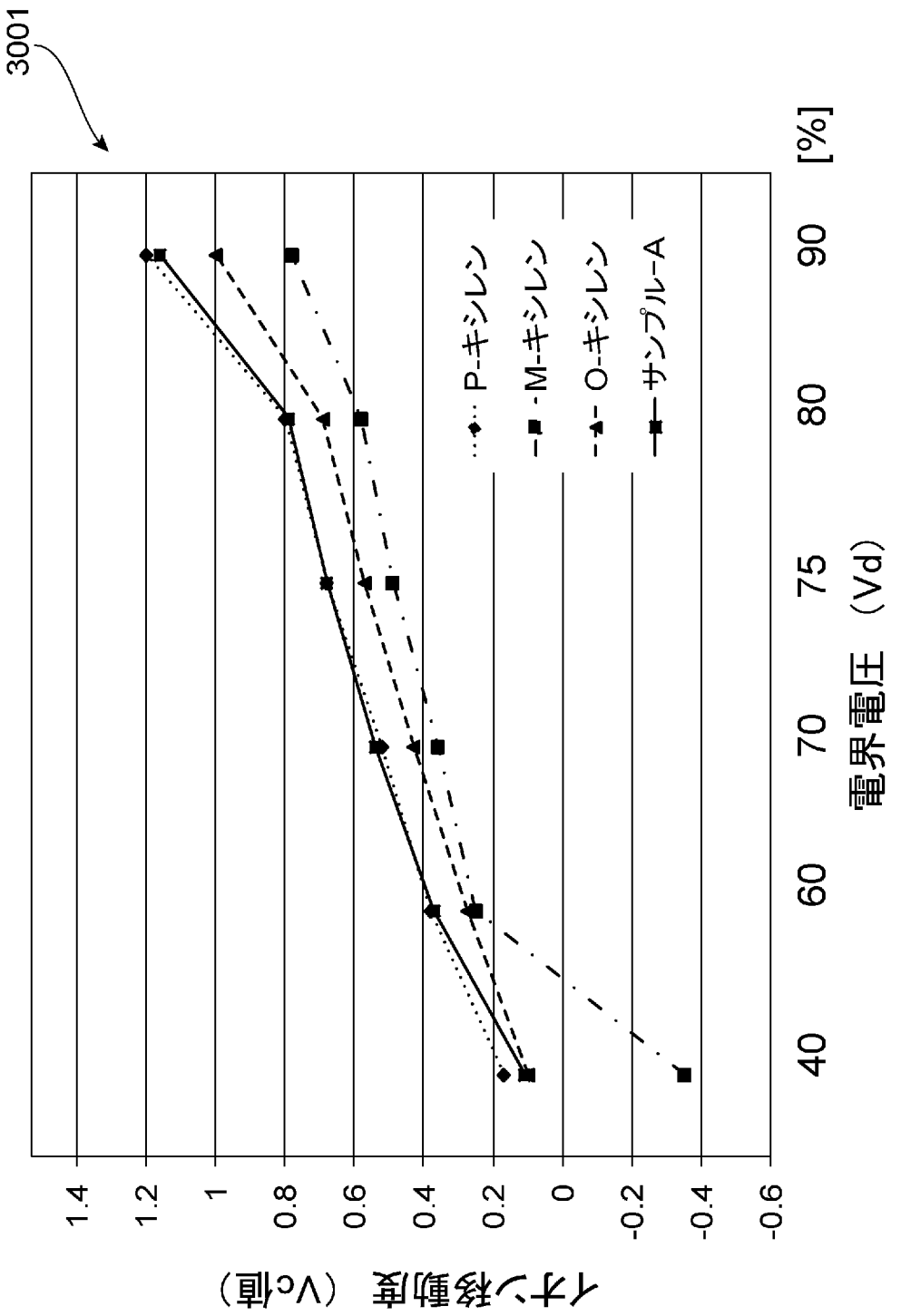
（b）

2902

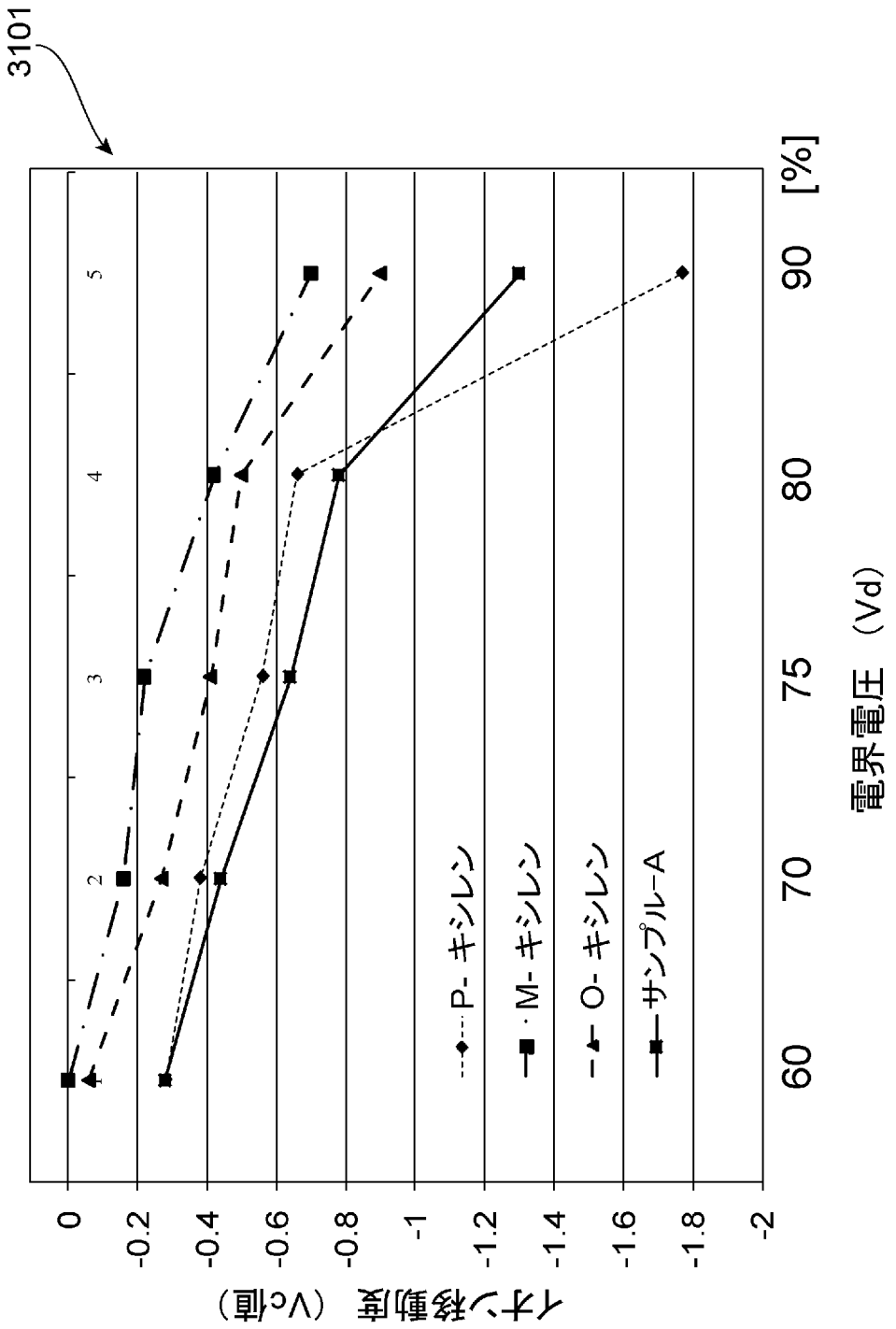
Vd[%]	P-キシレン	M-キシレン	O-キシレン	サンプル-A
60	-0.28	0	-0.06	-0.28
70	-0.38	-0.16	-0.27	-0.44
75	-0.56	-0.22	-0.41	-0.64
80	-0.66	-0.42	-0.5	-0.78
90	-1.77	-0.7	-0.9	-1.3

表2　負イオン移動度（Vc値）

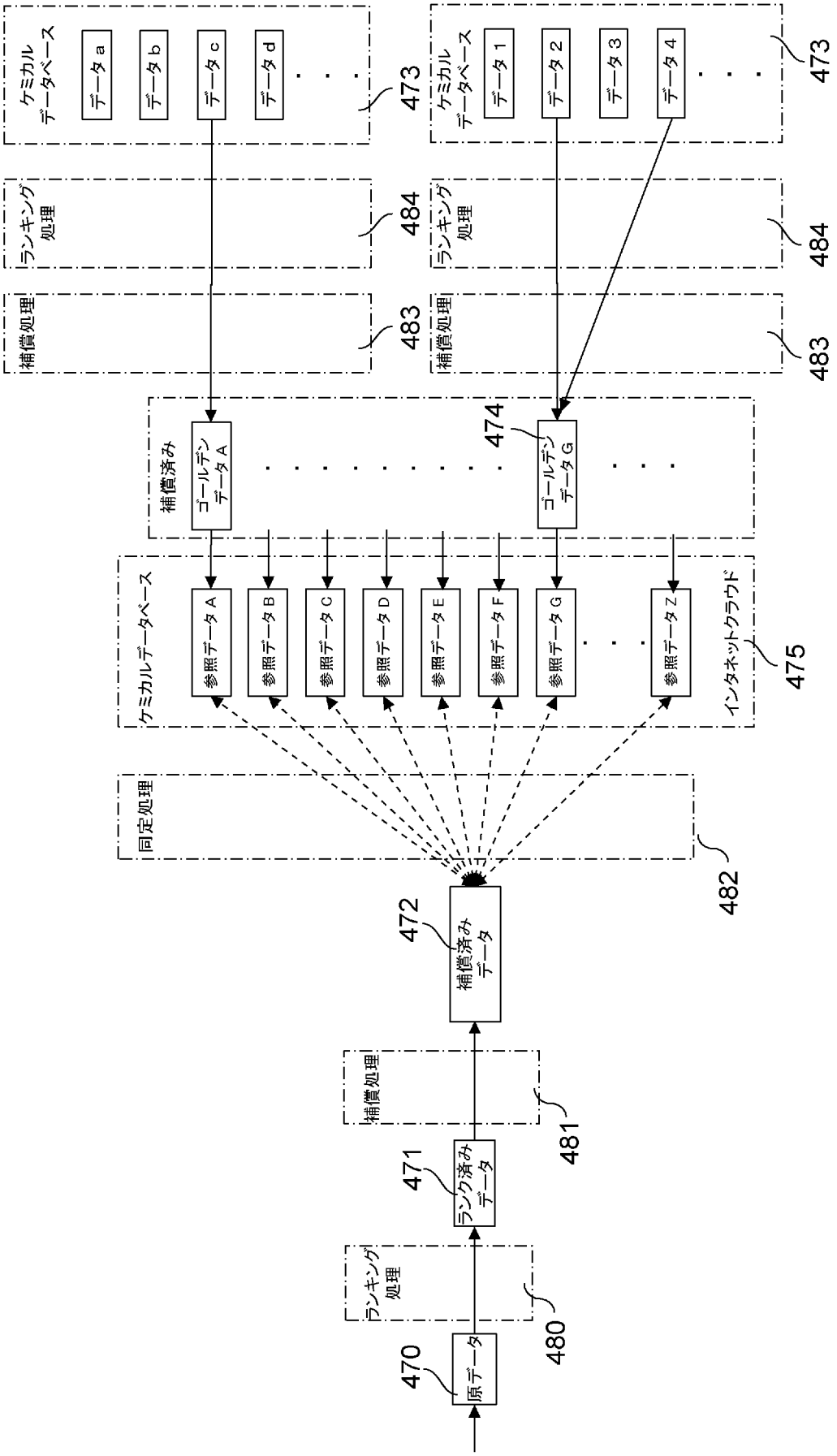
[図30]


3001
キャリア移動度（Vc値）
1.4
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
40
60
70
75
80
90
[%]
電界電圧（Vd）
P-キシレン
M-キシレン
O-キシレン
サンプル-A

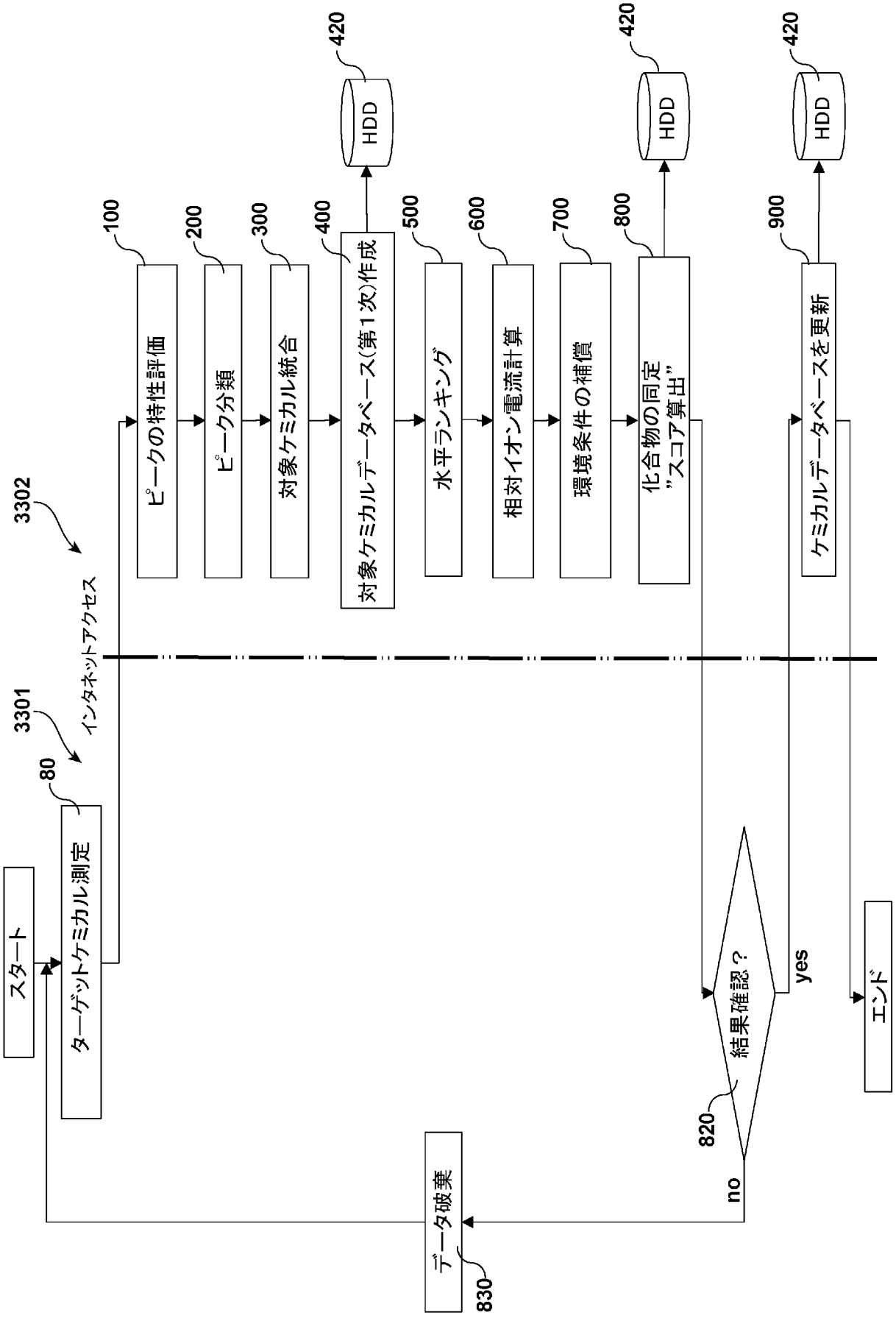
[図31]


3101
オフ移動度 (Vc値)
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-1.2
-1.4
-1.6
-1.8
-2
電界電圧 (Vd)
60
70
75
80
90
[%]
P- キシレン
M- キシレン
O- キシレン
サンプル-A

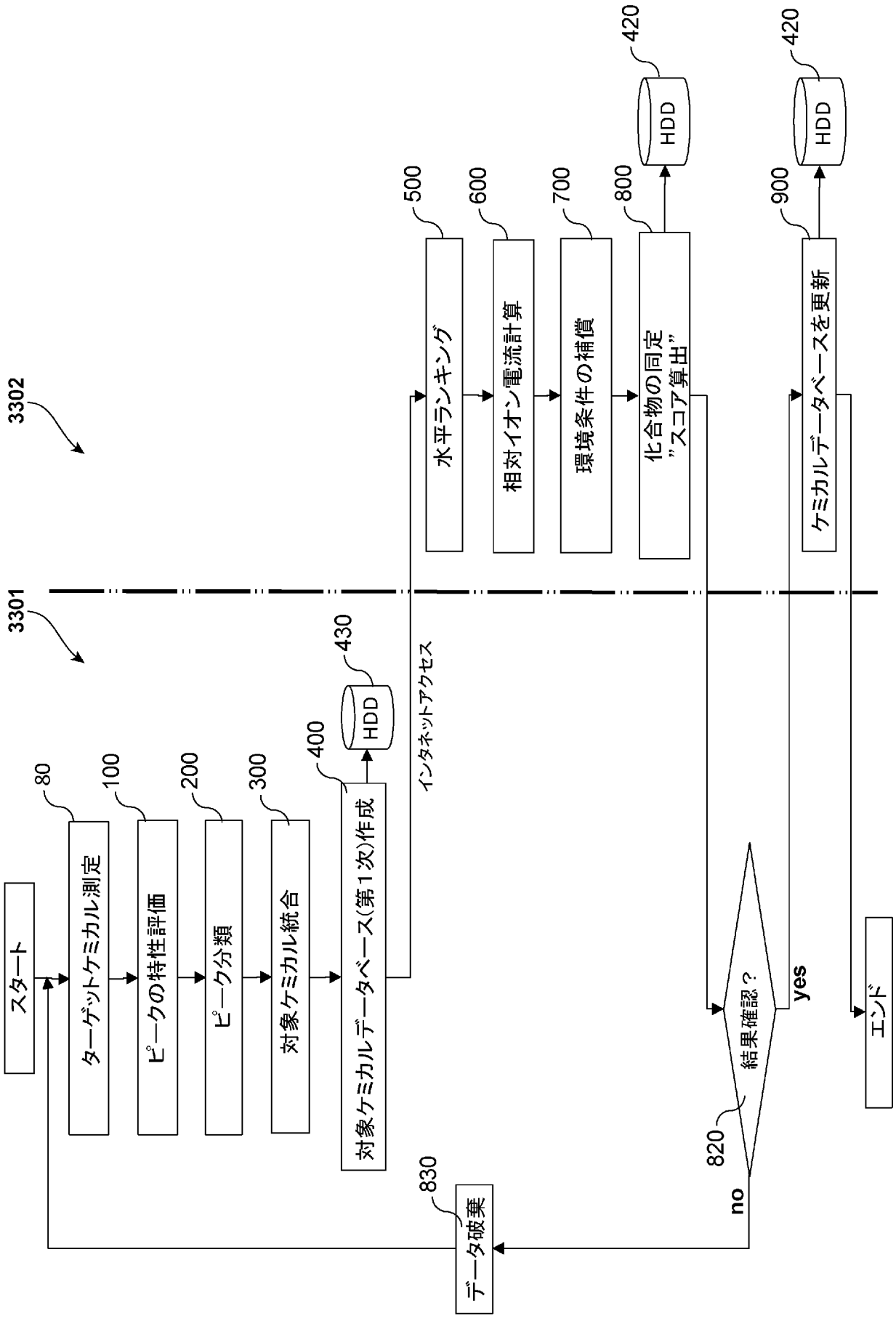
[図32]


ケミカル データベース
データ a
データ b
データ c
データ d
473
ケミカル データベース
データ 1
データ 2
データ 3
データ 4
473
ランキング 処理
484
ランキング 処理
484
補償処理
483
補償処理
483
補償済み
ゴールデン データ A
474
ゴールデン データ G
ケミカルデータベース
参照データ A
参照データ B
参照データ C
参照データ D
参照データ E
参照データ F
参照データ G
参照データ Z
インタネットクラウド
475
同定処理
482
472
補償済み データ
補償処理
481
471
ランク済み データ
ランキング 処理
480
470
原データ

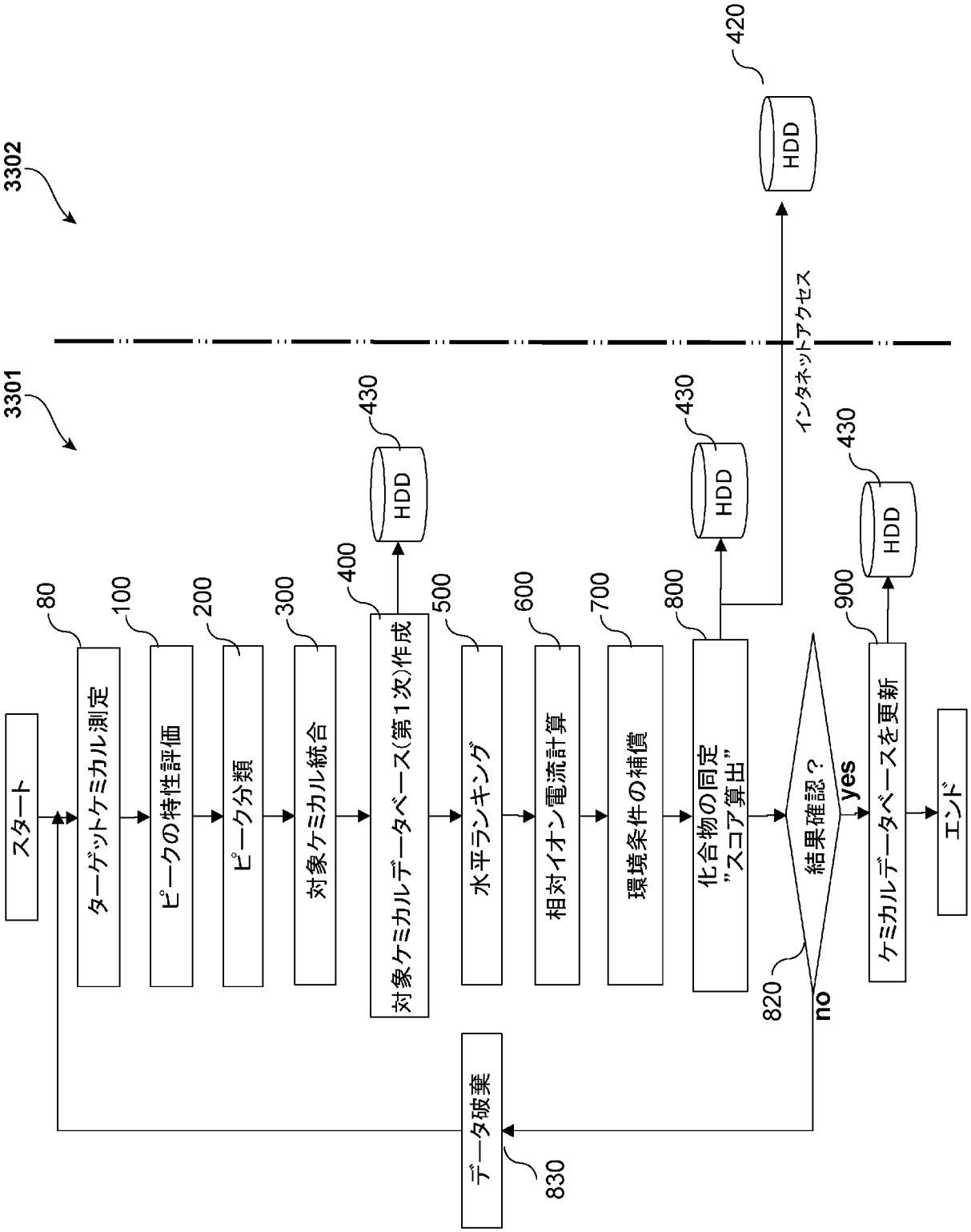
[図33]


スタート
ターゲットケミカル測定
80
3301
インタネットアクセス
3302
ピークの特性評価
100
ピーク分類
200
対象ケミカル統合
300
対象ケミカルデータベース(第1次)作成
400
HDD
420
水平ランキング
500
相対イオン電流計算
600
環境条件の補償
700
化合物の同定
"スコア算出"
800
HDD
420
ケミカルデータベースを更新
900
HDD
420
結果確認？
820
yes
no
データ破棄
830
エンド

[図34]


3302
3301
スタート
80
ターゲットケミカル測定
100
ピークの特性評価
200
ピーク分類
300
対象ケミカル統合
400
対象ケミカルデータベース(第1次)作成
430
HDD
インタネットアクセス
500
水平ランキング
600
相対イオン電流計算
700
環境条件の補償
800
化合物の同定
”スコア算出”
420
HDD
900
ケミカルデータベースを更新
420
HDD
820
結果確認？
yes
no
830
データ破棄
エンド

[図35]


3302
3301
420
HDD
インタネットアクセス
430
HDD
430
HDD
430
HDD
スタート
80
ターゲットケミカル測定
100
ピークの特性評価
200
ピーク分類
300
対象ケミカル統合
400
対象ケミカルデータベース(第1次)作成
500
水平ランキング
600
相対イオン電流計算
700
環境条件の補償
800
化合物の同定
"スコア算出"
820
結果確認？
no
yes
900
ケミカルデータベースを更新
エンド
データ破棄
830