

LabSolutions GC 软件智能功能在分析实验室中的应用

GC-254

摘要： 本文描述了 LabSolutions GC 软件内置的 [Clean Pilot] 自动清洁色谱柱、自动定时启停仪器和依据系统适应性结果启停批处理三项智能功能的实现流程。通过这些软件的智能化功能可以显著提升数据分析质量和提高实验室工作效率，尤其适合于在检测和质控实验室中应用。

关键词： LabSolutions GC 软件 Clean Pilot 定时启停 系统适应性

技术特点：

- ❖ 利用 [Clean Pilot] 色谱柱清洁功能，自动清洁老化色谱柱。
- ❖ 通过 LabSolutions GC 软件实现仪器定时启停，自动完成就绪准备工作。
- ❖ 利用 LabSolutions GC 软件自动计算系统适应性，依据判断结果自动启停批处理运行。

在未来实验室中，人工智能（Artificial Intelligence, AI）技术将会广泛应用于分析实验领域，以往需要由实验人员完成的工作部分可以由 AI 技术代替完成。因此，AI 技术可以大幅度减轻实验人员工作负担，使得实验人员将更多精力投入其他诸如研发工作中，进而大幅度提高实验室整体工作效率。

在迈向未来实验室的过程中，岛津 LabSolutions 系列软件也通过不断地版本更新引入了更多智能化的功能，迎接 AI 时代的到来。

本文中列举了 LabSolutions GC 软件三项典型的智能化功能（包括 [Clean Pilot] 色谱柱清洁、LabSolutions 自动定时启停仪器和依据系统适应性结果控制批处理启停），比较了应用 LabSolutions 智能化功能开展相关实验与传统模式下实验效率的差异，并在文中详细描述了如何通过参数设置以实现这些功能。

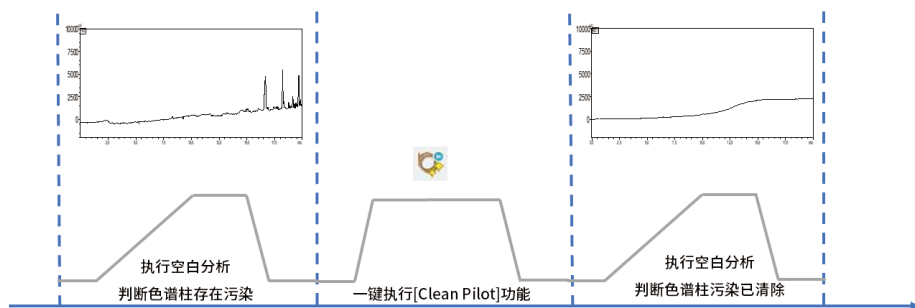
通过 LabSolutions 智能化的设计，可以减少不良数据的产生风险，进一步保证数据完整性的同时显著提高实验效率，尤其适合于检测和质控分析实验室。

■ [Clean Pilot] 功能自动清洁色谱柱

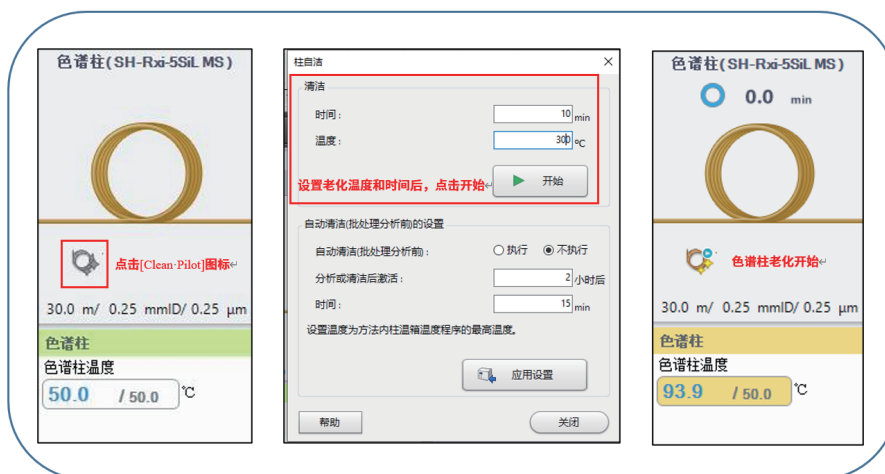
色谱峰型欠佳、鬼峰、基线噪声高、波动大是分析工作中的常见现象，这些现象经常是由色谱柱污染导致（包括固定相流失），因此需对色谱柱进行老化以清除污染。在 LabSolutions 智能功能中，软件内置 [Clean Pilot] 功能，可实现无需详细设置老化参数一键完成色谱柱老化或在批处理开始前自动完成色谱柱预防性老化两项模式，显著减少色谱柱污染风险及减轻操作人员工作量，大幅提高实验工作效率。

[Clean Pilot] 一键老化色谱柱

仪器经长时间待机或长期未使用的色谱柱重新安装至仪器后，流失的固定相会造成色谱柱污染，影响分析结果。在传统工作模式下，需由实验人员详细设置老化参数并执行，而启用 [Clean Pilot] 功能后，仅需设置老化温度和老化时间两项参数，即可执行色谱柱老化程序，具体流程如下：



[Clean Pilot] 功能设置如下：

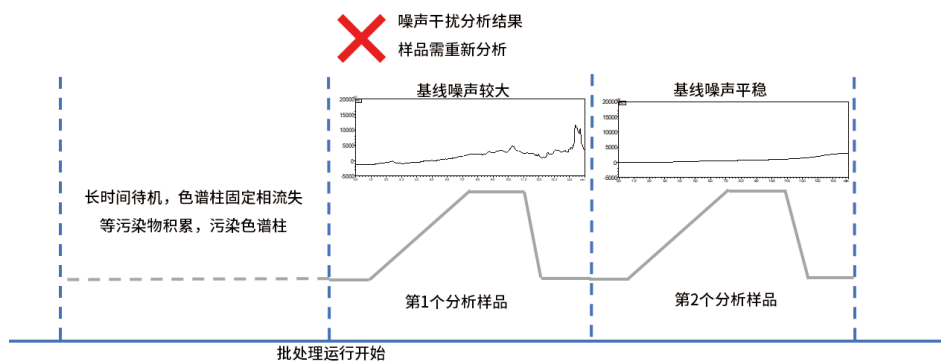


[Clean Pilot] 自动老化色谱柱

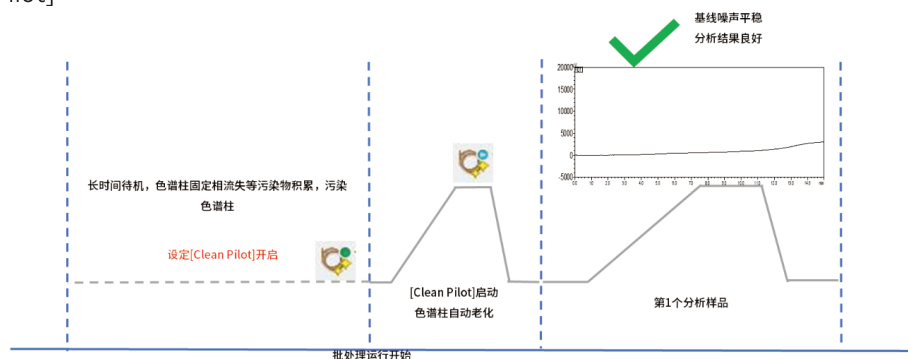
在传统工作模式下，对色谱柱的老化均发生在分析结果因污染导致不理想后，对色谱柱进行维护性老化以消除污染。而利用 [Clean Pilot] 功能可以实现分析开始前对色谱柱进行预防性老化，确保第一个分析样品即可获得理想结果。相较传统模式，可显著减少因污染产生不良分析结果的可能性，保证数据完整性。

具体实现方式为通过设置 [Clean Pilot] 功能中的待机时间阈值，当仪器待机时间超出阈值时，下次批处理分析开始前将自动执行色谱柱老化程序，具体流程如下：

传统工作模式：



启用 [Clean Pilot]



[Clean Pilot] 功能设置如下：

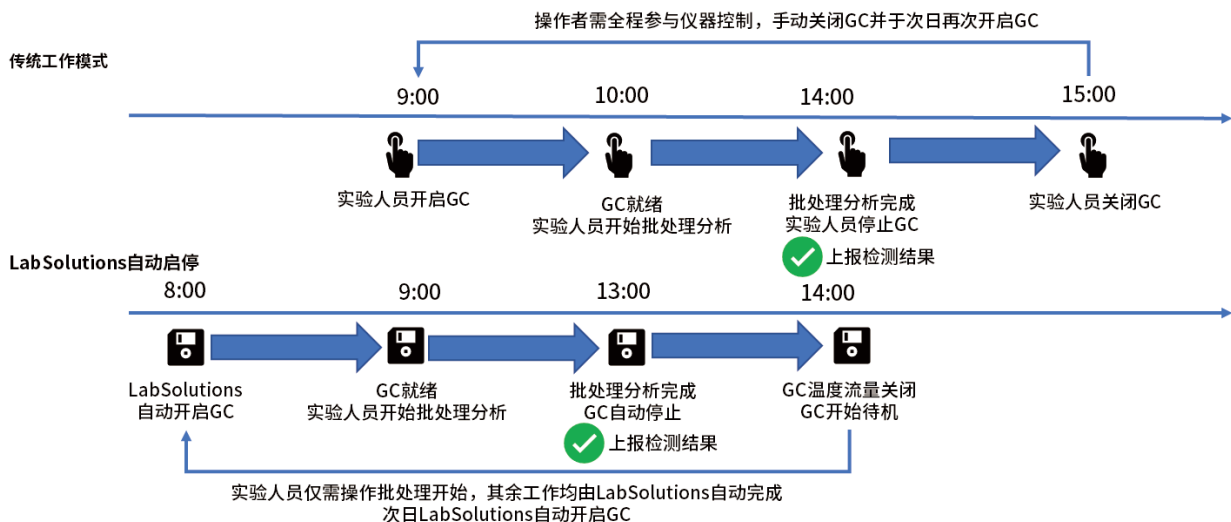


相较于传统模式，[Clean Pilot] 功能可免去繁杂的色谱柱老化参数设置，实现一键老化色谱柱，减轻实验人员工作量，同时实现对色谱柱预防性老化，极大减轻不良数据产生的可能性，尤其适用于对数据完整性有较高要求的实验室。

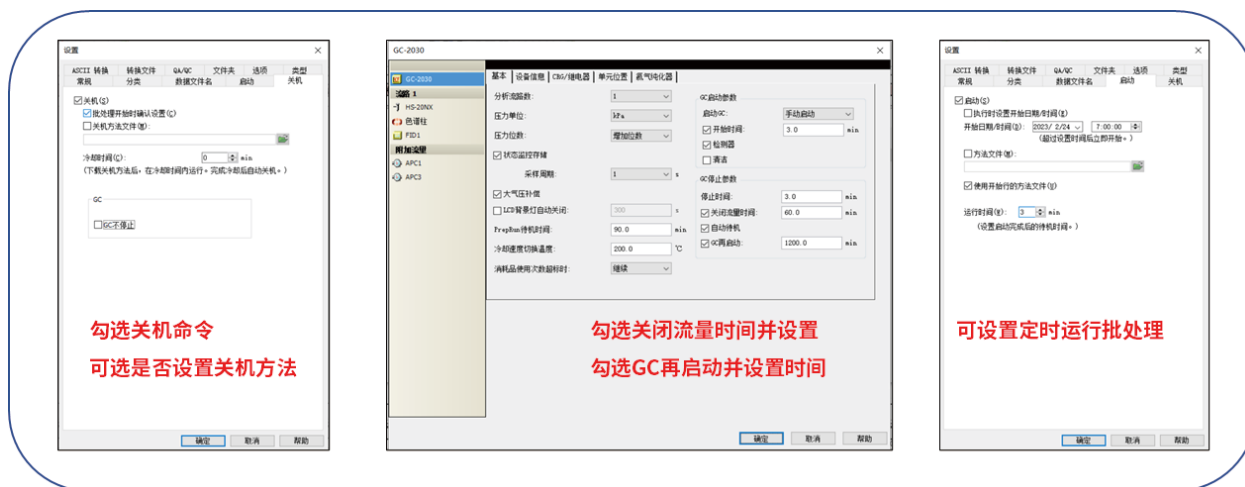
■ LabSolutions 设置仪器自动启停以节省载气并提高实验效率

在日常检测中，经常需要使用固定方法每日分析相同样品并尽快获取结果，确保后续工作及时开展。例如，在石化和制药行业，对每天生产过程中涉及到原料纯度进行检测，及时上报结果确保后续工艺进行。

在传统工作模式下，实验人员需每日开启仪器并待仪器就绪后开始分析，或为保证时效将仪器长期处于就绪准备状态，前者情形将影响实验室分析时效性，而后者情形会造成资源浪费。在 LabSolutions 软件智能功能中，可设置仪器每日自动开启时间、自动关机时间等参数。使仪器在实验人员开始工作时已处于就绪状态，分析完成后自动进入待机状态并于次日重新启动。具体流程如下：



自动启停参数设置如下：



步骤 1：在批处理设置关机选项卡中，勾选关机命令，根据需要选择是否调用关机降温方法及降温时间，如不调用关机方法，仪器将进入自然降温状态。

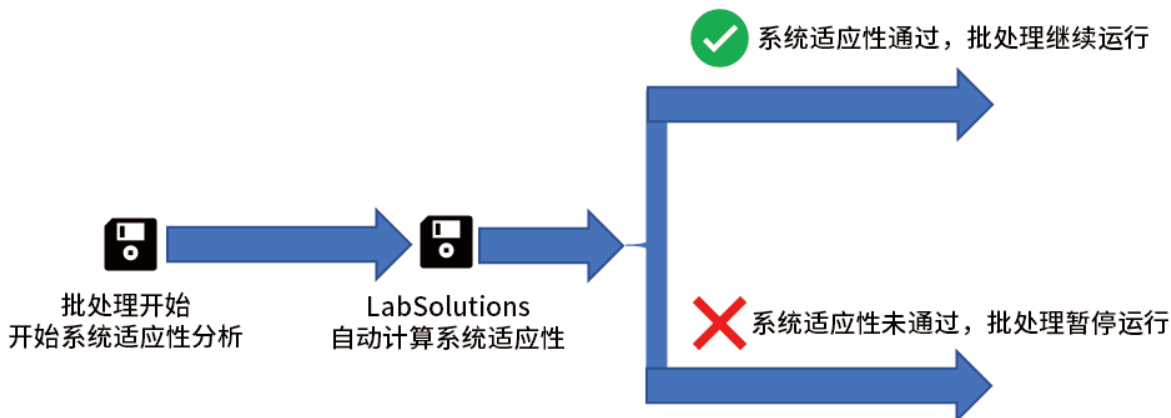
步骤 2：系统配置中，勾选关闭流量时间 / 自动待机 / GC 再启动并设置相关参数，即可实现在批处理分析完成后仪器自动待机并于设定时间到达后再次自动。

步骤 3（可选）：在批处理设置启动选项卡中，可设置批处理自动启动时间，待仪器启动完成并且到达批处理自动启动时间后，批处理将自动开始运行，利用此功能可提前开始分析校准曲线样品，待样品制备完成后追加至批处理表中，进一步提前获取样品结果时间。

通过 LabSolutions 自动启停功能，仅数据处理阶段需由实验人员完成，仪器启动及停止均可由软件自动定时完成，进而减轻实验人员工作负担。此外，通过设置仪器启动时间及批处理自动运行时间，可实现样品制备期间仪器已开始分析前序数据，显著提早分析结果取得时间，尤其适用于化工生产等行业。

■ LabSolutions 自动计算系统适应性启停批处理

在 GxP 体系中，每批次样品分析前均需考察仪器系统适应性，确定系统适应性满足质控要求后方可开始样品分析工作。在传统分析模式下，需操作人员判断系统适应性通过后，再确定批处理能否继续运行，而在 LabSolutions 智能分析模式下，可在批处理表中设置系统适应性考核标准，依据判断结果自动启动或停止批处理分析，实现流程如下：



系统适应性参数设置如下：



数据文件	级别号	系统适应性	措施
适应性-1110-1.gcd	0	开始	
适应性-1110-2.gcd	0	分析	
适应性-1110-3.gcd	0	分析	
适应性-1110-4.gcd	0	分析	
适应性-1110-5.gcd	0	分析	
适应性-1110-6.gcd	0	结束	系统适应
STD-1ug.gcd	1	无	
STD-5ug.gcd	2	无	
STD-10ug.gcd	3	无	
STD-20ug.gcd	4	无	
STD-50ug.gcd	5	无	
sample 1-1	0	无	
sample 1-2	0	无	
sample 2-1	0	无	
sample 2-2	0	无	

批处理措施				
#	测试	结果	措施	参数
1	系统适应性	通过	Goto	7
2	系统适应性	失败	暂停	
3				
4		失败		
5		失败		
6		失败		
7		失败		
8		失败		

在方法 - 系统适应性 - 选项中，设置需要考察的参数项目和限值（如峰面积，限值为 $RSD \leq 3\%$ ），在批处理表中增加系统适应性列和措施列，设置系统适用性计算开始行和结束行，并在结束行的措施列中设置适应性未通过暂停批处理，适应性通过运行批处理下一行，通过此设置即可实现根据系统适应性结果启停批处理功能，并可在数据文件所在文件夹下查看系统适用性结果报告。在 GxP 体系中，通过此功能可以显著减小不良数据发生率同时减轻实验人员工作负担。

■ 结论

岛津 LabSolutions 软件引入了许多智能化的功能，诸如检测或质控实验中，通过 [Clean Pilot] 色谱柱预防性老化和系统适应性自动计算以避免不良数据产生，利用仪器自动启停实现高效分析与节约成本并存等等。利用 LabSolutions 智能功能将显著提高实验室数据分析质量，提高实验室整体工作效率，降低实验室运行成本，可在如 GxP 体系实验室中得到广泛应用。

岛津应用云

