

# 基于“AI”算法的 Peakintelligence™模块 助力多 MRM 通道农药残留数据自动化处理

## LCMSMS-894

**摘要：**本文介绍了基于“AI”算法的 Peakintelligence™数据解析模块的特点及其在多 MRM 通道农药残留数据自动化处理中的应用。通过加载人工智能和机器学习的数据处理算法可以有效避免积分异常，在遇到色谱峰前延、拖尾、响应低等复杂多变情况时，也可获得科学合理的积分结果。Peakintelligence™数据解析模块可以简化数据处理流程，保证检测结果准确，提高实验室分析效率。

**关键词：**人工智能 积分 Peakintelligence 农残

### 技术特点：

- ❖ 利用全球首个 AI 积分算法 Peakintelligence™数据解析模块处理含有多 MRM 通道农残数据，让工作流程变得简单智能。
- ❖ Peakintelligence™模块可以有效解决色谱峰前延、拖尾、响应低等复杂多变情况下积分结果不准确的问题，提高实验室数据质量。

Peakintelligence™是岛津公司推出的全球首款“AI”积分处理算法数据解析模块，该模块搭载了人工智能 (AI) 和机器学习模型，经过专业色谱分析人员熟练处理后的 14,000 多个数据训练，相比传统的数据处理机，可以实现自动积分并避免由于积分参数设置不合理导致的积分异常。

当使用 LC-MS/MS 仪器进行多农药残留分析时，我们常常一针进样同时分析几十甚至几百种农药，每个数据涉及几十甚至几百个 MRM 通道，数

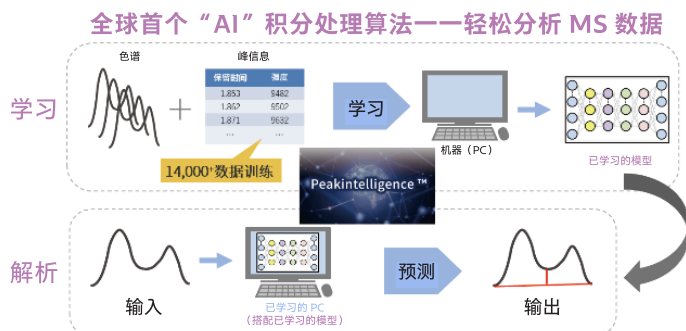
据解析将是一项大工程。

Peakintelligence™数据解析模块软件操作界面简单，与传统数据处理机的积分方式相比，无需设置半峰宽、斜率等积分参数，无需耗费时间进行参数调整，即可得到令人满意的积分结果，大大简化了人员操作；在遇到色谱峰前延、拖尾、响应低等复杂多变情况时，操作人员无需丰富的经验，也可获得科学合理的积分结果。基于“AI”算法的 Peakintelligence™数据解析模块能够极大地提升分析工作者的工作效率。

## ■ 关于 Peakintelligence™

### 1.1 仪器

Peakintelligence™是岛津基于对未来“智能分析”理念推出的一款全新的数据处理算法模块，它打破了对传统 MS 数据积分处理的刻板印象，化繁为简，重新定义“自动积分”，将数据后处理的准确性和效率大幅提升。



处理算法选择即可!

积分

算法(A): 数据处理机

自动(面积)  自动(高度)  详细

最大峰数(P): 5

半峰宽(W): 7 sec

斜率(S): 3400 /min

漂移(D): 250 /min

突变时间(T): 1000 min

最小面积/高度: 600 counts

计算依据:  面积  高度

平滑

方法(E): 标准

平滑次数(C): 1

平滑宽度(I): 1 sec

积分

算法(A): Peakintelligence\_Ver2

型号(M): LCMS\_Model\_V1\_Horizontal

AI 算法现已更新至2代

无参数

平滑

方法(E): 标准

平滑次数(C): 1

平滑宽度(I): 1 sec

基线校正

方法: 基线跟随度: 1

传统积分



Peakintelligence



无需参数设定, 软件自动进行准确的峰积分!

消除因操作人员熟练程度与分析经验等的差异而产生的偏差

## ■ 适用机型与软件

仪器装置方面, 可搭配岛津全系列液相色谱串联质谱系统, 如: LCMS-8040、LCMS-8045、LCMS-8050、LCMS-8060NX、LCMS-2050 等, 以 LCMS-8050 参考配置为例:

系统控制器 : CBM-20A	脱气机 : DGU-20A <sub>5R</sub>
输液泵 : LC-30AD	自动进样器 : SIL-30AC
柱温箱 : CTO-30A	质谱仪 : LCMS-8050

软件配置方面, 可搭配岛津色谱工作站 Labsolutions Ver.5.113 及以上版本使用



## ■ 结果与讨论

### 3.1 Peakintelligence™自动积分应用于响应低的色谱峰

在多农残检测时, 定量限附近的色谱峰响应往往很低, 这个时候采用传统积分方式, 积分结果是不稳定的。如图 1a 蓝框标识的色谱峰。

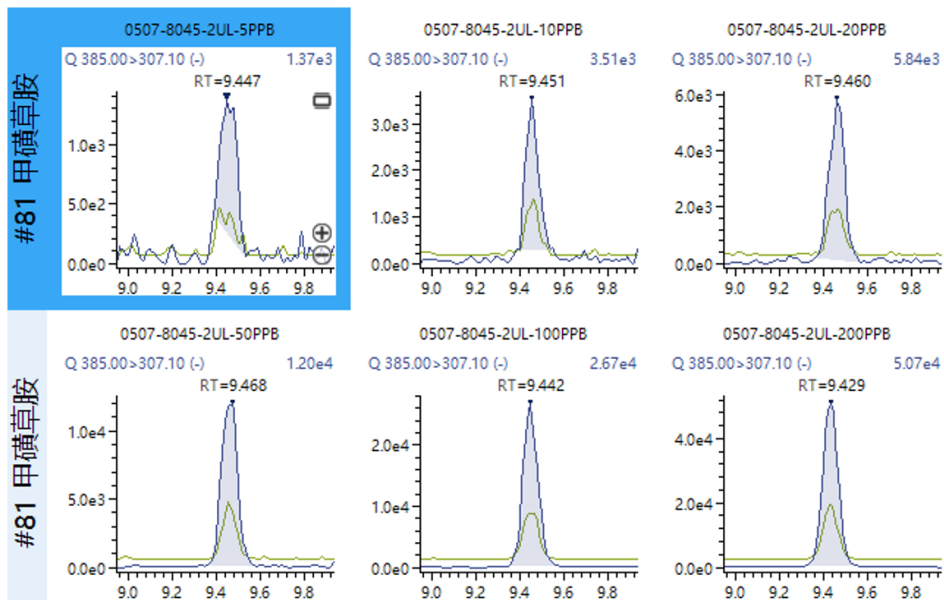


图 1a 传统积分方式下甲磺草胺积分结果

当积分方式切换为 Peakintelligence™自动积分后，积分结果变得科学合理，如图 1b 蓝框标识的色谱峰。与此同时，对于高浓度点的数据，采用任一积分方式均能取得满意的结果。

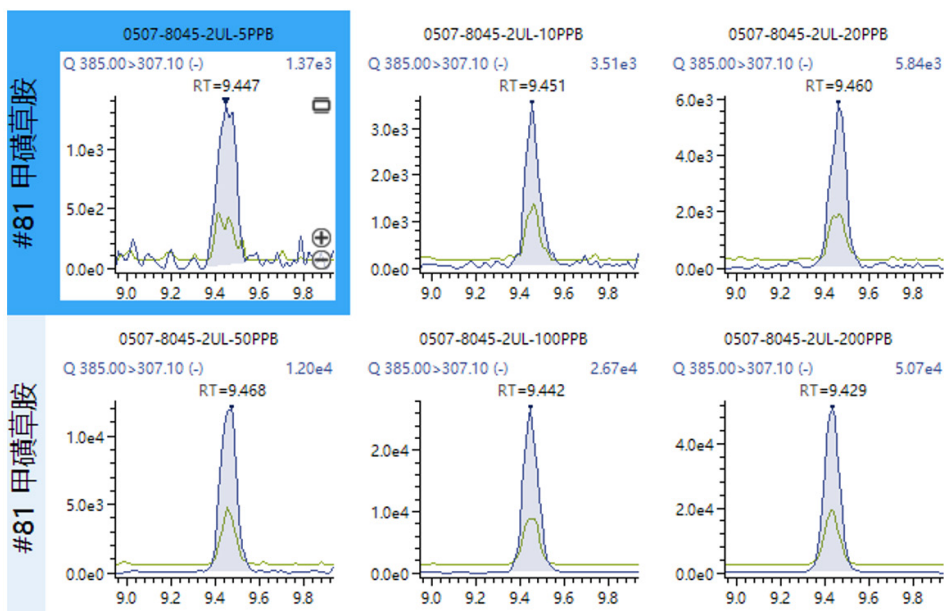


图 1b Peakintelligence™积分方式下甲磺草胺积分结果

### 3.2 Peakintelligence™自动积分应用于峰形差的色谱峰

在多农残检测时，我们常常一针进样同时分析几十甚至几百种农药，由于化合物性质差异较大，在选定流动相条件下，个别化合物峰形可能不佳。采用传统积分方式时，积分结果不理想（如图 2a 所示），操作人员需要凭借经验，不断尝试“半峰宽”值和“斜率”值等，以取得合理的积分结果；不同 MRM 通道可能需要分别设置不同的积分参数，才能得到合理的结果，操作繁琐耗时。

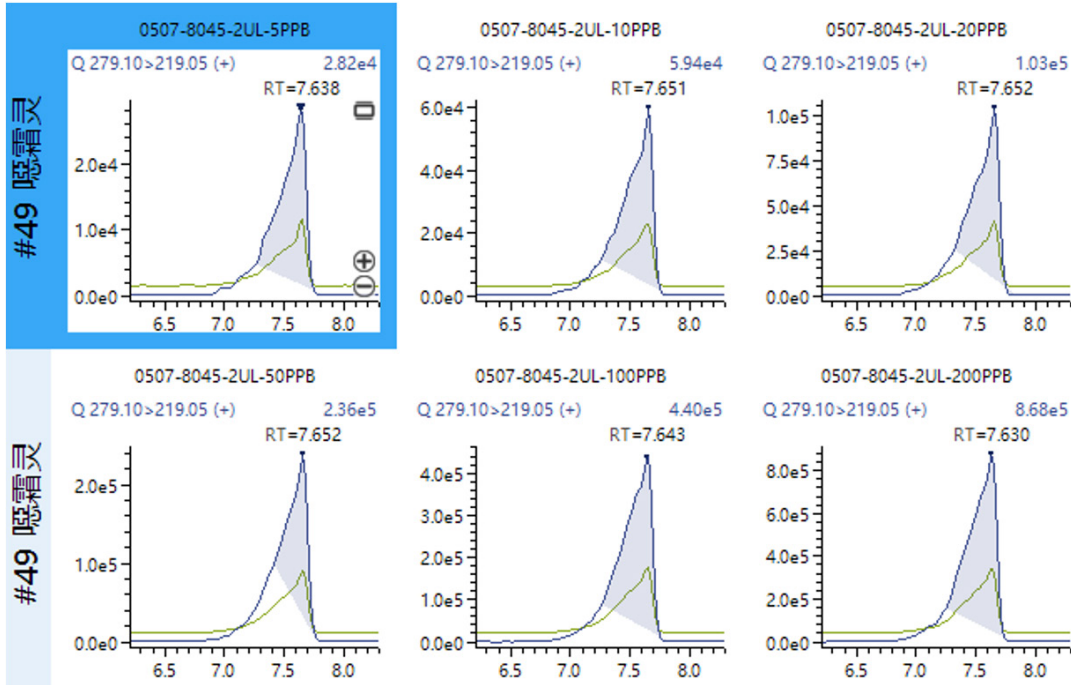


图 2a 传统积分方式下噶霜灵积分结果

当切换为 Peakintelligence™积分方式时，无需设置任何积分参数，软件自动获得每个MRM通道的科学合理的积分结果（如图 2b 所示）。在此情景下，对于高、中、低各浓度点，Peakintelligence™积分结果均优于传统积分方式。

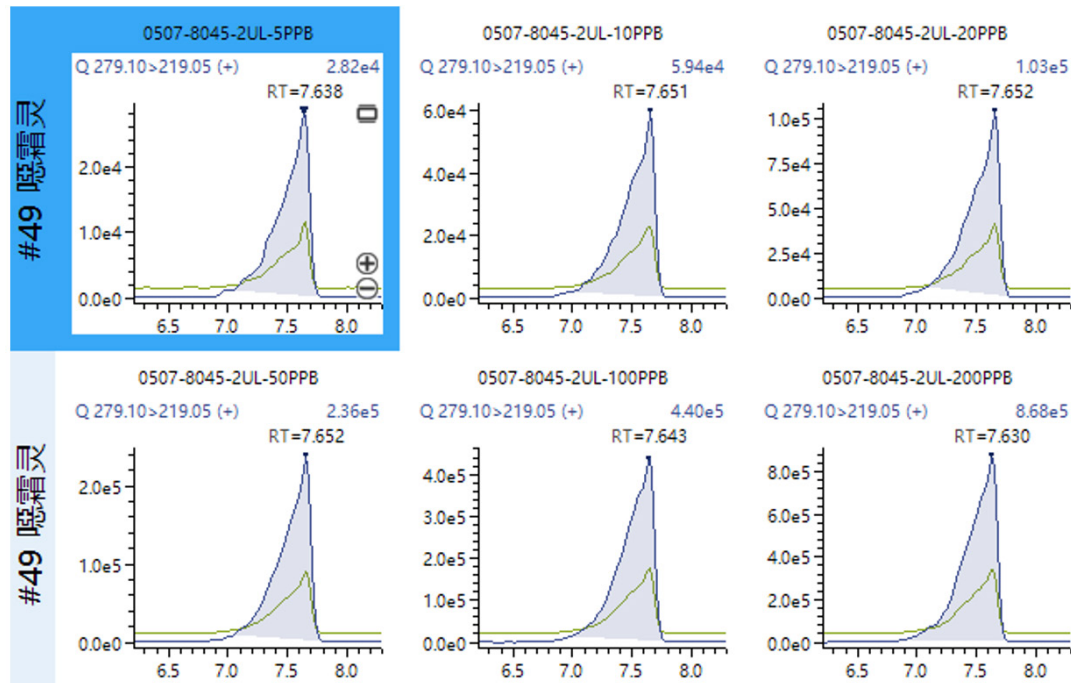


图 2b Peakintelligence™积分方式下噶霜灵积分结果

## ■ 结论

Peakintelligence™是基于人工智能 (AI) 的峰积分智能算法, 利用 AI 实现“无参数、高精度”, 能精准把握各类复杂图谱的色谱积分。当我们在多农残检测时的数据解析工作中, 可以使用 Peakintelligence™功能, 简化数据处理流程, 保证检测结果准确, 提高实验室分析效率。

岛津应用云

