

Technical Report

基于 AI 算法的 LC 方法开发自动梯度优化

Shinichi Fujisaki¹

摘要:

在方法开发过程中，梯度优化不仅需要创建大量的分析计划，还需要人工干预，以便根据分析结果探索最佳条件。LabSolutions MD 是一款支持方法开发的专用软件，具有独特的 AI 算法，可自动优化梯度条件，并通过设置分离度标准，自动搜索符合标准的梯度条件。本文介绍了自动优化梯度功能在儿茶素、茶黄素和没食子酸（15 种化合物）同时分析中的应用。

关键词：方法开发，梯度优化，AI，自动，LabSolutions MD

1. 背景

传统的 LC 方法开发过程从“准备”开始，包括配制流动相、安装色谱柱、创建分析批表，然后运行分析。然后对数据结果进行分析判断，以便为后续的改进进行“准备”。方法开发就是通过一遍又一遍地重复这些过程来筛选理想条件，但除了重复创建分析计划所需的大量时间外，基于数据的分析判断还需要色谱方面的专业知识。换言之，传统的方法开发需要“人工干预”。因此，将方法开发过程自动化，减少人工干预，对于提高整体工作效率是非常有帮助的。LabSolutions MD 拥有独特的 AI 算法，通过重复“AI 改进梯度条件”和“改进条件的校正分析”的过程来自动优化梯度条件。这使得任何人都可以在没有“人工干预”的情况下探索梯度条件，只需进行流动相和色谱柱的初始制备，并确认最终结果。

2. LabSolutions MD 自动梯度条件优化

图 1 显示了梯度优化的正常工作流程和 LabSolutions MD 使用 AI 算法的自动化工作流程的比较。自动梯度条件优化的工作流程包括以下三个阶段。

- 1) 初始设置（图 1 中的①）
- 2) 利用 AI 探索梯度条件（图 1 中的②）
- 3) 确定最佳条件（图 1 中的③）

在“初始设置”阶段，设置几条梯度曲线和分离度标准（图 2 和 3）。在“利用 AI 探索梯度条件”阶段，LabSolutions MD 根据初始分析结果来探索梯度条件，以提供更好的分离度（图 1 ②中的条件搜索和校正分析）。此过程重复进行，直到满足分离度标准为止。在“确定最佳条件”阶段，检查 AI 建议的梯度条件是否充分满足标准。

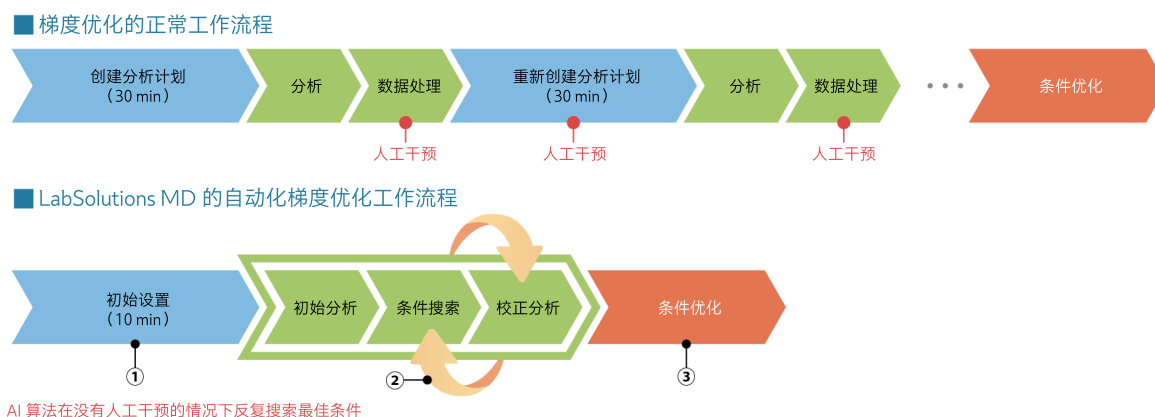


图 1 正常工作流程和 LabSolutions MD 自动化工作流程的比较

使用 LabSolutions MD 自动优化梯度条件的优势如下所示。

- 无需“人工干预”，显著提高梯度优化效率。
- 任何人，无论色谱经验如何，都可以利用 LabSolutions MD 的 AI 算法优化梯度条件。

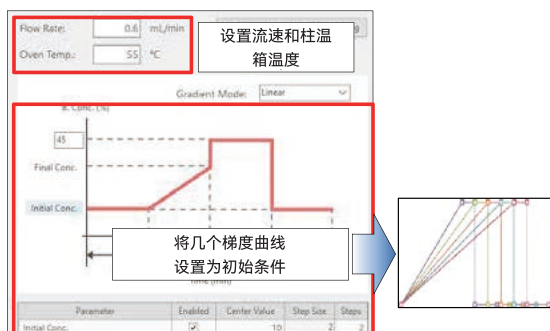


图2 梯度优化的初始设置

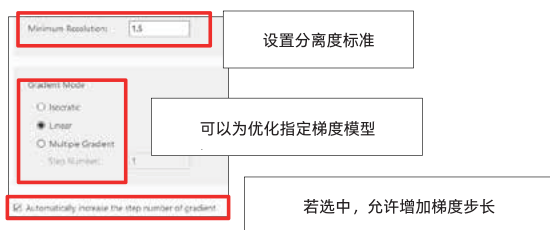


图3 分离度标准设置

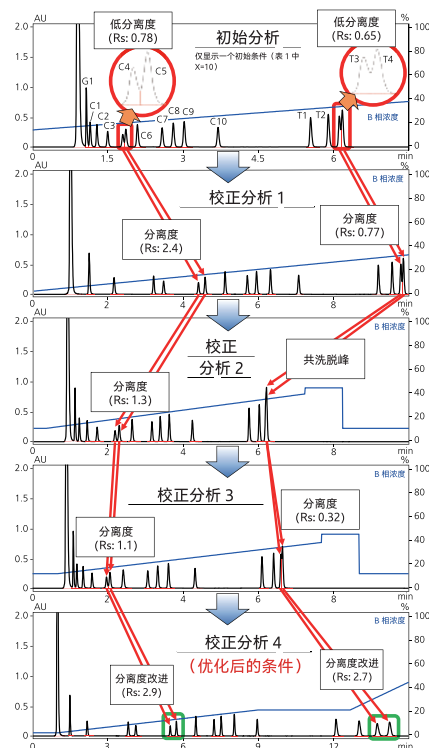


图4 梯度条件的自动优化
(蓝线表示梯度曲线)

3. 食品中的功能性成分的应用

图4显示了用于同时分析包括儿茶素、茶黄素和没食子酸(15种化合物)在内的食品中的功能性成分的梯度优化的实例。(分析条件,见表1。)

表1 分析条件

系统: Nexera™ X3	
样品: 儿茶素、茶黄素和没食子酸 (15种化合物)	
C1) 没食子儿茶素	C8) 表儿茶素没食子酸酯
C2) 表没食子儿茶素	C9) 儿茶素没食子酸酯
C3) 儿茶素	C10) 表儿茶素 3-O- (3"-O- 甲基) 没食子酸酯
C4) 表儿茶素	T1) 茶黄素
C5) 表没食子儿茶素没食子酸酯	T2) 茶黄素 3- 没食子酸酯
C6) 没食子儿茶素没食子酸酯	T3) 茶黄素 3'- 没食子酸酯
C7) 表没食子儿茶素 3- (3"-O- 甲基) 没食子酸酯	T4) 茶黄素 3,3'- 双没食子酸酯
	G1) 没食子酸
流动相:	
泵 A: 0.2% 磷酸水溶液	
泵 B: 乙腈	
色谱柱: Shim-pack™ GISS C18 (100 mm × 3.0 mm I.D., 1.9 μm) [†]	
[†] 227-30049-02 (SGLC 部件号)	
初始设置:	
B 相浓度:	: 15% (0 min) → 45% (X min) → 15% (X-X+5 min)
	*X = 6、8、10、12、14 (5种)
柱温:	: 55°C
流速:	: 0.6 mL/min
进样量:	: 5.0 μL
检测器:	: Max plot 240-280 nm (SPD-M40, UHPLC 流通池)
最低分离度标准: 1.5	
优化的梯度模型: 线性	

初始分析的结果显示峰 C4 和 C5 之间以及峰 T3 和 T4 之间的分离度不足 (如图 4 顶部的红框所示)。然而,通过使用 AI 算法重复执行校正分析,最终发现了满足标准(最低分离度为 1.5)的梯度条件(如图 4 底部的绿框所示)。在此例中,通过在 9 分钟后应用等度洗脱成功分离 T3 和 T4。通常情况下,探索这种梯度条件需要人工干预数据分析和色谱知识。相比之下, LabSolutions MD 的 AI 算法使任何人都可以轻松找到满足指定标准的梯度条件,而无需依赖直觉或经验。

4. 总结

在优化方法开发的梯度条件时,通常每次都需要人工干预来创建分析计划和数据分析。因此,亟需梯度条件的自动优化。LabSolutions MD 结合了独特的 AI 算法,可自动探索满足分离度标准的梯度条件,有望显著提高方法开发的效率。

岛津应用云



LabSolutions、Nexera 和 Shim-pack 是岛津制作所或其附属公司在日本和 / 或其他国家 / 地区的商标。



岛津企业管理(中国)有限公司
岛津(香港)有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话: 800-810-0439
400-650-0439

免责声明:

* 本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售;
* 本资料中的所有信息仅供参考,不予任何保证。
如有变动,恕不另行通知。

第一版发行日: 2023 年 10 月