

基于“AI”算法的 Peakintelligence™ 模块助力临床质谱数据自动化处理

LCMSMS-791

摘要：液相串联质谱联用技术在医学检验中的应用越来越广泛，质谱数据后处理的准确性直接影响到检测结果的质量，本文介绍了基于“AI”算法的 Peakintelligence™ 数据解析模块的特点及其在临床质谱数据后处理中的应用优势，包括血清中脂溶性维生素检测、儿茶酚胺类化合物检测等易受内源性基质干扰影响的项目。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异常积分曲线出现的概率，简化数据后处理流程，提高实验室分析效率并保证检测结果更准确。

关键词：人工智能 AI 算法 Peakintelligence 临床质谱

技术特点：

- ❖ 利用全球首个 AI 积分算法 Peakintelligence™ 数据解析模块处理复杂的质谱数据，打破传统质谱数据后处理复杂参数设置的刻板印象，让 LC-MS/MS 分析更智能化。
- ❖ 带有“AI”算法的 Peakintelligence™ 模块可以有效解决异常色谱图积分结果不准确的问题，提高实验室数据质量。

质谱技术已成为化学分析领域和生命科学领域非常有效的分析工具，在医学检验领域，液相串联质谱法相比于传统方法具有高特异性、高灵敏度、分析通量的丰富性，以及对复杂生物基质分析的高耐受性等特点。

随着质谱技术的深入应用与经验的积累，在面对复杂基质的生物样本时，仍然会受到基质效应影响、结构类似物干扰、电荷竞争带来的离子信号不稳定性等问题，使得色谱峰型出现异常。

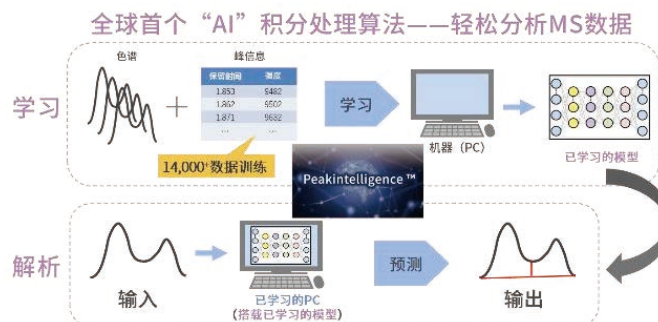
Peakintelligence™ 是岛津公司最新推出的全球首款“AI”积分处理算法数据解析模块，该模块搭载了

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，可以避免色谱积分异常问题。

当使用 Peakintelligence™ 数据解析模块对血清中脂溶性维生素检测项目、儿茶酚胺类化合物检测项目和免疫抑制剂 TDM 等项目进行数据后处理时发现：与传统数据处理机的积分结果相比，Peakintelligence™ 的积分参数设置简洁易操作，对异常峰型的色谱积分处理更加合理，从而可以大大减少不必要的人工核对和修正工作。

■ 关于 Peakintelligence™

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

变容时间(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:

传统积分



Peakintelligence



无需参数设定，软件自动进行准确的峰积分!

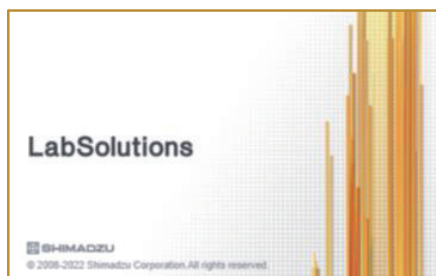
消除因操作人员熟练程度与分析经验等的差异而产生的偏差

■ 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-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 _{5R}
输液泵：LC-30AD	自动进样器：SIL-20AC _{MP}
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

基质干扰太强，需要手动积分？试试 Peakintelligence™自动积分

血液中儿茶酚胺类激素的检测对质谱仪的检测灵敏度提出了挑战，其分子量小、极性高、往往低浓度点数据易受基质干扰影响，传统的积分仪难以应对复杂多变的色谱图变化，出现积分偏移、多积分或少积分等问题。

如图 1 所示，“706”至“710”为具有相同肾上腺素含量的血清样品，经传统积分仪处理发现“707”、“708”和“709”样品含量异常，核对色谱峰后发现三者积分均出现偏差，切换 Peakintelligence™模块处理后，三者积分结果回归理论值，其中“708”的错误识别峰被纠正，实际峰面积极低，与其内标峰的低值相呼应，提示可能为前处理失误导致。

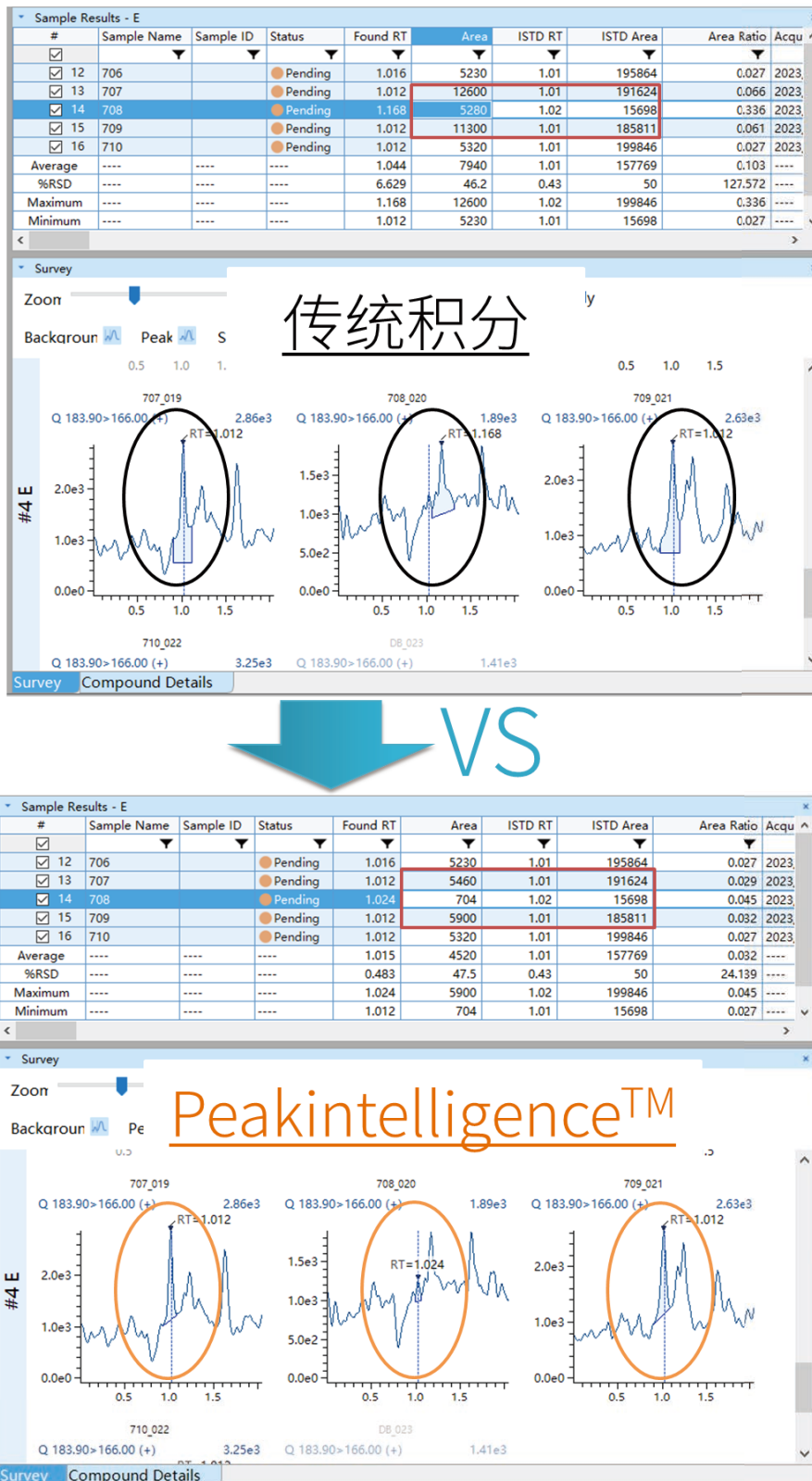


图1 Peakintelligence™对血清样品中肾上腺素色谱积分的优化

标准曲线低点积分总是不准？——Peakintelligence™悄悄帮您修复

校准曲线是未知样本定量的基础，而低浓度校准点易受色谱条件稳定性、样品基质干扰等因素出现峰型扰动并影响色谱积分行为。

如图 2 所示，传统积分会将干扰峰与维生素 K1 峰合并积分，使得峰面积大于真实值，最终影响校准曲线相关性，R 值 <0.995；切换 Peakintelligence™处理后，维生素 K1 峰与干扰峰采用基线分离准则积分，峰面积接近真实值，校准曲线拟合相关系数 R 值 >0.995。

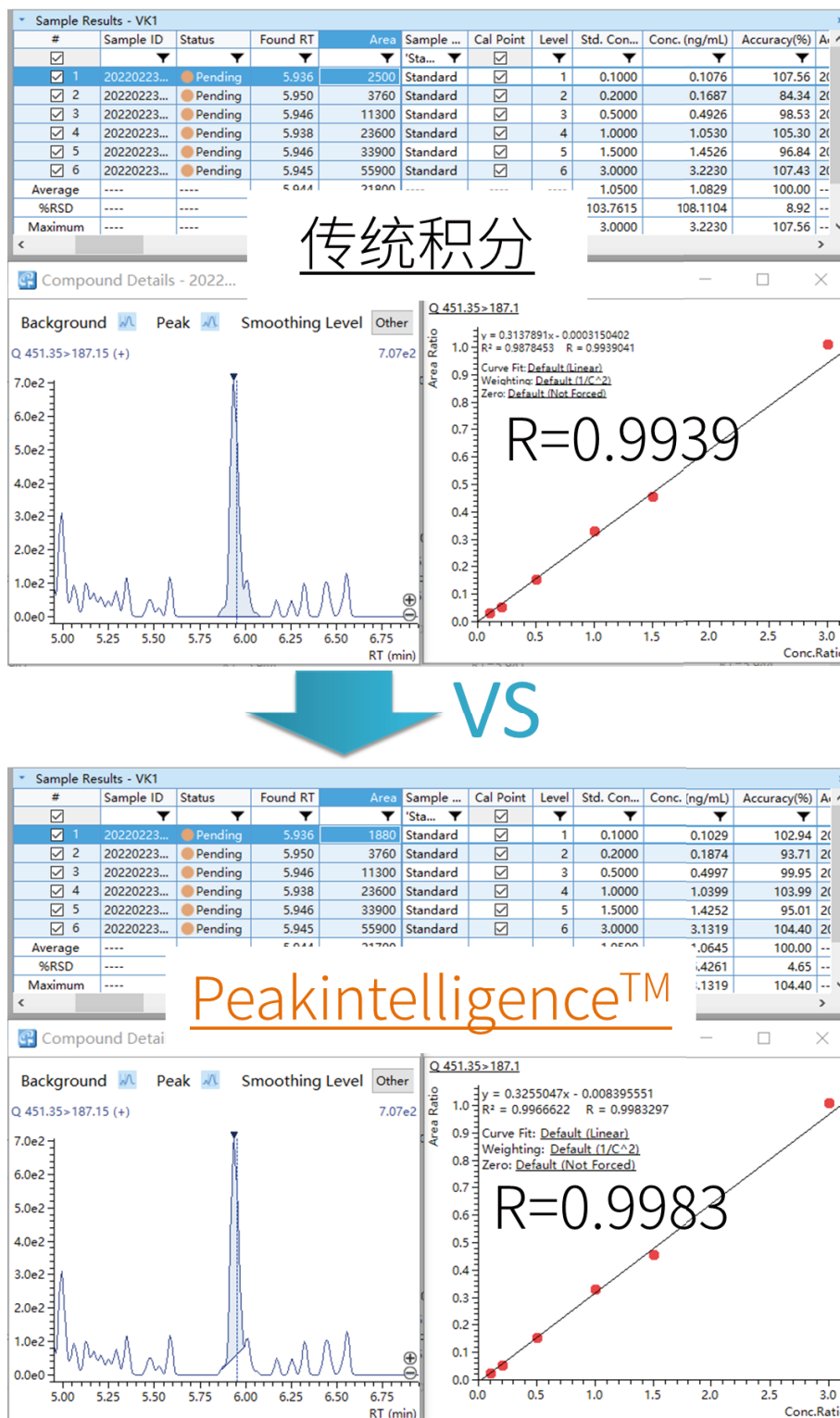


图 2 Peakintelligence™对维生素 K1 的 LLOQ 校准点色谱积分的优化

■ 结论

LC-MS/MS 法因为其高灵敏度、特异性等优点已经在临检领域普遍使用，但是也存在一些诸如色谱柱或质谱仪稳定性下降、基质影响增大等因素带来的影响检测结果准确性的问题。为了保证计算结果的准确性，往往需人工核对每个数据的积分结果，必要时需依靠手动积分来修正，这个过程耗时又费力，同时又引入了一定的人为误差；

Peakintelligence™的人工智能算法经过 14,000 多次熟练操作者的标准积分训练学习，能精准把握各类复杂图谱的色谱积分，在面对基质杂峰干扰时，采用基线分离及垂直分割的自适应智能积分算法，将基质杂峰对目标峰的影响降到最低，自动积分的可靠性大大增强，为高质量得完成 MS 数据自动化处理工作，提高检测效率，保证质谱数据的可靠性方面提供有力支持。

岛津应用云

