

## 使用 Peakintelligence™ 进行高效数据分析 ——用于分析全氟和多氟烷基物质 (PFAS)

01-00658-CN

Takanari Hattori 和 Hiroyuki Niwa

### 特点描述

- ◆ Peakintelligence 峰积分软件可大大缩短 PFAS 分析中数据分析所需的时间，并减少分析精力。
- ◆ 由于不需要参数设置，Peakintelligence 甚至可以由无经验的用户执行峰积分，并获得与经验丰富的工人相当的结果。

### ■ 引言

全氟和多氟烷基物质 (PFAS) 是疏水、耐热和耐化学性的化合物，广泛用作涂料、表面处理剂、乳化剂和灭火剂。由于对 PFAS 及其在环境中的持久性、在活生物体中的累积、对活生物体的毒性以及长距离迁移能力的担忧，近年来开展了对 PFAS 的实况调查研究，并出台了相关条例。截至 2023 年 10 月，只有三种 PFS 在日本受到监管限制 (PFOS、PFOA 和 PFHxS)，但更多的在美国和欧洲受到限制。在世界各地，越来越多的 PFAS 需要分析。这些变化将产生更多需要处理的分析数据，从而需要更高效的数据分析方法。

Peakintelligence 是一款峰值集成软件，配备了在人工智能 (AI) 的帮助下开发的峰值查找算法。本应用新闻描述了一个案例，在该案例中，该软件被用于处理 PFAS 分析的色谱数据，减少了所需的工作量并提高了分析效率。

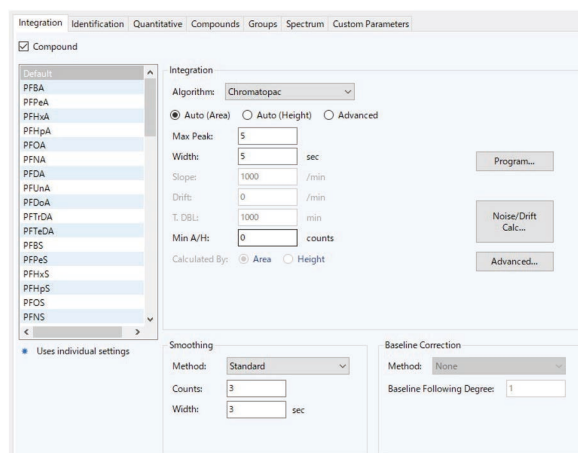
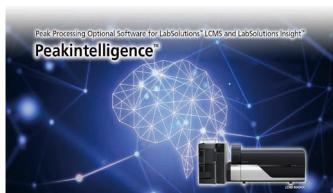


图 1 既往峰积分算法的参数设置窗口



• Peakintelligence 是一款由岛津和富士通联合研究开发的产品。

### ■ 既往算法的局限性

既往峰积分算法要求用户根据色谱图调整和微调许多检测和积分参数 (图 1)。当算法无法正确检测和积分峰时，需要手动校正，这增加了用户的工作量。执行这项工作所需的技能水平和对该项技能进行标准化的挑战也是应用这些算法时的主要问题。

### ■ Peakintelligence 峰积分算法

Peakintelligence 是一种新的峰值集成技术，利用深度学习 (AI 的一种) 开发。AI 是用于一般概念和技术的名称，而机器学习和深度学习是作为 AI 基础的技术。机器学习训练模型的目标属性必须首先由人提取，但深度学习训练模型的目标属性是由计算机上的软件通过机械方式提取的。因此，深度学习可以训练具有大量数据的模型，并且无人的参与引起的可变性。

Peakintelligence 使用的训练模型是从大约 13,000 个色谱图中创建的，并由经验丰富的专家验证峰检测和积分。通过标记色谱数据、峰起点和终点、调整训练和参数以及评估模型性能来准备训练数据集 (图 2)。在实验室电脑上安装这一训练的模型，使用户毫不费力就可以自动分析 LC-MS 数据。

• Peakintelligence 不具备使用新获取的数据进行额外学习的功能。

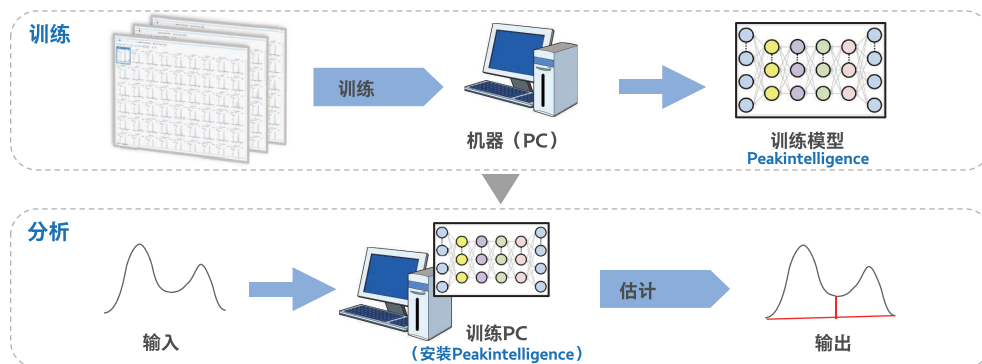


图 2 Peakintelligence 的说明性概述

## ■ 无参数调整的出色峰积分

由于 Peakintelligence 是通过由经验丰富的专家处理的色谱图进行机器训练的，因此它可以像经验丰富的分析师一样分析相同标准的峰。与既往算法不同，它不需要预先调整参数（图 3）。用户无需设置多个复杂参数。他们可以通过简单地指定算法和模型，用 Peakintelligence 处理色谱图。这种能力还减少了由参数设置错误和其他形式的人为错误引起的可变性。

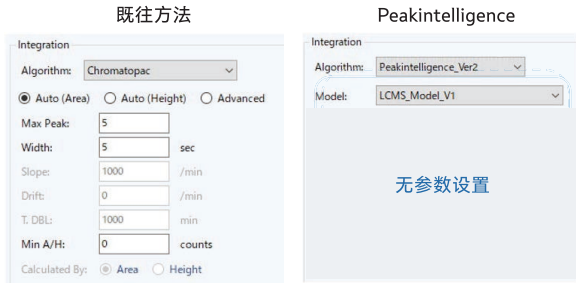


图 3 既往算法和 Peakintelligence 的参数设置窗口

## ■ 缩短数据分析时间

分析工业废水中的 72 种 PFAS（31 种内标物质），并使用 Peakintelligence 处理所得色谱图。如图 4 所示，它成功地识别并积分了信噪比较低的峰。

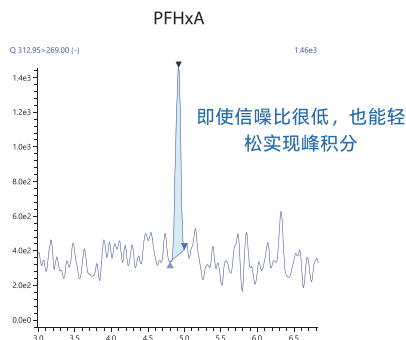


图 4 Peakintelligence 的峰积分示例

如图 5 所示，既往方法错误地识别到基线噪声和波动，而 Peakintelligence 准确地检测到峰值，且无错误检测。使用既往方法处理峰导致 72 种成分中的 26 种成分出现错误检测，而 Peakintelligence 显示没有任何成分出现错误检测（图 6）。当错误识别到噪音峰时，必须将其手动删除，这会增加分析时间。Peakintelligence 只需要 45 秒就能分析一份数据，而既往方法需要 2 分钟。Peakintelligence 可扩展至 100 条数据，将分析时间从 3.3 小时缩短至约 1.3 小时，节省了大量人力和时间。

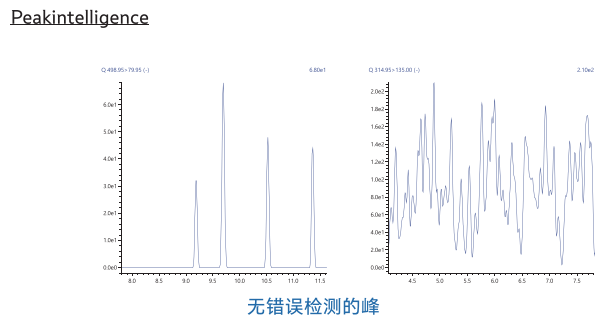
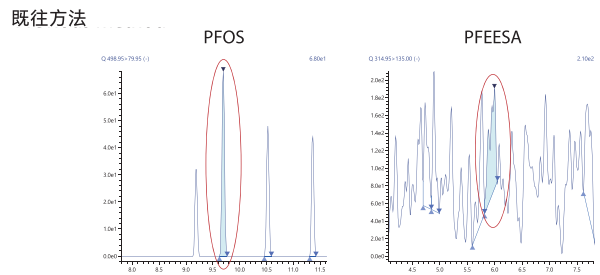


图 5 既往方法 Peakintelligence 的峰积分比较

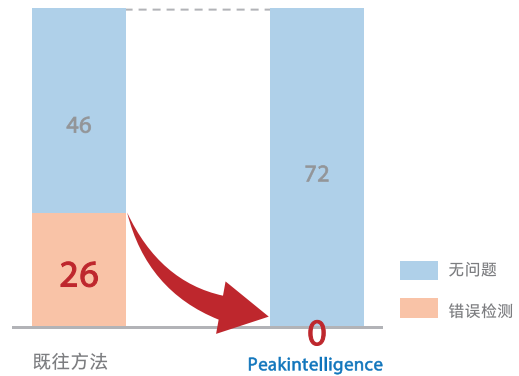


图 6 工业废水中 72 种 PFAS 的峰积分结果比较

## ■ 结论

在 PFAS 分析中使用 Peakintelligence 处理色谱图大大减少了错误检测和错误识别峰的数量，明显减少了需要手动处理的峰数，并且不需要在分析前调整参数。这些改进大大缩短了执行数据分析所需的时间，并减少了精力。同时无需用户设置参数也消除了用户之间结果的可变性，这有助于消除对特定人员的依赖性。随着全世界需要分析的 PFA 数量的增加，将需要一种更高效的色谱峰积分方法；Peakintelligence 是满足这一需求的有效解决方案。

岛津应用云



LCMS 和 Peakintelligence 是 Shimadzu Corporation 及其附属公司在日本和其他国家 / 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：2024 年 9 月