

基于“AI”算法的 Peakintelligence™ 模块 助力多兽药残留数据的自动化处理

LCMSMS-947

摘要：液相色谱串联质谱是兽药残留测定的利器。随时检测项目的不断增多，多兽残同时分析也越来越普遍。但在数据处理时，多组分分析常常需要花费更多的时间，并且兽药基质复杂，干扰成分多，有可能造成积分异常的情况。质谱数据处理的准确性直接影响到定量结果的异常，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兽残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，尤其是在遇到色谱峰拖尾、基线复杂、响应低等复杂多变的情况时，可获得科学合理的积分结果。

关键词：人工智能 AI 算法 Peakintelligence 兽残

技术特点：

- ❖ 利用全新 AI 峰积分算法 Peakintelligence™ 数据解析模块处理多 MRM 通道的兽残数据，无需额外参数设置，让多目标多数据处理更加简单智能。
- ❖ Peakintelligence™ 模块可以有效解决色谱峰拖尾、基线复杂、响应低等复杂多变情况下识别及积分结果不准确的问题，提高实验室数据质量。

LC-MS/MS 进行兽药残留分析时，为了提高分析效率，常常采用多兽药残留同时检测的方法，目前国家也有跨类多兽药残留检测的国家标准出台，数据通常涉及上百个 MRM 通道。但在数据处理时，如遇到拖尾、前延峰等异常峰型的情况，常常需要大量的人工核对和修正工作，不利于分析效率的提高。

Peakintelligence™ 是岛津推出的首款“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，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；尤其在遇到色谱峰前延、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。





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-8040/8045/8050/8060(NX) 及以上型号对应的 RX 系列等。

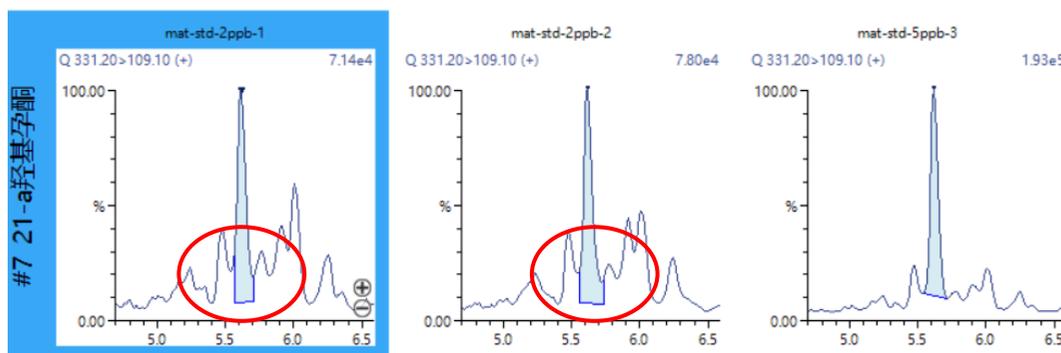
软件配置方面，可搭配岛津色谱工作站 Labsolutions Ver.5.113、LabSolutions Insight Ver.3.8SP3 以上版本 (FL)；或 LabSolutions LCMS DB Ver.6.114 以上版本 (DB)。



■ 应用案例与讨论

3.1 Peakintelligence™ 滤除基质干扰影响，实现正常积分

在多甾残检测时，常常在目标物位置附近存在较大的基质干扰，这大大影响了积分的准确性，容易产生积分偏移、积分过大或过小的问题，如图 1 中的 21- α 羟基孕酮，在传统积分模式下，低浓度点基质干扰严重，存在峰面积比实际值积分偏大的情况。



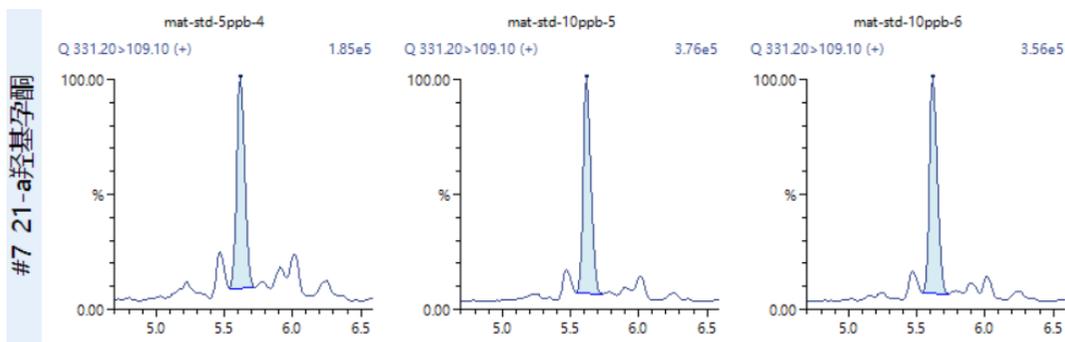


图 1a 传统积分方式下 21- α 羟基孕酮积分结果

当积分方式切换为 Peakintelligence™ 自动积分后，可有效纠正峰面积偏大的情况，积分更加合理。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。

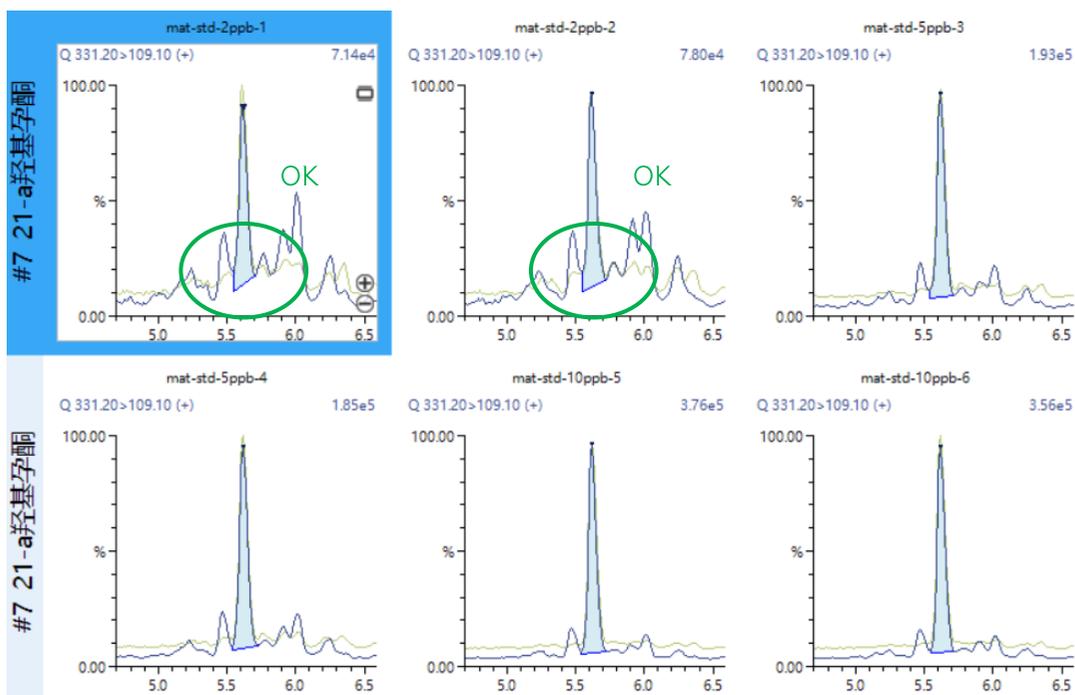


图 1b Peakintelligence™ 积分方式下 21- α 羟基孕酮积分结果

3.2 Peakintelligence™ 自动积分应用于响应低的色谱峰

在多兽残检测时，检测限或定量限附近的色谱峰响应往往很低，这时采用传统积分方式，积分结果容易出现不稳定的情况。如图 2a 蓝框标识的色谱峰，低浓度点的积分情况同高浓度点不一致，且积分峰面积不合理，小于其真实值。操作人员需要凭借经验，调整“半峰宽”和“斜率”值，以取得合理的积分结果。

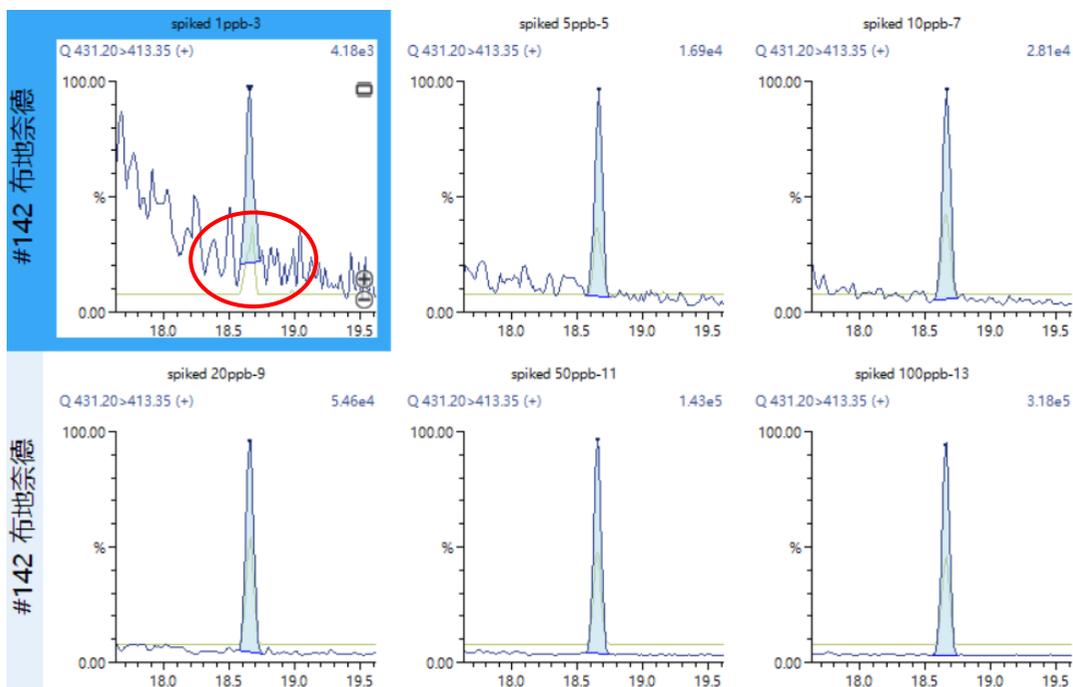


图 2a 传统积分方式下布地奈德积分结果

当采用 Peakintelligence™ 积分方式时, 无需设置任何积分参数, 低浓度点和高浓度点的积分状态基本一致, 结果科学合理 (如图 2b 所示), 提高分析效率。

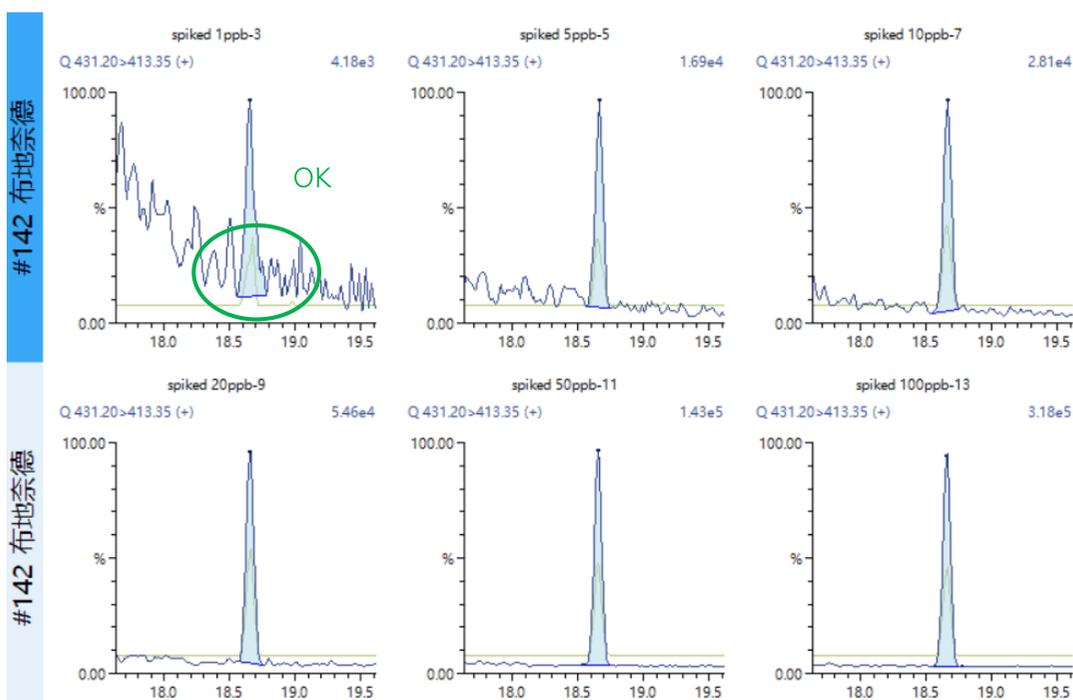


图 2b Peakintelligence™ 积分方式下布地奈德积分结果

■ 结论

兽药残留分析存在基质复杂、检测限低、存在异构体等因素带来的影响结果准确性的问题，为保证定量结果的准确性，往往需要人工核对每个数据的积分结果，过程耗时费力。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，自动积分的可靠性大大增强。使用 Peakintelligence™功能，可简化数据处理流程，保证质谱数据的可靠，提高实验室分析效率。

岛津应用云

