

LabSolutions Insight 数据解析软件助力实验室数据处理智能化和高效化

LCMSMS-930

摘要：本文介绍了 LabSolutions Insight 数据解析软件在实验室数据处理中的应用。LabSolutions Insight 软件拥有可调整的显示视图、定制化的标记和筛选功能、个性化的报告模板、符合法规标准要求的内置参数等，让实验室的数据处理流程变得简单智能，从而大大提高实验室运行效率。

关键词：LabSolutions Insight 数据解析 GCMS LCMS 智能

技术特点：

- ❖ LabSolutions Insight 软件特有的标记、筛选功能，能够快速锁定超过限量值的化合物和样品，让数据处理变得智能。
- ❖ LabSolutions Insight 软件输出报告时具有多重个性化的选择，让工作流程变得高效。

在食品农兽药残留分析、环境中污染物分析、医学检验等项目中需要测定目标化合物众多，实验人员需要从大量样品数据和众多目标化合物中确认超过限量值的目标成分，数据解析将花费大量的时间和精力。

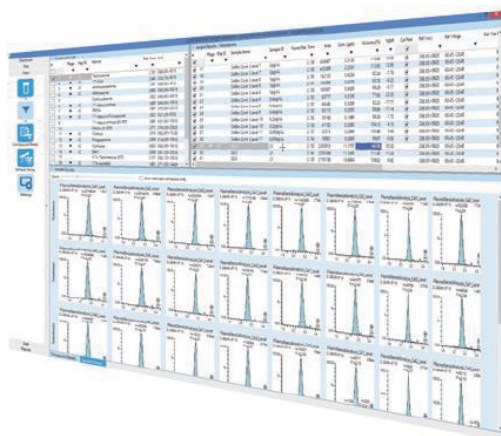
LabSolutions Insight 是对 GCMS 和 LCMS 采集的数据进行定量处理的软件，特别适合于多组分多样品的数据处理和报告输出。Insight 拥有丰富多样的显示视图，可以满足不同场景下的数据处理需求，方

便的查看和导出定量结果；标记功能和筛选功能可以根据实验人员的预先设定值，高亮显示数据结果，或者仅显示符合的结果，从而让实验人员专注于需要确认的数据结果；输出报告时，有多种格式供选择，可以按照要求仅输出指定数据和指定目标物的报告结果，满足个性化需求的同时又很高效。LabSolutions Insight 软件在数据解析和报告输出时能够极大地提升分析人员的工作效率。

■ 关于 LabSolutions Insight™

LabSolutions Insight 是对 GCMS 和 LCMS 采集的数据进行定量处理的软件，能够使用同一软件实现不同类仪器的数据处理，特别适合于多组分多样品的数据解析和报告输出。

■ 适用机型与软件



仪器装置方面，可搭配岛津全系列质谱系统，如：GCMS-QP 系列、GCMS-TQ 系列、LCMS-8045/8050/8060(RX)、LCMS-9030/9050 等。

■ 应用场景展示

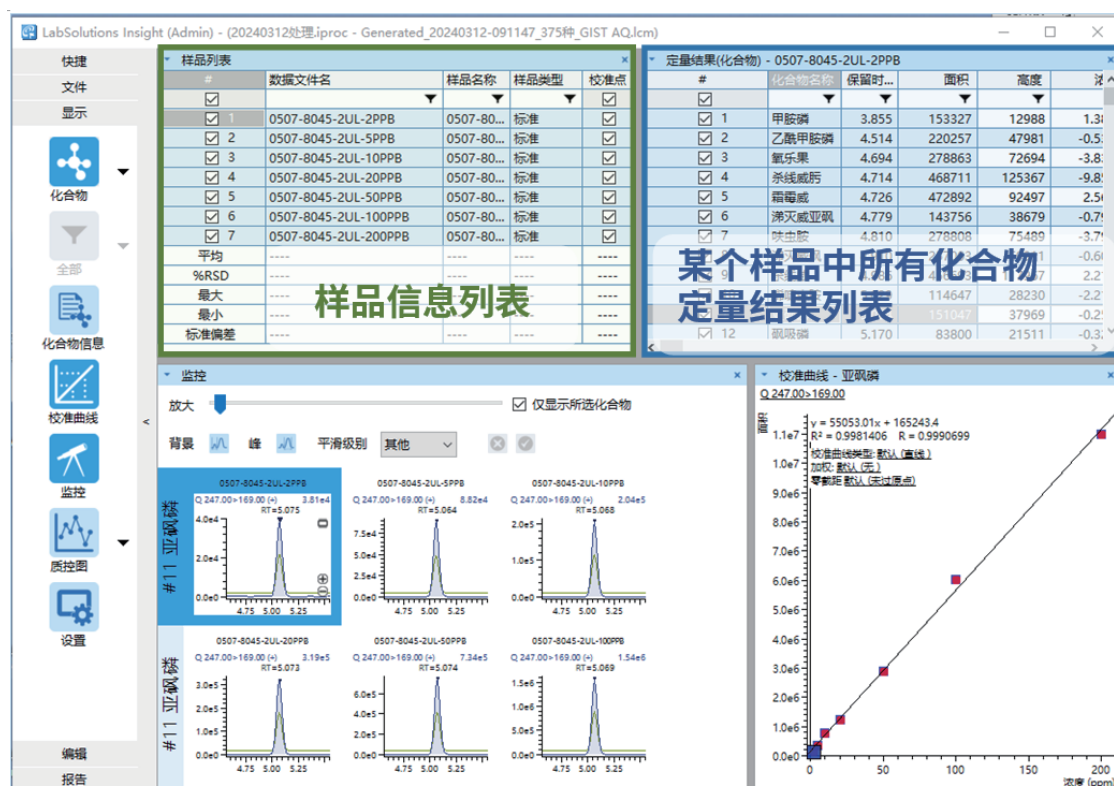
3.1 显示视图

在数据解析时，我们可能会有多样化的结果显示需求。LabSolutions Insight 有三种显示方式：化合物视图、样品视图和汇总视图。可根据不同的应用场景灵活调整显示方式。



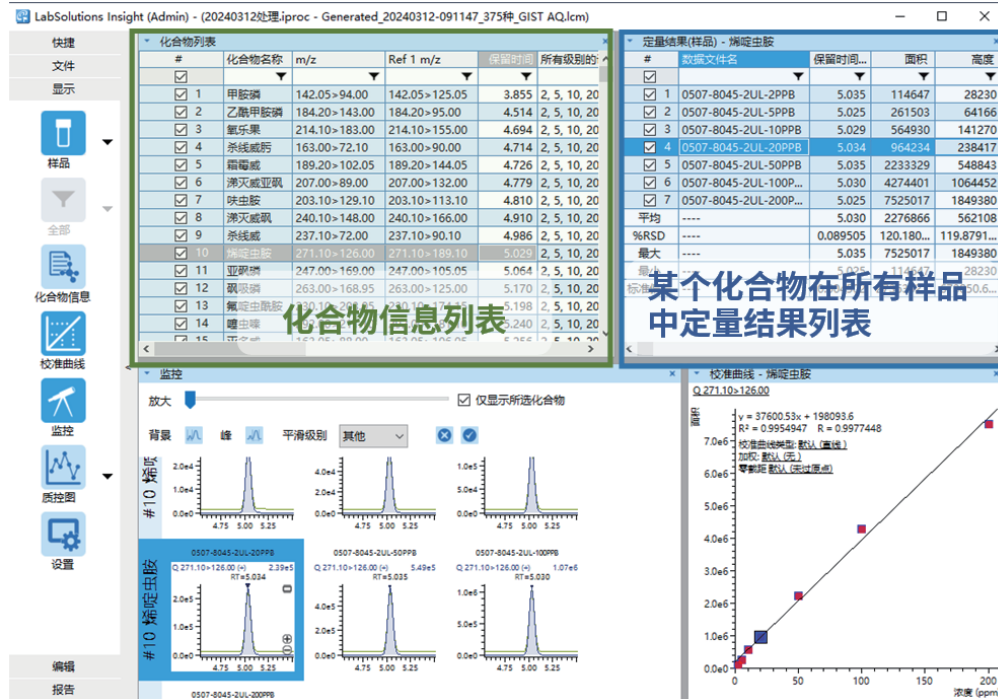
3.1.1 【化合物】视图

通过选择某个样品的数据文件，可确认该样品中所有化合物的定量结果。



3.1.2 【样品】视图

通过选择关注的某个化合物，可确认该化合物在所有样品数据中的定量结果。



3.1.3 【汇总】视图

通过一览确认全部样品数据的所有化合物的定量分析结果。



3.2 离子丰度比设置

定性判定时，离子丰度比最大允许偏差可以自定义，也可以选择自动匹配国标参数。该功能贴合我国法规标准要求，减化了实验人员操作。



3.3 内标法和外标法同时使用

在一些特定的应用场景中，需要对一个数据中的不同化合物分别使用内标法和外标法定量。如下图所示，在【化合物】表的【定量方法】列中，可以针对每个化合物设置定量方法，可实现一个数据中不同化合物分别使用内标法和外标法（默认）。



3.4 标记与筛选功能

当我们在进行多目标化合物的同时分析时，怎样能从大量的数据中快速锁定超过限量值的化合物和样品呢？Insight 的【标记】和【筛选】功能可以帮助我们。

3.4.1 【标记】

通过【编辑标记】和【加载标记】，可实现颜色条突出显示异常结果。比如，我们按照下图编辑标记，当目标化合物浓度超过限量值时，将会红色条突出显示。该标记设置可存为模板，下次使用时无需再次编辑直接加载即可。通过加载上述标记，浓度超过限量值的化合物将红色突出显示，标记列同样也有提示。

编辑方法设置 - 标记

标记: 未知 +/-

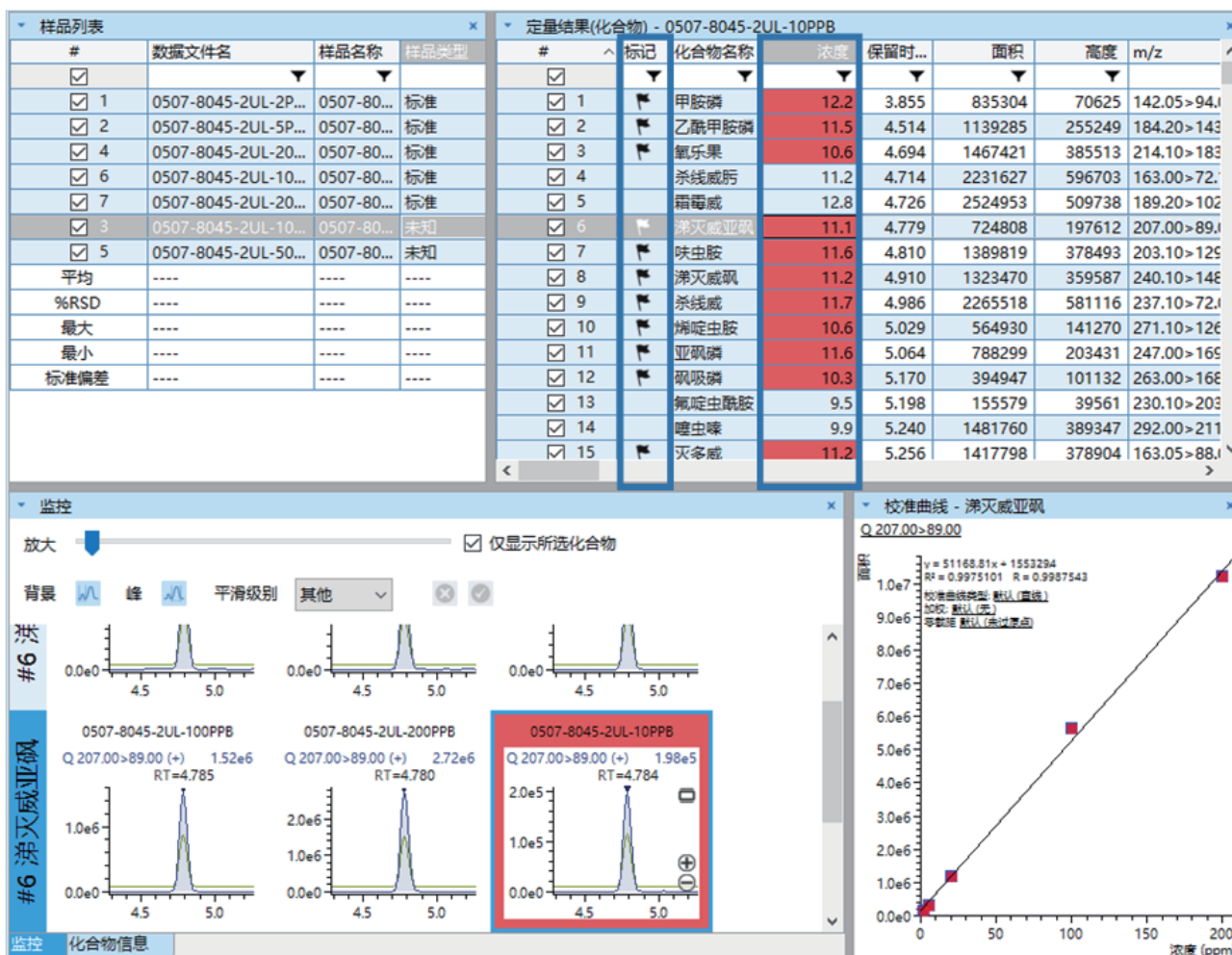
【编辑标记】

编辑 合格与否

#	化合物	m/z	RT	浓度上限值(警告)
1	甲胺磷	142.05>94.00	3.855	10.0000000
2	乙酰甲胺磷	184.20>143.00	4.514	10.0000000
3	氧乐果	214.10>183.00	4.694	10.0000000
4	杀线威脒	163.00>72.10	4.714	20.0000000
5	霜霉威	189.20>102.05	4.726	20.0000000
6	涕灭威亚砷	207.00>89.00	4.779	5.0000000

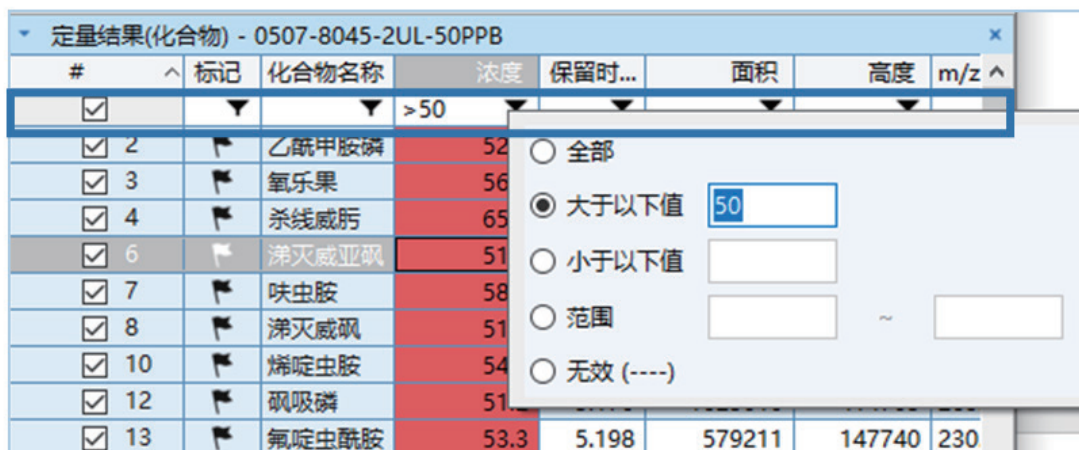


【加载标记】



3.4.2 【筛选】

当我们只想显示符合某些特定条件的数据时，可以使用定量结果表中各列标题的下方的筛选按钮，使得只显示符合筛选条件的结果。另外，也可以点击每列的标题对定量结果进行升序或者降序排列。



#	标记	化合物名称	浓度	保留时...	面积	高度	m/z
<input checked="" type="checkbox"/>			>50				
<input checked="" type="checkbox"/> 2		乙酰甲胺磷	52.3				
<input checked="" type="checkbox"/> 3		氧乐果	56.6				
<input checked="" type="checkbox"/> 4		杀线威脞	65.6				
<input checked="" type="checkbox"/> 6		涕灭威亚砷	51.9				
<input checked="" type="checkbox"/> 7		呋虫胺	58.3				
<input checked="" type="checkbox"/> 8		涕灭威砷	51.1				
<input checked="" type="checkbox"/> 10		烯啶虫胺	54.8				
<input checked="" type="checkbox"/> 12		砒吸磷	51.2				
<input checked="" type="checkbox"/> 13		氟啶虫酰胺	53.3	5.198	579211	147740	230

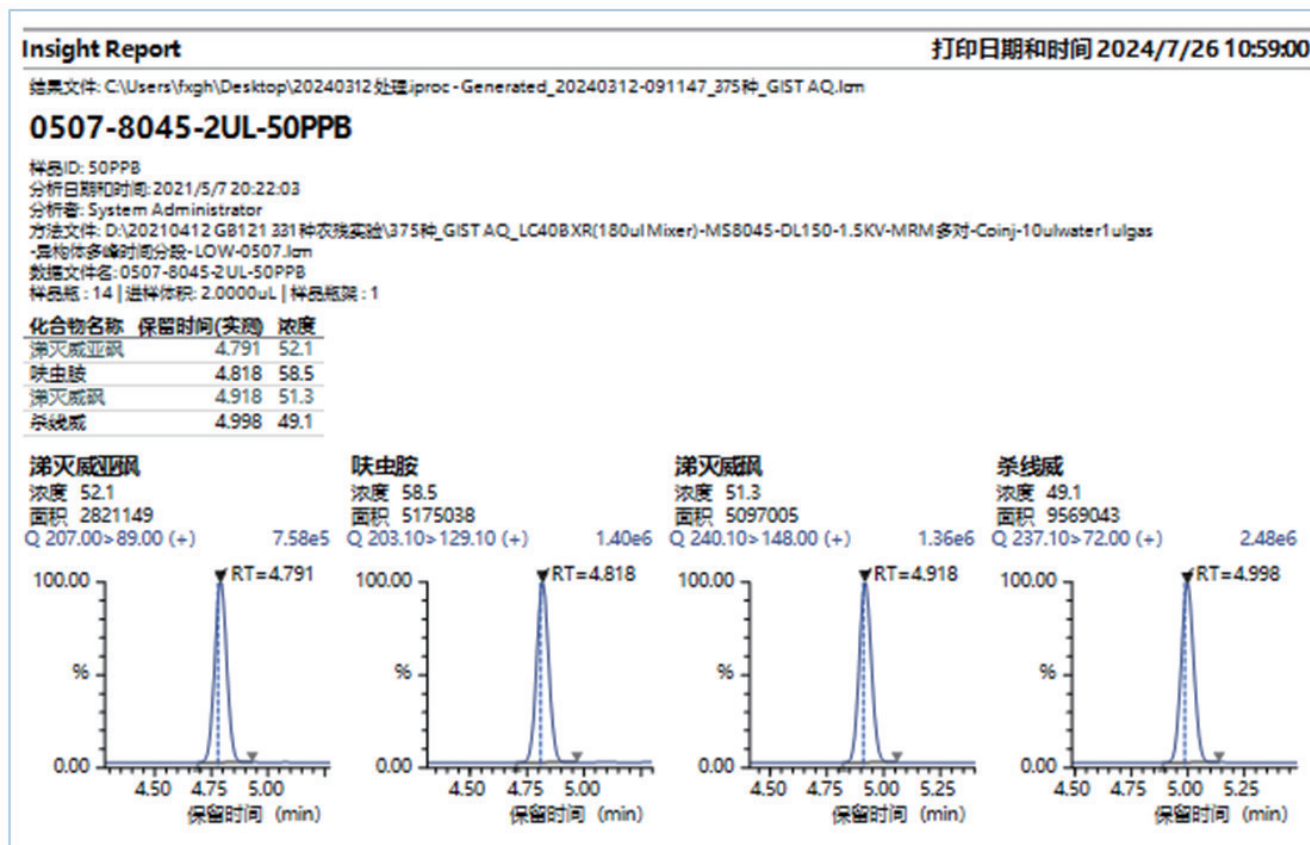
3.5 打印报告

LabSolutions Insight 在打印报告时有多重个性化的选择。报告形式有化合物报告、样品报告、批处理报告等多种类型；在输出报告时，我们还支持个性化选择，可以指定高亮显示的样品、高亮显示的化合物、勾选的样品、勾选的化合物打印报告。当我们进行多组分化合物同时分析时，有时只需要打印样品中某几个化合物的报告，使用该功能可快速生成报告，无需更新化合物表和二次数据处理。



#	样品类...	数据文件名	样品...	#	标记	化合物名称	浓度	保留时...	面积
<input type="checkbox"/> 1	标准	0507-8045-2UL-2PPB	0507	<input type="checkbox"/> 1		甲胺磷	50.0	3.855	3359839
<input type="checkbox"/> 2	标准	0507-8045-2UL-5PPB	0507	<input type="checkbox"/> 2		乙酰甲胺磷	52.3	4.514	4472350
<input type="checkbox"/> 3	标准	0507-8045-2UL-10PPB	0507	<input type="checkbox"/> 3		氧乐果	56.6	4.694	5598951
<input type="checkbox"/> 4	标准	0507-8045-2UL-20PPB	0507	<input type="checkbox"/> 4		杀线威脞	65.6	4.714	7467825
<input checked="" type="checkbox"/> 5	未知	0507-8045-2UL-50PPB	0507	<input type="checkbox"/> 5		霜霉威	45.5	4.726	9192652
<input type="checkbox"/> 6	标准	0507-8045-2UL-100PPB	0507	<input checked="" type="checkbox"/> 6		涕灭威亚砷	51.9	4.779	2821149
<input type="checkbox"/> 7	标准	0507-8045-2UL-200PPB	0507	<input checked="" type="checkbox"/> 7		呋虫胺	58.3	4.810	5175038
平均	----	----	----	<input checked="" type="checkbox"/> 8		涕灭威砷	51.1	4.910	5097005
%RSD	----	----	----	<input checked="" type="checkbox"/> 9		杀线威	48.8	4.986	9569043
				<input type="checkbox"/> 10		烯啶虫胺	54.8	5.029	2233329
				<input type="checkbox"/> 11		亚砷磷	49.6	5.064	2898861
				<input type="checkbox"/> 12		砒吸磷	51.2	5.170	1625010
				<input type="checkbox"/> 13		氟啶虫酰胺	53.3	5.198	579211
				<input type="checkbox"/> 14		噻虫嗪	62.1	5.240	5711845
				<input type="checkbox"/> 15		灭多威	52.7	5.256	5255190

使用【样品报告】输出“勾选的化合物”报告



■ 结论

LabSolutions Insight 软件能够进行 GCMS 和 LCMS 的数据解析。该软件拥有可调整的显示视图、定制化的标记和筛选功能、个性化的报告模板、符合法规标准要求的内置参数等，特别适合于多组分多样品的数据解析和报告输出。LabSolutions Insight 软件让实验室的数据处理流程变得简单智能，大大提高实验室运行效率。

岛津应用云

