

Peakintelligence 智能积分软件提升 GCMS 农残检测数据处理效率

GCMSMS-311

摘要： GCMS 及 GC-MS/MS 在农药残留检测时具有检测灵敏度高、抗干扰能力强、能同时进行几十种甚至几百种多农残检测等特点，有效提高了农药残留检测的能力和效率，但数据量大、组分多，在数据处理时常常需要花费大量时间，并且因为浓度低、基质干扰等原因会造成积分异常现象。岛津适时推出 Peakintelligence™ for GCMS 智能分析软件，配备全新人工智能（AI）峰积分算法，有效解决以上问题，在数据量大、基质干扰强的农残检测数据处理中优势明显，数据处理设置简洁、积分结果合理准确、有效降低积分异常的概率，有效提高农残数据处理效率。

关键词： Peakintelligence 智能积分 人工智能（AI） 农残检测 数据处理

技术特点：

- ❖ Peakintelligence™ 智能分析软件，有效简化复杂质谱数据处理方式，提高处理效率。
- ❖ Peakintelligence™ 智能分析软件，有效降低积分异常概率，提高数据处理质量。

农药的使用不可避免地会产生农药残留的问题，为了保证安全，农药残留的检测不可或缺，随着技术的发展，质谱仪的引入已经能够实现几十甚至几百种农药的同时检测，这无疑降低了检测成本并加快了检测速度，并且提高了灵敏度，但带来的问题是检测数据分析的过程中，对峰的识别和正确积分需要消耗大量的时间，并且，不同的人员处理相同数据时，由于处理习惯不同，有可能结果也会不同。

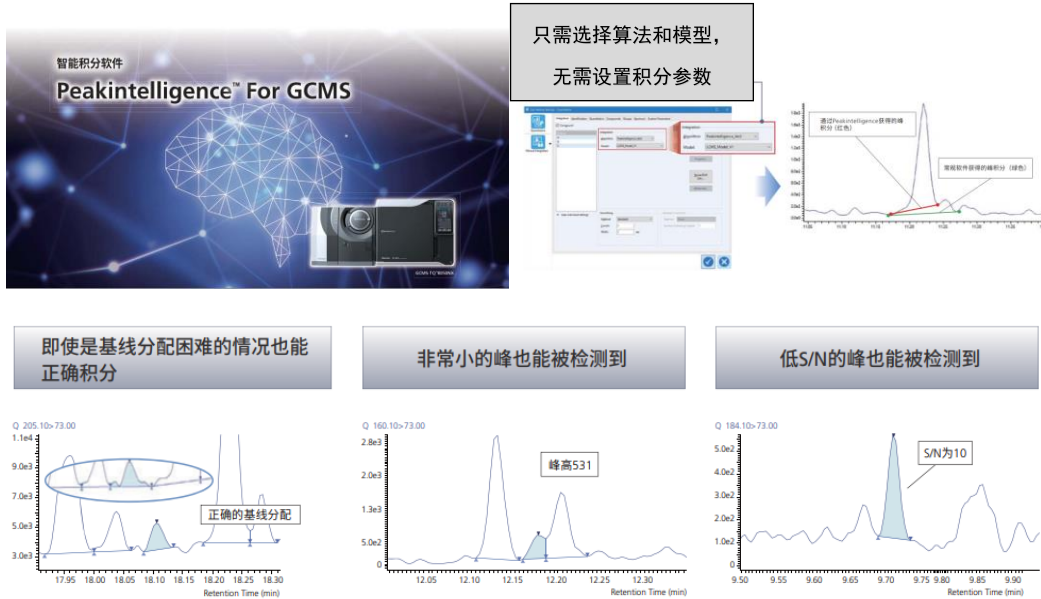
Peakintelligence™ for GCMS 是岛津推出的针对 LabSolutions Insight™ 软件的 AI 峰积分模块，搭载全

新 AI 峰积分算法，显著减少 GCMS 或者 GC-MS/MS 的数据处理时间；通过深度学习等机器学习方法，使用 Peakintelligence 对数据处理的结果，可与高水平用户持平，增加数据处理的准确率；无需设置积分参数，减少偏离风险和手动积分的主观性。

将 Peakintelligence™ for GCMS 用于多农残数据的解析，比传统数据处理机方式操作简便，对异常峰（前沿、拖尾、响应低、基质干扰强）的积分更加合理，显著减少手动积分的比例，从而降低用户数据处理的难度，节约数据处理时间。

■ Peakintelligence™ for GCMS 简介

Peakintelligence™ for GCMS 是岛津推出的智能积分软件，通过深度学习技术（一种机器学习方法），以大量的优质的 GCMS 及 GC-MS/MS 数据对系统进行“训练”，使系统“学会”正确的数据处理方式，从而对其它 GCMS 及 GC-MS/MS 数据“智能”处理，提升数据处理效率及正确率。



■ 适用机型及软件

支持的仪器：GCMS-QP 系列及 GCMS-TQ 系列仪器，如：GCMS-QP2020 NX、GCMS-QP2050、GCMS-TQ8040 NX、GCMS-TQ8050 NX 等（注：文件类型为 LabSolutions GCMS 文件）。

支持的软件：LabSolutions Insight DB GCMS Ver.4.0 SP4 以上版本

LabSolutions Insight CS Ver.4.0 SP5 以上版本

LabSolutions Insight FL Ver.4.1 以上版本



■ 结果与讨论

3.1 Peakintelligence™ for GCMS 有利于不同浓度点积分一致性

在多农残检测中，一般需要做校准曲线以实现未知样定量，而低浓度点和高浓度点的峰形往往有一定区别，这就导致采用统一的积分方式时，积分效果有明显差别。

如图 1 “传统积分效果” 所示，四氯硝基苯的最低 2 个浓度点（2 $\mu\text{g/L}$ 和 5 $\mu\text{g/L}$ ）在统一积分条件下，并未从基线积分，导致积分面积变小，与高浓度点积分状态不一致。偏离真实检测结果。如图 “Peakintelligence” 积分方式下，采用智能化方式进行积分，四氯硝基苯低浓度点的积分状态和高浓度点的积分状态达到一致，积分值更加准确。

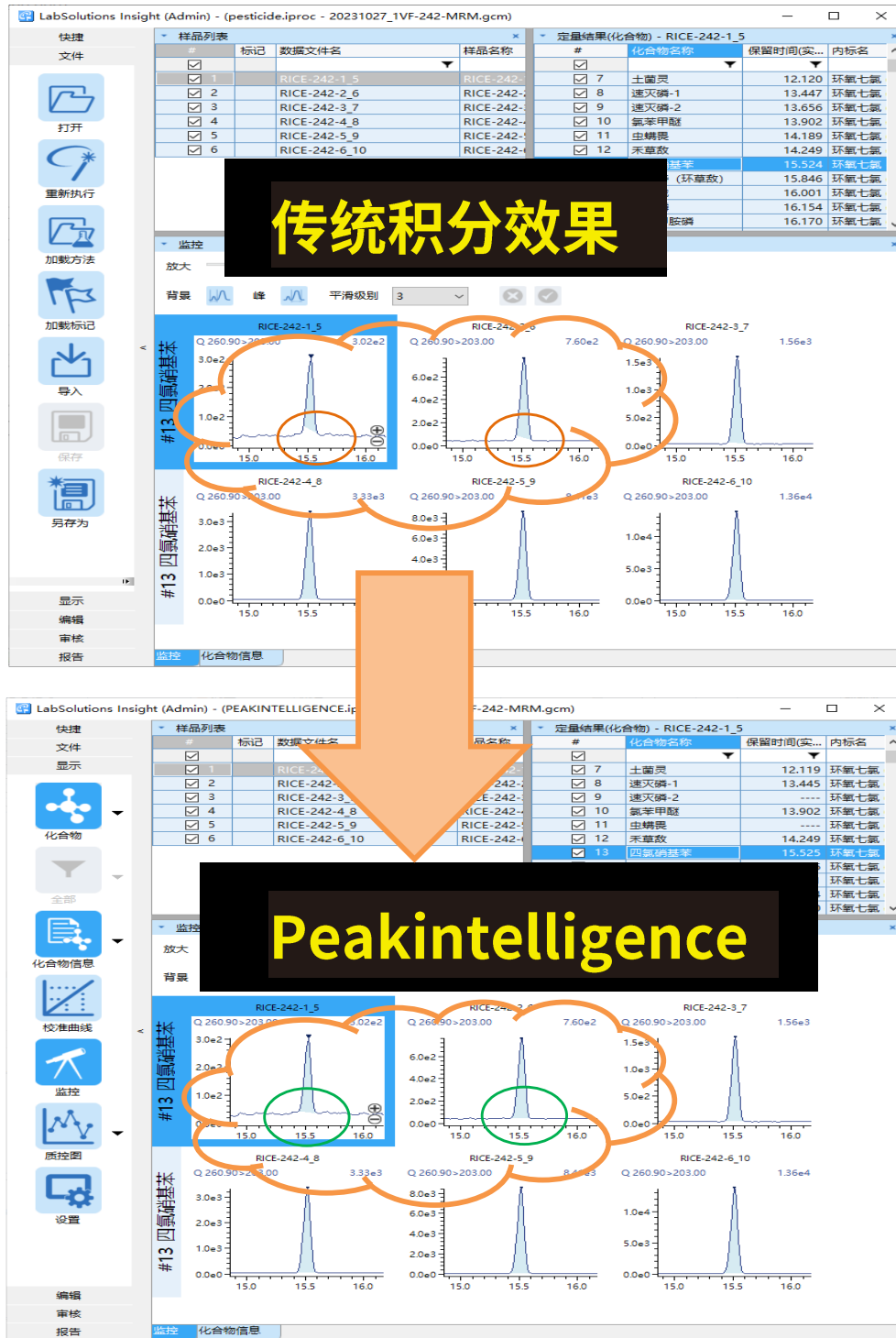


图1 Peakintelligence™ for GCMS 对四氯硝基苯低浓度点的积分优化

3.2 Peakintelligence™ for GCMS 滤除基质干扰影响，实现正常积分

使用 GCMS 或 GC-MS/MS 进行多农残检测时，常常在目标物出峰位置产生基质干扰，这大大影响了积分的准确性，容易产生积分偏移、多积分或者少积分的问题。

如图 2 所示，禾草敌在传统积分模式下，低浓度点基质干扰严重，产生了“多积分”，导致峰面积比实际峰面积积分大的情况，在 Peakintelligence 模式下积分，有效纠正了“多积分”的问题，积分更加合理。

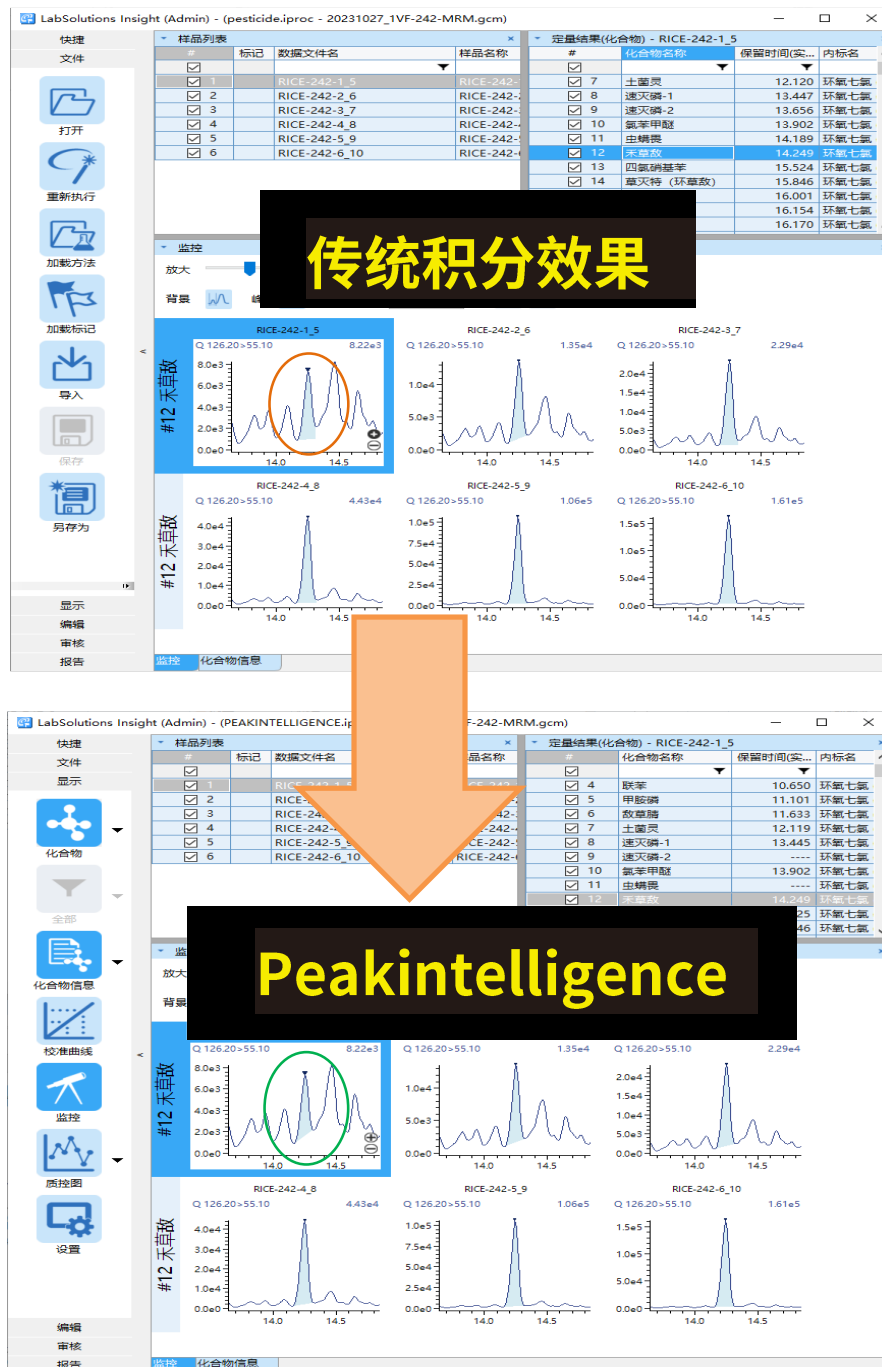


图 2 Peakintelligence™ for GCMS 智能积分应对禾草敌基质干扰

■ 结论

Peakintelligence™ for GCMS 是基于人工智能（AI）的积分软件，通过优质数据正确积分方法的训练学习，成为需要进行大量 GCMS 或者 GC-MS/MS 数据处理的用户的专业助手。操作非常简单：无需设置积分参数，仅需选择 Peakintelligence 积分选项，即可实现智能积分。积分结果准确：Peakintelligence 精准把握积分“秘诀”，能有效“过滤”基质干扰，将基质杂峰对目标峰的影响降到最低；能将响应低或峰形不好的峰正确积分，实现高低浓度峰的积分一致性。简便智能的数据处理能够减少数据处理时间，大大提高工作者的工作效率。

岛津应用云

