TargetLynx Auto-Flag v1 – 产品需求文档 (PRD)

版本 1.0 — 2025-08-07

# 1 背景与痛点

• Waters LC‑MS/MS（MassLynx + TargetLynx）每批需定量 5–30 种类固醇激素。  
• 每批 60–80 样品，人工峰形与质控审核约 4 小时。  
• 夜班/周末人员不足导致报告 TAT 延迟。  
• 规则引擎自动标记，可将复核量降至 5–10 %。

# 2 产品目标及收益

|  |  |
| --- | --- |
| 指标 | 目标 |
| 复核耗时 | ≤30 min/batch |
| 误报率 | ≤5 % |
| 漏报率 | ≤1 % |
| 部署成本 | 零新增硬件 |
| 上线周期 | ≤5 weeks |
| 预计省时 | ≈1000 技术员小时/年 |

# 3 关键用户故事

* • 作为日班技术员，我拖放导出文件，几分钟得到异常列表。
* • 作为实验室主管，我在 config.xlsx 调整阈值，无需改代码。
* • 作为夜班技术员，我只复核被标记行，加速放行。

# 4 范围与阶段

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 项目 | v1 包含 | 排除 |
| 数据源 | Waters TargetLynx CSV/TXT | 其它品牌 |
| 处理 | Parse→Rules→Excel | 自动再积分 |
| 界面 | CSV & Excel | PDF、LIS 对接 |
| 部署 | Standalone EXE | Docker/K8s |

# 5 功能概要

• 数据输入：拖放 CSV，支持列名别名。  
• 规则引擎：内标 ±25%，RT 硬 ±0.20 min 软 0.05‑0.20 min，S/N<10，校准及定量范围，缺失检测。  
• 规则验证：阈值基于 100 批历史数据，每周微调。  
• 输出：Quant\_Result.csv 含 Flag；Exception\_List.xlsx（红=硬，黄=软）；Batch\_Summary.txt 统计。  
• 配置版本：记录 MD5，保存带时间戳备份。  
• 日志：记录文件、配置哈希、规则版本、错误。

# 6 安全与技术假设

离线；可选 AES‑256 输出加密；EXE 数字签名。  
技术栈：Python 3.9、pandas、openpyxl、tkinter、PyInstaller.

# 7 里程碑

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 阶段 | 周 | 交付物 |
| 原型 | 1 | 解析&规则雏形 |
| Beta | 3 | 输出&配置界面 |
| 候选版 | 4 | 签名 EXE + 指南 |
| 上线 | 5 | 稳定版、SOP、培训 |

# 8 验收

误报≤5%，漏报≤1%；三批数据处理≤30 分钟；新用户培训 30 分钟后可完成操作。

# 9 风险与缓解

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 风险 | 影响 | 缓解 |
| 模板变动 | 解析失败 | 列名映射+测试 |

# 10 术语

Flag、RT、IS、S/N、TAT