



# Agilent GC/Q-TOF MS 및 Mass Profiler Professional 소프트웨어를 이용한 올리브 오일 특성화

## 응용 자료

식품 검사 및 농업

## 저자

Stephan Baumann,  
Sofia Aronova  
Agilent Technologies, Inc.  
Santa Clara, CA USA

## 개요

본 응용 자료에서는 올리브 오일의 엑스트라 버진 관능 검사(extra virgin sensory test) 통과 여부를 예측하는 모델을 구축하였습니다. Agilent 7890A GC 시스템을 Agilent 7200 시리즈 Accurate Mass Q-TOF MS와 결합하여 전자 이온화(Electron Ionization, EI) 및 양이온 화학적 이온화(Positive Chemical Ionization, PCI) 모드에서 측정한 결과, 올리브 오일에서 다수의 화합물이 발견되었습니다. Mass Profiler Professional 소프트웨어를 이용해 통계 분석을 수행하고 분류 모델을 구축하였으며, 이 분류 모델은 올리브 오일의 관능 검사 탈락 여부를 정확하게 예측하기 위해 다섯 가지 특정 화합물을 활용했습니다.



**Agilent Technologies**

## 소개

지중해 식품을 비롯하여 올리브 오일이 가져다주는 건강상의 이점에 대한 관심이 높아짐에 따라 미국 내 올리브 오일의 수요가 빠르게 증가하고 있습니다. 미국 시장은 2013년까지 18억 달러를 웃돌 것으로 전망됩니다[1]. 올리브 오일은 남유럽 주민들의 장수와 낮은 심장 질환 발병률의 비결로 여겨지고 있습니다. 실제로 미국식품의약국(Food and Drug Administration, FDA)에서는 올리브 오일에 함유된 단일 불포화 지방의 건강 기능성과 관상 동맥 심장 질환 위험성을 낮춰주는 효과를 인정했습니다. 최근 연구 결과, 올리브 오일의 항염증 효과는 주로 오일을 짤 때 제일 처음으로 얻게 되는 엑스트라 버진 올리브 오일(Extra Virgin Olive Oil, EVOO)에 기인하는 것으로 밝혀졌습니다. 산화방지제와 항염증 화합물이 풍부하게 함유되어 있는 식품은 그리 많지 않습니다.

국제 올리브 협회(International Olive Council, IOC) 및 USDA에서는 미각 평가원에 의한 관능 검사와 화학 시험을 포함한 EVOO 분류 표준을 세웠습니다. 그러나 최근 연구 [2]에 따르면, 미국 시장 내 EVOO의 99%를 차지하는 수입산 올리브 오일은 관능 검사로 EVOO 분류에 실패하는 경우가 많다고 밝혀졌습니다. 또한 관능 검사는 비용이 많이 들고 주관적입니다.

증가하고 있는 미국 내 EVOO 시장의 수요와 규모를 고려해 볼 때 올리브 오일의 관능 검사 통과 여부를 예측할 수 있는 화학적 선별 방법을 개발할 가치가 있습니다. 따라서 생산자들은 관능 검사를 통과할 가능성이 높은 올리브 오일만 선별하여 제출할 수 있게 됩니다. 이러한 화학적 선별 방법은 인증에 드는 비용과 시간은 줄이면서도 시판 EVOO의 품질을 높일 수 있습니다.

본 응용 자료에서는 올리브 오일의 관능 검사 통과 여부를 예측할 수 있는 모델 개발의 가능성을 입증하고 있으며, 최근 와인 분류에 사용된 것과 유사한 비표적 화합물 분석법을 활용합니다[3]. Agilent 7200 시리즈 Accurate Mass Q-TOF MS와 Agilent 7890A GC 시스템을 이용하여 전자 이온화(EI) 및 양이온 화학적 이온화(PCI) 모드로 데이터를 수집했습니다. Agilent MassHunter 소프트웨어를 사용하여 크로마토그래피 디콘볼루션을 수행하였고 Mass Profiler Professional(MPP)을 활용하여 추가적으로 통계 분석 및 분류 모델 구축을 수행하였습니다. 올리브 오일 시료에서 수집된 다섯 가지 특정 화합물이 관능 검사 실패와 연관성이 있었습니다.

## 실험

### 시약 및 표준물질

Cyclohexane, 분광광도법 등급, Sigma-Aldrich

### 시료

UC Davis Olive Center에서 총 10종의 올리브 오일 시료를 받았습니다. 모든 시료는 IOC의 인증을 받은 평가원에 의해 IOC 관능 검사를 받아 EVOO 기준 통과 여부를 결정하였습니다. 시료는 어두운 장소에서 실온으로 보관했습니다. 시료는 cyclohexane과 1:10 비율로 희석한 후 1:10 분할 모드로 GC에 주입하여 무작위 순으로 분석했습니다.

### 기기

본 연구는 Agilent 7200 시리즈 GC/Q-TOF 시스템과 Agilent 7890A GC 시스템으로 수행되었습니다. 기기 조건은 표 1과 같습니다.

표 1. GC 및 MS 조건

#### GC 실행 조건

컬럼	DB-5 MS, 30m, 0.25mm id, 0.25µm film(p/n 122-5532)
주입량	1µL
MMI 주입구	50°C for 0.01min 600°C/min to 300°C
분할 배출구(split vent) 퍼지 유량	60mL/min at 1min
오븐 온도 프로그램	45°C for 4.25min 5°C/min to 75°C, 0min hold 10°C/min to 320°C, 10 min hold
운반 가스	헬륨, 1.3mL/분, 일정 유량
이송 라인 온도	290°C

#### MS 조건

이온화 모드	EI, PCI(20% methane flow)
이온화원 온도	230°C
사중극자 온도	150°C
m/z 범위	40 ~ 800m/z
스펙트럼 수집 속도	5Hz, 중심 및 프로파일 모드에서 모두 수집

## 데이터 처리 및 통계 분석

데이터 처리에는 MassHunter Qualitative Analysis(B.05 SP1 버전)를 사용했으며, MassHunter의 크로마토그래피 디콘볼루션 도구로 피크를 생성했습니다. 또한 소프트웨어를 통해 1 ~ 3백 개의 화합물이 판별되도록 질량 및 화합물 필터를 조정했습니다. 디콘볼루션한 데이터를 MPP로 가져오기 위해 MassHunter 내보내기 도구를 이용하여 CEF 파일을 생성했습니다.

Mass Profiler Professional(2.1.5 버전)이 통계 분석에 사용되었습니다. 데이터 처리 단계는 다음과 같았습니다.

1. 가져오기 필터 및 정렬 파라미터 설정
2. 정규화 기준 선택
3. 시료군 정의
4. 데이터 필터 설정
5. PCA 도표로 데이터 클러스터링 평가

이러한 단계를 완료한 후 배수 변화(fold change) 및 유의성 분석(significance analysis) 등의 통계 도구를 통해 데

이터를 평가했습니다. 최종 분석 단계는 분류 모델 구축 및 시험이었습니다. 질량 스펙트럼 라이브러리 검색 및 분자식 예측 수행을 통해 모델에 사용된 화합물을 판별하는 것과 같은 추가적 데이터 처리도 진행했습니다.

## 결과 및 토의

### 데이터 수집 및 처리

EV00 시료를 분석하여 GC/Q-TOF로 검출 가능한 화합물을 선별했습니다. 일반적으로 MassHunter의 크로마토그래피 디콘볼루션 도구로 약 150개의 피크를 식별할 수 있습니다(그림 1). cold split 주입 방식이 사용되었으며, 주입구 온도를 50°C에서 300°C까지 높여 열분해를 최소화했습니다. 일찍 용리되는 피크를 잘 분리하기 위해 초기에 오븐 온도를 5°C/분의 속도로 상승시켰습니다.

MassHunter 디콘볼루션 도구로 피크를 검출한 후, MassHunter 내보내기 도구를 사용하여 Mass Profiler Professional(MPP) 소프트웨어에서 가져올 수 있는 CEF 파일을 생성했습니다.

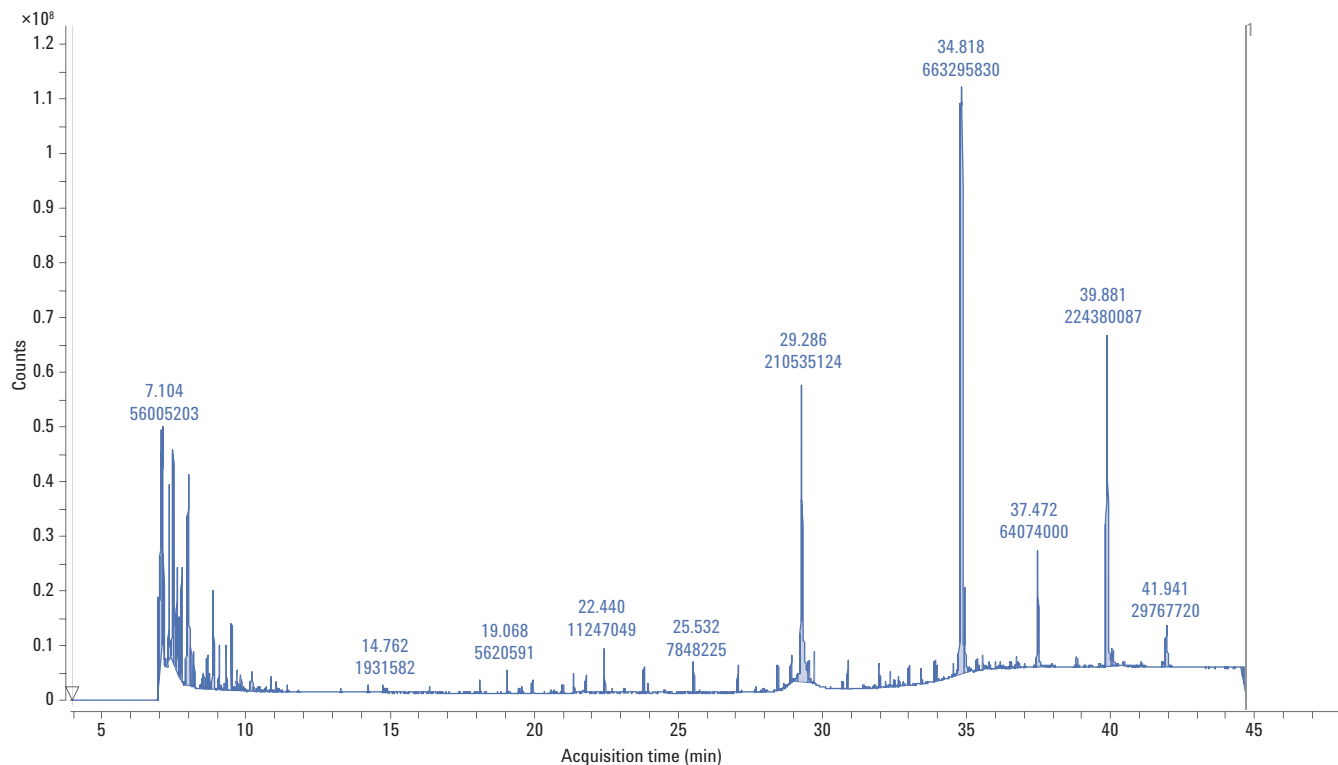


그림 1. 일반적으로 크로마토그래피 디콘볼루션으로 약 150개의 피크가 판별되며, 상대 면적 필터는 가장 큰 피크의 0.1%로 하였습니다.

추출된 이온 크로마토그램(Extracted Ion Chromatograms, EIC)은 스펙트럼 패턴 및 머무름 시간을 기준으로 MPP에서 조정되었습니다. 추출된 스펙트럼의 경우 상호 상관 인자와 머무름 시간 일치가 각각 0.6과 0.05분이어야 동일한 성분으로 간주되었습니다. 그림 2의 질량 대비 머무름 시간 도표는 올리브 오일 시료에서 442개의 고유한 성분이 확인되었음을 나타냅니다. 대부분은 한두 차례만 나타났기에 데이터 필터링 단계에서 제거했습니다.

시료군을 정의한 후 MPP에서 데이터 필터를 설정했습니다. 성분 필터링은 고품질 데이터 세트의 생성에 유리하며 차후에 이루어지는 다변량 분석이 더욱 유의미해집니다. 첫 번째 필터는 어떤 성분(화합물)이 최소 1개 시료군에 100% 함유되어 있었는지를 확인했습니다(빈도 분석). 이 빈도 필터는 잠재적인 마커 수를 442개에서 91개로 줄였습니다.

## 통계 분석

ASCII 또는 텍스트 유형의 결과를 처리하기 위해 개발된 복잡한 통계 소프트웨어를 사용하면 마커 발견을 위한 통계 분석이 시간 소모가 큰 지루한 작업이 되는 경우가 많습니다. 불필요한 정보를 많이 담고 있는 복잡한 데이터를 효율적으로 활용하는 데 필요한 정교한 데이터 관리, 필터링, 통계 분석, 해석, 모델 생성 및 예측을 위해서는 MPP가 이상적입니다. MPP는 조작하기 쉬운 워크플로를 제공하므로 사용자가 데이터를 평가하는 최선의 방법을 결정하는 데 도움을 줍니다. 전문가들은 사용하고자 하는 데이터 처리 기능으로 바로 이동할 수 있습니다. 자세한 내용은 Mass Profiler Professional 브로셔(5990-4164EN)를 참조하십시오.

PCA(Principle Component Analysis)는 주로 사용되는 무감독 다변량 분석 기법으로, 데이터 식별력을 유지하면서 data dimensionality reduction을 가능하게 해 줍니다.

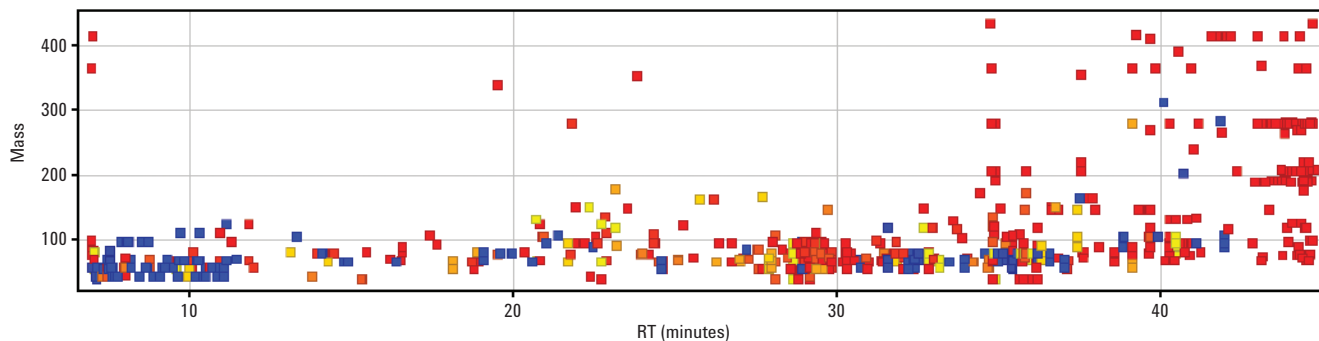


그림 2. 이 질량 대비 머무름 시간 도표는 442개의 고유한 화합물이 크로마토그래피 디콘볼루션으로 확인되었음을 보여주며, 대부분은 한두 차례만 나타났기에 MPP에서 필터링으로 제거되었습니다. 저빈도 화합물은 빨간색, 고빈도 화합물은 파란색으로 표시되었습니다.

이는 측정된 변수를 무상관 주성분으로 변환해 수행되며, 각 주성분은 원래 변수의 선형 결합입니다. PCA는 품질 관리 도구로 사용되어 데이터 클러스터링 방법에 관한 아이디어를 제공하고 이상치(outlier)를 판별합니다. 관능 검사에 통과한 시료와 탈락한 시료 사이에서 양이 다른 성분에 대해 PCA를 진행한 결과 확실히 구분되는 데이터군을 확인할 수 있었습니다(그림 3).

## 배수 변화 및 통계적 유의성 분석

관능 검사를 통과 및 탈락한 올리브 오일 시료에 상응하는 두 데이터 부류가 확인된 후 통계 분석을 수행했습니다. 특정 화합물의 농도에서 배수 변화(증가)의 양을 먼저 확인했습니다. 이러한 분석을 통해 선택한 데이터 부류 간에 큰 차이를 보이는 성분을 판별했습니다. 즉, 통과 및 탈락한 EVOO 시료 간 농도가 2배, 3배, 4배 등으로 차이가 났습니다.

다음으로, ANOVA(Analysis of Variance)를 사용하여 배수 변화 기준을 충족하는 화합물 간의 차이가 통계적으로 유의한지 여부를 확인했습니다. 확률값  $p$ 를 0.01로 두고 빈도 필터를 통해 얻은 91개 성분을 5개의 유의한 화합물로 줄였습니다. 배수 변화 분석 및 ANOVA의 결과는 Volcano Plot으로 나타냈습니다(그림 4).  $p$ 값이 가장 낮고 배수 변화가 가장 많은 5개 화합물을 선택하여 분류 모델을 구축했습니다.

## 분류 모델

분류의 목표는 여러 변수로 기술되고 분류 정보에 상응하여 알려진 라벨로 확인되는 예시 학습 세트를 기반으로 일반적인 가설을 세우는 것입니다. 전자에서 후자로 매핑을 학습하는 것이 과제입니다. 통계 또는 인공 지능을 바탕으로 하는 수많은 기법이 이러한 목적을 위해 개발되었습니다[4]. 여기서는 관능 검사 탈락과 연관성이 있는 것으로 보이는 5개 화합물을 바탕으로 관능 검사에서 탈락할 올리브 오일 시료를 예측하는 것을 목표로 삼았습니다.

PLS(Partial Least Square) 분석은 측정된 변수(예: 검출된 성분,  $m/z$ )보다 관측된 값(시료 수)이 적은 경우에 맞게 특별히 고안된 방법입니다. 이는 많은 상관 변수 및 불필요한 변수(noisy variable)를 다룰 수 있어 널리 활용되고 있습니다. PLSDA(Partial Least Square Discrimination Analysis)는 관측된 부류들을 최대한 분리하여 최적의 분류를 위해 사용되는 방법으로, 대사체학 데이터를 분류하기 위한 강력한 도구가 되었습니다[4]. 따라서 올리브 오일 분류 모델을 구축하는 데 PLSDA를 사용했습니다.

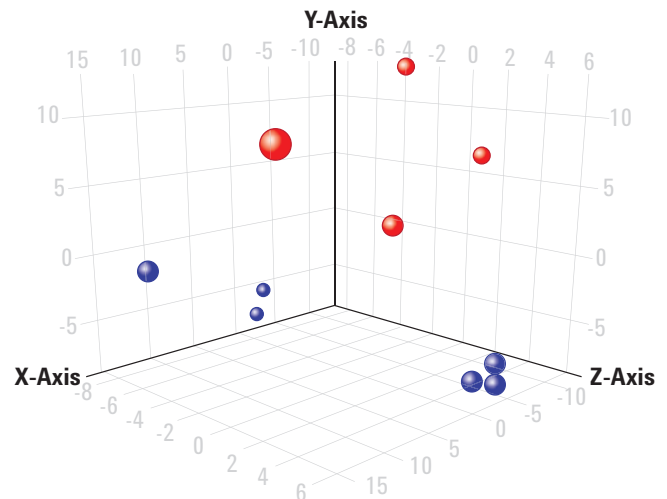


그림 3. PCA(Principal Component Analysis)는 데이터 클러스터링 방법을 보여줍니다. 관능 검사에서 탈락한 시료는 빨간색, 통과한 시료는 파란색으로 표시되어 있습니다.

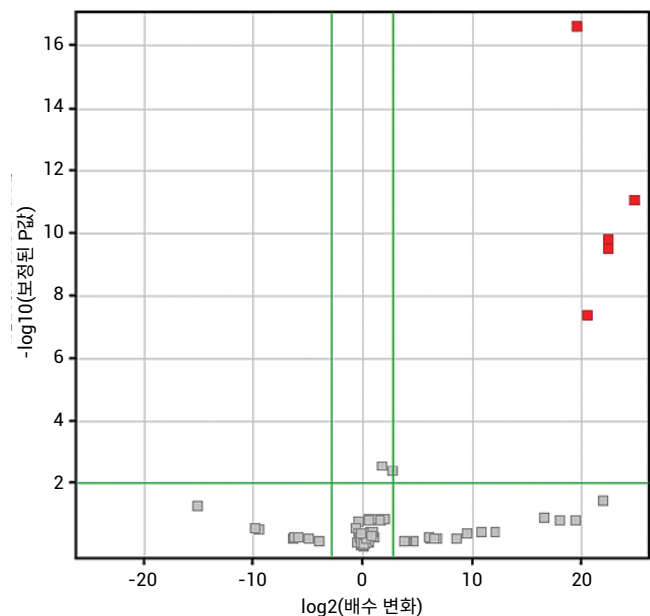


그림 4. 이 Volcano Plot의 x축에는 각 성분에 대한 배수 변화, y축에는 유의성이 나타나 있습니다. 이들 5개 화합물은 관능 검사에서 탈락한 시료로부터 수집되었습니다.

MPP 처리를 통해 선택된 5개 화합물로 두 데이터 부류를 정립한 후 다음 단계는 올리브 오일 시료의 관능 검사 통과 여부를 예측할 수 있는 모델을 만드는 것이었습니다. 분류 모델을 구축하는 첫 단계는 데이터로 모델을 학습시키는 것이었습니다(그림 5).

이 모델을 시험하기 위해 모델 구축 시 포함하지 않은 시료 뿐만 아니라 동일한 학습 데이터도 사용했습니다. 이는 불필요하지만 유효한 통계적 절차입니다. 동일한 분류 예측 모델을 사용하여 학습된 모델을 검증했습니다. 모델 구축 시 사용하지 않은 시료를 포함해 한정된 수의 시료를 이용한 이 모델의 정확도는 100%였습니다(그림 6). 이 결과는 EVOO의 관능 검사 통과 여부를 정확하게 예측할 수 있는 모델 개발의 가능성을 입증합니다.

Identifier	Training	Predicted(Training)	Confidence
CSC1-EI-1: Ig2	[F, Training]	[F, Training]	1.000
FSW2-EI-1: Ig2	[F, Training]	[F, Training]	1.000
ESC1-EI-1: Ig2	[P, Training]	[P, Training]	1.000
ESC2-EI-1: Ig2	[P, Training]	[P, Training]	1.000
RSA1-EI-1: Ig2	[P, Training]	[P, Training]	1.000

그림 5. PCA 도표에 나와 있는 세 가지 클러스터 각각을 대표하는 화합물을 포함하고 있는 PLSD 학습 세트

Prediction Results				μ
Identifier	Grade	Training	Predicted(Class Pre...	Confidence
PAC1-EI-1: Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
ESC2-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
ESC1-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
SAC1-EI-1: Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
RFC2-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
RSA2-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
CSC1-EI-1: Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
RSA1-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
EFC1-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
FSW2-EI-1: Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000

그림 6. 이 모델은 모델 구축 시 사용하지 않은 시료를 포함해 모든 시료의 검사 통과 여부를 정확하게 예측했습니다. 예측 모델을 구축하는 데 사용하지 않은 시료의 경우 Training 변수가 'None'으로 설정되어 있습니다.

## 화합물 판별

Agilent 7200 시리즈 GC/Q-TOF와 같은 기기의 장점은 EI, CI 및 생성 이온 스캔 모드에서 데이터를 수집할 수 있다는 점입니다. 이러한 독립적인 작동 모드는 데이터 확인에 도움이 됩니다. EI 스펙트럼은 라이브러리 검색을 가능하게 하고 조각화 데이터를 제공하며 CI는 화학식에 관한 정보를 제공합니다. 또한 생성 이온 스캔 MS/MS는 EI 또는 CI를 통해 생성된 이온에 적용 가능한 정확한 질량 하부구조 검색용 데이터를 생성합니다.

분류 모델에 사용된 화합물이 무엇인지 알 필요는 없지만 판별 과정을 통해 이들 화학 성분이 올리브 오일의 관능 품질에 직간접적으로 악영향을 미칠 수 있는 메커니즘을 이해할 수 있습니다. Agilent 7200 시리즈 GC/Q-TOF는 정확한 질량 구조 정보를 제공함으로써 화합물 판별(ID)에 굉장한 이점을 제공합니다.

Agilent MassHunter Qualitative 소프트웨어를 사용하여 정확한 질량 크로마토그래피 디콘볼루션을 수행하고 간섭을 일으키는 피크에서 순수한 스펙트럼을 추출했습니다. 그런 다음 NIST 데이터베이스에서 이러한 EI 스펙트럼을 검색했습니다(그림 7). 마지막 화합물을 제외한 모든 화합물은 상응하게 매칭되는 EI 스펙트럼이 검색되었습니다. 조각화 패턴이 일관됨에도 불구하고 일치도(match factor)는 사중극자 기반 기기로 획득할 때 얻을 수 있는 일치도보다 낮았습니다. 이는 대부분의 NIST 라이브러리 데이터가 사중극자 질량 분석기로부터 얻어진 것이기 때문입니다. 사중극자 기반 기기의 반응은 TOF(Time of Flight)에서보다 낮은 질량 범위에서 최적화되므로 두 가지 유형의 질량 분석기가 각기 다른 질량 범위에서 최적의 성능을 보입니다.

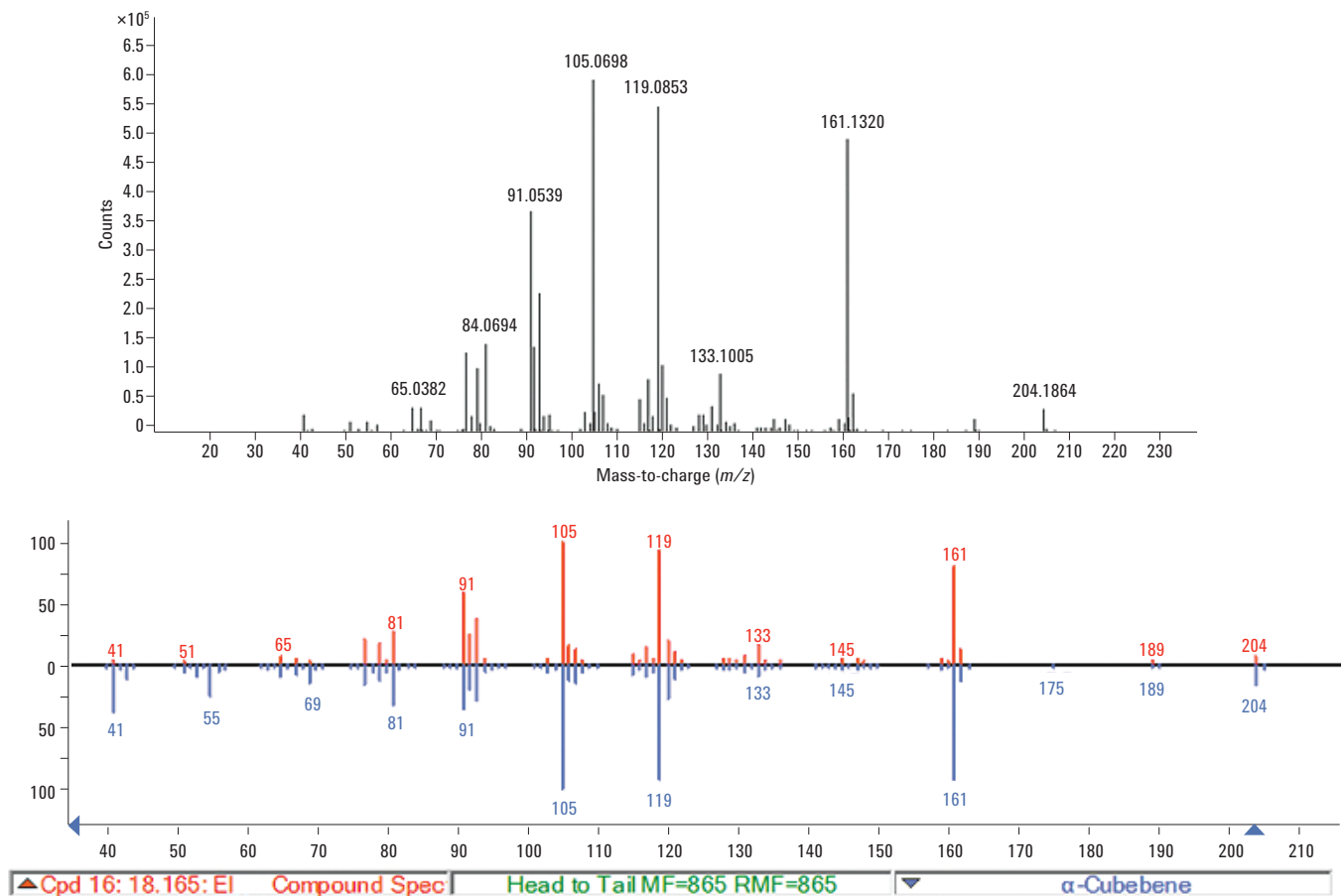


그림 7. 정확한 질량 EI GC/Q-TOF 데이터를 사용해 Wiley 및 NIST와 같은 상업용 단위 질량 EI 스펙트럼 라이브러리를 검색하여 화합물을 판별할 수 있습니다.



EI 이온에 대해 제공되는 정확한 질량 정보가 수집된 화합물에 대한 잠정적인 판별을 확정하는 데 도움이 되었습니다. 이때 한 화합물 제외한 모든 화합물(주요 분자 이온 부재)에 대해 5ppm 미만의 질량 정확도를 확인할 수 있었습니다(그림 8).

정확한 PCI 질량 데이터를 사용하여 각 마커 화합물에 대한 분자식을 얻었습니다(그림 8). 이 데이터의 관찰된 조각화 패턴을 통해 다섯 번째 화합물(아래 행)의 분자식이 확인되었습니다. 예상 피크 227m/z 및 (M+C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>) + PCI 부가 생성물과 함께 H<sub>2</sub>O 손실과 일치하는 209m/z 조각이 관찰되었습니다. 191m/z 조각은 두 번째 물 분자의 손실을 나타냅니다. 이 데이터는 화합물이 화학식 C<sub>14</sub>H<sub>26</sub>O<sub>2</sub>의 diol이라는 가설로 이어집니다. 이 화합물의 질량 정확도는 8ppm을 살짝 넘어 저신호 강도와 일치합니다. NIST 데이터베이스 검색을 통해 판별한 네 가지 화합물의 특성을 조사한 후 이들 모두가 올리브 오일의 풍미에 기여하는 향을 지니고 있으며 이로 인해 관능 검사를 통과하지 못하는 결과가 초래될 수 있다고 판단했습니다(그림 9).

MPP ID	잠정적 NIST ID	NIST 일치	화학식	CAS	EI, M <sup>++</sup>			PCI, [M+H] <sup>+</sup>		
					계산값	측정값	질량 오차 (ppm)	계산값	측정값	질량 오차 (ppm)
55.0@27.546	n-Hexadecanoic acid	789	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	57-10-3	256.2397	256.2385	4.7	257.2475	257.2470	1.9
73.0@29.750	Octadecanoic acid, ethyl ester	703	C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O <sub>2</sub>	111-61-5	312.3023	312.3008	4.8	313.3101	313.3091	3.2
81.0@35.731	Squalene	831	C <sub>30</sub> H <sub>50</sub>	111-02-4	410.3907	410.3904	0.7	411.3985	411.3987	0.5
105.0@20.906	a-Cubebene	880	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	17699-14-8	204.1873	204.1883	4.9	205.1951	205.1945	2.9
71.0@27.260	NIST 데이터베이스에 없음	N/A	C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	N/A	226.1927	ND	ND	227.2006	227.1987	8.4

그림 8. PCI 스펙트럼 데이터는 EI 스펙트럼에 모분자 이온(마지막 행)이 나타나지 않은 경우를 포함하여 관능 검사에서 탈락하는 올리브 오일로부터 수집된 화합물의 분자 이온에 관한 정확한 질량 정보를 제공했습니다.

MPP ID	잠정적 NIST ID	NIST 일치	화학식	CAS	향	출처
55.0@27.546	n-Hexadecanoic acid	789	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	57-10-3	약한 오일향	Bedoukian Research
73.0@29.750	Octadecanoic acid, ethyl ester	703	C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O <sub>2</sub>	111-61-5	왁스향	The Good Scents Company
81.0@35.731	Squalene	831	C <sub>30</sub> H <sub>50</sub>	111-02-4	꽃향	The Good Scents Company
105.0@20.906	a-Cubebene	880	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	17699-14-8	허브향	The Good Scents Company

그림 9. 관능 검사 탈락과 관련된 것으로 확인된 네 가지 화합물의 향 특성 목록



## Molecular Structure Correlator를 이용한 구조 확인

Q-TOF 생성 이온 스펙트럼은 생성된 모든 조각 이온을 제안된 구조 이성질체와 연관시킬 수 있는지 확인하는 데 도움이 됩니다. Molecular Structure Correlator는 ChemSpider 데이터베이스에서 하부구조 검색을 수행하고 그 결과를 가능한 모든 구조 이성질체와 연관시킵니다. 각 조각 이온은 제안된 화학식을 깨져야 하는 화학 결합 수를 기반으로 한 불이식과 함께, 제안된 화학식에 대한 질량 오차를 기반으로 순위가 결정되었습니다. 이성질체의 개별 양립성 점수(Compatibility Score)는 조각 이온 점수의 가중 평균이며, 각 조각 이온의 강도와 질량을 고려합니다 (그림 10).

이 도구는 EI 라이브러리 검색을 보완하는 것으로, 검색 결과 29.75분에 생성된 피크가 ethyl ester임을 분명히 확인할 수 있습니다. 29.75 분에 생성된 화합물과 가장 일치하는 것은 ethyl octadecanoate입니다. Molecular Structure Correlator는 312  $m/z$  전구체의 생성 이온이 ethyl octadecanoate와의 연관성이 높으며 양립성 점수가 98을 넘는다는 사실을 보여줍니다(그림 10). 또한 조각 이온의 정확한 질량 정보는 예상 질량과 잘 연관되며 모든 조각의 질량 오차는 5ppm 이내에 있습니다. 이는 화합물 판별을 뒷받침하는 또 다른 정보입니다.

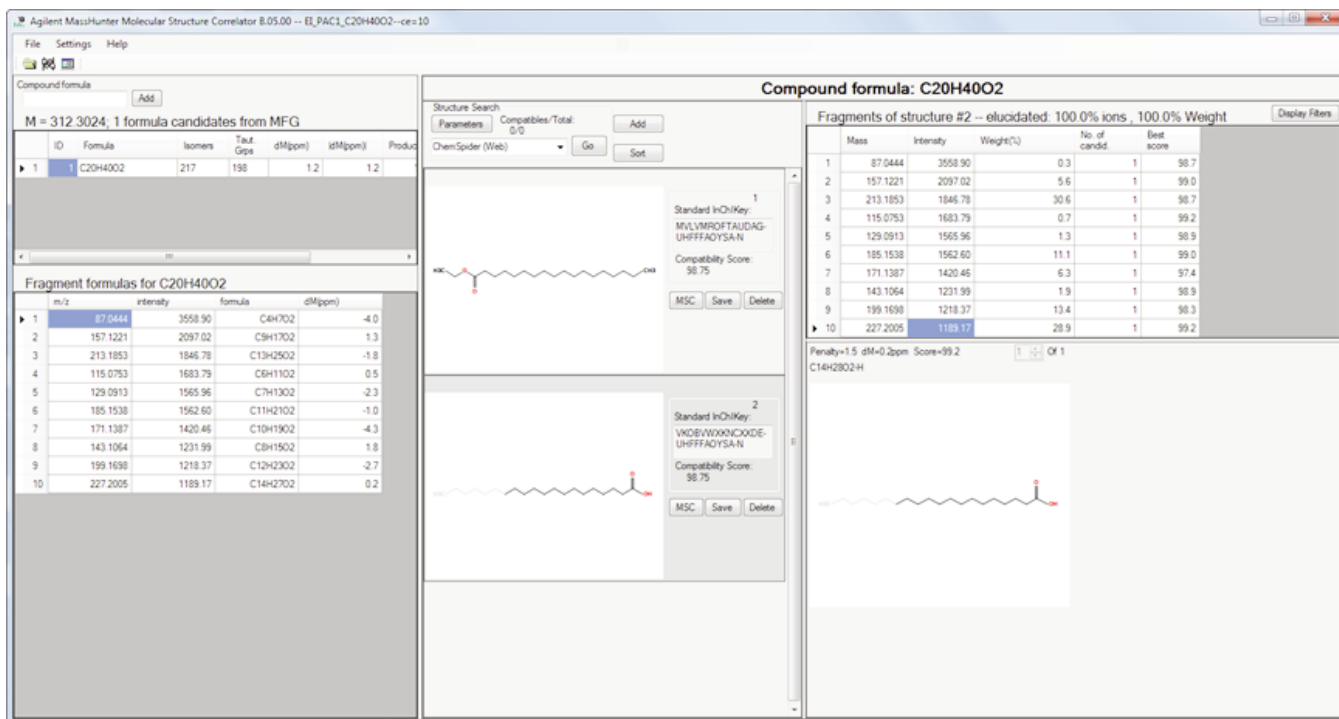


그림 10. Molecular Structure Correlator는 Q-TOF 생성 이온 스펙트럼을 화학식의 구조 이성질체에 비교해 어떤 생성 이온이 이성질체 조각과 관련이 있고 양립성 점수를 생성하는지 확인합니다.

## 결론

Agilent GC/Q-TOF 시스템으로 생성한 정확한 질량 티 및 PCI 스캔 데이터를 사용하여 올리브 오일의 관능 검사 통과 여부를 정확하게 예측하는 모델을 구축했습니다. 매우 적은 양의 시료 세트로 구축한 모델이나 이러한 접근법의 가능성을 입증해 줍니다. 훨씬 더 많은 시료를 사용하여 예측 모델을 구축하면 올리브 오일 생산자들이 저렴하면서도 빠른 검사를 통해 자신이 생산하는 오일의 관능 검사 통과 여부를 판단하여 질 낮은 오일에 대해 비용과 시간이 많이 드는 관능 검사를 시행할 필요가 없게 됩니다. EVOO에 수집된 화합물 중 관능 검사에서 탈락하게 만드는 화합물이 향으로 확인되었고, 올리브 오일의 풍미에 부정적인 영향을 미친다는 가설에 신빙성이 있음이 밝혀졌습니다. 이러한 접근법은 올리브 오일에 비교적 저렴한 다른 오일이 섞여 있는지 여부를 예측할 수 있는 모델을 구축하는 데 사용될 수도 있습니다.

## 참고문헌

1. Olive Oil in the U.S., 3rd Edition, Apr 1, 2009, a marketing report from Packaged Facts (<http://www.packagedfacts.com/Olive-Oil-Edition-2071654/>)
2. E. N. Frankel, R. J. Mailer, C. F. Shoemaker, S. C. Wang, J. D. Flynn, "Tests indicate that imported "extra virgin"olive oil often fails international and USDA standards" UC Davis Olive Center, July 2010 (<http://olivecenter.ucdavis.edu/news-events/news/files/olive%20oil%20final%20071410%20.pdf>)
3. L. Vaclavik, O. Lacina, J. Hajslova, J. Zweigenbaum. "The use of high performance liquid chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry coupled to advanced data mining and chemometric tools for discrimination and classification of red wines according to their variety.", *Anal Chim Acta*. **685**, 45-51 (2011)
4. J. Boccard, J. L. Veuthey, S. Rudaz. "Knowledge discovery in metabolomics: an overview of MS data handling." *J Sep Sci*. **33**, 290-304 (2010)

## 자세한 정보

이러한 데이터는 일반적인 결과를 나타냅니다. 애질런트 제품 및 서비스에 대한 자세한 내용은 애질런트 웹사이트 ([www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem))를 참조하십시오.

[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)

애질런트는 이 문서에 포함된 오류나 이 문서의 제공, 이행 또는 사용과 관련하여 발생한 부수적인 또는 결과적인 손해에 대해 책임을 지지 않습니다.

본 발행물의 정보, 설명 및 사양은 공지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc., 2012  
2012년 3월 23일  
한국에서 인쇄  
5991-0106KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 우)04418  
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부  
고객지원센터 080-004-5090 [www.agilent.co.kr](http://www.agilent.co.kr)



**Agilent Technologies**