

OpenLab CDS용 Custom Calculator 도구의 고급 활용: 올리고뉴클레오타이드의 예

서론

OpenLab CDS의 Custom Calculator 기능을 사용하면 기본 결과 정보에 대한 계산을 포함할 수 있습니다. 이러한 계산을 사용하여 응용 목적에 부합하는 결과 또는 품질 관리 통계를 생성할 수 있습니다. 맞춤형 계산을 사용하면 기존 시스템 생성 결과에서 수학적 및 비수학적 계산을 기반으로 새로운 값을 얻을 수 있습니다(그림 1). 시료의 각 피크 또는 전체 주입 세트에 대해 계산을 생성할 수 있으며 복잡한 다중 변수 계산도 가능합니다. 한 번의 마우스 클릭으로 프로세싱 method에 맞춤 계산을 주입할 수 있습니다.

Custom Calculator 및 사용자 지정 계산은 실험실에서 강력한 도구로 활용할 수 있습니다. 그러나 Custom Calculator를 사용하여 고급 워크플로를 위한 method를 만드는 데 두려움이 앞설 수 있습니다. 이 개요에서는 올리고뉴클레오타이드 최종 제품의 피크 면적 계산(상당한 계산이 필요함)과 올리고뉴클레오타이드 획득 및 분석법 세트에 대한 보고에 OpenLab CDS용 Custom Calculator를 사용하는 방법을 보여줍니다.

올리고머 분석은 생산 및 보관 단계에서 발생하는 다양한 분자 변형으로 인해 복잡해질 수 있으며, LCMS 및 소프트웨어 워크플로를 통한 순도 분석 시에 이 부분을 고려해야 합니다. 처음에는 하나의 표적 화합물로 시작했지만 분석 중에 화학종이 여러 첨가이온(나트륨, 칼륨 등)으로 나타날 수 있습니다. 공정 불순물 및 분해물도 존재하며 하나 이상의 핵염기에 의해 FLP(전체 길이 생성물)보다 짧거나 길어 데이터 분석 중에 고려해야 할 훨씬 더 많은 화학종이 생겨나는 상황으로 이어질 수도 있습니다. 구현된 Custom Calculator 워크플로는 FLP, Shortmer, Longmer, Depurinated, Oxidized FLP 등과 같은 그룹별로 수집된 데이터를 %Area 보고서에 의미 있게 분류하는 동시에 수작업 단계를 줄여 엄청난 시간을 절약하는 데 도움을 줍니다.

100개 이상의 질량 스펙트럼 데이터 채널에 대해 원래 소프트웨어의 수동 워크플로 대신 Custom Calculator를 사용하여 달성한 시간 절약과 이 Custom Calculator를 실행하는 실험실 및 직원의 역할을 비교하여, OpenLab CDS용 Custom Calculator와 이 프로세스로 생성된 보고서로 자동화된 순도 워크플로를 도입함으로써 실험실을 성공적으로 이끌 수 있는 방법을 보여줍니다.

저자

Jarod N Grossman, Niels Van Herck,
Frederick Thibaut
Agilent Technologies, Inc.

Willy Verluyten, Anja Deckers,
Jean-Paul Boon, Mario Hellings
Janssen Pharmaceutical
Companies of Johnson & Johnson

분석법 생성 및 활용

합성 올리고뉴클레오타이드 시료에는 동시 용출 크로마토그래피 불순물이 많이 포함되어 있습니다. 출하 및 안정성 목적으로 이러한 불순물을 정량하기 위한 특정 크로마토그래피 분석법을 사용할 수 있어야 합니다. 기본적으로, 이러한 분석법은 UV 및 MS 검출을 기반으로 하며 안정성을 나타내야 합니다. 크로마토그래피 선택성과 MS 선택성의 조합으로 정확한 순도 데이터 세트가 생성됩니다. 이를 위해 미리 정의된 시간 범위 내에서 프로세싱하고 모든 특정 m/z 채널을 추출할 수 있습니다. 결과적인 모든 면적을 합하면 최대 120개의 불순물까지 모든 MS 불순물 목록에 대한 %Area 보고서가 생성됩니다. 또한 이 분석 절차는 정확하고 QC 친화적이어야 하며 관련 프로세싱 단계에서 작업량을 가능한 낮게 유지해야 합니다.

맞춤 계산으로 다음과 같은 작업을 효율화할 수 있습니다.

분석에 정의된 주입 수준에서 결과 보기 (예: method별).

최종 보고서에서 결과 직접 보기

발견 사항을 시각화하여 빠른 결정을 가능케 함



그림 1. OpenLab CDS용 Custom Calculator 개요.

Agilent MSD XT SQ 기기에서 MS 전체 스캔 채널을 추출하고 사전 정의된 시간 범위 내에서 프로세싱하며 모든 데이터를 하나의 %Area 보고서로 결합하여 보고하기 위해 Custom Calculator를 사용한 자동화 도구가 개발되었습니다.

그림 2는 수작업 및 자동화의 관점에서 method를 생성하기 위한 워크플로를 보여줍니다. 그림 3은 사용자가 Custom Calculator를 사용하여 매일 몇 시간씩 절약할 수 있음을 보여줍니다. 최소 애질런트 권장 사양을 갖춘 워크스테이션 PC에서 최대 수요에 따라 수작업 프로세싱 method를 채우는 데 최소 30~45분의 작업 시간이 걸리지만 복잡한 시료 세트의 경우 최대 몇 시간이 걸릴 수 있습니다. 시퀀스에서 사용하려는 모든 고유한 프로세싱 method에 이 시간을 사용해야 합니다.

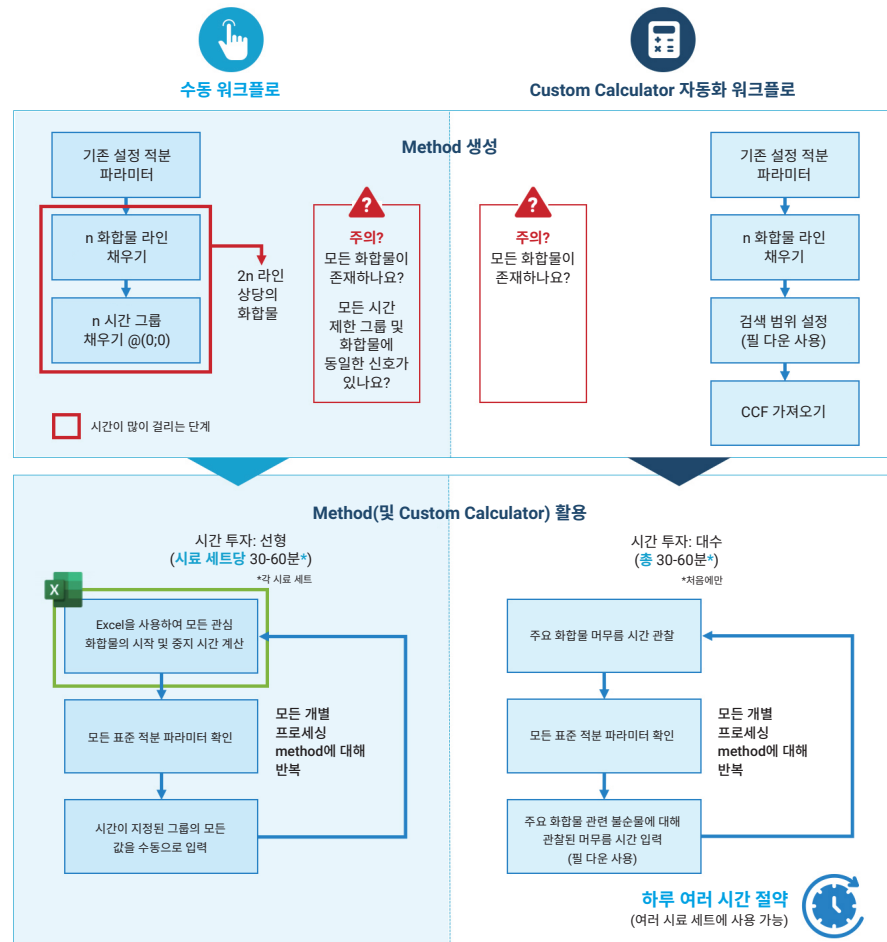


그림 2. 수동 및 자동 method 워크플로 생성 비교. Custom Calculator 자동화 워크플로는 수동 method에 비해 상당한 시간을 절약해줄 수 있습니다.

평균적으로, 수작업 프로세싱에는 최소 30분이 소요되지만 시료 세트당 최대 2시간이 소요되는 경우도 있습니다. 자동화된 프로세싱 method는 생성하는데 15분이 소요되며(단순한 method 사용) 기기 분석법의 수명 기간 동안 사용할 수 있습니다. 자동화된 method는 컴퓨터에서 처리하는 데 2분이 걸립니다. 실험 기준이 자동 계산을 허용하는 경우 컴퓨터가 대부분의 작업을 수행합니다. 이 시간 동안은 사용자가 직접 작업할 필요가 없으므로 자동화된 method에 더 많은 시간을 할애할 수 있습니다. 피크 이동이 너무 심한 경우 반복 분석이 필요할 수 있습니다. 그림 3과 같이 Custom Calculator 자동화 워크플로를 만들고 활용하여 얻어지는 효율성은 분석 시료 수가 증가함에 따라 크게 높아질 수 있습니다.

Custom Calculator 도구가 특정 올리고 프로젝트에 맞게 프로그래밍되면 해당 분석 시퀀스의 특정 머무름 시간만 도구에 추가됩니다. Custom Calculator는 많은 수의 시료를 포함하는 경우를 포함하여 시퀀스의 %Area MS 순도 데이터를 신속하게 추출 및 처리하고 정확하게 보고할 수 있습니다.

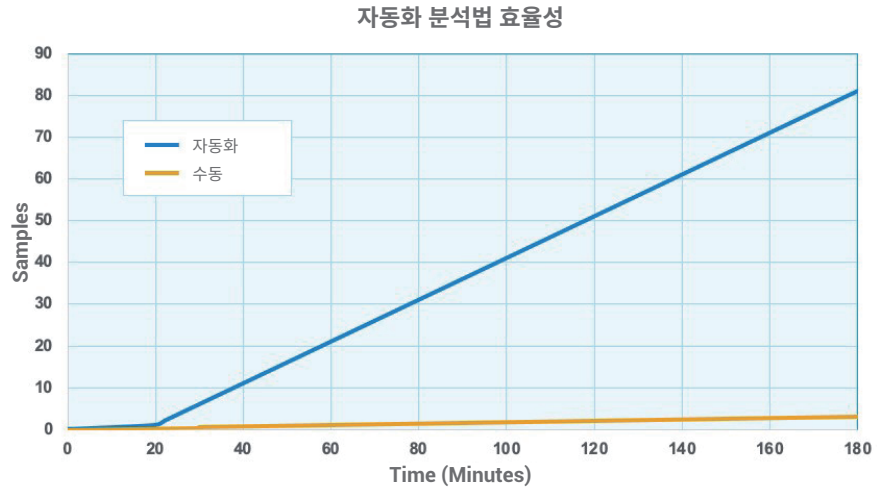


그림 3. Custom Calculator 자동화 method를 만들고 활용하면 시간을 크게 절약하고 시료 결과 프로세싱/보고 처리량을 높일 수 있습니다.

워크플로 및 역할

그림 4는 Custom Calculator가 OpenLab CDS method로 작동하는 방식과 이것이 화합물 세부 정보와 상호 작용하는 방식에 대한 기술 세부 정보를 보여줍니다. 또한 이 Custom Calculator의 기능을 활용하기 위해 실험실 구성원이 수행할 간단한 단계와 프로그램을 지속적으로 실행하기 위해 실험실 분석가와 관리자에게 기대하는 사항도 나와 있습니다.

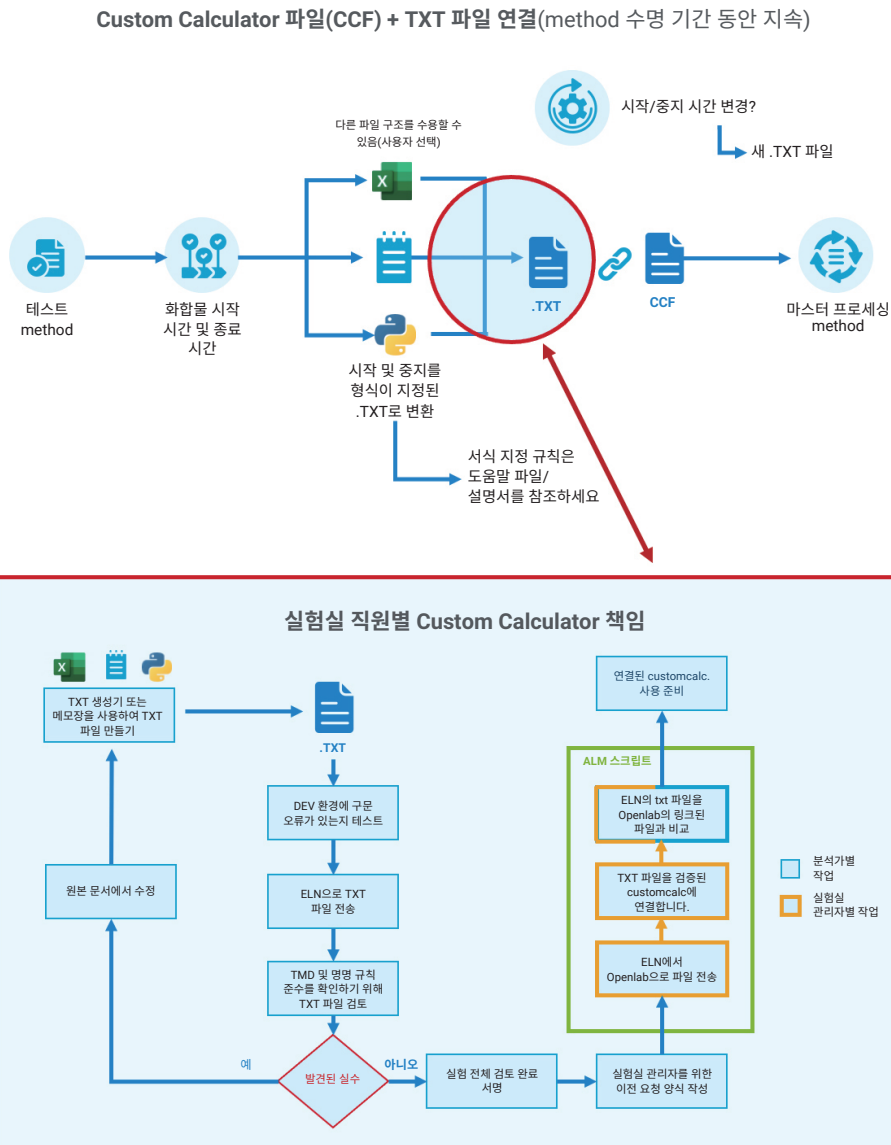


그림 4. 이 그림은 Custom Calculator가 OpenLab CDS method로 작동하는 방식과 이것이 화합물 세부 정보와 상호 작용하는 방식에 대한 기술적 정보를 보여줍니다. 이 그림에는 또한 Customer Calculator의 기능을 활용하기 위해 명확하게 역할이 지정된 실험실 구성원이 수행할 간단한 단계와 프로그램을 지속적으로 실행하기 위해 실험실 분석가와 관리자에게 기대되는 사항도 나와 있습니다.

보고서 생성

이 특정한 Custom Calculator method의 전반적인 목표는 올리고뉴클레오타이드 및 시료의 모든 불순물에 대한 MS 면적 % 보고서를 생성하는 것입니다. 다음은 이 전체 Custom Calculator 프로세스에서 나온 실질적이고 고도로 사용자 정의 가능한(아직 수정됨) 보고서로, 실험실 직원과 관리자뿐만 아니라 실험실 노트북 시스템에서도 사용할 수 있습니다.

결론

이와 같은 Custom Calculator 워크플로를 한 번 설정하면 실험실에서 올리고뉴클레오타이드 주입 시료 세트당 몇 시간의 작업 시간을 절약하고 모든 올리고 분석 단계에서 수작업에 따른 오류를 제거하며 수동 계산 없이 자동으로 순도 정보를 보고할 수 있습니다. 이 소프트웨어를 활용하면 실험실에서 매일 몇 시간씩 절약하고 이전에 실험실 분석가와 관리자에게 필요했던 힘들고 시간 소모적인 수작업 단계를 제거할 수 있습니다.

애질런트는 OpenLab을 고객 워크플로에 포함시키기 위한 맞춤형 솔루션 및 컨설팅 접근 방식/서비스를 제공합니다. 자세한 정보가 필요하거나 작업에 특정한 계산을 적용하는 데 도움을 받고 싶다면 당사로 연락해 주세요.

MS 면적 % 보고서							분석 개발
데이터 파일:							
시료 명칭:	0.25mg/mL						
설명:							
결과 세트 버전:	2022-071 8-0911-42644						
시퀀스 명칭:	20220715 172840 quad 펄프와 비교						
노트북 코드:							
Elims 번호:							
시료 정보:							
식별자:	1						
명칭	m/z	RT 시작	RT 중지	면적 불랭크	수정된 면적	면적 %	
화합물 1	1438.9	13.45	13.95		0.00	0.00	
화합물 2	1451.0	13.40	13.70		0.00	0.00	
화합물 3	1463.0	13.90	14.20		1170.26	0.01	
화합물 4	1637.2	13.90	14.20		1628.04	0.01	
화합물 5	1640.5	13.80	14.10		1036.57	0.01	
화합물 6	1641.9	13.85	14.15		0.00	0.00	
화합물 7	1645.1	13.90	14.20		21347.39	0.11	
화합물 8	1647.6	13.90	14.20		1666.11	0.01	
화합물 9	1664.7	14.52	14.82		4632.45	0.02	
화합물 10	1668.5	14.20	14.50		6806.11	0.03	
화합물 11	1669.9	13.90	14.20		1704.25	0.01	
화합물 12	1682.5	13.90	14.20		12149.27	0.06	
화합물 13	1685.7	13.85	U.15		0.00	0.00	
화합물 14	1690.2	13.90	14.20		28749.61	0.15	
화합물 15	1698.5	13.78	14.08		17658.89	0.09	
화합물 16	1700.7	13.95	14.25		88707.30	0.45	
화합물 17	1702.7	13.85	14.15		0.00	0.00	
화합물 18	1705.1	13.45	13.85		193043.26	0.99	
화합물 19	1705.9	13.85	14.15		346351.05	1.77	
화합물 20	1708.7	11.15	14.00		239922.34	1.22	
화합물 21	1709.1	14.00	14.30		18416621.08	94.01	
화합물 22	1712.3	14.25	14.55		25261.92	0.13	
화합물 23	1712.7	13.75	14.05		136058.06	0.69	
화합물 24	1717.8	14.35	14.65		17227.70	0.09	
화합물 25	1719.7	14.70	15.00		21026.15	0.11	
화합물 26	1738.7	14.55	15.65		0.00	0.00	
인쇄: 2022-07-18 11:1 5:23+02:00							1/2페이지

MS 면적 % 보고서

분석 개발

명칭	m/z	RT 시작	RT 중지	면적 불랭크	보정된 면적	면적 %
화합물 27	1748.4	14.35	14.65		0.00	0.00
화합물 28	1770.8	14.20	14.50		0.00	0.00
화합물 29	1773.2	14.15	14.45		0.00	0.00
화합물 30	1776.4	14.20	14.50		0.00	0.00
화합물 31	1777.8	14.30	14.60		2509.73	0.01
화합물 32	1780.9	14.15	14.45		4705.98	0.02

요약

화합물 그룹 1의 합계

1.77

화합물 그룹 3의 합계

0.14

화합물 그룹 2의 합계

0.21

화합물 그룹 4의 합계

0.04

총 면적

19589983.53

전자 서명:

사용 가능한 전자 서명 데이터가 없습니다.

인쇄: 2022-07-18 11:1 5:23+02:00

2/2페이지

그림 5. 이 자동화 프로세스로 생성된 최종 보고서의 예.

Custom Calculator로 수행할 수 있는 작업에 대해 자세히
알아보려면 다음을 방문하세요

www.agilent.com/chem/openlab-custom-calculator

OpenLab CDS에 대한 더 자세한 내용:

www.agilent.com/chem/openlab-cds

DE49522774

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2023
2023년 2월 1일, 한국에서 발행
5994-5654KO

한국애질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com