



OpenLab CDS

## 데이터 분석 참조 안내서

# 공지 사항

## 문서 정보

문서 번호 : D0028019ko Rev. A  
간행 판 : 01/2024

## Copyright

© Agilent Technologies, Inc. 2012-2024

이 설명서의 어떤 부분도 미국 및 국제 저작권법에 의해 규정되는 바와 같이 Agilent Technologies, Inc.의 사전 동의 및 승인을 받지 않고는 어떠한 형태나 수단(전자식 저장 및 검색 또는 번역 포함)으로도 복사가 허용되지 않습니다.

Agilent Technologies, Inc. 5301  
Stevens Creek Blvd. Santa Clara, CA  
95051,

미국

## 소프트웨어 수정판

본 안내서는 Agilent OpenLab CDS의 개정 2.8에 유효합니다.

## 보증

이 문서에 포함된 자료는 "있는 그대로" 제공되며, 별도의 통지 없이 향후 개정판에서 변경될 수 있습니다. 관련 법률이 허용하는 한도 내에서 애질런트는 상품성 및 특정 목적에의 적합성에 대한 묵시적 보증을 포함하여(단, 이에 국한되지 않음), 이 설명서 및 설명서에 포함된 일체의 내용에 있어 모든 명시적이거나 암묵적인 보증을 부인합니다. 애질런트는 이 문서 또는 이 문서에 포함된 모든 정보의 제공, 사용 또는 이행과 관련된 오류나 부수적 또는 간접적 손해에 대해 책임을 지지 않습니다. 애질런트와 사용자가 이 문서에서 위와 같은 조건들과 상충하는 사항들을 다루는 보증 조건을 포함하는 별도의 서면 협의를 체결하는 경우에는 별도 협의서 상의 보증 조건들이 우선 적용됩니다.

## 기술 라이선스

이 문서에서 언급되는 하드웨어 및/또는 소프트웨어는 라이선스 하에서 제공되며 그와 같은 라이선스의 조건에 따라서만 사용되거나 복제될 수 있습니다.

## 제한된 권리에 관한 설명

미국 정부의 제한된 권리. 연방정부에 허가된 소프트웨어 및 기술 데이터 권리는 일반적으로 최종 소비자들에게 제공되는 권리만 포함합니다. 애질런트는 FAR 12.211 (Technical Data), 12.212 (Computer Software), 국방부에 대해서는, DFARS 252.227-7015 (Technical Data - Commercial Items), 그리고 DFARS 227.7202-3 (Rights in Commercial Computer Software or Computer Software Documentation)에 따라 소프트웨어 및 기술 데이터에 대해 이러한 일반적인 상업적 라이선스를 제공합니다.

## 안전 사항

### 주의

"주의"는 위험을 의미합니다. 이는 정확하게 수행되거나 충실하게 지켜지지 않으면 제품의 손상이나 중요한 데이터의 손실을 초래할 수도 있는 작업 절차, 실행 등에 대한 주의를 환기시키기 위함입니다. 표시된 조건들이 충분히 이해되고 충족될 때까지는 작업을 더 이상 진행하면 안 됩니다.

### 경고

"경고"는 위험을 의미합니다. 이는 정확하게 수행되거나 충실하게 지켜지지 않으면 부상이나 사망을 초래할 수도 있는 작업 절차, 실행 등에 대한 주의를 환기시키기 위함입니다. 표시된 조건들이 충분히 이해되고 충족될 때까지는 작업을 더 이상 진행하면 안 됩니다.

## 이 안내서에서...

이 안내서는 고급 사용자, 시스템 관리자 및 Agilent OpenLab CDS 검증 담당자를 대상으로 합니다. 계산 원리와 데이터 분석 알고리즘에 대한 참조 정보가 포함되어 있습니다.

이 안내서를 사용하여 사용자 요구 사항 사양에 따라 시스템 기능을 검증하고 검증 계획에 정의된 시스템 검증 작업을 정의 및 실행하십시오. 다음 리소스에는 추가 정보가 포함되어 있습니다.

- 컨텍스트별 작업("방법") 정보, 사용자 인터페이스에 대한 참조 및 문제 해결 도움말: OpenLab 도움말 및 학습.
- 시스템 설치 및 현장 준비에 대한 세부 정보: OpenLab CDS 요구 사항 안내서, OpenLab CDS 워크스테이션 안내서 또는 OpenLab CDS 클라이언트 및 AIC 안내서.

### 1 신호 준비

이 장에서는 신호가 적분되기 전에 바탕 감산 등을 통해 신호를 준비하는 방법을 설명합니다.

### 2 ChemStation 적분기를 통한 적분

이 장에서는 OpenLab CDS의 ChemStation 적분기의 개념과 적분기 알고리즘을 설명합니다.

### 3 EZChrom 적분기를 통한 적분

이 장에는 EZChrom 적분기 이벤트에 대한 설명이 포함되어 있습니다.

### 4 피크 식별

이 장에서는 피크 식별의 개념을 설명합니다.

### 5 검량

이 장에는 검량 프로세스에 사용되는 계산에 대한 세부 정보가 포함되어 있습니다.

### 6 정량

이 장에서는 화합물을 정량화하는 방법을 설명하고 정량화에 사용되는 계산에 대해 설명합니다.

## 7 UV 스펙트럼 분석

이 장에서는 불순물 확인의 개념과 UV 스펙트럼 분석을 기반으로 한 화합물 식별 확인에 대해 설명합니다.

## 8 질량 분석

이 장에서는 질량 분석을 기반으로 한 시료 순도 계산에 대해 설명합니다.

## 9 시스템 적합성

이 장에서는 분석 장비와 분석법의 성능을 평가하기 위해 OpenLab CDS이(가) 수행할 수 있는 작업에 대해 설명합니다.

# 목차

1	신호 준비	7
	신호 평활화	8
	바탕 감산	10
2	ChemStation 적분기를 통한 적분	11
	적분이란 무엇입니까?	12
	적분기 알고리즘	14
	작동 원리	19
	피크 인식	20
	피크 면적 측정	29
	바탕선 할당	32
	적분기 이벤트	45
3	EZChrom 적분기를 통한 적분	64
	적분기 이벤트	65
	바탕선 코드 설명	79
4	피크 식별	81
	피크 식별이란 무엇입니까?	82
	충돌 해결	84
	상대 머무름 시간	85
	시간 참조 화합물	87
	처리 방법 업데이트	89
5	검량	93
	검량이란 무엇입니까?	94
	결합된 검량 곡선	95
	결합된 검량 곡선 계산	105
	결합된 검량 곡선 평가	112

6	정량	117
	정량이란 무엇입니까?	118
	보정 계수	119
	농도 및 질량%	120
	면적% 및 높이%	121
	보정된 화합물의 정량	122
	교정되지 않은 화합물의 정량	127
	식별되지 않은 피크의 정량	129
	정규화	130
	그룹의 정량	133
7	UV 스펙트럼 분석	139
	UV 스펙트럼 분석이란 무엇입니까?	140
	UV 불순물 확인	142
	UV 확인	152
8	질량 분석	153
	MS 시료 순도	154
	MS 피크 순도	156
9	시스템 적합성	158
	시스템 적합성 평가	159
	노이즈 결정	161
	피크 비대칭성 및 대칭성 계산	170
	시스템 적합성 공식 및 계산	172
	성능 테스트 정의	173

# 1

## 신호 준비

신호 평활화	8
일반적인 접근 방식	8
알고리즘 세부 정보	9
바탕 감산	10

이 장에서는 신호가 적분되기 전에 바탕 감산 등을 통해 신호를 준비하는 방법을 설명합니다.

이 장에서는 신호가 적분되기 전에 준비하는 방법에 대해 설명합니다.

### 주

바탕 감산 및 평활화 설정을 모두 사용하여 데이터를 처리하는 경우, 시스템은 먼저 평활화를 수행한 다음 평활화된 신호로 바탕 감산을 수행합니다.

## 신호 평활화

### 일반적인 접근 방식

#### 전제 사항

모든 평활화 알고리즘은 데이터가 등거리 데이터라고 가정합니다. 등거리가 아닌 데이터는 보간을 적용하고 등거리가 아닌 데이터에서 가장 작은 시간차를 사용하여 데이터를 다시 샘플링하여 등거리 데이터로 변환됩니다.

비 MS 데이터는 스플라인 보간을 사용하여 변환됩니다.

MS 데이터의 경우 변환은 평활화 알고리즘에 따라 달라집니다. **Savitzky-Golay**에서는 스플라인 보간이 사용됩니다. **Moving average** 또는 **Gaussian**에서는 선형 보간법이 사용됩니다.

#### 평활화 - 기본 알고리즘

모든 평활화 알고리즘은 다음과 같은 접근 방식을 사용하여 평활화 계수로 채워진  $2m+1$  크기의 창을 적용합니다.

$$x'(i) = \sum_{j=-m}^{j=m} x(i+j) \cdot a(j)$$

где:

$a$	평활 계수의 배열
$x'$	평활화된 신호
$m$	평활화 창의 절반 너비를 지정하는 짝수

이 방식을 사용하면 전체 창 크기가 홀수  $2m+1$ 가 됩니다.

#### 가장자리 처리

평활 계수는 정규화되어야 하므로 가장자리를 특별히 고려해야 합니다.

**Moving average** 및 **Gaussian** 필터링의 경우, 창은 왼쪽 또는 오른쪽 가장자리에서 잘리고 계수는 총 합이 1이 되도록 다시 계산됩니다(정규화).

**Savitzky-Golay**의 경우 처리가 더 복잡합니다. 신호의 가장자리에 가까운 곳에서도 Savitzky-Golay 필터링의 특성을 보존해야 합니다. [“알고리즘 세부 정보”](#) 페이지 9을(를) 참조하십시오.



## 알고리즘 세부 정보

### 이동 평균

**Moving average**은 가장 간단한 평활화 알고리즘입니다. 모든 계수는 다음과 같이 계산됩니다.

$$a(i) = \frac{1}{2m+1}; i = [-m, m]$$

где:

$a$  평활 계수의 배열

$m$  평활화 창 의 절반 너비를 지정하는 짝수

즉, 평활화 함수는 직사각형 형태를 갖습니다. 이러한 종류의 평활화를 박스카 평균화라고도 합니다.

### 가우시안

**Gaussian** 평활화는 가우스 정규 분포에서 샘플링된 계수를 사용합니다. 창 크기로  $2m+1$ 라는 숫자가 주어지면 정규 분포의 표준 편차  $\sigma$ 는 다음과 같이 계산됩니다.

$$\sigma = \frac{2m+1}{6} - 1$$

그런 다음 개별 계수는 다음과 같이 계산됩니다.

$$a'(i) = e^{-\frac{1}{2}(\frac{i}{\sigma})^2}; i = [-m, m]$$

두 번째 단계에서는 계수의 합이 1이 되도록 계수를 정규화합니다.

$$a(i) = \frac{a'(i)}{\sum_{j=-m}^m a'(j)}$$

### Savitzky-Golay

Savitzky-Golay 평활화 계수는 함수 아래 면적이 변하지 않도록 하는 방식으로 계산됩니다. 계수 계산은 Gorry의 논문 콘볼루션(Savitzky-Golay) 분석법에 의한 일반 최소 제곱 평활화 및 미분(1990)<sup>1</sup>.

이 계산은 Savitzky-Golay 평활화의 면적 보존 특성이 신호의 경계에서도 유효한지 확인합니다.

<sup>1</sup> Gorry, P.A., 1990. General Least-Squares Smoothing and Differentiation by the Convolution (Savitzky-Golay) Method. Analytical Chemistry 62, 570-573.

## 바탕 감산

시료를 분석할 때, 얻은 신호는 분석 물질뿐만 아니라 희석 용매, 이동상, 첨가물 등에 의해 발생할 수 있습니다. 바탕 감산을 사용하면 분석 물질의 기여도만 포함된 깨끗한 크로마토그램을 얻을 수 있습니다.

바탕 신호는 다음에서 발생할 수 있습니다.

- 시퀀스 내의 바탕 시료
- 시퀀스 외부의 바탕 시료(예: 단일 실행)

새 신호는 바탕 시료를 감산하여 계산합니다.

■ 새 신호 = 시료 신호 - 바탕 신호

특정 파장을 사용하여 추출한 크로마토그램의 경우:

■ 새 신호 = 파장의 시료 신호 - 파장의 바탕 신호

특정  $m/z$ 를 사용하여 추출한 크로마토그램의 경우:

■ 새 신호 =  $m/z$ 의 시료 신호 -  $m/z$ 의 바탕 신호

바탕과 시료의 데이터 수집 주기가 다른 경우 바탕의 데이터 수집 주기가 조정됩니다. 데이터 포인트는 보간(MS 데이터의 경우 선형 보간, 비 MS 데이터의 경우 스플라인 보간)을 통해 제거되거나 생성됩니다.

시료의 작동 시간이 바탕의 작동 시간보다 긴 경우 새 신호에는 보정된 데이터 포인트와 보정되지 않은 데이터 포인트가 포함됩니다.

## 2

# ChemStation 적분기를 통한 적분

적분이란 무엇입니까?	12
적분은 무엇을 합니까?	12
적분기 기능	12
적분기 알고리즘	14
개요	14
초기 바탕선 정의	15
바탕선 추적	16
바탕선 할당	17
용어 정의	18
작동 원리	19
피크 인식	20
피크 폭	20
피크 인식 필터	21
번칭	22
피크 인식 알고리즘	23
병합된 피크	24
숄더	25
기본 바탕선 구성	25
바탕선 코드	26
피크 면적 측정	29
면적 결정	29
단위 및 변환 계수	31
바탕선 할당	32
바탕선 보정 모드	32
피크 대 골짜기 비율	33
탄젠트 스키밍	35
탄젠트 스킵 모드	38
숄더 모드	41
탄젠트 스킵 모드와 숄더 모드 결합	43
적분기 이벤트	45
표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트	45
표준 적분기 이벤트: 시간 초과 이벤트	49
고급 적분기 이벤트	61

이 장에서는 OpenLab CDS의 ChemStation 적분기의 개념과 적분기 알고리즘을 설명합니다.

## 적분이란 무엇입니까?

적분은 신호에서 피크를 찾아 그 크기를 계산합니다.

적분은 다음을 위해 필요한 단계입니다.

- 식별
- 검량
- 정량

## 적분은 무엇을 합니까?

신호가 적분되면 소프트웨어는

- 각 피크의 시작 및 종료 시간을 식별합니다.
- 각 피크의 정점, 즉 머무름/이동 시간을 찾습니다,
- 바탕선을 구성합니다.
- 각 피크의 면적, 높이, 피크 폭 및 대칭을 계산합니다.

이 프로세스는 적분기 이벤트라는 파라미터에 의해 제어됩니다.

## 적분기 기능

적분기 알고리즘에는 다음과 같은 주요 기능이 포함됩니다.

- 여러 신호 또는 둘 이상의 검출기를 사용하는 경우 각 크로마토그래피 신호에 대한 개별 적분기 이벤트 테이블을 정의하는 기능
- 사람의 해석이 필요한 크로마토그램의 그래픽 수동 적분
- 적분 결과에 대한 주석
- 면적 제한, 높이 제한, 피크 폭, 기울기 감도, 솔더 검출, 바탕선 보정 및 전면/꼬리 탄젠트 스킴 검출에 대한 기본 적분기 설정을 설정하거나 수정하기 위한 적분기 파라미터 정의
- 힘 바탕선, 유지 바탕선, 모든 골짜기의 바탕선, 다음 골짜기의 바탕선, 현재 피크의 끝에서 바탕선 뒤로 이동 피팅, 시간 범위에서 가장 가능성이 높은 바탕선 지점등의 바탕선 제어 파라미터

적분이란 무엇입니까?

- 면적 합산 제어
- 마이너스 피크 인식
- 용매 피크 정의 검출
- 적분기 작동을 위한 머무름 시간 범위를 정의하는 적분기 제어 명령
- 이차도함수 계산을 통한 피크 솔더 할당

## 적분기 알고리즘

### 개요

크로마토그램을 적분하기 위해 적분기는 ...

- 1 초기 바탕선을 정의하고,
- 2 바탕선을 지속적으로 추적 및 업데이트하고,
- 3 피크의 시작 시간을 식별하고,
- 4 각 피크의 정점을 찾고,
- 5 피크의 끝 시간을 식별하고,
- 6 바탕선을 구성합니다.
- 7 각 피크의 면적, 높이, 피크 폭 및 대칭을 계산합니다.

이 프로세스는 **integration events**에 의해 제어됩니다. 가장 중요한 이벤트는 초기 기울기 감도, 피크 폭, 숄더 모드, 면적 제한 및 높이 제한입니다. 소프트웨어에서 이러한 이벤트 및 기타 이벤트의 초기 값을 설정할 수 있습니다. 초기 값은 크로마토그램을 시작할 때 적용됩니다.

대부분의 경우 초기 이벤트는 전체 크로마토그램에 대해 바람직한 적분 결과를 제공하지만, 적분 진행을 더 잘 제어하고 싶을 때가 있을 수 있습니다.

이 소프트웨어를 사용하면 크로마토그램에서 적절한 시점에 새로운 적분기 이벤트를 프로그래밍할 수 있으므로 적분 수행 방법을 제어할 수 있습니다.

## 초기 바탕선 정의

### 카디널 포인트

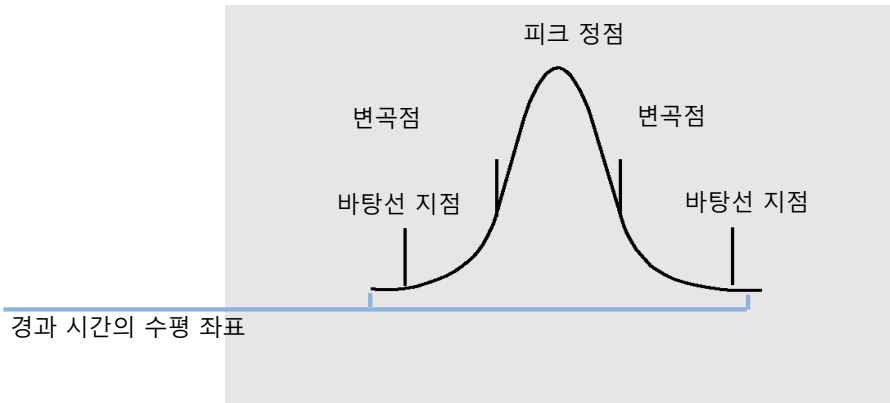


그림1 카디널 포인트

### 초기 바탕선 정의

바탕선 조건은 애플리케이션 및 검출기 하드웨어에 따라 다르므로 적분기는 적분기 이벤트와 데이터 파일의 파라미터를 모두 사용하여 바탕선을 최적화합니다.

적분기가 피크를 적분하기 전에 **baseline point**를 설정해야 합니다. 분석을 시작할 때 적분기는 첫 번째 데이터 포인트를 임시 바탕선 지점으로 삼아 초기 바탕선 레벨을 설정합니다. 그런 다음 입력 신호의 평균을 기반으로 이 초기 바탕선 지점을 재정의하려고 시도합니다. 적분기가 재정의된 초기 바탕선 지점을 얻지 못하면 첫 번째 데이터 포인트를 잠재적 초기 바탕선 지점으로 유지합니다.

### 피크의 카디널 포인트 식별

적분기는 잠재적 바탕선 지점이 바탕선 엔벨로프 외부에 있고 바탕선 곡률이 적분기의 기울기 감도 파라미터에 의해 결정된 대로 특정 값을 초과할 때 피크가 시작될 수 있다고 판단합니다. 이 조건이 계속되면 적분기는 피크의 상사면에 있음을 인식하고 피크를 처리합니다.

### 시작

- 1 기울기 및 곡률이 한계 이내: 바탕선을 계속 추적합니다.
- 2 기울기 및 곡률이 한계 초과: 피크 발생 가능성이 있습니다.

- 3 기울기가 한계 이상으로 유지됨: 피크가 인식되고, 피크 시작점이 정의됩니다.
- 4 곡률이 마이너스가 됨: 전면 변곡점이 정의됩니다.

### 정점

- 1 기울기가 0을 통과하여 마이너스가 됨: 피크의 정점, 정점 포인트가 정의됩니다.
- 2 곡률이 플러스가 됨: 후면 변곡점이 정의됩니다.

### 끝

- 1 기울기와 곡률이 한계 이내: 피크의 끝이 가까워집니다.
- 2 기울기와 곡률이 한계 이내에 유지: 피크의 끝이 정의됩니다.
- 3 적분기가 바탕선 추적 모드로 돌아갑니다.

## 바탕선 추적

적분기는 실행이 진행됨에 따라 초기 피크 폭 또는 계산된 피크 폭에 의해 결정된 속도로 디지털 데이터를 샘플링합니다. 적분기는 각 데이터 포인트를 잠재적인 바탕선 지점으로 간주합니다.

적분기는 기울기가 첫 번째 도함수에 의해 결정되고 곡률이 두 번째 도함수에 의해 결정되는 바탕선 추적 알고리즘을 사용하여 바탕선의 기울기로부터 **바탕선 엔벨로프**를 결정합니다. 바탕선 엔벨로프는 현재 데이터 포인트에 끝이 있는 원뿔 형태로 시각화할 수 있습니다. 원뿔의 상한 및 하한 허용 레벨은 다음과 같습니다.

- + 상사면 + 곡률 + 바탕선 편향이 임계값 레벨보다 낮아야 합니다,
- - 상사면 - 곡률 + 바탕선 편향이 임계값 레벨보다 더 플러스(즉, 덜 마이너스)여야 합니다.

새로운 데이터 포인트가 허용되면 원뿔은 브레이크아웃이 발생할 때까지 앞으로 이동합니다.

바탕선 지점으로 허용되려면 데이터 포인트가 다음 조건을 충족해야 합니다.

- 정의된 바탕선 엔벨로프 내에 있어야 합니다,
- 데이터 포인트에서 바탕선의 곡률(도함수 필터에 의해 결정됨)이 현재 기울기 감도 설정에 따라 결정되는 대로 임계값 미만이어야 합니다.

분석 시작 시 설정된 초기 바탕선 지점은 피크 폭에 의해 결정된 비율로 피크 폭에 의해 결정된 기간 동안 바탕선 엔벨로프 내에 있는 데이터 포인트의 이동 평균으로



지속적으로 재설정됩니다. 적분기는 피크 상승 기울기가 감지될 때까지 드리프트를 보상하기 위해 바탕선을 추적하고 주기적으로 재설정합니다.

## 바탕선 할당

적분기는 분석 중에 피크 폭 값에 의해 결정된 주파수로 크로마토그래피 바탕선을 할당합니다. 적분기가 특정 수의 데이터 포인트를 샘플링하면 바탕선을 초기 바탕선 지점에서 현재 바탕선 지점으로 재설정합니다. 적분기는 다음 데이터 포인트 세트에 대한 바탕선 추적을 재개하고 바탕선을 다시 재설정합니다. 이 프로세스는 적분기가 피크의 시작을 식별할 때까지 계속됩니다.

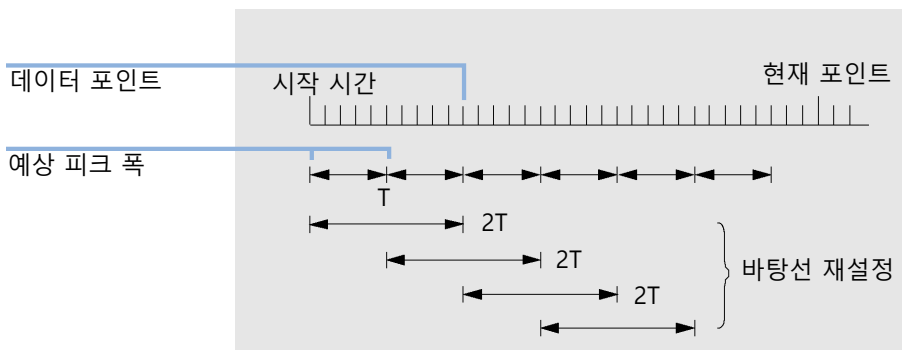


그림2 바탕선

적분 프로세스가 시작될 때 첫 번째 데이터 포인트가 사용됩니다. 이 바탕선 지점은 그림과 같이 주기적으로 재설정됩니다(\*\* '바탕선' on page 17 \*\* 참조).

면적은 시간  $T$ (예상 피크 폭)에 걸쳐 합산됩니다. 이 시간은 데이터 포인트 하나보다 짧을 수 없습니다. 이는 바탕선 조건이 존재하는 한 계속됩니다. 기울기 및 곡률도 구합니다. 기울기와 곡률이 모두 임계값보다 작으면 두 면적을 합산한 후 이전 바탕선과 비교합니다. 새 값이 이전 바탕선보다 작으면 새 값이 이전 값을 즉시 대체합니다. 새 값이 이전 값보다 크면 잠정적인 새 바탕선 값으로 저장되고 기울기 및 곡률 평탄도 기준을 충족하는 값이 하나 더 있는 경우 확인됩니다. 마이너스 피크가 허용되는 경우 후자의 제한은 적용되지 않습니다. 바탕선 중에 빠르게 상승하는 용매도 검사해야 합니다. 너무 빨라서 상사면을 감지하지 못할 수 있습니다. (상사면이 확인되면 용매 기준이 더 이상 유효하지 않을 수 있습니다.) 첫 번째 데이터 포인트를 통과하는 첫 번째 시간이 바탕선입니다. 신호가 기준값에 있으면  $2T$  평균으로 대체됩니다. 그런 다음 바탕선은 매  $T$ 마다 재설정됩니다(\*\* '바탕선' on page 17 \*\* 참조).

## 용어 정의

### 용매 피크

일반적으로 분석 측면에서 중요하지 않은 매우 큰 피크인 용매 피크는 정상적으로 적분되지 않습니다. 그러나 분석 관심 대상인 작은 피크가 용매 피크의 꼬리처럼 용매 피크 가까이에서 용출되는 경우, 특수 적분 조건을 설정하여 용매 피크 꼬리의 기여도에 대해 보정된 면적을 계산할 수 있습니다.

### 숄더(전면, 후면)

2개의 피크가 너무 가까이에서 용출되어 그 사이에 골짜기가 생기지 않고 분리되지 않을 때 숄더가 발생합니다. 숄더는 피크의 선행 에지(전면) 또는 피크의 후행 에지(후면)에서 발생할 수 있습니다. 숄더가 검출되면 탄젠트 스킴 또는 드롭 라인에 의해 적분될 수 있습니다.

### 기울기

시간 대비 성분 농도의 변화를 나타내는 피크 기울기는 피크의 시작, 피크 정점 및 피크의 끝을 결정하는 데 사용됩니다.

## 작동 원리

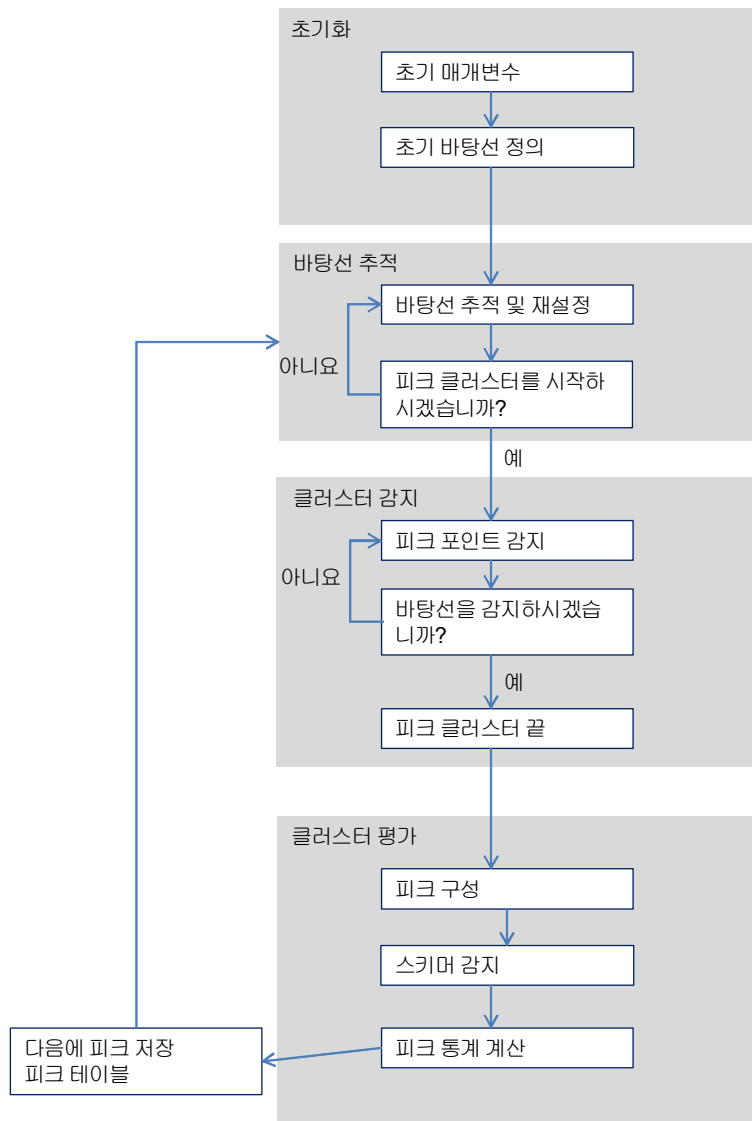


그림3 적분기 유속 다이어그램

## 피크 인식

적분기는 여러 도구를 사용하여 피크를 인식하고 특성화합니다.

- “피크 폭” 페이지 20
- “피크 인식 필터” 페이지 21
- “번칭” 페이지 22
- “피크 인식 알고리즘” 페이지 23
- “병합된 피크” 페이지 24
- “숄더” 페이지 25
- “기본 바탕선 구성” 페이지 25
- “바탕선 코드” 페이지 26

## 피크 폭

적분 중에 피크 폭은 조정된 피크 면적과 높이에서 계산됩니다.

**폭 = 조정된 면적/조정된 높이**

또는 변곡점을 사용할 수 있는 경우 변곡점 사이의 너비에서 구합니다.

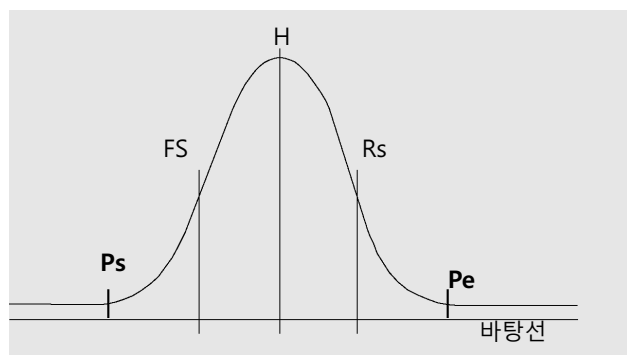


그림4 피크 폭 계산

위 그림에서 총 면적 A는 바탕선에 맞게 조정된 피크 시작(Ps)에서 피크 종료(Pe)까지의 면적의 합계입니다. Fs는 변곡점의 전면 기울기이고, Rs는 변곡점의 후면 기울기입니다.

피크 폭 설정은 적분기가 피크와 바탕선 노이즈를 구별하는 기능을 제어합니다. 좋은 성능을 얻으려면 피크 폭을 실제 크로마토그래피 피크의 폭에 가깝게 설정해야 합니다.

피크 폭을 변경하는 방법에는 세 가지가 있습니다.

- 적분 프로세스 전에 초기 피크 폭을 지정할 수 있습니다,
- 적분 프로세스 중에 적분기가 피크 인식 필터와 잘 일치하도록 필요에 따라 피크 폭을 자동으로 업데이트합니다,
- 적분 프로세스 중에 시간 프로그래밍된 이벤트를 사용하여 피크 폭을 재설정하거나 수정할 수 있습니다.

## 피크 인식 필터

적분기에는 연속된 데이터 포인트 세트 내에서 기울기 및 곡률의 변화를 감지하여 피크를 인식하는 데 사용할 수 있는 세 가지 피크 인식 필터가 있습니다. 이러한 필터에는 적분기가 검사하는 데이터 포인트의 첫 번째 도함수(기울기 측정용)와 두 번째 도함수(곡률 측정용)가 포함됩니다.

### 주

신뢰할 수 있는 결과를 제공하려면 피크에 최소 10개의 데이터 포인트가 포함되어야 합니다.

인식 필터는 다음과 같습니다.

- 필터 1** 연속된 데이터 포인트 2개(3개)의 기울기(곡률)
- 필터 2** 연속된 데이터 포인트 4개의 기울기 및 비연속 데이터 포인트 3개의 곡률
- 필터 3** 연속된 데이터 포인트 8개의 기울기 및 비연속 데이터 포인트 3개의 곡률

실제 사용되는 필터는 피크 폭 설정에 따라 결정됩니다. 예를 들어 분석을 시작할 때 필터 1을 사용할 수 있습니다. 분석 중에 피크 폭이 증가하면 필터가 먼저 필터 2로 변경된 다음 필터 3으로 변경됩니다. 인식 필터에서 좋은 성능을 얻으려면 피크 폭을 실제 크로마토그래피 피크의 폭에 가깝게 설정해야 합니다. 실행 중에 적분기는 적분을 최적화하기 위해 필요에 따라 피크 폭을 업데이트합니다.

적분기는 기기 테크닉에 따라 업데이트된 피크 폭을 다른 방식으로 계산합니다.

LC 데이터의 경우 기본 피크 폭 계산은 복합 계산을 사용합니다.

$$0.3 * (\text{오른쪽 변곡점} - \text{왼쪽 변곡점}) + 0.7 * \text{면적/높이}$$

GC 데이터의 경우 기본 피크 폭 계산은 면적/높이를 사용합니다. 이 계산은 피크가 절반 높이 지점 위로 병합될 때 너비를 과대평가하지 않습니다.

특정 유형의 분석(예: 등온 GC 및 등용매 LC 분석)에서는 분석이 진행됨에 따라 피크가 상당히 넓어집니다. 이를 보상하기 위해 적분기는 분석 중에 피크가 넓어지면 피크 폭을 자동으로 업데이트합니다. 고정 피크 폭 시간 초과 이벤트를 사용하여 업데이트를 비활성화하지 않는 한 자동으로 업데이트가 수행됩니다.

피크 폭 업데이트는 다음과 같이 가중치가 적용됩니다.

$$0.75 * (\text{기존 피크 폭}) + 0.25 * (\text{현재 피크 폭})$$

## 번칭

번칭은 적분기가 피크 인식 필터의 유효 범위 내에서 피크를 계속 넓혀 우수한 선택성을 유지하는 수단입니다.

적분기는 피크 폭을 넓히기 위해 피크 폭을 무한정 늘릴 수 없습니다. 결국 피크가 너무 넓어져 피크 인식 필터로 볼 수 없게 됩니다. 이러한 한계를 극복하기 위해 적분기는 데이터 포인트를 함께 묶어 동일한 면적을 유지하면서 피크를 효과적으로 좁힙니다.

데이터가 번칭될 때, 데이터 포인트는 번칭되지 않은 경우 = 1배, 한 번 번칭된 경우 = 2배, 두 번 번칭된 경우 = 4배 등 번칭 배수만큼 증가된 두 개로 번칭됩니다.

번칭은 데이터 수집 주기와 피크 폭을 기반으로 합니다. 적분기는 이러한 파라미터를 사용하여 적절한 수의 데이터 포인트를 제공하기 위해 번칭 계수를 설정합니다(표 1 페이지 22 참조).

번칭은 예상 또는 경험한 피크 폭을 기준으로 2의 거듭 제곱으로 수행됩니다. 번칭 알고리즘은 표 1 페이지 22에 요약되어 있습니다.

표 1 번칭 기준

예상 피크 폭	사용된 필터	번칭 완료
0~10개 데이터 포인트	첫 번째	없음
8~16개 데이터 포인트	두 번째	없음
12~24개 데이터 포인트	세 번째	없음
16~32개 데이터 포인트	두 번째	한 번
24~48개 데이터 포인트	세 번째	한 번
32~96개 데이터 포인트	세 번째, 두 번째	두 번
64~192개 데이터 포인트	세 번째, 두 번째	세 번

## 피크 인식 알고리즘

적분기는 피크 인식 알고리즘에 의해 결정된 바탕선 지점을 사용하여 피크의 시작을 식별합니다. 피크 인식 알고리즘은 먼저 피크 인식 필터의 출력을 초기 기울기 감도 값과 비교하여 상사면 누산기를 늘리거나 줄입니다. 적분기는 상사면 누산기의 값이  $\geq 15$ 가 되는 지점을 피크가 시작되었음을 나타내는 지점으로 선언합니다.

### 피크 시작

표 2 페이지 23에서 예상 피크 폭은 기울기 감도와 비교되는 필터의 기울기 및 곡률 값을 결정합니다. 예를 들어, 예상 피크 폭이 작으면 필터 1 숫자가 상사면 누산기에 추가됩니다. 예상 피크 폭이 커지면 필터 2의 숫자가 사용되고, 결국 필터 3이 사용됩니다.

상사면 누산기의 값이  $\geq 15$ 이면 알고리즘은 피크가 시작될 수 있음을 인식합니다.

표 2 상사면 누산기에 대한 증분 값

기울기 감도에 대한 도함수 필터 1~3 출력	필터 1	필터 2	필터 3
기울기 > 기울기 감도	+8	+5	+3
곡률 > 기울기 감도	+0	+2	+1
기울기 < (-) 기울기 감도	-8	-5	-3
기울기 <  기울기 감도	-4	-2	-1
곡률 < (-) 기울기 감도	-0	-2	-1

### 피크 끝

표 3 페이지 23에서 예상 피크 폭은 기울기 감도와 비교되는 필터의 기울기 및 곡률 값을 결정합니다. 예를 들어, 예상 피크 폭이 작으면 필터 1 숫자가 하사면 누산기에 추가됩니다. 예상 피크 폭이 커지면 필터 2의 숫자가 사용되고, 결국 필터 3이 사용됩니다.

하사면 누산기의 값이  $\geq 15$ 이면 알고리즘은 피크가 종료될 수 있음을 인식합니다.

표 3 하사면 누산기의 증분 값

기울기 감도에 대한 도함수 필터 1~3 출력	필터 1	필터 2	필터 3
기울기 < (-) 기울기 감도	+8	+5	+3
곡률 < (-) 기울기 감도	+0	+2	+1
기울기 > 기울기 감도	-11	-7	-4

표 3 하사면 누산기의 증분 값

기울기 감도에 대한 도함수 필터 1~3 출력	필터 1	필터 2	필터 3
기울기 >  기울기 감도	-28	-18	-11
곡률 > 기울기 감도	-0	-2	-1

### 피크 정점 알고리즘

피크 정점은 가장 높은 데이터 포인트를 통과하는 포물선 맞춤을 구성하여 크로마토그램에서 가장 높은 지점으로 인식됩니다.

### 병합된 피크

병합된 피크는 피크의 끝이 발견되기 전에 새 피크가 시작될 때 발생합니다. 그림은 적분기가 병합된 피크를 처리하는 방법을 보여줍니다.

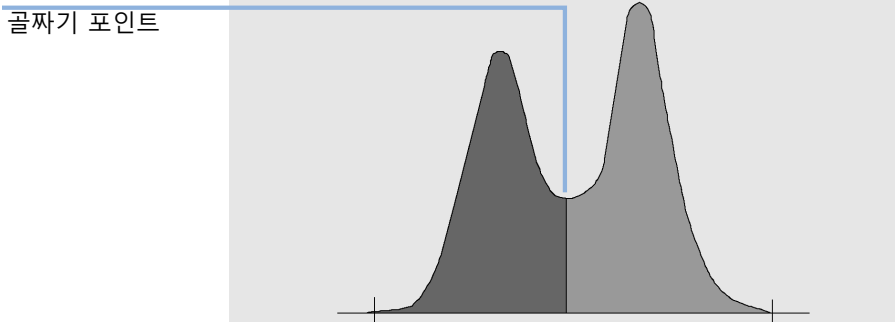


그림5 병합된 피크

적분기는 병합된 피크를 다음과 같은 방식으로 처리합니다.

- 1 골짜기 포인트까지 첫 번째 피크의 면적을 합산합니다.
- 2 골짜기 포인트에서 첫 번째 피크에 대한 면적 합산이 끝나고 두 번째 피크에 대한 합이 시작됩니다.
- 3 적분기가 두 번째 피크의 끝을 찾으면 면적 합산이 정지됩니다. 이 프로세스는 두 피크 사이의 골짜기 포인트에서 수직을 떨어뜨려 병합된 피크를 분리하는 것으로 시각화할 수 있습니다.



## 솔더

솔더는 더 큰 피크의 전면 또는 후면 가장자리에 있는 해결되지 않은 피크입니다. 솔더가 있는 경우 마이너스 기울기 뒤에 플러스 기울기가 뒤따른다는 의미에서 진정한 골짜기는 존재하지 않습니다. 피크에는 전면 및/또는 후면 솔더가 얼마든지 있을 수 있습니다.

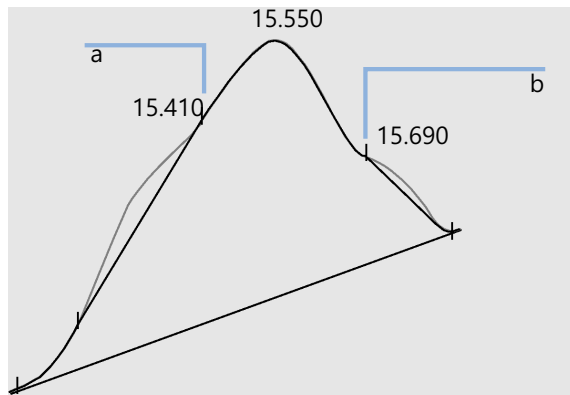


그림6 피크 솔더

솔더는 두 번째 도함수에 의해 주어진 피크의 곡률에서 감지됩니다. 곡률이 0이 되면 적분기는 \*\*\* '피크 솔더' on page 25 \*\*\*의 점 a와 b와 같은 변곡점을 식별합니다.

- 피크 정점 이전에 두 번째 변곡점이 감지되면 잠재적인 전면 솔더가 존재합니다. 솔더가 확인되면 솔더 포인트의 시작은 변곡점 이전의 최대 플러스 곡률 포인트에 설정됩니다.
- 피크 끝 또는 골짜기 이전에 두 번째 변곡점이 감지되면 잠재적인 후면 솔더가 존재합니다. 솔더가 확인되면 솔더 포인트의 시작은 피크 정점 이후 기울기의 첫 번째 최소값 지점에 설정됩니다.

머무름 시간은 솔더의 최대 마이너스 곡률 지점에서 결정됩니다. 프로그래밍된 적분기 이벤트를 사용하면 적분기는 변곡의 솔더 피크 지점에 드롭 라인이 있는 일반 피크로서 솔더 면적을 계산할 수도 있습니다.

솔더의 면적은 주 피크에서 감산됩니다.

적분기 시간 초과 이벤트를 사용하여 피크 솔더를 일반 피크로 처리할 수 있습니다.

## 기본 바탕선 구성

피크 클러스터가 완료되고 바탕선이 발견되면 적분기는 바탕선 할당 알고리즘에 페그 앤 스톱 기법을 사용하여 바탕선을 할당하도록 요청합니다. 사다리꼴 면적과 비례 높이

보정을 사용하여 가능한 가장 낮은 바탕선을 정규화하고 유지합니다. 바탕선 할당 알고리즘에 대한 입력에는 분석법의 파라미터와 적분기가 계산을 최적화하는 데 사용하는 검출기와 애플리케이션을 식별하는 데이터 파일도 포함됩니다.

가장 간단한 경우 적분기는 바탕선을 다음과 같이 일련의 직선 세그먼트로 구성합니다.

- 바탕선의 시작
- 피크 시작, 골짜기, 끝점
- 피크 바탕선

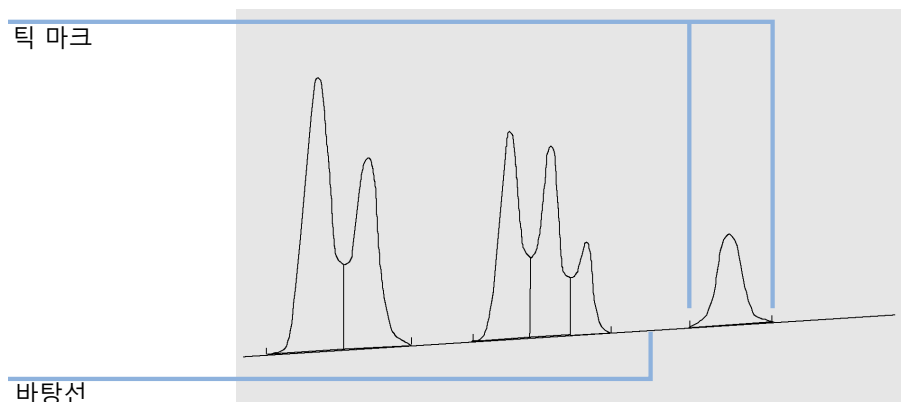


그림7 기본 바탕선 구성

## 바탕선 코드

보고서의 적분 결과에서 각 피크에는 신호 바탕선이 도출된 방법을 설명하는 2, 3 또는 4자 코드가 할당됩니다.

표 4 4자 코드

첫 번째 문자	두 번째 문자	세 번째 문자	네 번째 문자
시작 시 바탕선	종료 시 바탕선	오류/피크 플래그	피크 유형

바탕선 코드는 **Injection Results** 테이블과 모든 기본 보고서 템플릿에 포함되어 있습니다.

Injection Results								
Peaks		Summary						
#	Name	BL code	Signal description	RT (min)	Area	Area%	Height	
1		VB	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	1.940	356.576	27.285	65.775	
2		BB	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	2.578	314.315	24.051	49.125	
3		BB	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	3.022	333.322	25.506	59.034	
4		BV	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	4.517	302.650	23.159	49.419	

그림8 주입 결과

Signal: DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0

RT [min]	Type	Width [min]	Area	Height	Area%
1.940	VB	0.53	356.58	65.78	27.28
2.578	BB	0.43	314.31	49.12	24.05
3.022	BB	0.64	333.32	59.03	25.51
4.517	BV	0.59	302.65	49.42	23.16
	Sum		1306.86		

그림9 예시: 짧은 면적의 테이블 보고서

## 문자 1 및 2

첫 번째 문자는 피크가 시작될 때의 바탕선을 나타내고 두 번째 문자는 피크가 끝날 때의 바탕선을 나타냅니다.

- B** 피크가 바탕선에서 시작 또는 정지되었습니다.
- P** 바탕선이 침투되는 동안 피크가 시작 또는 정지되었습니다.
- V** 피크가 골짜기 드롭 라인에서 시작 또는 정지되었습니다.
- H** 피크가 강제 수평 바탕선에서 시작 또는 정지되었습니다.
- F** 피크가 강제 지점에서 시작 또는 정지되었습니다.
- M** 피크가 수동으로 적분되었습니다.
- U** 피크가 할당되지 않았습니다.

추가 플래그를 추가할 수도 있습니다(우선순위에 따라).

## 문자 3

세 번째 문자는 오류 또는 피크 플래그를 나타냅니다.

**A** 적분이 중단되었습니다. 예를 들어 적분기 이벤트 커짐/꺼짐 또는 신호 작동 시간 종료로 인해 발생합니다.

**D** 피크가 왜곡되었습니다(피크 형태가 잘못됨).

**바탕 공간** 피크가 정상 피크입니다.

#### 문자 4

네 번째 문자는 피크 유형을 나타냅니다. 강제 적분기 이벤트 또는 수동 적분이 트리거된 경우에만 표시됩니다. 예를 들어 적분기 이벤트를 사용하여 용매 피크를 정의하거나 수동 적분을 사용하여 바탕선을 수정하거나 피크를 삭제할 수 있습니다.

**S** 피크가 용매 피크입니다.

**N** 피크가 마이너스 피크입니다.

**+** 피크가 면적 합산 피크입니다.

**T** 탄젠트 스킴 피크(표준 스킴, 직선)입니다.

**X** 탄젠트 스킴 피크(이전 모드 지수 스킴)입니다.

**E** 탄젠트 스킴 피크(새 모드 지수 스킴)입니다.

**G** 탄젠트 스킴 피크 또는 솔더(가우시안)입니다.

**m** 수동 바탕선으로 정의된 피크입니다.

**n** 수동 바탕선으로 정의된 마이너스 피크입니다.

**T** 수동 바탕선으로 정의된 탄젠트 스킴 피크입니다.

**x** 수동 바탕선으로 정의된 탄젠트 스킴 피크(지수 스킴)입니다.

**R** 피크는 다시 계산된 피크입니다.

**f** 전면 솔더 탄젠트로 정의된 피크입니다.

**b** 후면 솔더 탄젠트로 정의된 피크입니다.

**F** 전면 솔더 드롭 라인으로 정의된 피크입니다.

**B** 후면 솔더 드롭 라인으로 정의된 피크입니다.

**U** 피크가 할당되지 않았습니다.

## 피크 면적 측정

피크 적분의 마지막 단계는 피크의 최종 면적을 결정하는 것입니다.

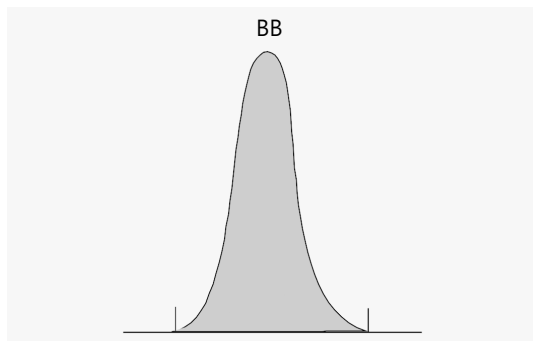


그림10 바탕선 대 바탕선 피크의 면적 측정

단순 분리 피크의 경우 피크 면적은 피크 시작과 정지 사이의 바탕선 위의 누적된 면적에 의해 결정됩니다.

## 면적 결정

적분기가 적분 중에 계산하는 면적은 다음과 같이 결정됩니다.

- 바탕선 대 바탕선(BB) 피크의 경우 \*\*\*'바탕선 대 바탕선 피크의 면적 측정'on page 29 \*\*\*에서와 같이 피크 시작과 피크 끝 사이의 바탕선 위 면적입니다.
- 골짜기 대 골짜기(VV) 피크의 경우, \*\*\*'골짜기 대 골짜기 피크에 대한 면적 측정'on page 30 \*\*\*와(과) 같이 골짜기 지점에서 수직 점선으로 분할된 바탕선 위의 면적입니다.

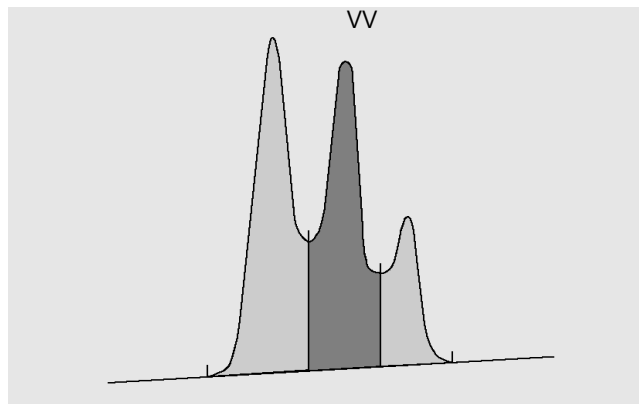


그림11 골짜기 대 골짜기 피크에 대한 면적 측정

- 탄젠트(T) 피크의 경우 재설정된 바탕선 위의 면적입니다.
- 용매(S) 피크의 경우, 마지막으로 찾은 바탕선 지점으로부터의 수평 연장 위 면적과 탄젠트(T) 피크에 주어진 재설정된 바탕선 아래 면적입니다. 용매 피크가 너무 느리게 상승하여 인식할 수 없거나, 실행 중에도 여러 개의 피크 그룹이 있어 일련의 라이더가 있는 용매로 처리해야 한다고 생각할 수 있습니다. 이 경우 일반적으로 첫 번째 피크가 나머지 피크보다 훨씬 큰 병합된 그룹이 포함됩니다. 단순한 드롭 라인 처리는 실제로는 첫 번째 피크의 꼬리에 위치하기 때문에 이후 피크가 과장됩니다. 첫 번째 피크가 용매로 인식되도록 강제함으로써 나머지 그룹은 꼬리에서 제거됩니다,
- 바탕선 아래에서 발생하는 마이너스 피크는 \*\*\* '마이너스 피크에 대한 면적 측정' on page 30 \*\*\*에 표시된 것처럼 플러스 면적을 갖습니다.

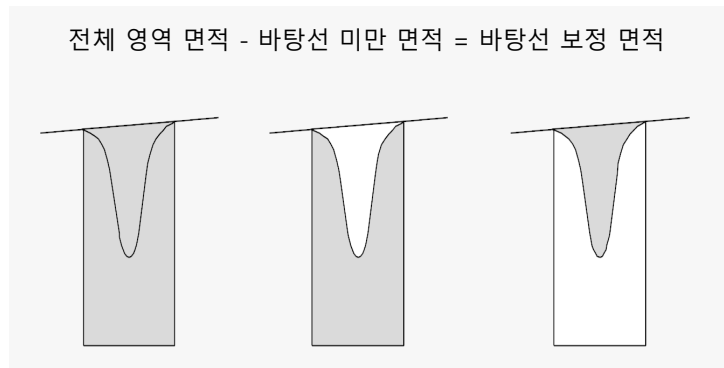


그림12 마이너스 피크에 대한 면적 측정

## 단위 및 변환 계수

외부적으로 데이터는 데이터 포인트 세트를 포함하며, 샘플링된 데이터 또는 적분 데이터일 수 있습니다. 적분 데이터의 경우 각 데이터 포인트는 **높이 × 시간**으로 표현되는 면적에 해당합니다. 샘플링된 데이터의 경우 각 데이터 포인트는 높이에 해당합니다.

따라서 적분 데이터의 경우 높이는 면적을 이전 데이터 포인트 이후 경과한 시간으로 나누어 구하는 계산된 엔티티입니다. 샘플링된 데이터의 경우 면적은 데이터에 이전 데이터 포인트 이후 경과된 시간을 곱하여 계산됩니다.

적분 계산은 두 엔티티를 모두 사용합니다. 적분기 내부에서 내부적으로 전달되는 단위는 다음과 같습니다. 면적은 **검출기 감응 × 초**, 높이는 **detector response**입니다. 이는 필요한 경우 정수 절단을 위한 공통 기반을 제공하기 위해 수행됩니다. 시간, 면적, 높이의 측정값은 소프트웨어에서 측정, 계산, 저장하는 방식과 관계없이 실제 물리적 단위로 보고됩니다.

## 바탕선 할당

### 바탕선 보정 모드

OpenLab CDS에서는 여러 가지 바탕선 보정 모드를 사용할 수 있습니다. 다음 섹션에서 설명되어 있습니다.

#### 바탕선 보정 모드: 고전 아형

신호가 구성된 바탕선(\*\*\* '바탕선 침투' on page 32 \*\*\*의 포인트 a) 아래로 떨어지면 침투가 발생합니다.

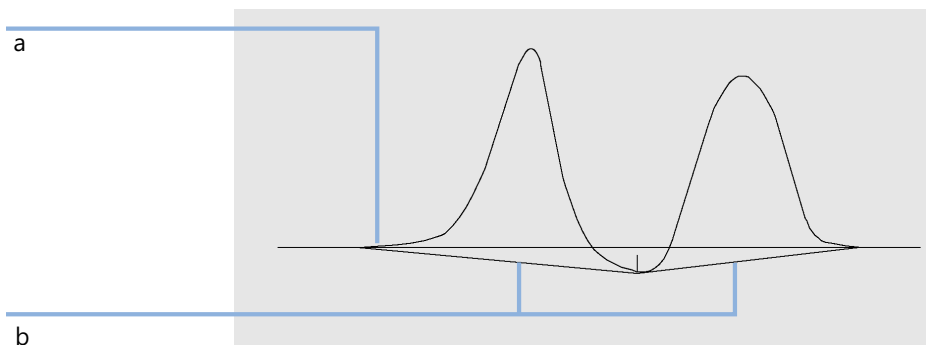


그림13 바탕선 침투

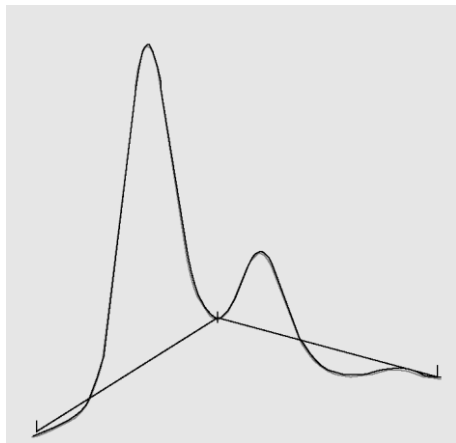
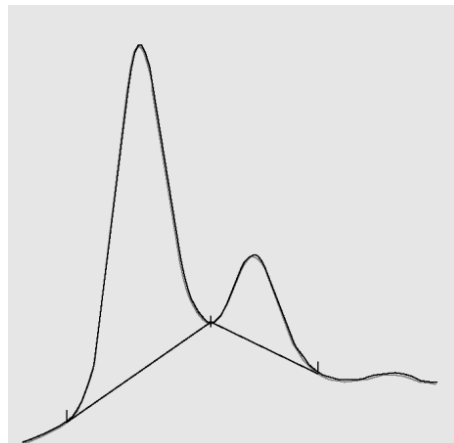
바탕선 침투가 발생하면 \*\*\* '바탕선 침투' on page 32 \*\*\*의 포인트 b에 표시된 것처럼 바탕선의 해당 부분이 재구성될 수 있습니다. 다음 보정 모드를 사용하여 모든 바탕선 침투를 제거할 수 있습니다.

- **No penetration**
- **Advanced**(최적화된 바탕선)
- **Advanced+**(최적화된 바탕선 및 솔더 검출)

#### 바탕선 보정 모드: 침투 없음

이 옵션을 선택하면 각 피크 클러스터에서 바탕선 침투를 검색합니다. 침투가 발견되면 침투가 남지 않을 때까지 피크의 시작점 및/또는 끝점이 이동됩니다.



바탕선 보정 모드 **Classical**바탕선 보정 모드 **No penetration**

## 주

바탕선 보정 모드 **No penetration**은 자식 피크와 솔더가 있는 용매 피크에는 사용할 수 없습니다.

## 바탕선 보정 모드: 고급

고급 바탕선 보정 모드에서 적분기는 피크의 시작 및 종료 위치를 최적화하고, 피크 클러스터에 대한 바탕선을 재설정하고, 바탕선 침투를 제거합니다(**“바탕선 보정 모드: 침투 없음”** 페이지 32 참조). 일반 보정 모드에 비해 고급 바탕선 보정은 기울기 감도에 덜 의존하는 보다 안정적인 바탕선을 제공합니다.

## 고급+

고급+ 바탕선 보정 모드에서는 적분기가 솔더 검출을 최적화합니다. 이는 솔더 감도를 높이고 동시에 중요한 솔더의 식별을 개선합니다. 고급 보정 모드에 비해 고급+ 바탕선 보정은 보다 안정적인 솔더 결과를 제공합니다.

고급+ 바탕선 보정 모드는 내부적으로 **Update peak height** 이벤트를 사용합니다. 따라서 피크 높이는 항상 보관된 높이가 아닌 절대 높이입니다.

## 피크 대 골짜기 비율

피크 대 골짜기 비율은 피크가 다른 물질 피크와 얼마나 잘 분리되어 있는지를 나타내는 품질 측정값입니다. 이 사용자 특정 파라미터는 고급 바탕선 추적 모드의 구성

요소입니다. 바탕선 분리가 표시되지 않는 두 피크가 드롭 라인 또는 골짜기 바탕선을 사용하여 분리되는지 여부를 결정하는 데 사용됩니다. 적분기는 더 작은 피크의 바탕선 보정 높이와 골짜기의 바탕선 보정 높이 사이의 비율을 계산합니다. 피크 골짜기 비율이 사용자가 지정한 값보다 낮으면 드롭 라인이 사용되며, 그렇지 않으면 첫 번째 피크 대 골짜기 시작 시 바탕선에서, 두 번째 피크 끝 시 골짜기에서 바탕선까지 바탕선을 그립니다(“바탕선 보정 모드: 침투 없음” 페이지 32와(과) \*\*\* '피크 골짜기 비율' on page 34 \*\*\* 비교).

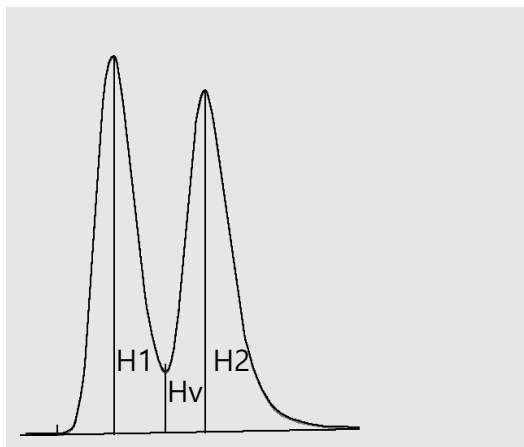


그림14 피크 골짜기 비율

피크 대 골짜기 비율은 다음 공식을 사용하여 계산합니다.

**$H1 \geq H2$ , 피크 골짜기 비율 =  $H2/Hv$**

및

**$H1 < H2$ , 피크 골짜기 비율 =  $H1/Hv$**

\*\*\* '바탕선에 대한 피크 골짜기 비율의 효과' on page 35 \*\*\*은(는) 사용자가 지정한 피크 골짜기 비율 값이 바탕선에 어떤 영향을 미치는지 보여줍니다.

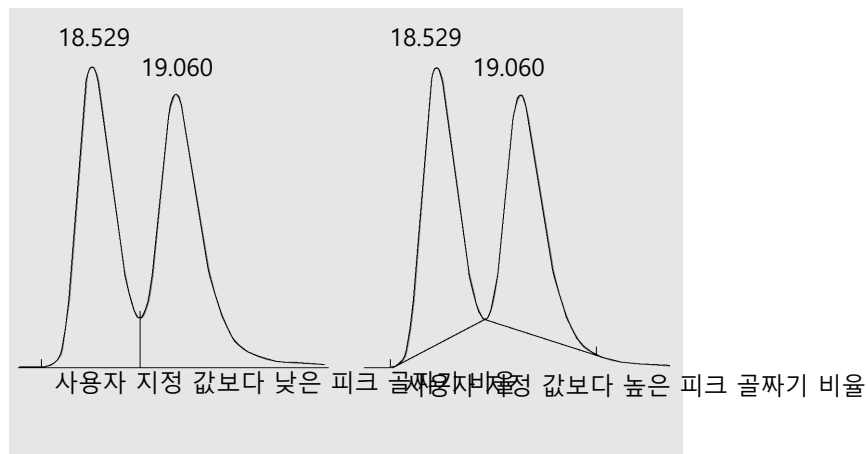


그림15 바탕선에 대한 피크 골짜기 비율의 효과

## 탄젠트 스키밍

탄젠트 스키밍은 피크의 오르막 또는 내리막에서 발견되는 피크에 대해 구성된 바탕선의 한 형태입니다. 전제 조건은 두 피크가 바탕선으로 분리되어 있지 않고 그 사이에 골짜기가 있어야 한다는 것입니다. 탄젠트 스키밍으로 감지된 피크를 **라이더 피크**라고 합니다. 골짜기가 없는 경우 피크를 **숄더**라고 합니다.

다음 그림은 탄젠트 스키밍의 원리를 설명합니다.

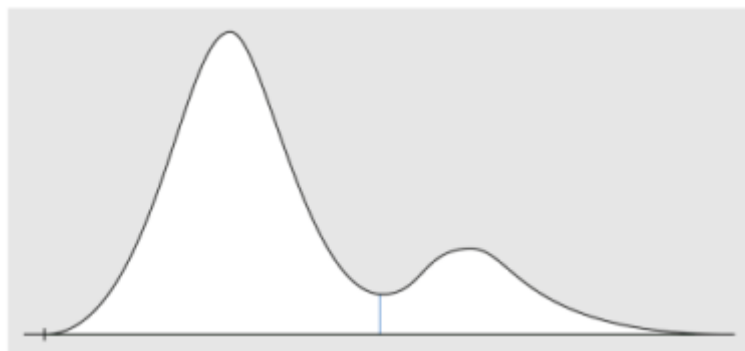


그림16 스키밍이 없는 피크, 골짜기 및 드롭 라인으로 구분됨

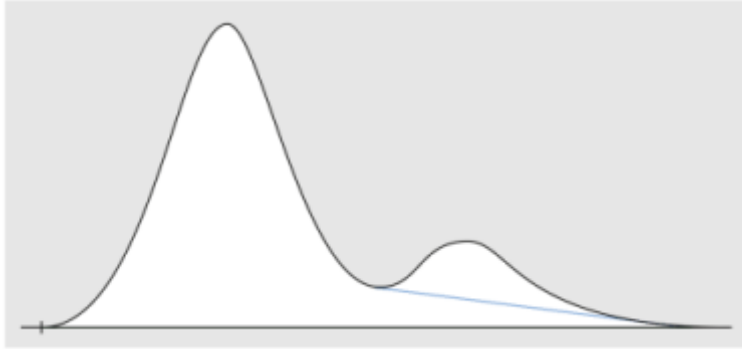


그림17 꼬리 스킴링

### 스킴 기준

다음 기준은 부모 피크의 전면 또는 후면 가장자리에서 용출되는 자식 피크의 면적을 계산하는 데 스킴 라인을 사용할지 여부를 결정합니다.

- 스킴 높이 비율(Front skim height ratio 또는 Tail skim height ratio)
- Skim valley ratio

**스킴 높이 비율**은 부모 피크의 바탕선 보정 높이(아래 그림의  $H_p$ )와 자식 피크의 바탕선 보정 높이( $H_c$ )의 비율입니다. 자식 피크가 스킴되도록 하려면 이 비율보다 낮은 값을 사용합니다. 실행 전체에서 지수 스킴링을 비활성화하려면 이 파라미터를 높은 값 또는 0으로 설정하면 됩니다.

**스킴 골짜기 비율**은 바탕선 위의 자식 피크 높이(아래 그림의  $H_c$ )와 바탕선 위의 골짜기 높이( $H_v$ )의 비율입니다. 자식 피크를 스킴하려면 이 비율보다 큰 값을 사용합니다.

주

부모 피크의 꼬리에 있는 자식 피크 세트에 대해 이러한 기준 중 하나가 충족되지 않으면 두 기준을 모두 충족한 마지막 자식 피크 이후의 모든 자식 피크가 더 이상 스킴되지 않고 드롭 라인을 사용합니다.

주

지수에 대한 시간 초과 이벤트가 적용 중이거나 부모 피크 자체가 자식 피크인 경우에는 이러한 기준이 사용되지 않습니다. 부모 피크와 자식 피크 사이의 바탕선코드는 **Valley** 유형이어야 합니다(“바탕선 코드” 페이지 26 참조).

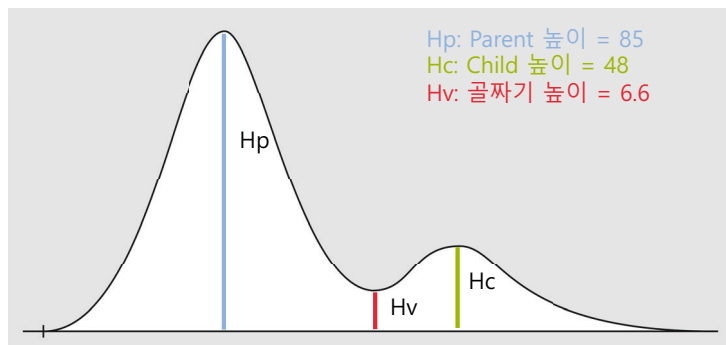


그림18 스킴 기준 값 계산 예시

스킴 높이 비율 =  $H_p/H_c$

스킴 골짜기 비율 =  $H_c/H_v$

где:

$H_p$  부모 피크의 바탕선 보정 높이

$H_v$  바탕선 위의 골짜기 높이

$H_c$  자식 피크의 바탕선 보정 높이

**꼬리 스키밍** 꼬리 스키밍을 사용하려면 다음과 같이 파라미터를 설정합니다.

- 꼬리 스킴 높이 비율 =  $85 / 48 = 1,77$   
적분기 이벤트에서는  $< 1,77$  값을 사용합니다.
- 스킴 골짜기 비율 =  $48 / 6,6 = 7,3$   
적분기 이벤트에서는  $> 7,3$  값을 사용합니다.

**전면 스키밍** 전면 스키밍을 사용하면 첫 번째 피크가 자식 피크이고 두 번째 피크가 부모 피크가 됩니다. 따라서 전면 스키밍을 사용하려면 파라미터를 다음과 같이 설정합니다.

- 전면 스킴 높이 비율 =  $48 / 85 = 0,56$   
적분기 이벤트에서는  $< 0,56$  값을 사용합니다.
- 스킴 골짜기 비율 =  $85 / 6,6 = 12,9$   
적분기 이벤트에서는  $> 12,9$  값을 사용합니다.

## 탄젠트 스킴 모드

탄젠트 스킴이 활성화된 경우 다음 모델을 사용하여 적절한 피크 면적을 계산할 수 있습니다.

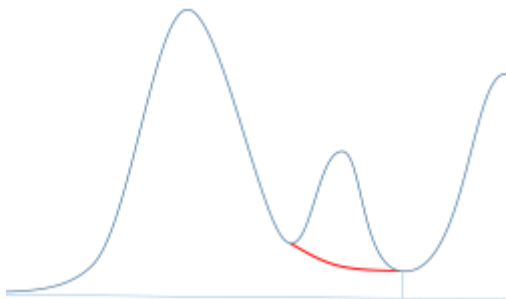
- 지수
- 새 지수
- 표준(가장 적합한 지수 또는 직선 계산을 자동으로 선택)
- 스트레이트
- 가우시안

### 주

스킴된 피크 또는 솔더 피크를 포함하는 신호를 정량화해야 하는 경우 피크 면적 대신 피크 높이를 평가하는 것이 좋습니다.

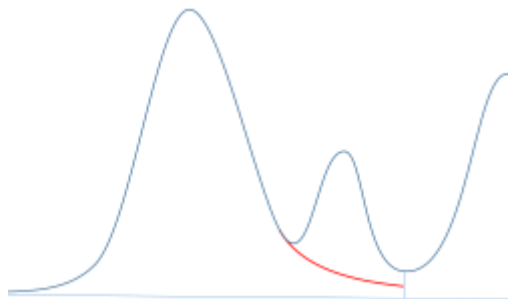
## 지수 스킴

이 스킴 모델은 자식 피크의 시작과 끝을 통해 지수 방정식을 사용하여 곡선을 그립니다. 곡선은 부모 피크에 뒤따르는 각 자식 피크 아래를 개별적으로 통과합니다.



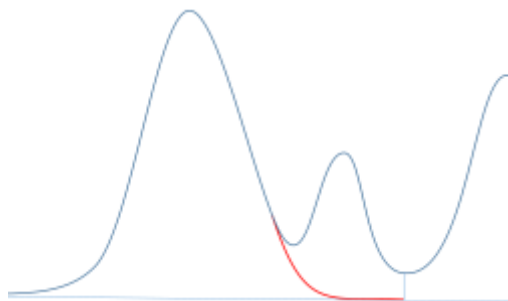
## 새 지수 스킴

이 스킴 모델은 지수 방정식을 사용하여 곡선을 그립니다. 부모 피크 신호의 선행 또는 후행 에지를 근사합니다. 곡선은 하나 이상의 자식 피크 아래를 통과합니다. 동일한 지수 모델을 사용하여 하나 이상의 자식 피크를 스킴할 수 있으며, 첫 번째 자식 피크 이후의 모든 피크는 첫 번째 자식 피크의 끝에서 시작하여 드롭 라인으로 구분되어 스킴 곡선에만 드롭됩니다.



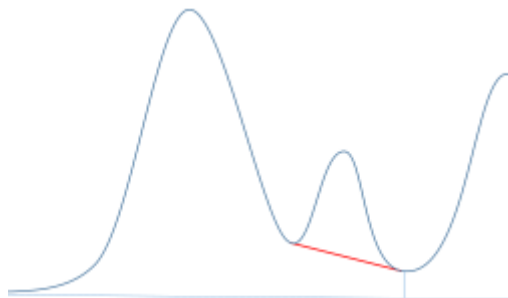
### 가우시안 스킴

이 스킴 모델은 새 지수 스킴과 동일한 방정식을 사용하지만, 부모 피크에서 더 높은 곳을 검색하여 가장 잘 맞는 곳을 찾고 부모 피크 바탕선에서 선행 또는 후행 에지에 근사합니다. 따라서 가우시안 스킴은 일반적으로 새 지수 스킴보다 더 넓은 면적을 계산합니다.



### 직선 스킴

이 스킴 모델은 자식 피크의 시작과 끝을 통과하는 직선을 그립니다. 꼬리 라이더 피크의 시작(또는 프론트 라이더 피크의 끝) 높이가 부모 피크 기울기에 맞게 보정될 수 있습니다.



## 표준 스킴

이 기본 분석법은 지수 계산과 직선 계산을 조합하여 가장 잘 맞도록 하는 분석법입니다.

지수 계산에서 선형 계산으로의 전환은 높이 또는 면적의 갑작스러운 불연속성을 제거하는 방식으로 수행됩니다.

- 신호가 바탕선을 훨씬 초과하는 경우 꼬리 피팅 계산은 지수가 됩니다.
- 신호가 바탕선 엔벨로프 내에 있으면 꼬리 피팅 계산은 직선이 됩니다.

조합 계산은 지수 또는 직선 탄젠트 스킴으로 보고됩니다.

## 스킴에 대한 지수 곡선 계산

다음 공식은 지수, 새 지수 또는 가우시안 스킴을 계산하는 데 사용됩니다:

$$H_b(t_R) = H_0 * \exp(-B * (t_R - t_0)) + A * t_R + C$$

где:

$H_b$	시간 $t_R$ 에서 지수 스킴의 높이
$H_0$	스킴 시작의 높이(바탕선 위)(지수 및 가우시안 스킴에 대해 서로 다른 추정치)
$B$	소멸 계수(지수 및 가우시안 스킴에 대해 서로 다른 추정치)
$t_0$	스킴의 시작에 해당하는 시간(지수 및 가우시안 스킴에 대해 서로 다른 추정치)
$t_R$	머무름 시간
$A$	부모 피크의 바탕선 기울기
$C$	부모 피크의 바탕선 오프셋(지수 및 가우시안 스킴에 대해 서로 다른 추정치)



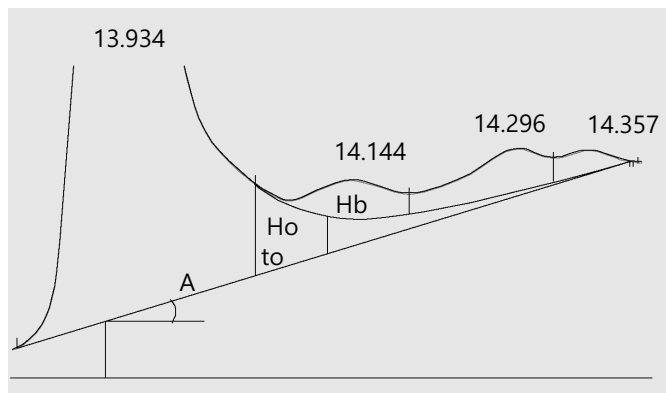


그림19 지수 스킴 계산에 사용되는 값

## 솔더 모드

솔더 검출이 활성화된 경우 다음 모델을 사용하여 적절한 피크 면적을 계산할 수 있습니다.

- 드롭 바탕선
- 탄젠트 바탕선
- 새 지수
- 가우시안

## 드롭 바탕선

변곡점에서의 드롭 라인은 솔더 피크와 주 피크를 구분합니다.

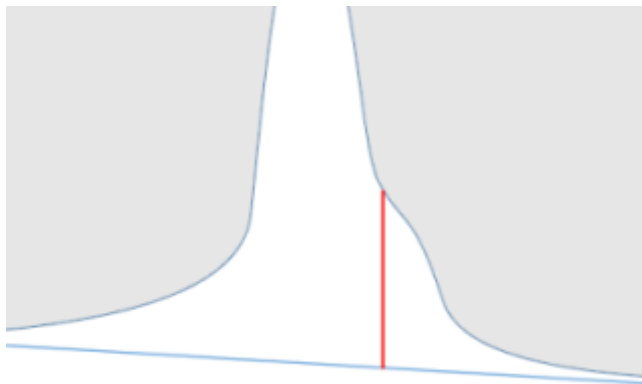


그림20 드롭 라인이 있는 솔더

### 탄젠트 바탕선

변곡점을 통과하는 직선이 솔더 피크를 정의합니다.

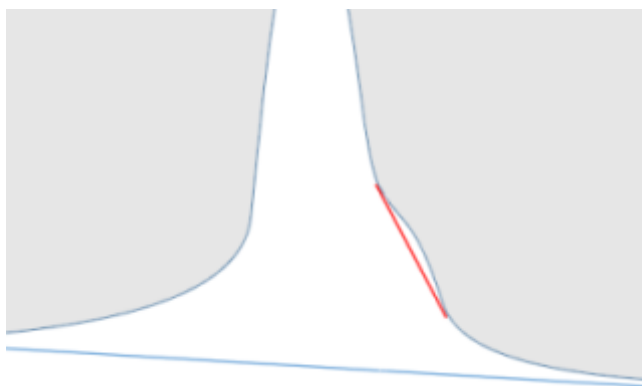


그림21 탄젠트 바탕선이 있는 솔더

### 새 지수

이 솔더 모드는 지수 방정식을 사용하여 곡선을 그립니다. 솔더 피크의 선행 또는 후행 에지를 근사합니다.

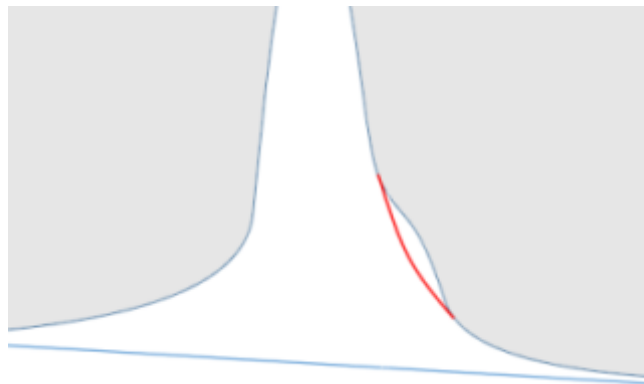


그림22 새 지수 바탕선이 있는 솔더

### 가우시안

이 솔더 모드 모델은 새 지수 모드와 동일한 방정식을 사용하지만, 부모 피크에서 더 높은 곳을 검색하여 가장 적합한 것을 찾습니다. 가우시안 스킴은 일반적으로 새 지수 스킴보다 더 넓은 면적을 계산합니다.

예를 들어 부산물이 없는 것을 보장해야 하는 경우 가우시안 모드를 사용하십시오.

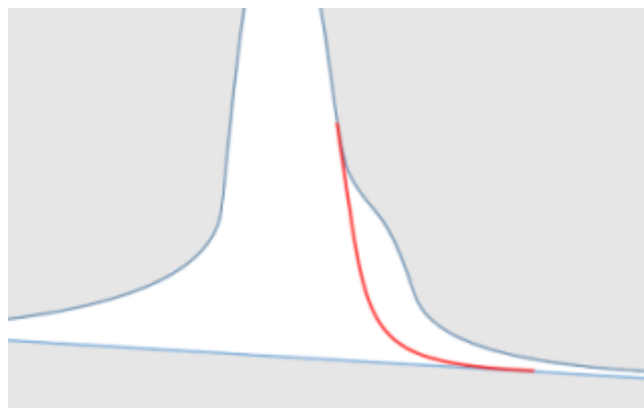


그림23 가우시안 바탕선이 있는 솔더

### 탄젠트 스킴 모드와 솔더 모드 결합

OpenLab CDS를 사용하면 탄젠트 스킴 모드와 솔더 모드를 개별적으로 구성할 수 있습니다. 그러나 모든 조합이 똑같이 유용한 결과를 생성하는 것은 아닙니다.

표 5            숄더 모드와 탄젠트 스킴 모드의 권장 조합

숄더 모드	탄젠트 스킴 모드
Drop <sup>1</sup>	드롭 라인으로 분리하려면 skim height ratio를 0.0으로 설정합니다.
Gaussian	Gaussian
New Exponential	New Exponential
Tangential	Straight

<sup>1</sup> 또는 모든 숄더 모드

## 적분기 이벤트

사용 가능한 적분기 이벤트는 다음 그룹으로 나뉘어집니다.

- 초기 적분기 이벤트는 적분 시작 시 적용되는 이벤트입니다. 이 이벤트는 처리 방법에서 **Integration Events** 섹션의 **Standard** 노드에서 기본값이 되어 있을 수 있습니다. 이러한 이벤트는 삭제할 수는 없지만 값을 변경할 수는 있습니다.
- 시간 초과 이벤트는 적분 시작 후 발생합니다. 시간 초과 이벤트는 초기 이벤트의 값을 변경할 수 있거나 추가 적분 파라미터를 켜거나 끌 수 있습니다. 이 이벤트는 처리 방법에서 **Integration Events** 섹션의 **Standard** 노드에서 추가할 수 있습니다.
- 모든 신호에 항상 적용되는 적분기 이벤트는 **Integration Events** 섹션의 **Advanced** 노드에서 구성할 수 있습니다.

### 표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트

**기울기 감도** 적분 중 피크의 시작점과 끝점을 식별하는 데 사용되는 신호 기울기의 값을 설정합니다. 제공된 신호에 대해 특별히 또는 모든 신호에 대해 글로벌하게 값을 설정할 수 있습니다.

신호 기울기가 **Slope Sensitivity** 값을 초과하면 피크 시작점이 설정됩니다. 신호 기울기가 **Slope Sensitivity** 값 미만이면 피크 끝점이 설정됩니다.

**피크 폭** 적분기의 감도를 제어하여 피크와 바탕선 노이즈를 구별합니다. 첫 번째 예상 피크(용매 피크 제외)의 절반 높이에서 피크 폭에 해당하는 피크 폭을 시간 단위로 지정합니다.

적분기는 실행 중에 적분 최적화가 필요할 때 피크 폭을 업데이트합니다.

선택한 초기 피크 폭이 너무 낮으면 노이즈가 피크로 해석될 수 있습니다. 넓은 피크와 좁은 피크가 혼합되면 실행 시간이 프로그래밍된 이벤트를 사용하여 특정 피크에 대한 피크 폭을 조정할 수 있습니다. 예를 들어, 피크는 등온 GC 및 등용매 LC 분석에서 분석이 진행됨에 따라 훨씬 더 넓어지는 경우가 있습니다. 이를 보상하기 위해 적분기는 시간 초과 이벤트로 비활성화되지 않는 한 분석 중에 피크가 넓어짐에 따라 피크 폭을 자동으로 업데이트합니다.

피크 폭 업데이트는 다음과 같이 가중치가 적용됩니다.

$$0.75 \times (\text{기존 피크 폭}) + 0.25 \times (\text{현재 피크 폭})$$

**면적 제한** 최소 관심 피크의 면적을 설정합니다.

최소 면적보다 작은 면적을 가진 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 **Area Reject**값보다 작은 모든 피크를 제외합니다. **Area Reject**값은 0 이상이어야 합니다.

숄더가 검출된 경우: 숄더를 제한하는 결정은 예비 근사치를 기반으로 합니다. 이 근사법의 경우 숄더 면적은 탄젠트를 대각선으로 사용하여 숄더 시작부터 숄더 끝까지 직사각형으로 계산됩니다.

## 주

**Area reject**은 수동 적분 중에는 무시됩니다.

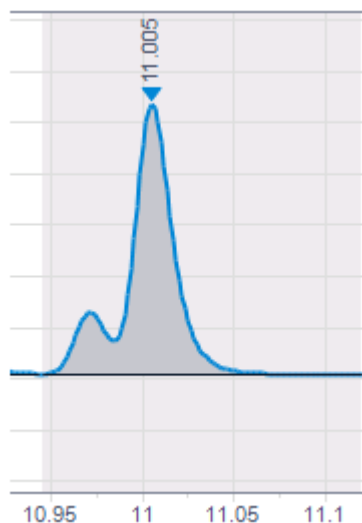
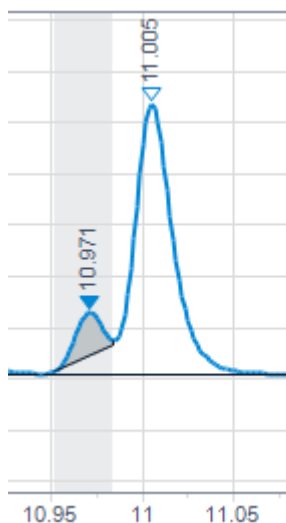
### 면적% 제한

최소 관심 피크의 면적%를 설정합니다.

면적%이 최소 면적%보다 작은 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 제공된 값보다 면적%이 작은 모든 피크를 제외합니다.

예상된 최소 피크의 면적%를 입력합니다. 면적 및 높이 제한이 0으로 설정된 데이터 파일을 먼저 적분하면 이 정보를 얻을 수 있습니다. 적분 결과에서 **Area%** 컬럼을 사용하여 적절한 최소값을 선택합니다.

낮은 면적%으로 인해 적분되지 않는 피크가 라이더 피크인 경우, 부모 피크와 병합됩니다.



부모 피크가 면적% 임계값보다 작지만 라이더 피크가 임계값보다 큰 경우, 라이더 피크의 계산 및 바탕선 구성이 제외된 피크에 기반하기 때문에 부모 피크가 유지됩니다.

### 높이 제한

최소 관심 피크의 높이를 설정합니다.

이 최소 높이보다 작은 높이를 가진 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 **Height Reject**값보다 작은 모든 피크를 제외합니다.

숄더가 검출된 경우: 숄더를 제한하는 결정은 예비 근사치를 기반으로 합니다. 이 근사치의 경우 숄더 높이는 탄젠트를 대각선으로 사용하여 숄더 시작부터 숄더 끝까지 직사각형의 높이로 계산됩니다.

## 주

**Height reject**은 수동 적분 중에는 무시됩니다.

**숄더 모드** 피크에서 숄더를 검출하는 초기 분석법을 설정합니다.

이 설정은 애플리케이션이 바탕선을 분리되지 않은 피크를 처리하는 방법을 정의합니다. 다음 중에서 선택할 수 있습니다.

<b>Off</b>	숄더가 검출되지 않습니다.
<b>Drop</b>	숄더가 드롭 라인으로 적분됩니다.
<b>Tangential</b>	숄더가 탄젠트 바탕선으로 적분됩니다.
<b>New Exponential</b>	숄더가 새 지수로 적분됩니다.
<b>Gaussian</b>	숄더가 가우시안 바탕선으로 적분됩니다.

탄젠트 스키밍에 대한 자세한 내용은 “탄젠트 스키밍” 페이지 35와 “탄젠트 스킵 모드” 페이지 38를 참조하십시오.

## 피크 폭 선택

신호 정보의 왜곡 없이 피크로 해석되는 노이즈를 방지하기에 충분한 필터링을 제공하는 설정을 선택합니다.

- 단일 관심 피크에 적합한 초기 피크 폭을 선택하려면 베이스에서 피크의 시간 폭을 기준으로 사용합니다.
- 관심 피크가 여러 개 있을 때 적합한 초기 피크 폭을 선택하려면 초기 피크 폭을 가장 좁은 피크 폭 이하의 값으로 설정하여 최적의 피크 감도를 얻습니다.

## 높이 제한과 피크 폭

**peak width**과 **height reject** 모두 적분 과정에서 매우 중요합니다. 이러한 값을 변경하면 다양한 결과를 얻을 수 있습니다.

- 상대적 주요 성분을 높은 노이즈 환경에서 검출하고 정량화해야 할 때 높이 제한과 피크 폭을 모두 증가시킵니다. 증가한 피크 폭은 노이즈의 필터링을 개선하고 증가한 높이 제한은 무작위 노이즈가 무시되도록 합니다.

- 높이 제한과 피크 폭을 줄여 높이가 노이즈 자체의 높이에 근접하는 극미량 성분을 검출하고 정량화합니다. 피크 폭을 줄이면 신호 필터링이 감소하지만, 높이 제한을 줄이면 작은 피크가 충분한 높이를 갖지 못하기 때문에 제한되지 않습니다.
- 분석에 피크 폭이 다양한 피크가 포함되어 있는 경우, 좁은 피크에 대한 피크 폭을 설정하고 높이 제한을 줄여 넓은 피크가 줄어드는 높이 때문에 무시되지 않도록 합니다.

### 적분 튜닝

경우에 따라 기울기 감도, 피크 폭, 높이 제한 및 면적 제한에 대한 값을 변경하여 적분을 사용자 정의하는 것이 유용합니다. 아래 그래프는 이러한 파라미터가 신호의 5개 피크 적분에 영향을 미치는 방법을 보여줍니다.

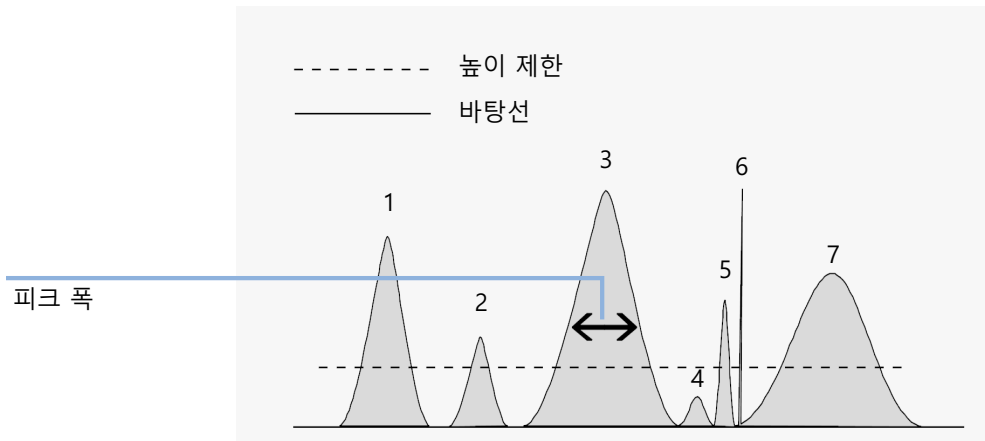


그림24 초기 이벤트 사용

피크는 4개의 적분 파라미터가 모두 충족될 때만 적분됩니다. 피크 3에 대한 피크 폭, 면적 제한 및 표시된 기울기 감도를 사용하면 피크 1, 3 및 7만 적분됩니다.

- 피크 1** 4개의 적분된 파라미터가 모두 충족되면 적분됩니다.
- 피크 2** 면적이 설정된 면적 제한값 미만이기 때문에 제거됩니다.
- 피크 3** 4개의 적분된 파라미터가 모두 충족되면 적분됩니다.
- 피크 4** 피크 높이가 높이 제한 미만이기 때문에 적분되지 않습니다.
- 피크 5** 면적이 설정된 면적 제한값 미만이기 때문에 제거됩니다.
- 피크 6** 적분되지 않고, 필터링과 번칭으로 인해 피크가 보이지 않습니다.
- 피크 7** 적분됩니다.



표 6 높이 및 면적 제한값

적분 파라미터	피크 1	피크 2	피크 3	피크 4	피크 5	피크 7
높이 제한	초과	초과	초과	미만	초과	초과
면적 제한	초과	미만	초과	미만	미만	초과
피크 적분됨	예	아니요	예	아니요	아니요	예

## 표준 적분기 이벤트: 시간 초과 이벤트

OpenLab CDS은(는) 내부 알고리즘 바탕선의 적분 모드와 사용자의 정의 중에서 선택할 수 있는 시간 초과 이벤트 세트를 제공합니다. 이 시간 초과 이벤트는 기본 구조가 적절하지 않을 때 신호 바탕선 구성을 사용자 정의하는 데 사용할 수 있습니다. 예를 들어, 사용자는 새 면적 합 이벤트 유형(**Area sum slice** 참조)을 생성할 수 있으므로 기본 면적 합 결과를 변경하지 않습니다. 이러한 이벤트는 최종 피크 면적을 합산하고 단기 및 장기 바탕선 이상을 보정하는 데 유용할 수 있습니다.

제공된 신호에 대해 특별히 또는 모든 신호에 대해 글로벌하게 값을 설정할 수 있습니다.

**면적 제한** 초기 이벤트를 참조하십시오 (“표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트” 페이지 45).

**면적 합** 적분기가 면적을 합산하는 지점(On/Off)을 설정합니다.

면적 합산으로 생성된 피크의 머무름/이동 시간은 시작 시간과 종료 시간의 평균입니다. **Area sum on** 이벤트가 피크 시작 후 정점 도달 전에 발생하면 전체 피크가 합계에 포함됩니다. 피크 정점 후 피크가 끝나기 전에 발생하면 피크가 잘리고 면적 합이 즉시 시작됩니다.

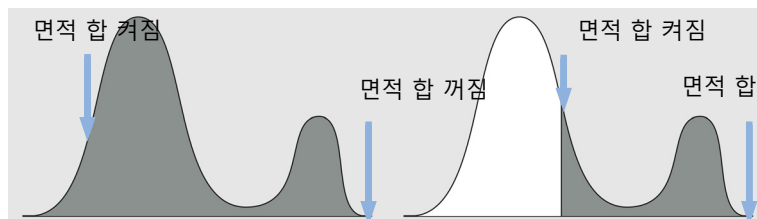


그림25 피크 정점 도달 후 피크가 끝나기 전 Area sum on 이벤트

**Area sum off** 이벤트가 피크 시작 후 정점 도달 전에 발생하면 면적 합이 즉시 종료됩니다. 이 현상이 발생하는 신호의 지점은 골짜기 지점이 됩니다. **Area sum off** 이벤트가 정점 도달 후에 발생하는 경우, 이벤트는 피크가 끝날 때까지 연기됩니다.

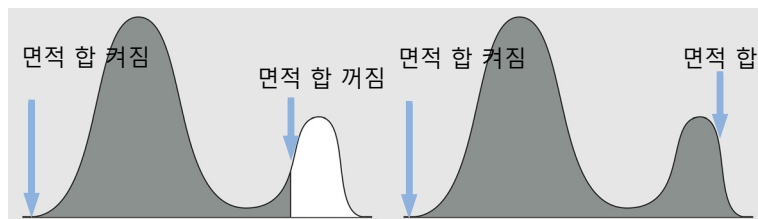


그림26 피크 시작 후 정점 도달 전 Area sum off 이벤트

### 면적 합 슬라이스

이 이벤트를 통해 면적 또는 시간 간격의 손실 없이 연속 면적 합 간격을 정의할 수 있습니다.

이 이벤트는 **Area Sum** 이벤트와 유사합니다. 그러나 이 이벤트를 통해 시간 간격 및 적분된 피크 면적의 손실 없이 인접한 면적 합 간격을 정의할 수 있습니다. 피크는 이 이벤트를 설정한 지점에서 분할됩니다. 면적 합산은 **Area Sum Slice** 간격이 지정된 곳에서 정확하게 시작되고 끝납니다.

면적 합 슬라이스 피크의 머무름 시간은 슬라이스 시간 간격의 중간입니다. 머무름 시간은 식별 또는 재검교정으로 변경되지 않습니다. 적분기는 면적 합 슬라이스 시작 이벤트와 함께만 데이터 포인트를 가져오기 시작하고 면적 합 슬라이스 종료 이벤트와 함께 끝나기 때문에 머무름 시간은 약간만 변합니다. 따라서 머무름 시간은 기껏해야 두 데이터 포인트 사이의 시간 만큼 변할 수 있습니다.

**Start** 파라미터를 사용하여 각 면적 합 슬라이스에 대한 시작 시간을 정의합니다. 다음 시작 시간은 이전 시간-슬라이스에 대한 종료 시간으로 사용되므로 여러 시작 이벤트를 차례로 사용할 수 있습니다.

**Start-negA.** 파라미터는 시간-슬라이스 면적에서 마이너스 면적(설정된 바탕선 미만)을 감산한 시간-슬라이스의 적분 시작을 정의합니다.

**End** 파라미터는 마지막 시간-슬라이스의 끝을 정의합니다. 시간-슬라이스의 면적은 설정된 바탕선 미만의 면적을 무시하고 계산됩니다. 다른 면적 합 슬라이스 이벤트가 뒤따르지 않으면 적분기가 자체 정규 피크 검출을 다시 재개합니다.

**Start** 이벤트에서 다음 **End** 이벤트까지의 범위 내에서 바탕선은 항상 중간에 방향이 바뀌지 않는 직선입니다. 끝점을 지난 후(최소 0,001 min 후)에만 **Set Baseline from Range**, **Set Low Baseline from Range** 또는 **Use Baseline from Range** 이벤트를 사용하여 장기 바탕선 변경이 다시 적용됩니다.

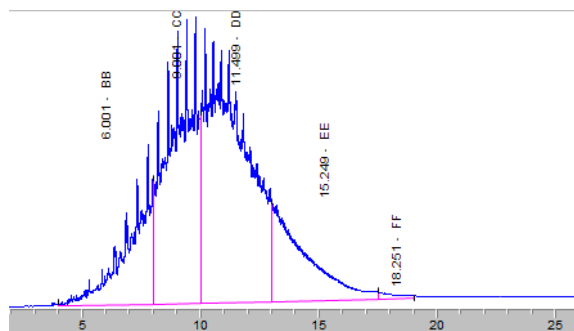


그림27 예시: 면적 합 슬라이스

위 그림은 다음 시간 초과 이벤트가 포함된 예시를 보여줍니다.

표 7 바탕선 구성

시간	이벤트	파라미터
4 min	범위에서 바탕선 설정	+2 min
22 min	범위에서 바탕선 설정	+4 min

표 8 면적 합 슬라이스

시간	이벤트	파라미터
4 min	면적 합 슬라이스	시작
8 min	면적 합 슬라이스	시작
10 min	면적 합 슬라이스	시작
13 min	면적 합 슬라이스	시작
17,5 min	면적 합 슬라이스	시작
19 min	면적 합 슬라이스	끝

**자동 피크 폭**

다음 피크를 위한 피크 폭의 자동 업데이트를 컷니다. 해당 시점의 피크 폭과 관계없이 재개되고, 이전에 발견한 피크 폭에 기반하여 피크 폭 추적을 재개합니다.

**골짜기에서의 바탕선**

피크 사이의 모든 골짜기에서 적분기가 바탕선을 재설정하는 지점(On/Off)을 설정합니다.

바탕선의 반복된 재설정은 피크의 모서리를 잘라낼 수 있습니다. 이러한 모서리는 마이너스 면적이 되고, 피크의 측정된 전체 면적을 줄입니다.

이 기능은 넓고 낮은 피크 뒤에 피크가 있고 바탕선을 모든 골짜기 지점으로 재설정하려는 경우에 유용합니다.

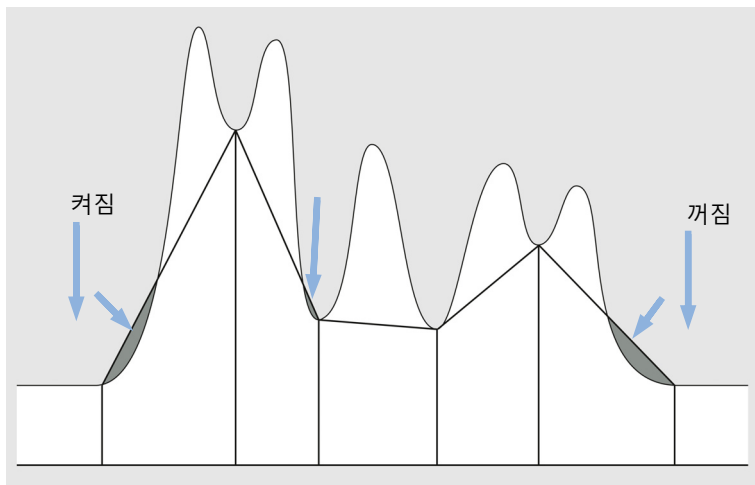


그림28 Baseline at valleys 이벤트

**바탕선 뒤로 이동**

표준 적분기는 바탕선을 명시된 바탕선 지점에서 이 지점까지 수평으로 뒤로 확장하는 지점을 설정합니다.

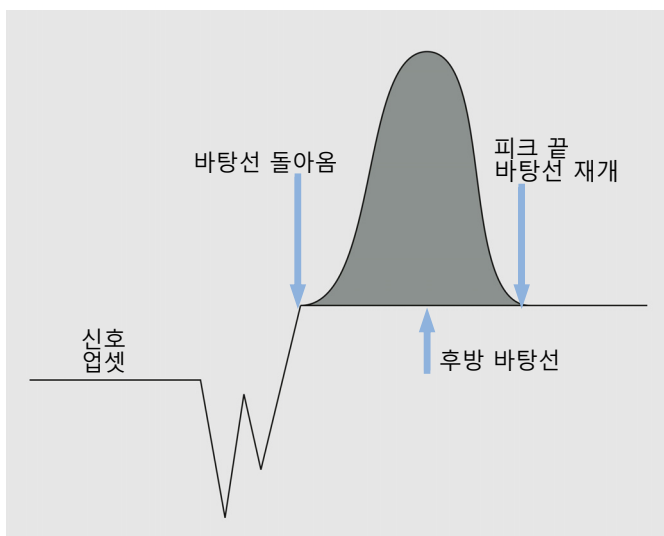


그림29 Baseline backwards 이벤트

- 바탕선 유지** 수평 바탕선은 바탕선 유지 이벤트가 켜질 때부터 바탕선 유지 이벤트가 꺼질 때까지 설정된 바탕선의 높이에 그려집니다.
- 바탕선 다음 골짜기** 적분기가 피크 사이의 다음 골짜기에서 바탕선을 재설정 한 후 이 기능을 자동으로 취소하는 지점을 설정합니다.
- 이 기능은 뒤에 있거나 서로 가까운 개별 클러스터에 있다고 가정하는 병합된 피크 그룹에서 유용합니다. 이 기능은 면적 합산 중에는 무시됩니다.
- 바탕선 나우** 신호가 피크에 있을 때 적분기가 바탕선을 데이터 포인트의 현재 높이로 재설정하는 지점(시간)을 설정합니다.
- 신호가 바탕선에 있는 경우 기능은 무시되고 검출된 바탕선이 사용됩니다.
- 숄더 검출** 적분기가 숄더 검출을 시작하고 정지하는 지점(**On/Off**)을 설정합니다.
- 숄더는 지정된 **Shoulders Mode**에 따라 검출됩니다. “표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트” 페이지 45을(를) 참조하십시오.
- 고정된 피크 폭** 피크 폭을 설정하고 다음 피크를 위한 피크 폭의 자동 업데이트를 비활성화합니다. 훌륭한 성능을 얻으려면 피크 폭을 실제 피크의 절반 높이에서 가깝게 설정합니다.
- 높이 제한** 초기 이벤트를 참조하십시오 (“표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트” 페이지 45).
- 적분** 적분기가 적분을 시작하고 정지하는 지점(**On/Off**)을 설정합니다.
- 적분기가 꺼진 시간과 켜진 시간 사이의 피크는 무시됩니다.

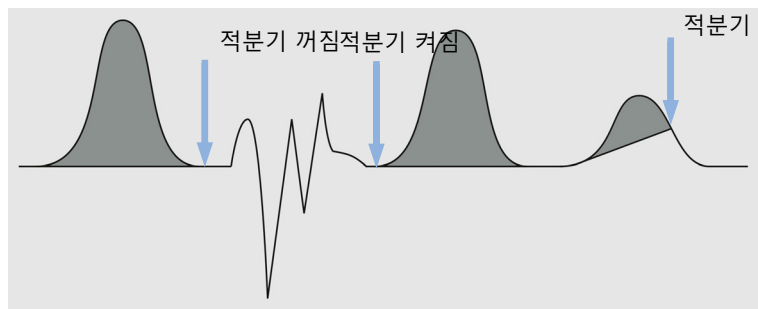


그림30 Integration 이벤트

바탕선은 침투에 대한 재설정을 포함하여 마지막으로 명시된 지점에서 그려집니다. 피크 폭, 임계값 및 면적 제한의 설정된 변경 사항과 함께 다른 모든 적분기 기능은 적분기가 꺼지면 무시됩니다. **On** 및 **Off** 지점에서 바탕선 지점이 재설정됩니다.

적분기가 재시작하도록 설정되면 새 바탕선 지점이 현재 신호 수준에서 재설정됩니다.

이 기능은 크로마토그램/전기영동도의 일부를 무시하거나 바탕선 간섭을 제거하는 데 유용합니다.

**최대 면적** 최대 관심 피크의 면적을 설정합니다.

최대 면적보다 큰 면적을 가진 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 최대 면적 값보다 큰 모든 피크를 제외합니다.

예를 들어, 이 이벤트를 사용하여 적분 결과에서 GC 크로마토그램의 용매 피크를 제외할 수 있지만 해당 라이더 피크를 포함할 수 있습니다.

**최대 높이** 최대 관심 피크의 높이를 설정합니다.

최대 높이보다 큰 높이를 가진 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 최대 높이 값보다 큰 모든 피크를 제외합니다.

예를 들어, 이 이벤트를 사용하여 적분 결과에서 GC 크로마토그램의 용매 피크를 제외할 수 있지만 해당 라이더 피크를 포함할 수 있습니다.

**마이너스 피크** 적분기가 마이너스 피크를 인식하는 지점(On/Off)을 설정합니다.

마이너스 피크가 인식되면 적분기는 더 이상 침투 후 바탕선을 자동으로 재설정하지 않습니다. 이제부터 바탕선의 모든 침투는 설정된 바탕선을 0으로 사용하여 적분됩니다. 면적은 이 바탕선과 관련하여 구성되고 절대값으로 제공됩니다.

마이너스 피크 기능은 바탕선이 피크 클러스터 시작의 명시된 바탕선 지점에서 피크 끝의 설정된 바탕선까지 구성되기 때문에 피크 크기와 비교하여 바탕선 이동이 작을 때만 자신 있게 사용될 수 있습니다.

## 주

면적 합산은 **Negative Peaks On** 이벤트가 활성화되면 자동으로 비활성화됩니다.

탄젠트 스키밍도 마이너스 피크 검출 중에 비활성화됩니다. 이런 피크는 드롭 라인으로 분리됩니다.

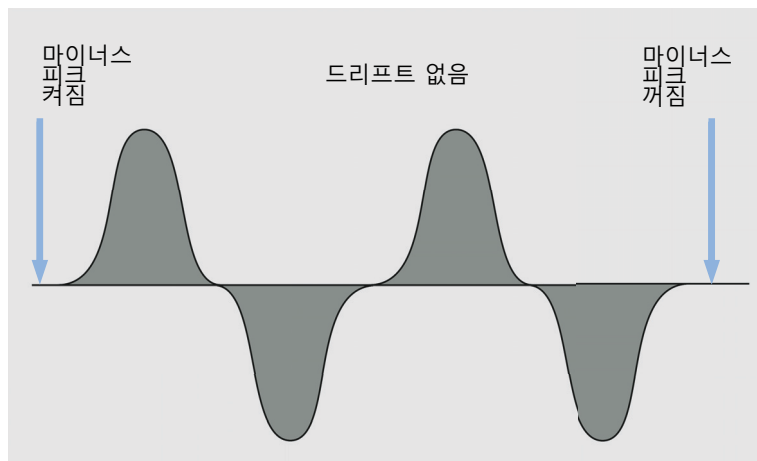


그림31 Negative peak 이벤트

**피크 클러스터** 피크 클러스터의 **Start** 및 **End** 이벤트 내에 있는 모든 피크에 대한 공통 바탕선을 생성합니다.

시작 또는 종료 시간이 겹친 피크(숄더 또는 라이더)와 교차하면 부모 피크는 피크 클러스터의 시작 및 종료 시간을 정의합니다. 두 피크 클러스터 범위가 서로 교차하면 두 번째 피크 클러스터 범위를 정의하는 이벤트가 무시됩니다.

바탕선은 첫 번째로 포함된 피크의 시작 시간에서 시작하고 마지막으로 포함된 피크의 종료 시간에서 끝납니다. 피크 클러스터의 전체 면적이 고려됩니다. 원래 어떠한 피크도 검출되지 않았던 피크 클러스터 내의 모든 영역은 할당되지 않은 피크(바탕선 코드 U)로 보고됩니다. 피크 클러스터 내에는 마이너스 피크가 없습니다. 따라서 격차는 면적 또는 높이 제한으로 인해만 또는 피크 클러스터 바탕선을 침투하는 신호로 인해 발생할 수 있습니다.

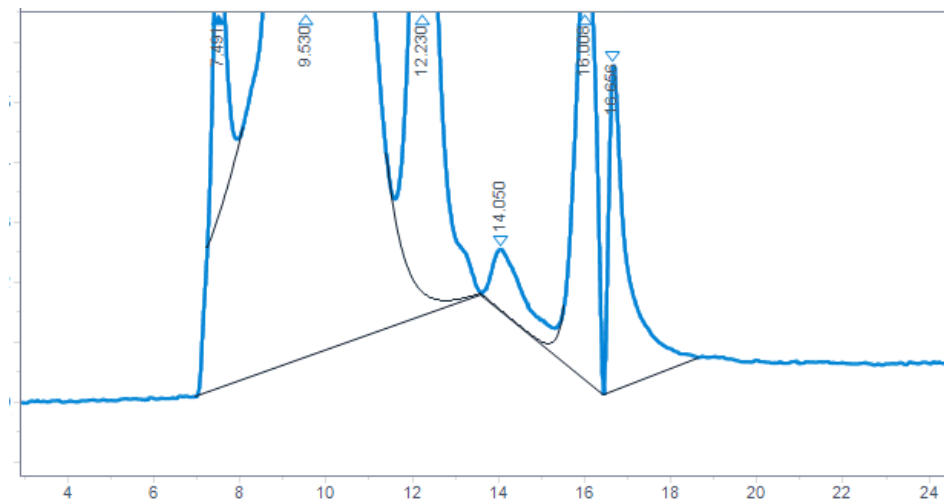


그림32 피크 클러스터 이벤트가 없는 적분

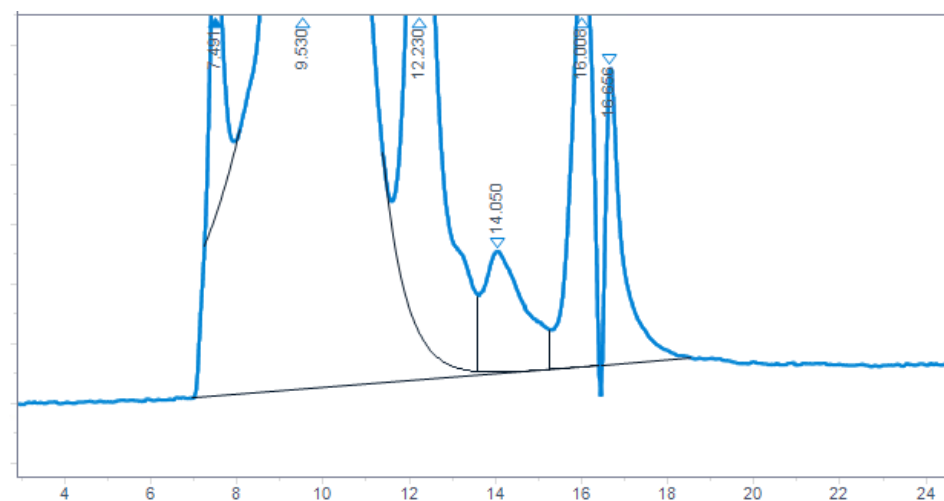


그림33 6 min에서 피크 클러스터 Start 이벤트 및 20 min에서 피크 클러스터 End 이벤트가 있는 적분

**Start no penetration** 피크 클러스터 옵션을 사용하면, 시스템은 신호에 침투하지 못하는 바탕선을 구축합니다.



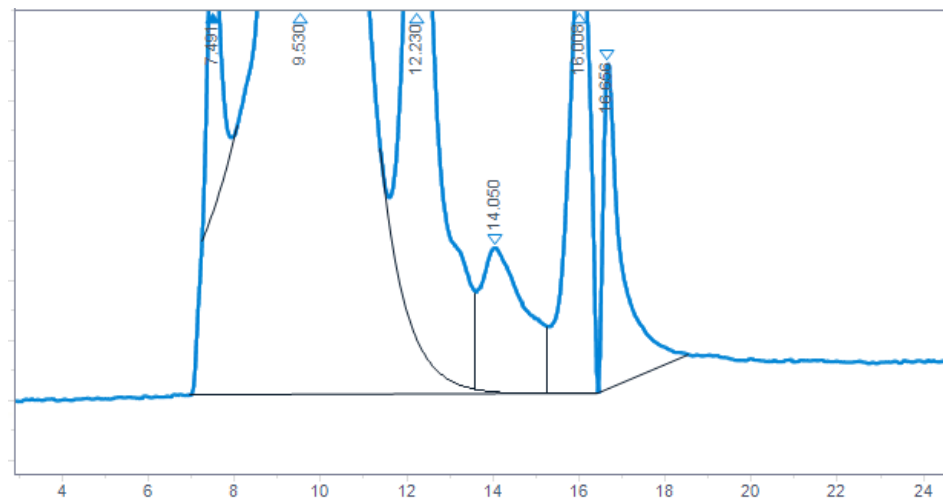


그림34 6 min에서 피크 클러스터 Start no penetration 이벤트 및 20 min에서 피크 클러스터 End 이벤트가 있는 적분

### 범위에서 바탕선 설정

데이터 포인트의 범위를 사용하여 시간 범위의 중간점에서 통계적으로 유의미한 바탕선 지점을 계산합니다.

사용자가 제공하는 값은 지정된 이벤트 시간 주위의 시간 간격입니다. 이것은 바탕선 지점을 결정하는 데 사용되는 범위를 정의합니다. 바탕선의 통계적 계산에 대한 자세한 내용은 “바탕선 보정 모드” 페이지 32을(를) 참조하십시오.

값을 0으로 설정하면 가장 가까운 크로마토그램 데이터 포인트가 바탕선 지점으로 사용되고, 어떠한 통계도 실행되지 않습니다. 마이너스 값을 설정하면 설정은 **Use baseline from range=Clear**와 같습니다. 통계적 바탕선 알고리즘의 사용이 정지됩니다.

바탕선 계산을 위한 크로마토그램에서 모든 시간 및 간격을 지정할 수 있습니다. 이상적으로는, 화학적 배경이 사라지고 노이즈만 포함해야 합니다.

두 개의 **Set Baseline from Range** 지점을 지정하면(예를 들어 크로마토그램의 시작 시 및 끝 시), 그 사이의 바탕선은 직선으로 연결됩니다.

### 범위에서 낮은 바탕선 설정

데이터 포인트의 범위를 사용하여 시간 간격의 중간점에서 통계적으로 유의미한 바탕선 지점을 계산합니다. **Set Baseline from Range** 이외에, 이 이벤트는 가능성이 가장 낮은 바탕선 지점을 사용하므로 30% 이상의 노이즈 데이터 포인트가 해당 지점 위에 있을 수 있습니다. 따라서 바탕선 침투가 최소화됩니다. **Set Low Baseline from Range**은 **Set Baseline from Range** y 값에서 한 개의 시그마(노이즈 표준편차)를 감산하여 계산합니다.

사용자가 제공하는 값은 지정된 이벤트 시간 주위의 시간 간격입니다. 이것은 바탕선 지점을 결정하는 데 사용되는 범위를 정의합니다. 바탕선의 통계적 계산에 대한 자세한 내용은 “**바탕선 보정 모드**” 페이지 32을(를) 참조하십시오.

값을 0으로 설정하면 가장 가까운 크로마토그램 데이터 포인트가 바탕선 지점으로 사용되고, 어떠한 통계도 실행되지 않습니다. 마이너스 값을 설정하면 설정은 **Use baseline from range=Clear**와 같습니다. 통계적 바탕선 알고리즘의 사용이 정지됩니다.

바탕선 계산을 위한 크로마토그램에서 모든 시간 및 간격을 지정할 수 있습니다. 이상적으로는, 화학적 배경이 사라지고 노이즈만 포함해야 합니다.

두 개의 **Set Baseline from Range** 지점을 지정하면(예를 들어 크로마토그램의 시작 시 및 끝 시), 그 사이의 바탕선은 직선으로 연결됩니다.

계산에 사용된 크로마토그램의 면적에 과도한 화학적 노이즈 또는 전자 노이즈 스파이크가 포함된 경우 **Set Baseline from Range** 대신 **Set Low Baseline from Range**를 사용합니다.

**솔더 모드** 초기 이벤트를 참조하십시오 (“**표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트**” 페이지 45).

**기울기 감도** 초기 이벤트를 참조하십시오 (“**표준 적분기 이벤트: 초기 이벤트**” 페이지 45).

**용매 피크** 특정 기울기(mV/s 단위) 위에 있는 피크는 아날로그-디지털 변환 범위에서 벗어난 용매 피크로 검출됩니다.

후행 피크는 자동으로 탄젠트 스킵됩니다. 탄젠트 스킵 이벤트를 켜 필요가 없습니다.

용매 피크 검출 기능이 꺼져 있으면 탄젠트 대신 후행 피크에서 드롭 라인이 그려집니다.

**갈라진 피크** 드롭 라인으로 피크를 분할하는 지점을 지정합니다.

## 주

**Area Sum**이 켜져 있는 동안에는 **Split Peak**를 사용할 수 없습니다. **Area Sum**이 켜져 있는 동안 피크를 분할하려면 해당 수동 적분기 이벤트를 사용합니다.

**Split Peak** 이벤트를 사용하여 스킵된 피크를 분할할 수 없습니다.

**꼬리 탄젠트 스킵** 탄젠트 스킵을 시작하거나 끝내는 지점을 지정합니다.

### On

적분기가 다음 피크의 후행 에지에서 탄젠트 스킵을 설정할 지점을 설정합니다. 탄젠트 위의 모든 피크는 재설정 바탕선에 적분됩니다. 탄젠트는 작은 피크 이전의 골짜기에서 검출기 신호 그래디언트가 탄젠트 그래디언트와 동일한 작은 피크 이후 지점까지 그려집니다. 탄젠트 스킵 이벤트 시간은 피크 중 언제라도 입력할 수 있습니다. 피크를 용매 피크로도 지정합니다.

### Off

현재 피크가 완료되거나 저장된 간격에서 어떠한 피크도 발견되지 않은 경우(그리고 용매가 무심코 다음 클러스터에 지정되지 않을 경우) 탄젠트 스키밍을 종료합니다.

#### 탄젠트 스키밍 모드

다음 탄젠트 스키밍 모드는 적절한 피크 면적을 계산하는 데 사용할 수 있습니다.

- 지수
- 새 지수
- 표준
- 스트레이트
- 가우시안

자세한 내용은 “탄젠트 스키밍 모드” 페이지 38을(를) 참조하십시오.

#### 할당되지 않은 피크

일부 바탕선 구성이 있으면 바탕선 위와 신호 아래에 작은 면적이 있지만 식별된 피크의 부분은 아닙니다. 일반적으로 그러한 면적은 측정되지도 않고 보고되지도 않습니다. 할당되지 않은 피크가 켜지면 이러한 면적은 할당되지 않은 피크로 측정되고 보고됩니다. 이러한 면적에 대한 머무름/이동 시간은 면적의 시작과 끝 사이에 있는 중간점입니다.

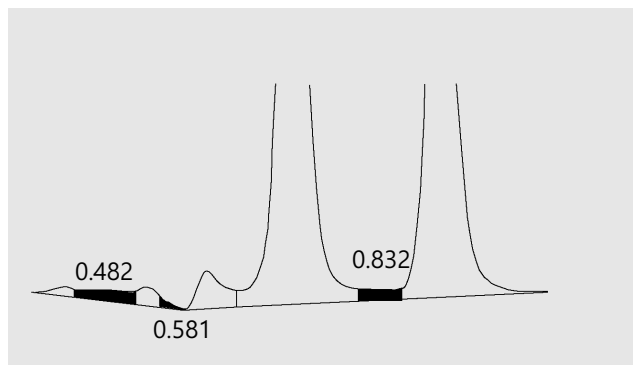


그림35 할당되지 않은 피크

#### 피크 높이 업데이트

이 이벤트는 적분기가 피크 높이와 피크 머무름 시간을 모두 정의하는 피크 정점으로 가장 높은 데이터 포인트를 사용하도록 합니다. 이 이벤트가 없으면 보관된 곡선의 최대값이 사용됩니다. **Update peak height** 이벤트는 특히 매우 가파르고 각진 피크 또는 아래쪽으로 떨어지기 시작한 피크가 있는 신호에서 유용합니다. 이와 같은 피크는 MSD 신호에서 일반적으로 나타납니다.

**Update peak height**의 시작 시간은 평가되지 않습니다. 이벤트는 항상 전체 크로마토그램에 영향을 미칩니다.

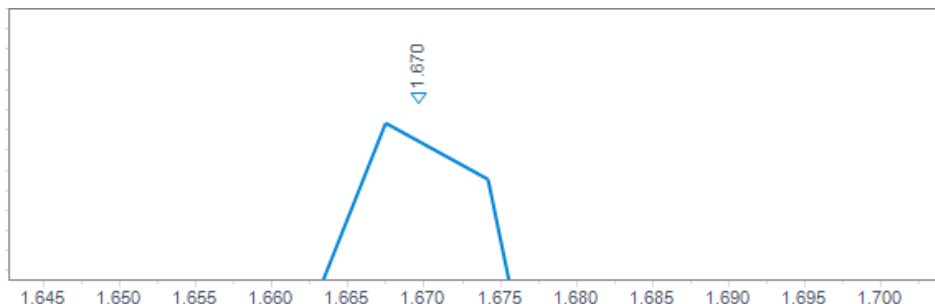


그림36 기본 적분

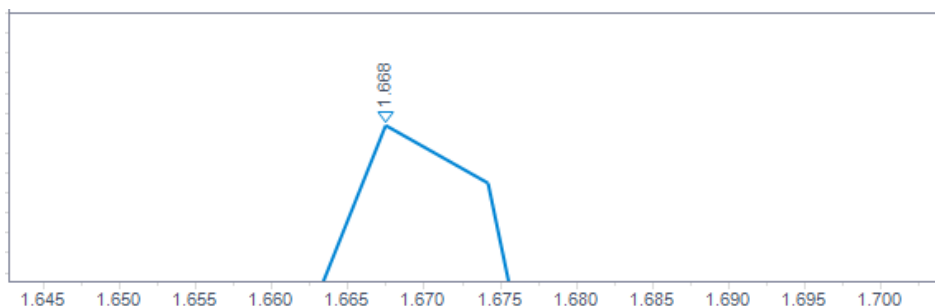


그림37 피크 높이 업데이트 이벤트가 있는 적분

### 범위에서 바탕선 사용

바탕선 값을 나중 또는 이전 시간으로 투영하여 바탕선 침투를 최소화할 수 있습니다.

**Set Baseline from Range** 또는 **Set Low Baseline from Range** 값이 크로마토그래프 피크가 없는 영역에서 계산되는 경우, 첫 번째 관심 피크가 용출되기 직전 시간에(또는 마지막 관심 피크가 용출된 직후 시간에) 계산된 바탕선을 투영하는 것이 좋습니다. **Use Baseline from Range**를 사용하면 각 방향에서 최대 3개의 그러한 투영을 구성할 수 있습니다.

이 이벤트는 상사면 또는 하사면 바탕선을 구성했을 때 사용하는 것이 좋습니다. 그렇지 않으면 직선 바탕선이 예기치 않게 크로마토그램 곡선을 절단할 수 있기 때문입니다. 파라미터는 바탕선 지점을 선택하고 주어진 시간 간격에 바탕선을 바탕선 지점으로 투영할 바탕선 범위를 적분기에 알려줍니다.

다음 파라미터를 사용할 수 있습니다.

- **Clear:** 새 바탕선 동작을 지우고 이 지점에서 기존 알고리즘으로 복귀합니다.
- **Left:** 시간 내 이 지점의 왼쪽과 가장 가까운 바탕선 범위에서 바탕선 값을 사용합니다.

- **Right:** 시간 내 이 지점의 오른쪽과 가장 가까운 바탕선 범위에서 바탕선 값을 사용합니다.
- **Range 1—Range 9:** 주어진 바탕선 범위에서 바탕선 값을 사용합니다. 바탕선 범위는 크로마토그램을 시작할 때부터 계산됩니다.

**Area Sum Slice** (\*\* '예시: 면적 합 슬라이스' on page 51 \*\*)의 예시도 참조하십시오.

## 고급 적분기 이벤트

고급 적분기 이벤트는 모든 신호에 대해 제공됩니다.

### 탄젠트 스킵 모드

피크의 상사면 또는 하사면에서 발견되는 피크에 대한 바탕선 구성 유형을 정의합니다. “탄젠트 스킵 모드” 페이지 38을(를) 참조하십시오.

<b>Exponential</b>	높이가 보정된 각 자식 피크의 시작과 끝을 통해 지수 곡선을 그립니다.
<b>New Exponential</b>	부모 피크의 후행 에지에 근사하도록 지수 곡선을 그립니다.
<b>Standard</b>	가장 잘 맞도록 지수와 직선 계산을 결합합니다.
<b>Straight</b>	높이가 보정된 각 자식 피크의 시작과 끝을 통해 직선을 그립니다.
<b>Gaussian</b>	부모 피크의 후행 에지에 근사하도록 가우시안 곡선을 그립니다.

### 꼬리 스킵 높이 비율

**Skim valley ratio**와 함께 용매의 꼬리에 있는 작은 피크 또는 다른 큰 피크를 스킵하는 탄젠트의 조건을 설정합니다. “스킵 기준” 페이지 36을(를) 참조하십시오.

바탕선이 보정된 부모 피크 높이( $H_p$ )와 바탕선이 보정된 자식 피크 높이( $H_c$ )의 비율입니다. 지정된 값보다 높은 비율은 스킵을 활성화합니다.

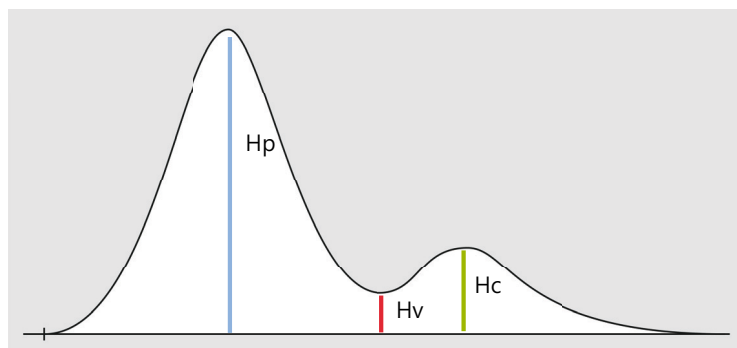


그림38 예시: 꼬리 스킵이 있는 피크

**전면 스킴 높이  
비율**

**Skim Valley Ratio**과 함께 용매의 전면에 있는 작은 피크 또는 다른 큰 피크를 스킴하는 탄젠트의 조건을 설정합니다. “스킴 기준” 페이지 36을(를) 참조하십시오.

바탕선이 보정된 부모 피크 높이( $H_p$ )와 바탕선이 보정된 자식 피크 높이( $H_c$ )의 비율입니다. 지정된 값보다 높은 비율은 스킴을 활성화합니다.

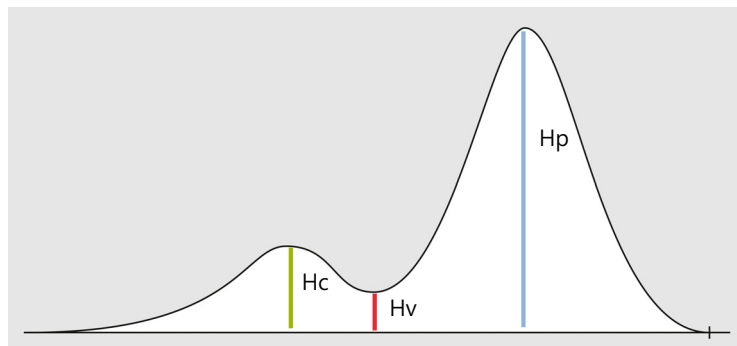


그림39 예시: 전면 스킴이 있는 피크

**스킴 골짜기  
비율**

**Tail Skim Height Ratio** 또는 **Front Skim Height Ratio**과 함께 용매의 꼬리 또는 전면에 있는 작은 피크 또는 다른 큰 피크를 스킴하는 탄젠트의 조건을 설정합니다. “스킴 기준” 페이지 36을(를) 참조하십시오.

바탕선이 보정된 자식 피크 높이( $H_c$ )와 바탕선이 보정된 골짜기 높이( $H_v$ )의 비율입니다. 지정된 값보다 낮은 비율은 스킴을 활성화합니다.

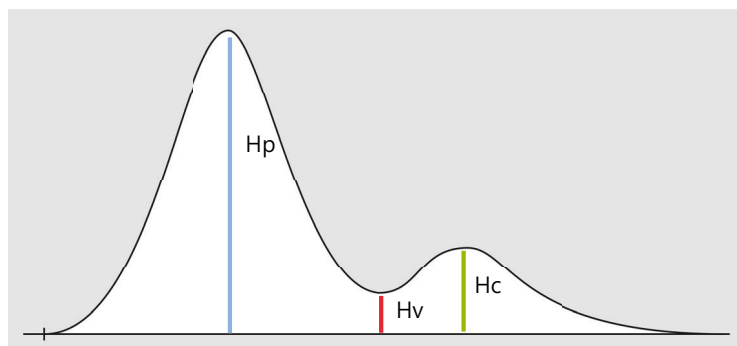


그림40 예시: 꼬리 스킴이 있는 피크

**바탕선 보정  
모드**

바탕선 보정 유형을 설정합니다. “바탕선 보정 모드” 페이지 32을(를) 참조하십시오.  
다음 파라미터 중에서 선택할 수 있습니다.

<b>Classical</b>	바탕선 침투를 수락합니다.
<b>No penetrations</b>	바탕선을 재구성하여 바탕선 침투를 제거합니다.
<b>Advanced</b>	적분기는 피크의 시작 및 끝 위치를 최적화하고, 피크의 클러스터에 대한 바탕선을 재설정하고, 바탕선 침투를 제거하려고 노력합니다.
<b>Advanced+</b>	적분기는 솔더 검출을 최적화하려고 노력합니다. 이는 솔더 감도를 높이고 동시에 솔더 아티팩트의 수를 줄입니다.

### 피크 대 골짜기 비율

바탕선 분리를 나타내지 않는 두 피크가 드롭 라인 또는 골짜기 바탕선을 사용하여 분리되는지 여부를 결정하기 위해 사용되는 이 비율은 작은 피크의 바탕선 보정된 높이와 골짜기의 바탕선 보정된 높이의 비율입니다. “[피크 대 골짜기 비율](#)” 페이지 33을(를) 참조하십시오.

피크 대 골짜기 비율이 지정된 값보다 낮으면 드롭 라인이 사용됩니다(A). 그렇지 않으면 바탕선이 첫 번째 피크의 시작점에 있는 바탕선에서 골짜기로, 그리고 골짜기에서 두 번째 피크의 끝점에 있는 바탕선으로 그려집니다(B).

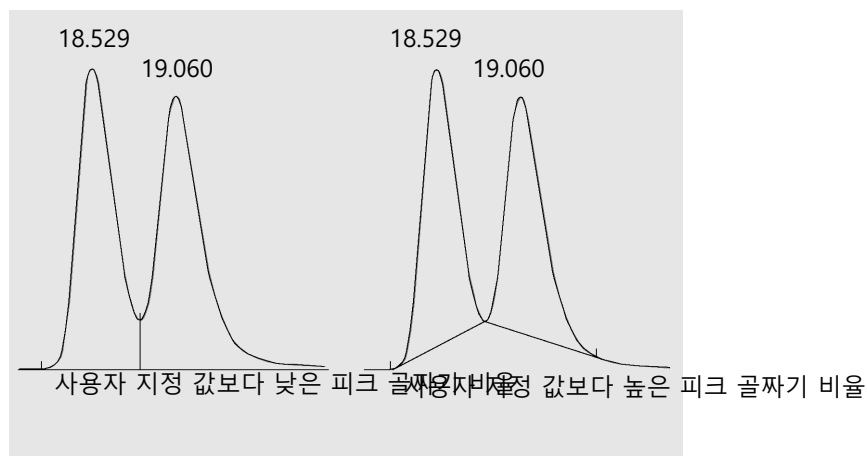


그림41 바탕선에 대한 피크 골짜기 비율의 효과

### 3

## EZChrom 적분기를 통한 적분

적분기 이벤트 65

바탕선 코드 설명 79

이 장에는 EZChrom 적분기 이벤트에 대한 설명이 포함되어 있습니다.



## 적분기 이벤트

제공된 신호에 대해 특별히 또는 모든 신호에 대해 글로벌하게 값을 설정할 수 있습니다. 시간 초과 이벤트를 추가하려면 파라미터 테이블에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭합니다.

여러 가지 유형의 적분기 이벤트가 있습니다. 일부 이벤트의 경우에 파라미터가 활성화된 동안 시작 및 정지 시간을 사용하여 시간 범위를 정의할 수 있습니다. 다른 이벤트의 경우에 시작 시간에서 또는 시간 범위 동안 사용할 특정 값을 정의할 수 있습니다. **Time Stop [min]**와 **Value** 컬럼은 이벤트 유형에 따라 활성화되거나 회색으로 표시됩니다.

### 주

OpenLab EZChrom과는 달리 OpenLab CDS의 다음 적분기 이벤트에 대한 정지 시간은 회색으로 표시됩니다.

- 폭
- 임계값
- 슬더 감도
- 최소 면적
- 바탕선 재설정
- 골짜기에서 바탕선 재설정

**폭** 진정한 피크를 노이즈와 구별하기 위해 사용됩니다. 시스템은 0,2 min를 기본 폭 값으로 사용합니다.

**Width** 이벤트는 번칭, 또는 평활화 및 적분 알고리즘이 적용되기 전 데이터 포인트에 대한 값을 계산하는 데 사용됩니다. 적분은 피크 전체에 20개의 지점이 있을 때 가장 잘 작동합니다. 피크가 과도하게 샘플링되면(즉, 샘플링 빈도가 너무 높으면), **Width** 파라미터는 적분 알고리즘이 피크 전체에서 20개 지점만 표시하는 데이터의 평균을 내는 데 사용됩니다.

**Width** 이벤트는 피크 정점 이전 또는 정점에서 발생하는 한 주어진 피크에 적용됩니다.

**Width** 파라미터는 과도한 샘플링을 보정할 때만 사용됩니다. 과소 샘플링(즉, 샘플링 빈도가 너무 낮아 가장 좁은 피크 전체에서 20개 미만의 지점만 수집하는 경우)된 데이터는 보정할 수 없습니다.

아래 다이어그램은 올바르게 않은 값이 피크 바탕선에 영향을 주는 방법에 대한 예시를 보여줍니다.

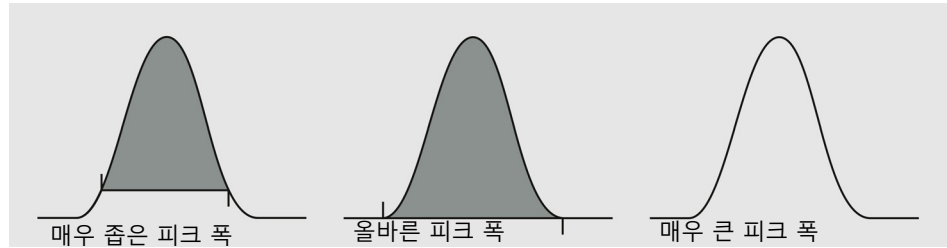


그림42 폭

주

대부분의 환경에서 크로마토그램의 가장 좁은 피크에 기반한 초기 폭 값은 모든 피크의 적절한 적분에 적합합니다. 그러나 새 폭 시간 초과 이벤트는 피크 폭이 두 배가 될 때마다 입력되어야 합니다.

주

폭과 임계값 모두의 극한값(너무 크거나 너무 작은)은 피크의 검출을 방해합니다.

임계값

이 파라미터는 첫 번째 도함수로, 적분 알고리즘이 바탕선 노이즈와 드리프트에서 피크의 시작과 정지를 구별할 수 있도록 하기 위해 사용됩니다. **Threshold** 값은 크로마토그램의 섹션에서 결정된 가장 높은 첫 번째 도함수 값에 기반을 두고 있습니다.

아래 다이어그램은 올바르게 조정된 값이 피크 바탕선에 영향을 주는 방법에 대한 예시를 보여줍니다.

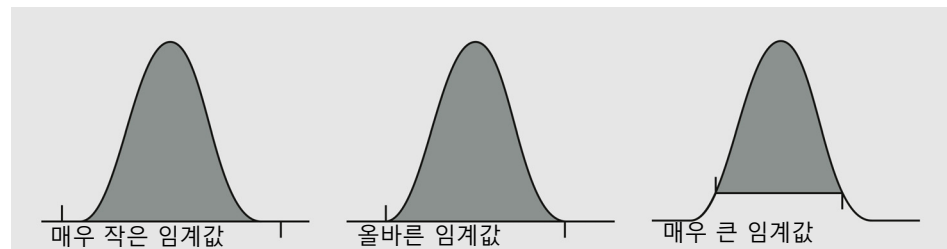


그림43 임계값

주

폭과 임계값 모두의 극한값(너무 크거나 너무 작은)은 피크의 검출을 방해합니다.

숄더 감도

이 파라미터는 더 큰 피크에서 숄더 검출을 활성화할 때 사용됩니다. 더 큰 값은 숄더 감도를 줄이지만 더 작은 값은 숄더 피크 감도를 높입니다. **Shoulder Sensitivity** 값은 크로마토그램의 섹션에서 결정된 가장 높은 두 번째 도함수 값에 기반을 두고 있습니다.

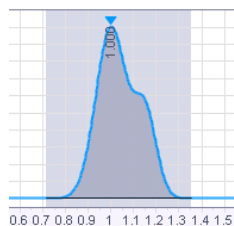


그림44 너무 높게 설정된 숄더 감도 값

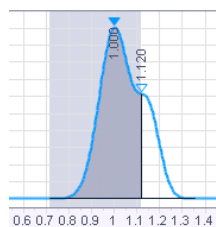


그림45 올바르게 설정된 숄더 감도 값

**적분 꺼짐**

이 이벤트는 범위가 지정된 동안 크로마토그램의 적분을 끕니다. 이 이벤트는 크로마토그램의 특정 영역에 관심이 없고 해당 섹션에 대해 피크가 보고되기를 원치 않는 경우에 유용합니다.

**Integration Off**을 사용하여 피크를 비활성화하면 이러한 영역이 노이즈 계산에 포함됩니다. 올바른 노이즈 값을 얻기 위해서는 적분된 모든 피크를 남겨둡니다.

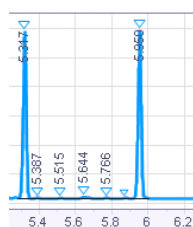


그림46 기본 적분

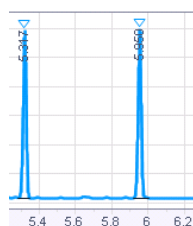


그림47 5,35~5,85 min에서 적분 꺼짐

**골짜기 대 골짜기**

이 이벤트로 인해 완전히 분해되지 않은(즉, 바탕선으로 반환되지 않은) 피크의 바탕선이 피크 사이의 최소 지점까지 그려집니다.

이 이벤트가 사용되면 크로마토그램이 바탕선으로 반환되는 다음 지점으로 바탕선이 투영되고 수직선이 바탕선에 도달하지 않은 피크를 향해 떨어집니다.

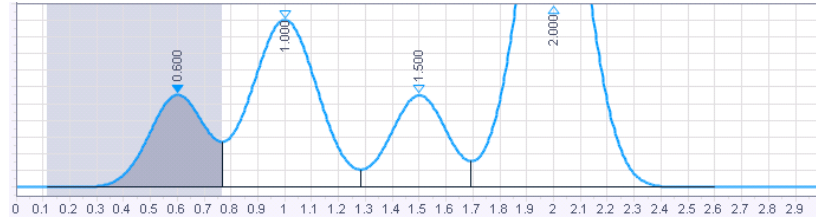


그림48 기본 적분

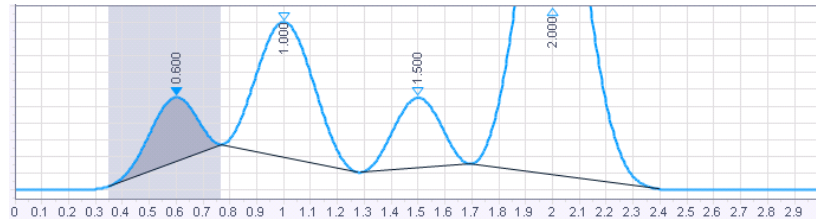


그림49 Valley to valley 이벤트가 있는 적분

**수평 바탕선**

이 이벤트를 통해 지정된 시간 범위 내에서 바탕선을 피크를 향해 전방 수평으로 투영할 수 있습니다. 바탕선은 정의된 시간 범위 내의 첫 번째 피크가 시작되는 곳에서 시작됩니다. 바탕선의 끝은 신호와 교차하는 곳 또는 마지막 피크가 끝나는 곳입니다.

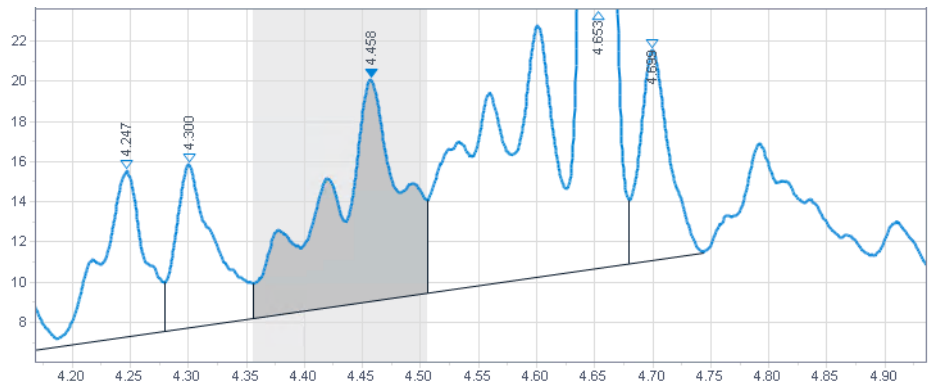


그림50 기본 적분

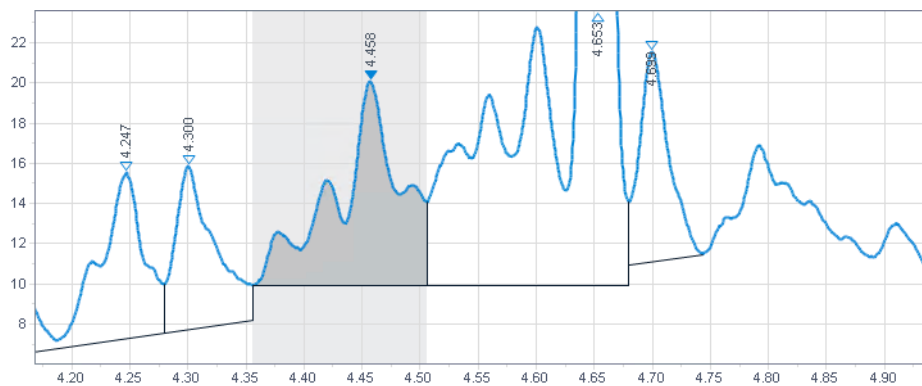


그림51 4.4~4.69 min 사이에 수평 바탕선 이벤트가 있는 적분

### 후방 수평 바탕선

이 이벤트는 수평 바탕선을 크로마토그램의 시작 방향으로 강제할 때 사용됩니다. 지정된 시간 범위 내에서 피크에 대한 후방 수평 바탕선이 생성됩니다. 바탕선은 정의된 시간 범위 끝 내의 마지막 피크 끝에 의해 정의됩니다. 신호와 교차하는 곳 또는 첫 번째 피크가 시작되는 곳으로 다시 투영됩니다.

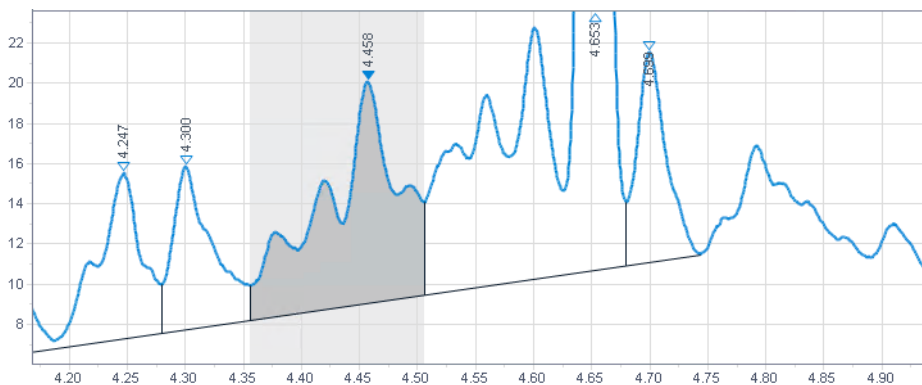


그림52 기본 적분

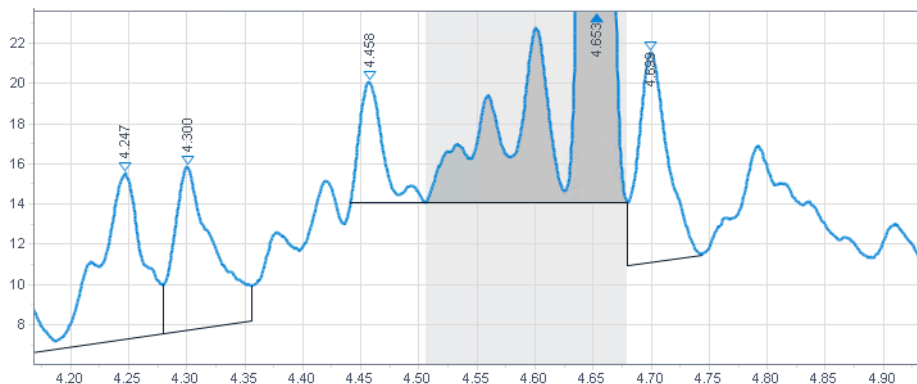


그림53 4.4~4.69 min 사이에 후방 수평 바탕선 이벤트가 있는 적분

가장 낮은 지점  
수평 바탕선

이 이벤트는 머무름 시간이 **Time (min)**과 **Time Stop (min)**에 의해 정의된 시간 범위 내에 있는 모든 피크에 적용됩니다.

**Value**은 적분기가 가장 낮은 바탕선 지점을 검색하기 시작하는 시간을 정의합니다.

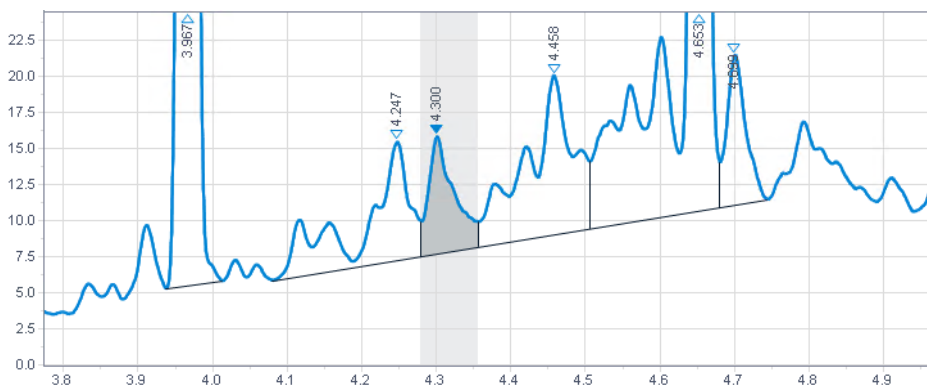


그림54 기본 적분

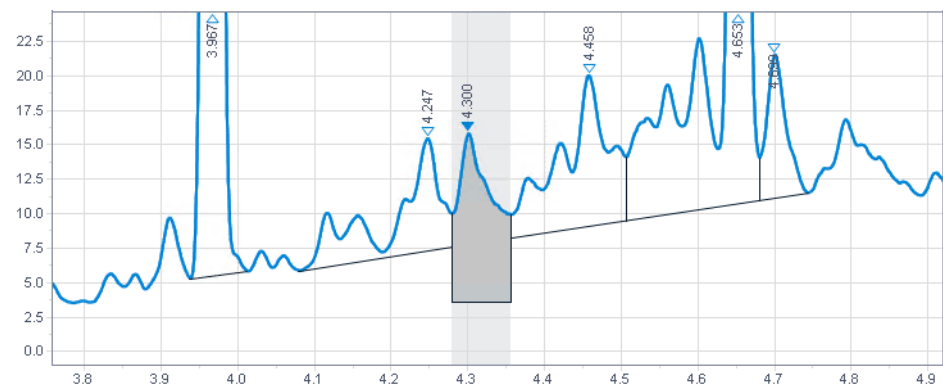


그림55 4,25~4,35 min 사이에 가장 낮은 지점 수평 바탕선 이벤트와 3,8 min로 설정된 Value이 있는 적분

### 탄젠트 스킴

이 이벤트는 더 큰 피크의 후행 에지에 위치한 작은 피크를 적분할 때 사용됩니다. 작은 피크의 바탕선은 더 큰 피크의 골짜기에서 크로마토그램의 탄젠트 지점까지 그려진 탄젠트가 됩니다.

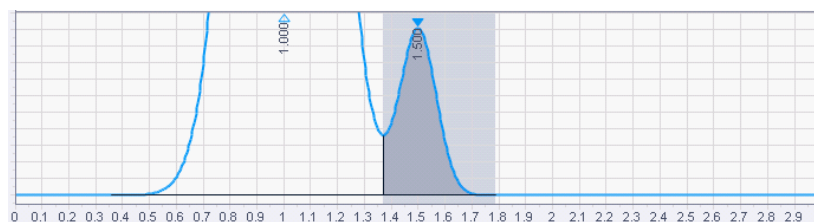


그림56 기본 적분

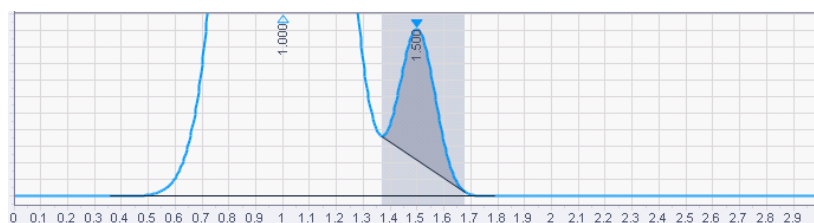


그림57 Tangent skim 이벤트가 있는 적분

### 전방 탄젠트 스킴

이 이벤트는 모 피크의 선두 에지에서 딸 피크에 대한 탄젠트 바탕선을 강제할 때 사용됩니다.

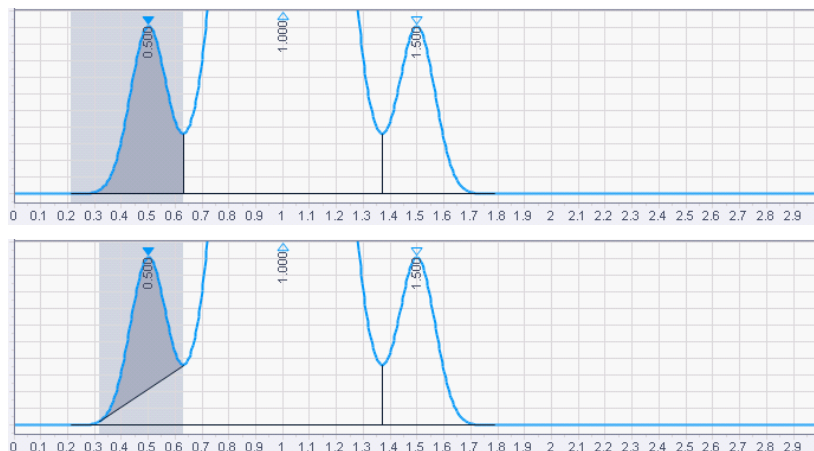


그림58 Front tangent skim 이벤트가 있는 적분

**지수 스킵** 이 이벤트는 더 큰 피크의 후행 에지에 위치한 작은 피크를 적분할 때 사용됩니다. 작은 피크의 바탕선은 더 큰 피크의 골짜기에서 크로마토그램의 탄젠트 지점까지 그려진 지수가 됩니다.

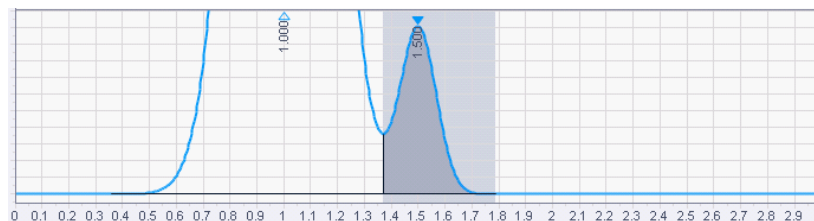


그림59 기본 적분

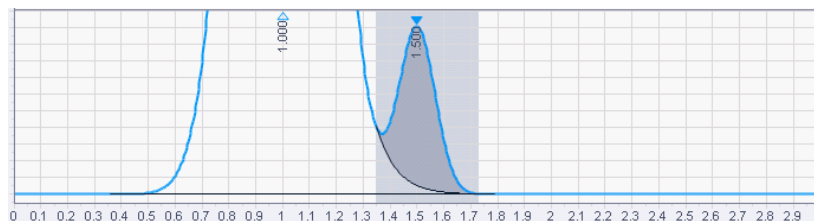


그림60 Exponential skim 이벤트가 있는 적분

**전방 지수 스킵** 이 이벤트는 모 피크의 선두 에지에서 딸 피크에 대한 지수 바탕선을 강제할 때 사용됩니다.



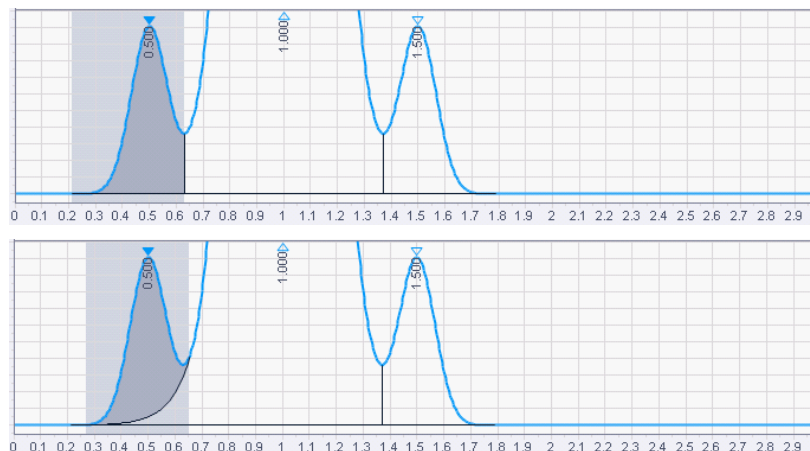


그림61 Front exponential skim 이벤트가 있는 적분

**최소 면적** 이 이벤트를 통해 피크 검출에 대한 면적 한계를 입력할 수 있습니다. 면적이 이 최소 면적 미만인 피크는 적분되지도 않고 피크로 보고되지도 않습니다. 이 이벤트는 보고서에서 노이즈나 오염 피크를 제거하는 데 유용합니다.

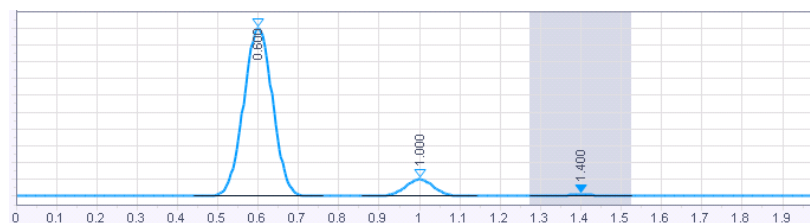


그림62 기본 적분

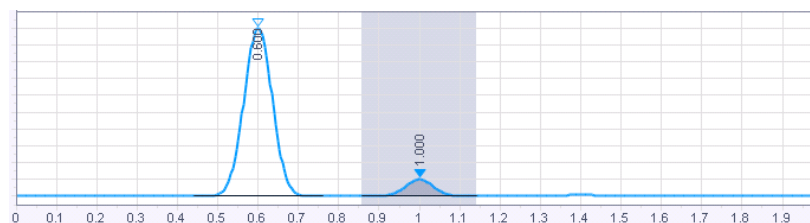


그림63 Minimum area 이벤트가 있는 적분

**마이너스 피크** 이 이벤트로 인해 바탕선 아래로 떨어지는 크로마토그램 부분이 일반 피크 로직을 사용하여 적분되고 진정한 피크로 보고됩니다. 이 이벤트는 특정 화합물에 부정적인 감응을 보이는 굴절률 유형과 같은 검출기를 사용할 때 유용합니다.

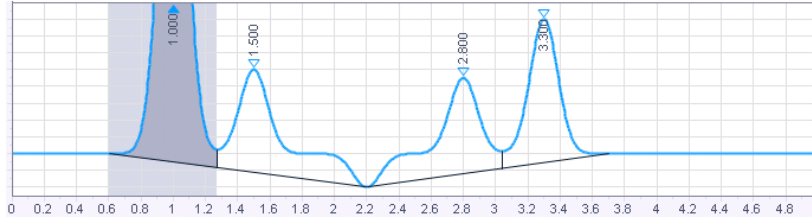


그림64 기본 적분

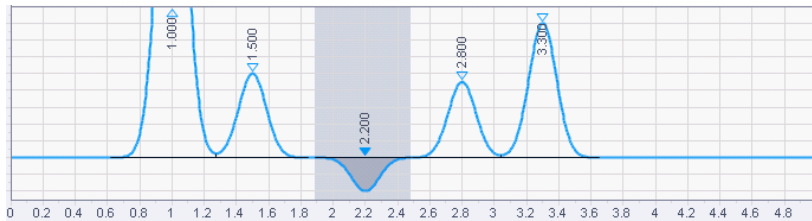


그림65 Negative peak 이벤트가 있는 적분

### 피크 검출 종료 비활성화

이 이벤트는 지정된 시간 사이의 피크 검출 종료를 끄는 데 사용되며, 소프트웨어가 이벤트 창 내에 있는 피크를 단일 피크로 취급하도록 강요합니다. 이 이벤트는 일련의 인접한 피크 면적을 하나의 면적으로 결합하는 유용한 방법입니다. 피크가 단일 피크의 일부로 간주되기 때문에 머무름 시간은 **Disable End of Peak Detection** 이벤트 후 첫 번째 정점 시간에 할당됩니다.

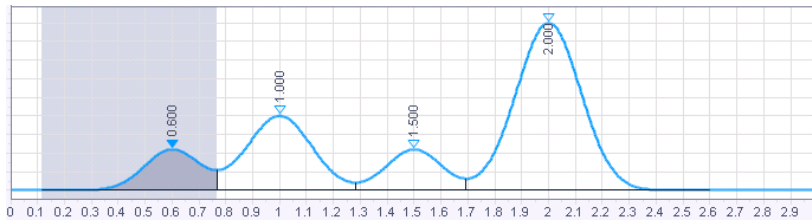


그림66 기본 적분

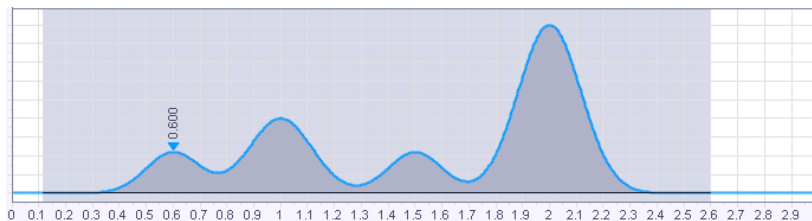


그림67 0,4~2,3 min 사이의 Disable end of peak detection

**수동 바탕선**

이 이벤트를 통해 적분 파라미터의 변경 없이 피크에 대한 바탕선이 그려지는 방법을 변경할 수 있습니다. 바탕선은 시작 시간의 신호에서 정지 시간의 신호까지 그려집니다.

이것은 크로마토그램의 다른 피크에 대한 바탕선이 그려지는 방법을 변경하지 않고 피크에 대한 바탕선이 그려지는 곳을 변경하려 할 때 편리합니다.

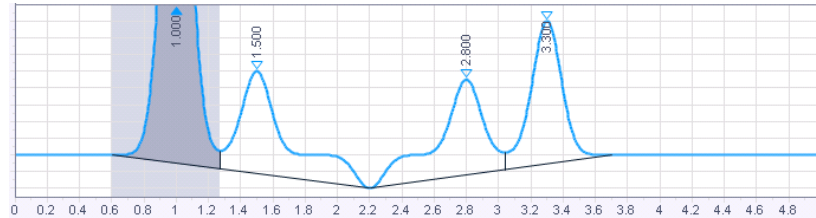


그림68 기본 적분



그림69 2,3~3,6 min 사이에 수동 바탕선이 있는 적분

**수동 피크**

이 명령을 통해 이전에 검출되지 않은 피크의 시작 및 정지 시간을 정의할 수 있습니다. 이것은 피크의 적분을 강제하려 하지만 전체 적분 파라미터의 변경을 원치 않을 때 편리합니다.

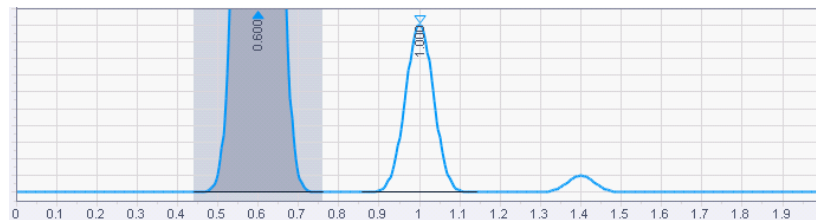


그림70 기본 적분

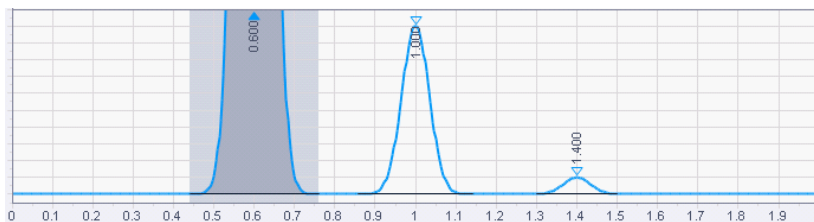


그림71 1,3~1,5 min 사이에 수동 피크 이벤트를 사용하여 강제된 작은 피크 적분

### 갈라진 피크

이 이벤트는 피크에서 수직 드롭 라인 적분을 강제할 때 사용됩니다. 수직선은 이벤트가 삽입되는 시간에 떨어집니다.

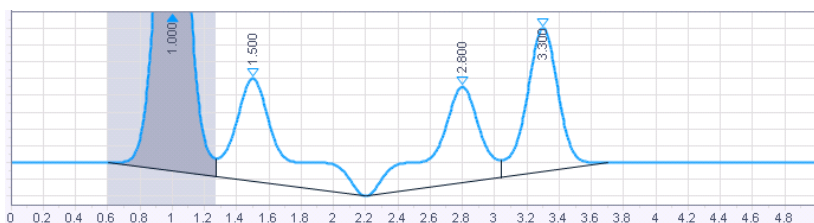


그림72 기본 적분

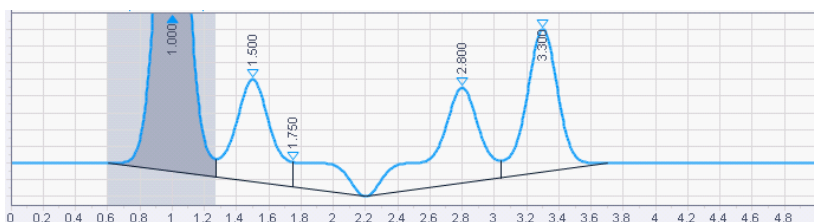


그림73 1,75 min에 Split peak 이벤트가 있는 적분

### 강제 피크 시작/강제 피크 종료

이러한 이벤트는 피크 적분의 시작 또는 정지를 특정한 지점으로 강제할 때 사용됩니다.

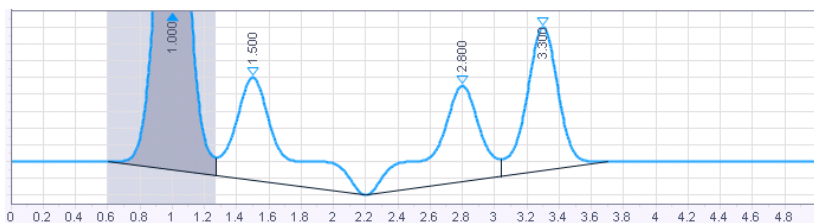


그림74 기본 적분

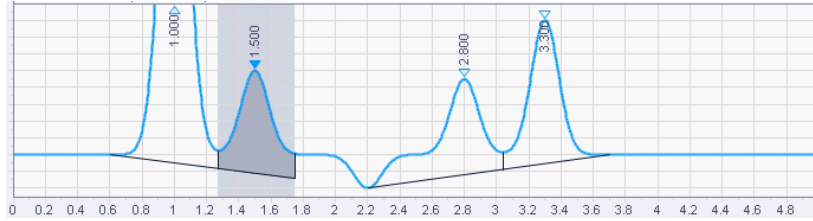


그림75 1.75 min에 Force peak end 이벤트가 있는 적분

**바탕선 재설정** 이 이벤트를 통해 크로마토그램의 지정된 지점에서 바탕선을 설정할 수 있습니다.

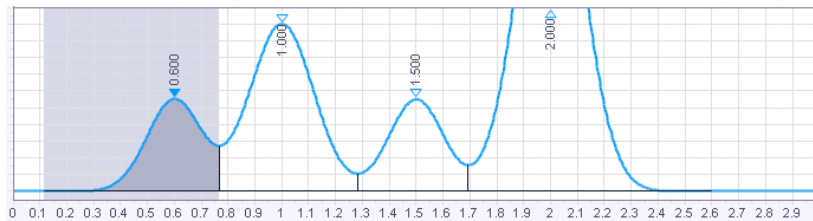


그림76 기본 적분

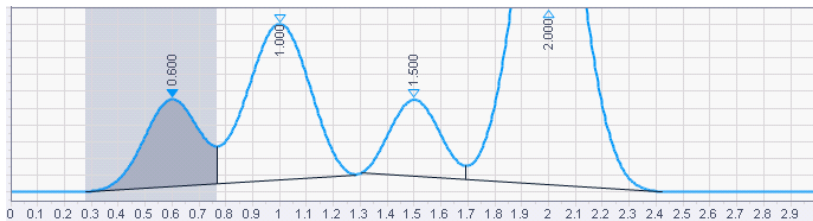


그림77 1.3 min에 Reset baseline 이벤트가 있는 적분

**골짜기에서  
바탕선 재설정**

**주**

이 이벤트로 인해 바탕선이 이벤트 후 검출된 다음 골짜기에서 재설정됩니다.

이벤트는 클러스터에서 첫 번째 피크의 시작 후 배치되어야 합니다. 그렇지 않으면 피크의 시작이 골짜기로 식별됩니다.

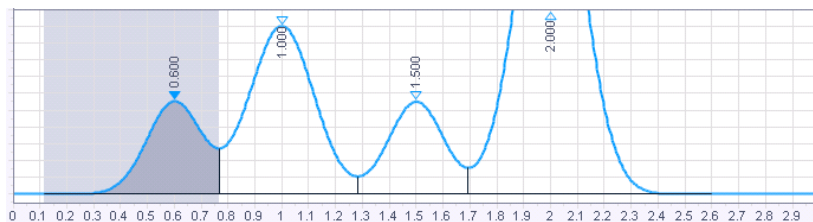


그림78 기본 적분

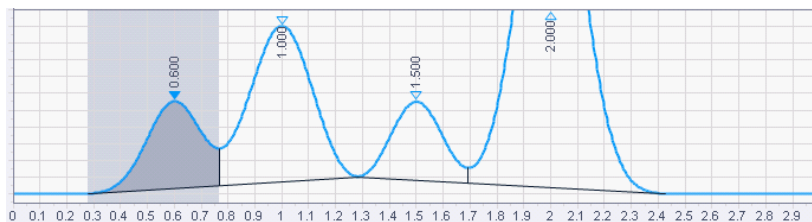


그림79 1,2 min에 Reset baseline at valley 이벤트가 있는 적분

**최대 면적** 최대 관심 피크의 면적을 설정합니다.

최대 면적보다 큰 면적을 가진 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 최대 면적 값보다 큰 모든 피크를 제외합니다.

예를 들어, 이 이벤트를 사용하여 적분 결과에서 GC 크로마토그램의 용매 피크를 제외할 수 있지만 해당 라이더 피크를 포함할 수 있습니다.

**최대 높이** 최대 관심 피크의 높이를 설정합니다.

최대 높이보다 큰 높이를 가진 피크는 보고되지 않습니다. 적분기는 바탕선 보정 후 최대 높이 값보다 큰 모든 피크를 제외합니다.

예를 들어, 이 이벤트를 사용하여 적분 결과에서 GC 크로마토그램의 용매 피크를 제외할 수 있지만 해당 라이더 피크를 포함할 수 있습니다.

## 바탕선 코드 설명

### 바탕선 코드 설명

기준 코드는 두 글자로 구성됩니다. 첫 번째 문자는 피크 시작 바탕선 유형을 나타내고 두 번째 문자는 피크 종료 바탕선 유형을 나타냅니다. 바탕선 코드는 **Injection Results** 테이블과 모든 기본 보고서 템플릿에 포함되어 있습니다.

Injection Results							
Peaks		Summary					
#	Name	BL code	Signal description	RT (min)	Area	Area%	Height
1		VB	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	1.940	356.576	27.285	65.775
2		BB	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	2.578	314.315	24.051	49.125
3		BB	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	3.022	333.322	25.506	59.034
4		BV	DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0	4.517	302.650	23.159	49.419

그림80 주입 결과

Signal: DAD1A,Sig=272.0,16.0 Ref=380.0,20.0						
RT [min]	Type	Width [min]	Area	Height	Area%	
1.940	VB	0.53	356.58	65.78	27.28	
2.578	BB	0.43	314.31	49.12	24.05	
3.022	BB	0.64	333.32	59.03	25.51	
4.517	BV	0.59	302.65	49.42	23.16	
	Sum		1306.86			

그림81 예시: 짧은 면적의 테이블 보고서

- B** Baseline(바탕선)
- C** Exponential(지수)
- f** Force Peak Start or Stop (user defined)(강제 피크 시작 또는 정지(사용자 정의))
- I** Peak ended by Integration Off event(적분 꺼짐 이벤트에 의한 피크 종료)
- N** Begin negative peak(마이너스 피크 시작)
- P** End negative peak(마이너스 피크 종료)
- H** Forward horizontal(전방 수평)
- h** Backward horizontal(후방 수평)

- M** Manual baseline or Manual peak(수동 바탕선 또는 수동 피크)
- m** Move baseline Start/Stop(바탕선 시작/정지 이동)
- S** Shoulder(숄더)
- T** Tangent skim(탄젠트 스킴)
- V** Valley(골짜기)
- v** Forced valley point(강제 골짜기 포인트)
- x** Split peak(갈라진 피크)
- E** End of chromatogram encountered before the end of peak was found.(피크의 끝이 발견되기 전에 발생한 크로마토그램의 끝.)  
End of chromatogram used as peak end.(피크 끝으로 사용된 크로마토그램의 끝.)
- R** Reset Baseline(바탕선 재설정)
- L** Lowest Point Horizontal(수평 최저점)



피크 식별이란 무엇입니까?	82
머무름 시간 창 평가	83
충돌 해결	84
상대 머무름 시간	85
상대 머무름 시간(RRT) 계산	86
시간 참조 화합물	87
시간 참조 화합물 정보	87
시간 참조 화합물에 대한 계산	87
처리 방법 업데이트	89
머무름 시간 업데이트	89
업데이트된 머무름 시간 계산	89
예: RRT를 사용한 머무름 시간 업데이트	91
글로벌 머무름 시간 변화 계산	92

이 장에서는 피크 식별의 개념을 설명합니다.

## 피크 식별이란 무엇입니까?

피크 식별은 크로마토그래피 특성을 기반으로 미지의 시료에 있는 화합물을 식별합니다.

분석법에 정량이 필요한 경우 이러한 화합물의 식별은 정량화에 필수적인 단계입니다. 정량화 없이도 식별을 통해 유효한 처리 방법을 만들 수 있습니다. 관심 있는 각 성분의 신호 특성은 분석법의 화합물 테이블에 저장됩니다.

피크 식별 프로세스의 기능은 신호의 각 피크를 화합물 테이블에 저장된 피크와 비교하는 것입니다.

식별은 예상 머무름 시간, 절대 머무름 시간 창 및 상대 머무름 시간 창(%)을 기반으로 합니다. 최종 머무름 시간 창은 예상 머무름 시간에 대칭으로 적용되는 상대적 창과 절대적 창을 합한 값입니다.

예상 머무름 시간은 분석법에서 절대 시간 값으로 지정되거나 상대 머무름 시간에서 계산됩니다. 시간 참조 화합물은 특정 기준 화합물에서 관찰된 가능한 변화를 기반으로 예상 머무름 시간을 보정하는 데 사용될 수 있습니다.

$$\text{Wnd Wdth} = \text{Abs R T Wnd} + \frac{\text{Exp R T} * \text{Rel R T Wnd}}{100}$$

где:

Abs R T Wnd	절대 머무름 시간 창
Exp R T	예상 머무름 시간
Rel R T Wnd	상대 머무름 시간 창
Wnd Wdth	창 너비

$$\text{R T Wnd} = [\text{Exp R T} - \text{Wnd Wdth}; \text{Exp R T} + \text{Wnd Wdth}]$$

где:

Exp R T	예상 머무름 시간
R T Wnd	머무름 시간 창
Wnd Wdth	창 너비

피크 식별이란 무엇입니까?

## 머무름 시간 창 평가

식별 창은 상대 창과 절대 창을 합한 값으로, 예상 머무름 시간에 대칭적으로 적용됩니다.  
예시:

예상 머무름 시간 = 1 min

절대 머무름 시간 창 = 0,2 min

상대 머무름 시간 창 = 10 % = 1 min \* 10/100 = 0,1 min

식별 창 =  $[1 - 0.2 - 0.1; 1 + 0.2 + 0.1] = [0.7; 1.3]$

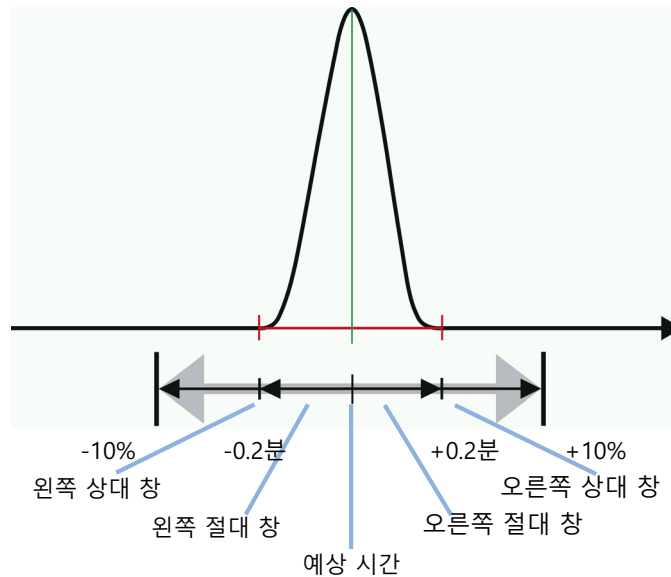


그림82 식별 창

## 충돌 해결

여러 피크가 머무름 시간 창 내에 있는 경우 특정 피크를 식별하는 방법에는 여러 가지가 있습니다. 화합물 식별 파라미터에서 **Peak match**에 대해 다음 값 중에서 선택할 수 있습니다.

- **First**: 머무름 시간 창에서 첫 번째 피크를 사용합니다.
- **Last**: 머무름 시간 창에서 마지막 피크를 사용합니다.
- **Closest**(기본 설정): 예상 머무름 시간에 가장 가까운 피크를 사용합니다.
- **Closest nested**: 기본 피크와 겹친 피크가 있고 둘 다 머무름 시간이 같은 경우 겹친 피크를 사용합니다.
- **Largest area**: 머무름 시간 창에서 가장 큰 면적을 가진 피크를 사용합니다.
- **Largest height**: 머무름 시간 창에서 높이가 가장 큰 피크를 사용합니다.

충돌이 해결되지 않으면 어떤 피크도 식별되지 않으며 처리 로그에 경고가 기록됩니다.

## 상대 머무름 시간

상대 머무름 시간을 사용하여 화합물의 식별이 올바른지 확인할 수 있습니다. 화합물의 머무름 시간은 주어진 다른 특정 화합물의 머무름 시간과 비교됩니다(RRT 기준이라고도 함). 두 머무름 시간의 비율, 즉 상대 머무름 시간 RRT는 일반적으로 애플리케이션에서 제공할 수 있는 알려진 수치입니다.

RRT 값 자체는 화합물 식별에 영향을 미치지 않습니다. 이를 위해 절대 예상 머무름 시간만 사용됩니다. 이 값은 처리 방법에 절대 시간 값으로 지정되거나 상대 머무름 시간에서 계산됩니다. 시간 참조 화합물 또는 분석법 업데이트를 사용하여 가능한 변화에 따라 이러한 절대 머무름 시간 창을 보정할 수 있습니다.

다음 예는 관련 화합물과 함께 RRT 기준 화합물에 대한 식별 파라미터를 보여줍니다.

Compound Table		Qualifier Setup		General			
#	Type	Name	Signal	Is RRT ref.	Associated RRT reference	Exp. RT (min)	RRT
1		Ref #1	DAD1A	<input checked="" type="checkbox"/>		2.000	1.000
2		Compound #1	DAD1A	<input type="checkbox"/>	Ref #1 (DAD1A)	3.000	1.500

관련 화합물

RRT 기준 화합물

연관된 화합물의 예상 RT를 변경하면 해당 RRT 값이 자동으로 다시 계산됩니다. 또한 그 반대의 경우도 RRT 값을 변경하면 예상 RT가 다시 계산됩니다.

RRT 기준 화합물의 예상 RT를 변경하면 시스템에서 관련 화합물의 예상 RT를 다시 계산합니다.



**시간 참조 화합물**을 RRT 기준 화합물과 함께 사용하는 경우, 머무름 시간 변화가 RRT 기준 화합물에 적용됩니다(**“시간 참조 화합물에 대한 계산”** 페이지 87 참조). 시스템은 관련 화합물의 예상 RT를 다시 계산하여 RRT 값이 변경되지 않도록 합니다.

Compound Table		Qualifier Setup		General				
#	Type	Name	Signal	Is time ref.	Associated time ref.	Exp. RT (min)	RRT	Is RRT ref.
1		Ref #1	DAD1A	<input type="checkbox"/>		2.000	1.000	<input checked="" type="checkbox"/>
2		Compound #1	DAD1A	<input type="checkbox"/>	Time Ref (DAD1A)	3.000	1.500	<input type="checkbox"/>
3		Time Ref	DAD1A	<input checked="" type="checkbox"/>		3.500		<input type="checkbox"/>

RT: 필요한 경우 조정됨

RRT: 일정하게 유지됨

RRT 기준 화합물과 함께 **Update RT** 기능을 사용할 수도 있습니다. 단, RRT 기준 화합물에 대한 업데이트 파라미터만 구성할 수 있습니다. 연결된 화합물은 기준과 동일한 값을 사용해야 하므로 RRT 값이 변경되지 않습니다.

Compound Table			Qualifier Setup		General			
#	△	Type	Name	Signal	Is RRT ref.	Associated RRT reference	RT update	RT update factor (%)
1		RRT Ref	DAD1A	<input checked="" type="checkbox"/>			After each run	50.000
2		Compound #1	DAD1A	<input type="checkbox"/>		RRT Ref (DAD1A)	After each run	

관련 화합물은 RRT 기준과 동일한 RT 업데이트 값을 사용함

RRT 기준 화합물은 RT 업데이트 기능을 사용함

식별되지 않은 피크의 경우, 관련된 화합물이 없습니다. 이 경우 첫 번째 RRT 기준 화합물이 RRT 값을 계산하는 데 사용됩니다.

## 상대 머무름 시간(RRT) 계산

처리 방법에  
표시되는 값

$$RRT = \text{예상 RT}_{\text{화합물}} / \text{예상 RT}_{\text{기준}}$$

연관된 화합물의 RRT 값을 변경하면 예상 RT는 다음과 같이 다시 계산됩니다.

$$\text{예상 RT}_{\text{화합물}} = RRT * \text{예상 RT}_{\text{기준}}$$

주입 결과에  
표시된 값

식별된 피크의 경우:

$$RRT = \text{실제 RT}_{\text{화합물}} / \text{실제 RT}_{\text{기준}}$$

확인되지 않은 피크의 경우:

$$RRT = \text{실제 RT}_{\text{피크}} / \text{실제 RT}_{\text{첫 번째 기준}}$$

## 시간 참조 화합물

### 시간 참조 화합물 정보

시간 참조 화합물을 사용하는 경우 애플리케이션은 특정 참조 화합물에서 관찰된 가능한 변화를 기반으로 절대 머무름 시간 창을 보정합니다.

처리 방법에서 하나 이상의 화합물을 시간 참조 화합물로 표시할 수 있습니다. 각 화합물 또는 시간 초과 그룹에 대해 시간 참조 화합물을 선택하여 예상 머무름 시간을 보정할 수 있습니다. 보정 정도는 개별 보정 계수로 조정할 수 있으며, 예상 머무름 시간을 보정하기 위해 각 화합물에 대해 선택할 수 있습니다(컬럼 **Factor**, 기본값 = 1).

화합물에 시간 참조 화합물이 할당된 경우, 예상 머무름 시간은 할당된 시간 참조 화합물의 변화에 의해 보정됩니다. 화합물 식별 알고리즘은 크로마토그램에서 피크를 식별하기 위해 보정된 예상 머무름 시간을 사용합니다. 시간 초과 그룹의 경우, 시간 범위는 변화에 의해 보정됩니다. 일반적으로 변화는 입력한 보정 계수에 의해 보정됩니다. 크로마토그램에서 연결된 참조 화합물을 찾을 수 없는 경우 연결된 피크와 시간 초과 그룹이 식별되지 않습니다.

**시간 참조 화합물** 및 RRT 기준 화합물을 사용하는 경우, 예상 RT<sub>기준</sub> 및 예상 RT<sub>화합물</sub>이 모두 조정되어 RRT가 일정하게 유지되도록 합니다.

#### 주

시간 참조 화합물을 사용하는 경우, **모든** 화합물 및 시간 초과 그룹에 시간 참조 화합물이 할당되어야 합니다. 그렇지 않으면 분석법에 일관성이 없어지며 재처리에 사용할 수 없습니다.

### 시간 참조 화합물에 대한 계산

시간 참조 화합물을 사용하는 경우 애플리케이션은 선택한 시간 참조 화합물에서 관찰된 가능한 변화를 기반으로 절대 머무름 시간 창을 보정합니다. 애플리케이션은 먼저 분석법에 정의된 예상 머무름 시간을 기준으로 범위에서 참조 피크를 식별합니다. 그런 다음 이 시간 참조를 사용하는 화합물에 대해 다음 계산이 수행됩니다.

시간 참조  
화합물의 변화

$$\text{Shift}_{\text{Ref}} = \text{ActualRT}_{\text{Ref}} - \text{ExpRT}_{\text{Ref}}$$

где:

Shift<sub>Ref</sub>

참조 화합물의 시간 변화

$ActualRT_{Ref}$	참조 화합물의 실제 머무름 시간
$ExpRT_{Ref}$	참조 화합물의 예상 머무름 시간

**관련 화합물의 RT** 시간 참조를 사용하는 화합물의 경우, 예상 머무름 시간은 추가 계수를 사용하여 계산됩니다.

$$CorrectedExpRT = ExpRT + (Shift_{Ref} * \text{계수})$$

где:

$CorrectedExpRT$	보정된 예상 머무름
$ExpRT$	예상 머무름 시간
$Shift_{Ref}$	시간 참조 화합물의 시간 변화
계수	연관된 시간 참조 화합물이 있는 화합물의 계수( <b>Factor</b> )

**연결된 시간 초과 그룹의 시작 및 정지 시간** 시간 초과 그룹의 경우 예상 시작 및 정지 시간이 그에 따라 계산됩니다.

보정된 범위 시작 = 범위 시작 + ( $Shift_{Ref}$  \* 계수)

보정된 범위 종료 = 범위 종료 + ( $Shift_{Ref}$  \* 계수)

где:

보정된 범위 시작	시간 초과 그룹의 보정된 시작 시간
범위 시작	시간 초과 그룹의 시작 시간
보정된 범위 종료	시간 초과 그룹의 보정된 정지 시간
범위 종료	시간 초과 그룹의 정지 시간
$Shift_{Ref}$	시간 참조 화합물의 시간 변화
계수	시간 참조 화합물이 연결된 시간 초과 그룹에 대한 계수( <b>Factor</b> )



## 처리 방법 업데이트

### 머무름 시간 업데이트

식별된 모든 화합물 또는 시간 초과 그룹의 머무름 시간 업데이트 유형(**Never**, **After each run** 또는 **After calibration standards**)에 따라 보정된 예상 머무름 시간이 계산된 후 처리 방법의 예상 머무름 시간이 자동으로 업데이트됩니다. 보정된 값을 기반으로 화합물을 찾을 수 있는 경우 보정된 값이 분석법에서 새로운 예상 값이 됩니다.

머무름 시간 업데이트는 시간 참조를 포함하거나 포함하지 않고 적용할 수 있습니다.

#### 주

머무름 시간 업데이트가 **After each run** 또는 **After calibration standards**로 설정된 경우 모든 주입이 순차적으로 처리됩니다. 분석법 변경은 다음 주입부터 적용되며 비검량 주입은 더 이상 병렬 처리할 수 없습니다.

실행 중에 머무름 시간을 업데이트하는 것 외에도 모든 머무름 시간을 지정된 값만큼 수동으로 이동할 수도 있습니다.

### 업데이트된 머무름 시간 계산

예상 머무름 시간을 보정하기 위해 애플리케이션은 현재 머무름 시간을 읽고 예상 머무름 시간으로의 변화를 계산합니다. 이 변화는 화합물별 가중계수를 곱한 값으로, 예상 머무름 시간에 추가됩니다.

$$\text{변화} = \text{ActualRT} - \text{ExpRT}$$

где:

변화	화합물의 시간 변화
ActualRT	화합물의 실제 머무름 시간
ExpRT	화합물의 예상 머무름 시간

$$\text{NewExpRT} = \text{ExpRT} + \left( \text{Shift} * \frac{\text{RTUpdate}}{100} \right)$$

где:

NewExpRT	화합물의 보정된 예상 머무름 시간
ExpRT	화합물의 예상 머무름 시간

변화	화합물의 시간 변화
RT업데이트	화합물의 가중계수(RT update factor (%))

### 시간 참조 화합물의 업데이트된 머무름 시간

시간 참조를 포함하거나 포함하지 않고 RT 업데이트를 사용할 수 있습니다. 시간 참조 화합물 자체의 변화 및 보정된 머무름 시간은 **RT 업데이트** 기능을 사용하여 모든 화합물과 동일한 방식으로 계산됩니다.

$$\text{NewExpRT}_{\text{Ref}} = \text{ExpRT}_{\text{Ref}} + \left( \text{Shift}_{\text{Ref}} * \frac{\text{RTUpdate}_{\text{Ref}}}{100} \right)$$

где:

$\text{NewExpRT}_{\text{Ref}}$	참조 화합물의 보정된 예상 머무름 시간
$\text{ExpRT}_{\text{Ref}}$	참조 화합물의 예상 머무름 시간
$\text{Shift}_{\text{Ref}}$	참조 화합물의 시간 변화
$\text{RTUpdate}_{\text{Ref}}$	참조 화합물의 가중계수(RT update factor (%))

시간 참조와 관련된 화합물의 보정된 머무름 시간은 추가 계수를 사용하여 계산됩니다.

$$\text{NewExpRT} = \text{ExpRT} + \left( \text{Shift}_{\text{Ref}} * \frac{\text{RTUpdate}}{100} * \text{Factor} \right)$$

где:

$\text{NewExpRT}$	화합물의 보정된 예상 머무름 시간
$\text{ExpRT}$	화합물의 예상 머무름 시간
$\text{Shift}_{\text{Ref}}$	참조 화합물의 시간 변화
$\text{RTUpdate}$	화합물의 가중계수(RT update factor (%))
계수	연관된 시간 참조 화합물이 있는 화합물의 계수(Factor)

**시간 초과 그룹**의 경우 예상 머무름 시간, 범위 시작 시간 또는 범위 종료 시간은 시간 참조 또는 상대 머무름 시간을 사용하는 경우에만 업데이트됩니다.

## 예: RRT를 사용한 머무름 시간 업데이트

머무름 시간을 자동으로 업데이트하고 상대 머무름 시간도 사용하는 경우 값은 다음과 같이 업데이트됩니다.

- RRT 기준 화합물의 예상 RT는 NewExpRT에 대한 방정식에 표시된 대로 계산됩니다(“업데이트된 머무름 시간 계산” 페이지 89 참조).
- 관련 화합물의 예상 RT는 예상 RT<sub>화합물</sub>에 대한 방정식에 표시된 것처럼 RRT 값을 일정하게 유지하도록 조정됩니다(“상대 머무름 시간(RRT) 계산” 페이지 86 참조).
- 시간 초과 그룹의 RT 시작 및 RT 정지 시간은 예상 RT<sub>화합물</sub>에 대한 방정식과 동일한 방정식을 사용하여 RRT 값을 일정하게 유지하도록 조정됩니다.

예를 들어, 3개의 화합물과 시간 초과 그룹이 있는 처리 방법에서 RT 업데이트 및 RRT가 사용되는 경우를 생각해 보겠습니다.

Compound Table			Qualifier Setup		General				
#	Type	Name	Signal	Is RRT ref.	Associated RRT reference	RT update	RT update factor (%)	Exp. RT (min)	RRT
1		TimedG	DAD1A	<input type="checkbox"/>	RRT Ref (DAD1A)	After each run		0.000	
3		RRT Ref	DAD1A	<input checked="" type="checkbox"/>		After each run	50.000	3.000	1.000
4		C2	DAD1A	<input type="checkbox"/>	RRT Ref (DAD1A)	After each run		6.000	2.000
2		C3	DAD1A	<input type="checkbox"/>	RRT Ref (DAD1A)	After each run		1.500	0.500

그림83 화합물 파라미터

Timed Group Parameters			
<input type="checkbox"/> Include identified peaks			
<input type="checkbox"/> Quantify each peak individually			
start	RRT start	RT stop	RRT stop
3.000	1.00	6.000	2.00

그림84 시간 초과 그룹 파라미터

주입이 처리된 후 3개의 화합물은 다음과 같은 머무름 시간에서 발견되었습니다.

- RRT 기준: 4,000 min
- C2: 8,000 min
- C3: 2,000 min

그 결과, RRT 기준 화합물의 예상 RT는 다음과 같이 보정됩니다.

$$\text{NewExpRT} = \text{ExpRT} + \left( \text{Shift} * \frac{\text{RTUpdate}}{100} \right)$$

$$\text{NewExpRT} = 3.000 \text{ min} + \left( (4.000 \text{ min} - 3.000 \text{ min}) * \frac{50}{100} \right)$$

$$= 3.500 \text{ min}$$

다른 화합물의 예상 머무름 시간과 시간 초과 그룹의 시작 및 정지 시간이 조정되어 RRT가 일정해집니다.

$$\text{예상 RT}_{\text{화합물}} = \text{RRT} * \text{예상 RT}_{\text{기준}}$$

$$\text{예상 RT}_{\text{C2}} = 2,000 * 3,500 \text{ min} = 7,000 \text{ min}$$

$$\text{예상 RT}_{\text{C3}} = 0,500 * 3,500 \text{ min} = 1,750 \text{ min}$$

$$\text{RTStart}_{\text{TimedG}} = 1,000 * 3,500 \text{ min} = 3,500 \text{ min}$$

$$\text{RTStop}_{\text{TimedG}} = 2,000 * 3,500 \text{ min} = 7,000 \text{ min}$$

## 글로벌 머무름 시간 변화 계산

분석법 편집의 일부로 시간 초과 그룹에 대한 모든 예상 머무름 시간과 시간 범위를 한번에 변화시킬 수 있습니다. 새로운 머무름 시간은 다음과 같이 계산됩니다.

절대 변화:

$$\text{NewExpRT} = \text{ExpRT} + \text{변화}$$

где:

NewExpRT	화합물의 보정된 예상 머무름 시간
ExpRT	화합물의 예상 머무름 시간
변화	사용자가 입력한 절대값

상대 변화:

$$\text{NewExpRT} = \text{ExpRT} + \left( \text{ExpRT} * \frac{\text{Shift}}{100} \right)$$

где:

NewExpRT	화합물의 보정된 예상 머무름 시간
ExpRT	화합물의 예상 머무름 시간
변화	사용자가 입력한 상대값

검량이란 무엇입니까?	94
결합된 검량 곡선	95
결합된 검량 곡선이란 무엇입니까	95
감응 유형 및 감응 계수	95
검량 레벨	99
검량점 가중치	100
결합된 검량 곡선 모델	102
결합된 검량 곡선 계산	105
곡선 계산을 위한 파라미터	106
선형 피팅	106
이차 피팅	107
로그 및 지수 피팅	110
평균 RF 피팅	111
결합된 검량 곡선 평가	112
결합된 검량 곡선 확인	112
상대 잔차	112
결합된 검량 곡선 통계	113

이 장에는 검량 프로세스에 사용되는 계산에 대한 세부 정보가 포함되어 있습니다.

## 검량이란 무엇입니까?

피크가 적분되고 식별된 후 정량 분석의 다음 단계는 검량입니다. 양과 감응이 분석할 시료의 실제 질량과 정비례하는 경우는 거의 없습니다. 따라서 참조 물질을 사용한 교정이 필요합니다. 정량은 피크 면적 또는 높이를 사용하여 시료에 포함된 화합물의 양을 결정합니다.

**정량 분석에는 다음과 같이 간략하게 요약된 여러 단계가 포함됩니다.**

- 분석하려는 화합물을 파악합니다.
- 알려진 양의 이 화합물이 포함된 시료를 분석하는 방법을 설정합니다. 이를 검량 시료 또는 표준물질이라고 합니다.
- 검량 시료를 분석하여 해당 양으로 인한 감응을 획득합니다.

검출기에 비선형 감응이 있는 경우 관심 있는 화합물의 양이 다른 여러 표준물질을 분석할 수도 있습니다. 이 프로세스를 **다단계 검량**이라고 합니다.

**다음 검량 분석법을 사용하여 정량을 수행할 수 있습니다.**

- 화합물별 검량(ESTD, ISTD)
- 다른 화합물 또는 그룹의 검량 또는 감응 계수를 사용한 간접 정량
- 고정 감응 계수(**Manual Factor**)

ESTD 결합된 검량 곡선 및 계산은 주어진 양의 측정된 감응(면적 또는 높이)을 기반으로 합니다. ISTD 결합된 검량 곡선 및 계산은 상대 감응 및 상대량을 기반으로 합니다(“**ISTD를 사용한 상대 감응**” 페이지 97 참조).

## 결합된 검량 곡선

### 결합된 검량 곡선이란 무엇입니까

결합된 검량 곡선은 하나 이상의 검량 시료에서 얻은 한 화합물에 대한 양과 감응 데이터를 그래픽으로 표현한 것입니다.

일반적으로 검량 시료를 소량 주입하고 신호를 얻은 후 다음의 그림과 유사하게 피크의 면적 또는 높이를 계산하여 감응을 결정합니다.

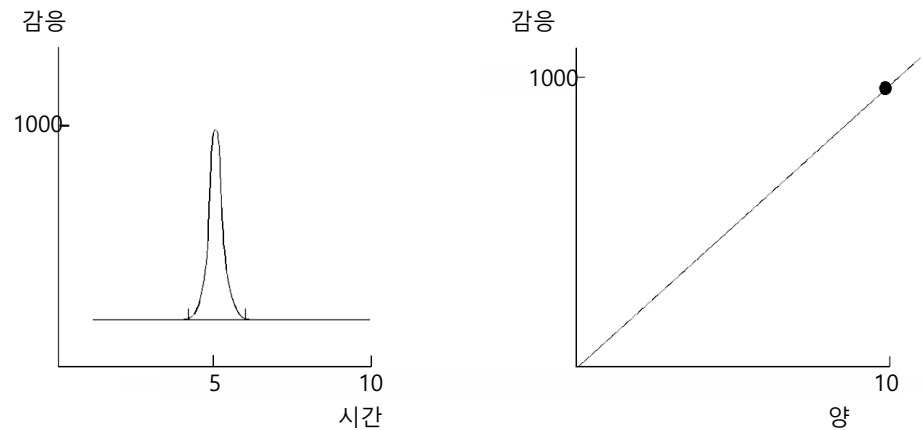


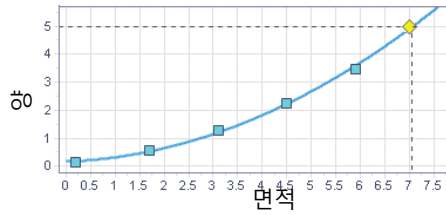
그림85 검량 시료, 신호 및 결합된 검량 곡선

### 감응 유형 및 감응 계수

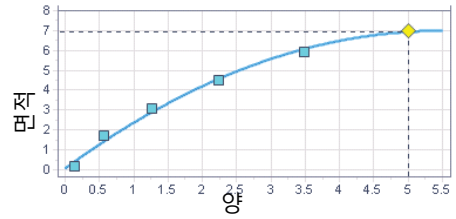
결합된 검량 곡선의 x축과 y축에 표시되는 값을 선택할 수 있는 다양한 설정이 있습니다.

#### RF 정의

감응 계수(RF)는 화합물이 검출될 때 신호가 변화하는 정도를 측정한 값입니다. 이는 화합물 양에 대한 감응의 비율 또는 그 반대로 정의됩니다. **RF definition** 아래의 일반 분석법 설정에서 **Response per amount**(기본값) 또는 **Amount per response** 간에 전환할 수 있습니다. 이 설정을 변경하면 결합된 검량 곡선의 x축과 y축이 바뀝니다.



감응당 양



양 당 감응(기본값)

그림86 다른 RF 정의, 감응이 Area으로 설정됨

RF 계산:

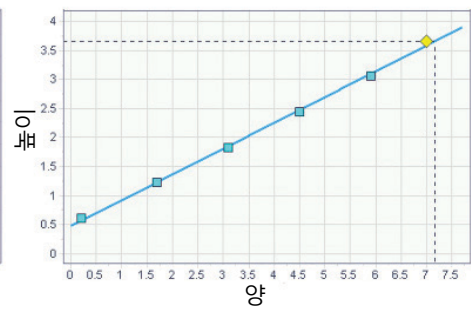
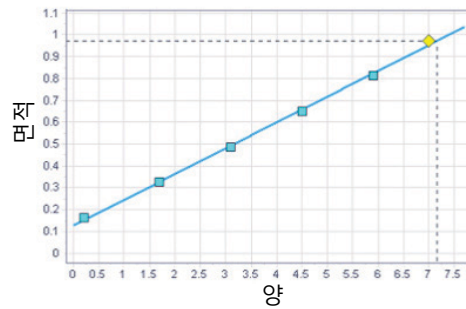
$$RF = \text{감응} / \text{양}$$

또는

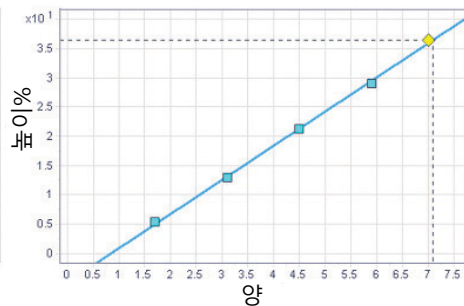
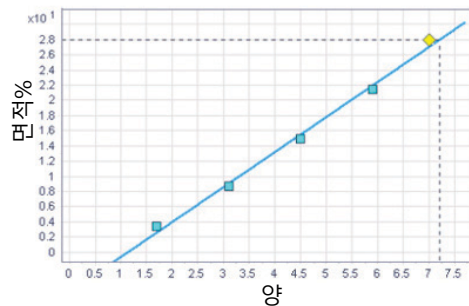
$$RF = \text{양} / \text{감응}$$

### 감응 유형

감응 자체는 **Area**, **Area%**, **Height** 또는 **Height%**로 정의할 수 있습니다. 각 화합물에 대해 개별적으로 감응 유형을 선택할 수 있습니다.

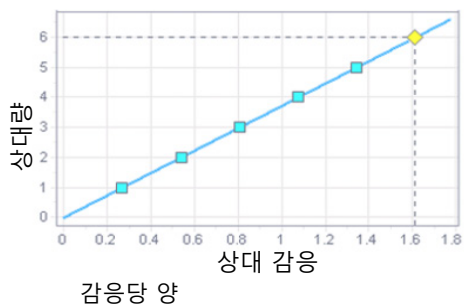
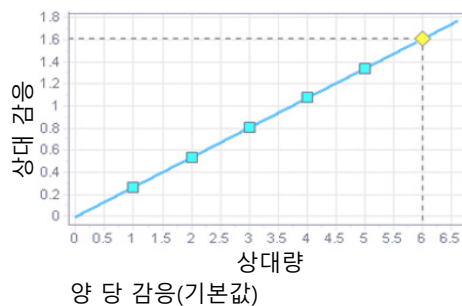






### ISTD를 사용한 상대 감응

시료에 내부 표준물질(ISTD)을 사용하는 경우 상대량과 상대 감응이 결합된 검량 곡선에 표시됩니다. 계산은 RF 정의에 따라 달라집니다.



RF 계산:

$$RF = (\text{감응}/\text{ISTD 감응}) / (\text{양}/\text{ISTD 양})$$

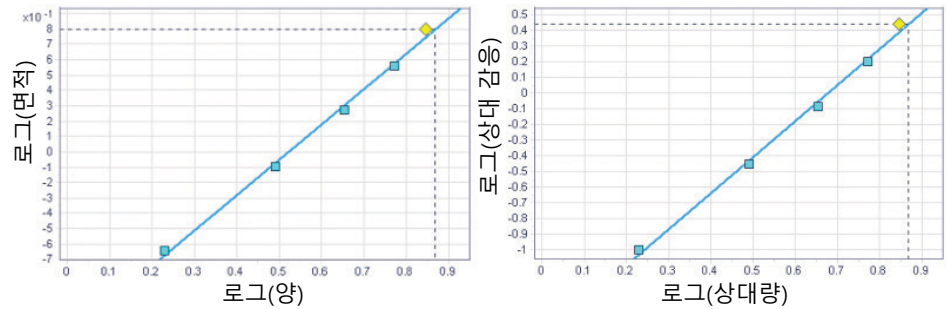
또는

$$RF = (\text{양}/\text{ISTD 양}) / (\text{감응}/\text{ISTD 감응})$$

### 로그/로그 곡선 모델

화합물에 대해 곡선 모델 **log/log**를 선택하면 양과 감응이 모두 로그 값으로 표시됩니다.

**log/log** 모델은 모든 감응 유형 및 내부 또는 외부 표준물질과 함께 두 가지 RF 정의와 함께 사용할 수 있습니다.



양 당 감응(기본값)

감응당 양

그림87 외부 또는 내부 표준물질이 있는 로그/로그 모델 예시

위에 표시된 예시에 대한 RF 계산:

$$RF = \text{로그(감응)} / \text{로그(양)}$$

$$RF = \text{로그(감응/ISTD 감응)} / \text{로그(양/ISTD 양)}$$

### 스케일링된 감응

스케일링된 감응을 선택하면 감응은 계산된 값으로 플롯되고 양은 수정 없이 플롯됩니다.

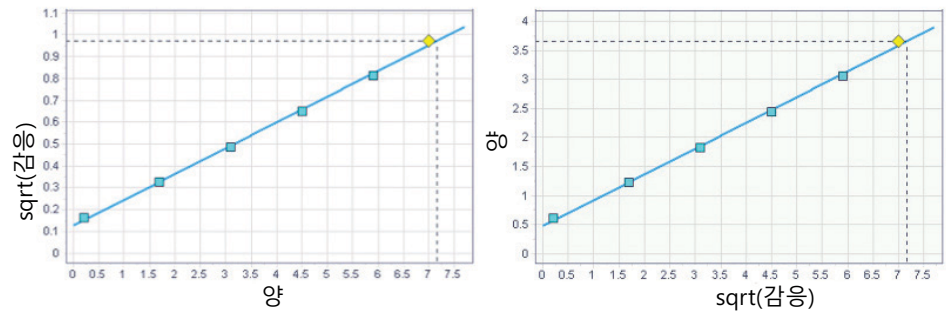


그림88 sqrt 함수를 사용한 스케일링된 감응의 예시

위에 표시된 예시에 대한 RF 계산:

$$RF = \text{sqrt(감응)} / \text{양}$$

또는

$$RF = \text{양} / \text{sqrt(감응)}$$

## 검량 레벨

모든 화합물에 대해 처리 방법당 하나의 글로벌 검량 레벨 수가 있습니다. 검량 레벨 수는 결합된 검량 곡선을 계산하는 데 사용되는 지점(양, 감응)의 수를 정의합니다. 해당 검량 표준물질을 처리하여 각 레벨을 정의합니다. 각 화합물에 대해, 결합된 검량 곡선에는 평균을 계산하는 데 사용된 검량점이 표시됩니다.

검량 표준물질을 다시 실행하거나 지정된 검량 레벨의 추가 검량 표준물질을 처리할 때 해당 레벨에 대한 검량점이 업데이트됩니다. **Curve calculation** 설정에서 평균값을 사용하도록 선택한 경우, 검량점은 새 측정 지점과 이미 존재하는 모든 값의 평균값으로 업데이트됩니다(“개별 지점 사용 모드” 페이지 99 참조),

검량점 수집은 Run Type을 통해 다음과 같이 제어할 수 있습니다.

- 선택 없음: 결합된 검량 곡선에 새 지점이 추가됩니다.
- **Clear all Calibration** 새 검량점이 저장되기 전에 모든 검량 레벨에 대한 모든 검량점이 삭제됩니다.
- **Clear Calibration at Level:** 새 검량점이 저장되기 전에 지정된 검량 레벨에 대한 모든 검량점이 삭제됩니다.

동일한 검량 표준물질 주입을 여러 번 재처리하면 곡선에서 동일한 검량점이 업데이트되고 새 지점은 추가되지 않습니다.

## 개별 지점 사용 모드

결합된 검량 곡선을 계산하는 데 검량점을 사용하는 방법을 처리 방법별로 선택할 수 있습니다. 다음의 모드를 사용할 수 있습니다.

- **From average per level:** 특정 레벨에 기여하는 모든 검량점의 양과 감응을 평균화하여 알고리즘에서 최상의 결합된 검량 곡선을 계산하는 데 사용합니다.
- **From individual calibration points:** 개별 검량점의 모든 양과 감응이 결합된 검량 곡선을 결정하는 데 직접 사용됩니다.

## 평균

모든 검량 실행의 평균은 다음 공식을 사용하여 계산됩니다.

$$\text{Response} = \frac{((n-1) * \text{Response}) + \text{MeasResponse}}{n}$$

где:

n	검량점 수
MeasResponse	측정 감응

## 일괄처리된 검량

일괄처리된 검량을 사용하면 시료는 사전 시료 및 사후 시료 검량에 의해 일괄처리됩니다. 여는 브래킷과 닫는 브래킷 사이의 검량 표준물질이 먼저 처리되고 결합된 검량 곡선이 계산됩니다. 그런 다음 이 곡선을 사용하여 이 브래킷의 시료를 계산합니다.

**Custom**를 제외한 모든 일괄처리 모드의 경우, 모든 여는 브래킷에 대해 **Clear all calibration** 작업이 자동으로 수행됩니다. 일괄처리 모드 **Custom**의 경우 필요에 따라 실행 유형을 **Clear all calibration**로 설정할 수 있습니다.

일괄처리는 **Injection List** 창에서 구성됩니다. 다양한 일괄처리 모드가 있습니다.

- **Overall**

결합된 검량 곡선은 시퀀스의 모든 검량 표준물질로 계산되며, 첫 번째 표준물질로 시작하여 마지막 표준물질로 끝납니다. 모든 시료는 결합된 검량 곡선이 계산된 후 재처리됩니다.

- **Non overlap**

시퀀스에는 최소 3개의 표준물질 세트가 있어야 하며 중간에 최소 2개의 표준물질이 있어야 합니다. 시퀀스 중간에 있는 표준물질은 각각 하나의 단일 브래킷에서만 사용됩니다.

중간에 두 개 이상의 표준물질이 있는 경우 표준물질이 분할되어 이전 및 이후 브래킷에 할당됩니다. 중간에 홀수의 표준물질이 있는 경우 여분의 표준물질은 앞 브래킷에 할당됩니다.

- **Overlap**

시퀀스에는 최소 세 세트의 표준물질이 있어야 합니다. 시퀀스 중간에 있는 표준물질은 두 브래킷(이전 브래킷 및 이후 브래킷)에서 사용됩니다.

- **Custom**

필요에 따라 브래킷을 생성합니다. **Run type** 컬럼에서 각 검량 표준물질에 대해 지울 검량 레벨을 개별적으로 선택할 수 있습니다. 실행 유형을 선택하지 않으면 브래킷이 이전 것과 함께 평균화됩니다.

## 검량점 가중치

다양한 검량 양에서 감응의 분산을 보상하기 위해 곡선을 생성하는 데 사용되는 다양한 검량점의 상대 가중치(또는 중요도)를 지정할 수 있습니다.

가중치를 제어하는 파라미터는 **Weighting Method**입니다. 기본 가중치는 모든 레벨에 대해 동일한 가중치이며 각 곡선의 최대 가중치는 1로 정규화됩니다.

다음과 같은 가중계수를 사용할 수 있습니다.

### 없음

모든 검량점의 가중치가 동일합니다.

wt = 1

r<sub>de</sub>:

wt

검량 레벨 가중계수

### 1/양

검량점은 가장 작은 양으로 정규화되어 가장 큰 가중계수가 1이 되도록 계수 1/양에 의해 가중치가 부여됩니다. 원점이 포함된 경우 다른 검량점의 가중치 평균이 할당됩니다.

$$wt = \frac{\text{Minimum(Amounts)}}{\text{CurrentAmount}}$$

r<sub>de</sub>:

현재 양

레벨 양

최소(양)

결합된 검량 곡선에 사용된 모든 지점(레벨)에서 가장 낮은 양

wt

검량 레벨 가중계수

### 1/양 제곱

검량점은 가장 작은 양으로 정규화되어 가장 큰 가중계수가 1이 되도록 계수 1/양<sup>2</sup>에 의해 가중치가 부여됩니다. 예를 들어 이차 검량점 가중치는 검량점의 확산을 조정하는데 사용할 수 있습니다. 일반적으로 더 정확하게 측정할 수 있는 원점에 가까운 검량점이 확산될 수 있는 원점에서 멀리 떨어진 검량점보다 더 높은 가중치를 받도록 합니다.

$$wt = \frac{\text{Minimum(Amounts)}^2}{\text{CurrentAmount}^2}$$

r<sub>de</sub>:

현재 양

레벨 양

최소(양)

결합된 검량 곡선에 사용된 모든 지점(레벨)에서 가장 낮은 양

wt

검량 레벨 가중계수

## 1/감응

검량점은 가장 작은 감응으로 정규화되어 가장 큰 가중계수가 1이 되도록 계수 1/감응에 의해 가중치가 부여됩니다. 원점이 포함된 경우 다른 검량점의 가중치 평균이 할당됩니다.

$$wt = \frac{\text{Minimum(Responses)}}{\text{CurrentResponse}}$$

rde:

현재 감응

레벨 감응

최소(감응)

결합된 검량 곡선에 사용된 모든 지점(레벨)에서 가장 낮은 감응

wt

검량 레벨 가중계수

## 1/감응 제곱

검량점은 가장 작은 감응으로 정규화되어 가장 큰 가중계수가 1이 되도록 계수 1/감응<sup>2</sup>에 의해 가중치가 부여됩니다. 예를 들어 이차 검량점 가중치는 검량점의 확산을 조정하는 데 사용할 수 있습니다. 일반적으로 더 정확하게 측정할 수 있는 원점에 가까운 검량점이 확산될 수 있는 원점에서 멀리 떨어진 검량점보다 더 높은 가중치를 받도록 합니다.

$$wt = \frac{\text{Minimum(Responses)}^2}{\text{CurrentResponse}^2}$$

rde:

현재 감응

레벨 감응

최소(양)

결합된 검량 곡선에 사용된 모든 지점(레벨)에서 가장 낮은 감응

wt

검량 레벨 가중계수

## 결합된 검량 곡선 모델

OpenLab CDS은(는) 다양한 모델에 따라 검량을 계산할 수 있습니다. 지원되는 모델은 다음과 같습니다(“결합된 검량 곡선 계산” 페이지 105 참조).

- 선형 피팅(“선형 피팅” 페이지 106 참조)
- 이차 피팅(“이차 피팅” 페이지 107 참조)

- 로그 및 지수 피팅(“로그 및 지수 피팅” 페이지 110 참조)
- 평균 RF 피팅(“평균 RF 피팅” 페이지 111 참조)

각 검량 화합물에 대해 개별적으로 결합된 검량 곡선 모델을 설정할 수 있습니다.

### 원점 처리

애플리케이션은 결합된 검량 곡선을 계산할 때 그래프의 원점을 다양한 방식으로 고려할 수 있습니다. 이 파라미터는 각 화합물에 대해 독립적으로 설정할 수 있습니다. 곡선 유형에 따라 특정 원점 처리 옵션만 사용할 수 있습니다(예: 로그 결합된 검량 곡선으로 곡선을 강제로 원점을 통과하게 할 수 없음).

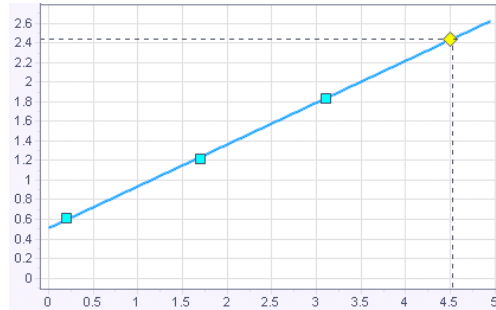


그림89 원점 무시

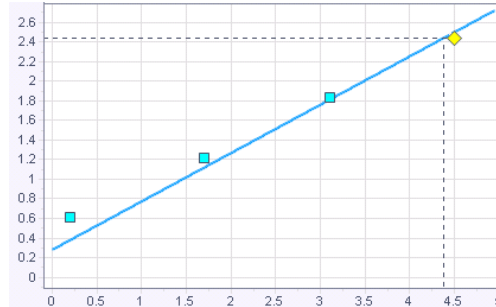


그림90 계산에 원점 포함.

**Include** 옵션을 사용하면 양이 0이고 감응이 0인 지점이 검량 레벨에 추가됩니다.

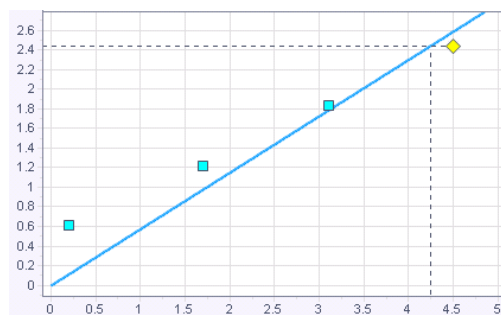


그림91 결합된 검량 곡선이 원점을 통과하도록 강제

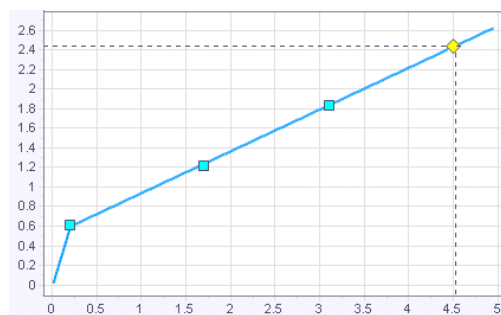


그림92 원점 연결(계산에 포함되지 않음)



## 결합된 검량 곡선 계산

최적의 결합된 검량 곡선은 곡선을 검량점에 일치시켜 계산합니다. 곡선 계산은 잔차 제공의 합을 최소화하는 최소 제곱 피팅(LSQ)을 기반으로 합니다. 곡선 유형은 가중치가 적용된 검량점에 적용됩니다. 계산은 감응 계수의 정의에 따라 달라집니다(RF 정의, “감응 유형 및 감응 계수” 페이지 95 참조).

RF가 **Response per amount**으로 정의된 경우:

$$\Sigma(wt * (CalPointArea - CalculatedArea)^2) = \text{최소}$$

где:

$\Sigma$	검량점(레벨)에 대한 합계
CalculatedArea	검량 레벨 양의 곡선에서 읽은 면적
CalPointArea	검량 레벨 면적
wt	검량점 가중계수

$$\Sigma(wt * (CalPointHeight - CalculatedHeight)^2) = \min$$

где:

$\Sigma$	검량점(레벨)에 대한 합계
CalculatedHeight	검량 레벨 양의 곡선에서 읽은 높이
CalPointHeight	검량 레벨 높이
wt	검량점 가중계수

RF가 **Amount per response**으로 정의된 경우:

$$\Sigma(wt * (CalPointAmount - CalculatedAmount)^2) = \text{최소}$$

где:

$\Sigma$	검량점(레벨)에 대한 합계
CalculatedAmount	검량 레벨 면적 또는 높이의 곡선에서 읽은 양
CalPointAmount	검량 레벨 양
wt	검량점 가중계수

## 곡선 계산을 위한 파라미터

곡선 계산은 모두 다음 파라미터를 사용합니다.

a, b, c 곡선 계수	
x	<b>Response per amount</b> 의 경우: 양(ESTD) 또는 양 비율(ISTD) <b>Amount per response</b> 의 경우: 면적, 면적%, 높이 또는 높이%(ESTD) 면적 비율 또는 높이 비율(ISTD)
y	<b>Response per amount</b> 의 경우: 면적, 면적%, 높이 또는 높이%(ESTD) 면적 비율 또는 높이 비율(ISTD) <b>Amount per response</b> 의 경우: 양(ESTD) 또는 양 비율(ISTD)
wt	검량 레벨 가중계수

## 선형 피팅

곡선 계산은 최소 제곱 피팅을 기반으로 합니다(“결합된 검량 곡선 계산” 페이지 105 참조).

곡선 공식:

$$y = a * x + b$$

где:

a 기울기

b Y절편

곡선 계수 계산:

$$b = \frac{\sum(x^2 * wt) * \sum(y * wt) - \sum(x * y * wt) * \sum(x * wt)}{\sum(wt) * \sum(x^2 * wt) - \sum(x * wt)^2}$$

$$a = \frac{\sum(wt) * \sum(x * y * wt) - \sum(x * wt) * \sum(y * wt)}{\sum(wt) * \sum(x^2 * wt) - \sum(x * wt)^2}$$

선형 피팅을 위해서는 최소 두 개의 검량점이 필요합니다.

## 원점 포함

원점을 포함하면 지점 (0,0)이 다른 지점에 추가되고 다른 지점의 가중치 평균값으로 가중치가 부여됩니다. 즉,  $\Sigma(wt)$  항이 다른 지점의 가중치 평균값만큼 증가합니다.

## 힘 기원

힘 기원 옵션을 선택하면 곡선 공식은 다음과 같습니다.

$$y = a * x$$

где:

a

기울기

곡선 계수 계산:

$$a = \frac{\sum(x * y * wt)}{\sum(x^2 * wt)}$$

원점을 포함하거나 강제로 설정할 때 하나의 검량 레벨만 필요합니다.

## 이차 피팅

이차 곡선 공식:

$$y = (a * x^2) + (b * x) + c$$

이차 피팅에는 최소 3개의 검량점이 필요합니다. 원점이 포함되거나 강제로 지정된 경우 두 지점이 필요합니다.

## 이차 피팅을 위한 계수 계산

계수는 아래 동시 선형 방정식의 결과입니다. 크라우트 알고리즘은 해당 정규 행렬 방정식( $A^T A x = A^T y$ )을 푸는 데 사용됩니다. 주어진 공식에서 합은 다음과 같이 축약됩니다.

$$\begin{aligned}
W &= \sum(wt) \\
XW &= \sum(x * wt) \\
X2W &= \sum(x^2 * wt) \\
X3W &= \sum(x^3 * wt) \\
X4W &= \sum(x^4 * wt) \\
YW &= \sum(y * wt) \\
XYW &= \sum(x * y * wt) \\
X2YW &= \sum(x^2 * y * wt)
\end{aligned}$$

오버플로를 방지하기 위해 계산에 들어가기 전에 x값을 정규화합니다.

$$Norm = \sum(x)$$

$$x = x / Norm$$

이차 곡선에 대한 정규 방정식:

$$\begin{aligned}
\sum(wt) * c + \sum(x * wt) * b + \sum(x^2 * wt) * a &= \sum(y * wt) \\
\sum(x * wt) * c + \sum(x^2 * wt) * b + \sum(x^3 * wt) * a &= \sum(x * y * wt) \\
\sum(x^2 * wt) * c + \sum(x^3 * wt) * b + \sum(x^4 * wt) * a &= \sum(x^2 * y * wt)
\end{aligned}$$

또는 행렬 방정식으로 작성됨:

$$\begin{vmatrix} W & XW & X2W \\ XW & X2W & X3W \\ X2W & X3W & X4W \end{vmatrix} \begin{vmatrix} c \\ b \\ a \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} YW \\ XYW \\ X2YW \end{vmatrix}$$

크라우트의 분해:

$$\begin{vmatrix} W & XW & X2W \\ XW & X2W & X3W \\ X2W & X3W & X4W \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} L11 & & \\ L21 & L22 & \\ L31 & L32 & L33 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & U12 & U13 \\ & 1 & U23 \\ & & 1 \end{vmatrix}$$

값 약어 포함:

$$\begin{aligned}
L11 &= W \\
U12 &= \frac{XW}{L11} \\
L21 &= XW \\
U13 &= \frac{X2W}{L11} \\
L31 &= X2W \\
L22 &= X2W - L21 * U12 \\
U23 &= \frac{X3W - L21 * U13}{L22} \\
L32 &= X3W - L31 * U12 \\
L33 &= X4W - (L31 * U13) - (L32 * U23)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 z0 &= \frac{YW}{L11} \\
 z1 &= \frac{XYW - (L21 * z0)}{L22} \\
 z2 &= \frac{X2YW - (L31 * z0) - (L32 * z1)}{L33} \\
 a' &= z2 \\
 b' &= z1 - (U23 * a') \\
 c' &= z0 - (U12 * b') - (U13 * a')
 \end{aligned}$$

마지막으로 정규화를 반전시켜야 함:

$$\begin{aligned}
 c &= c' \\
 b &= \frac{b'}{\text{Norm}} \\
 a &= \frac{a'}{\text{Norm}^2}
 \end{aligned}$$

### 힘 기원

힘 기원 옵션을 선택하면 정규 방정식을 만들 때 오프셋 항 **a**가 0으로 설정됩니다.

$$\begin{vmatrix} X2W & X3W \\ X3W & X4W \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} b \\ a \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} XYW \\ X2YW \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 L11 &= X2W \\
 U12 &= \frac{X3W}{L11} \\
 L21 &= X3W \\
 L22 &= X4W - (L21 * U12)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 z0 &= \frac{XYW}{L11} \\
 z1 &= \frac{X2YW - (L21 * z0)}{L22} \\
 a' &= z1 \\
 b' &= z0 - (U12 * a') \\
 b &= \frac{b'}{\text{Norm}} \\
 a &= \frac{a'}{\text{Norm}^2}
 \end{aligned}$$

### 원점 포함

원점을 포함하면 지점 (0,0)이 다른 지점에 추가되고 다른 지점의 가중치 평균값으로 가중치가 부여됩니다. 즉,  $\Sigma(wt)$  항이 다른 지점의 가중치 평균값만큼 증가합니다.

## 로그 및 지수 피팅

### 로그 및 지수 피팅

지수 및 로그 피팅을 계산하기 위해 양 또는 감응 스케일은  $\ln$  함수를 사용하여 변환됩니다. 선형 곡선 피팅 및 가중계수가 변환된 데이터에 적용되고 변환된 데이터에서 곡선이 계산됩니다.

**Include origin** 및 **Force origin** 옵션은 원점에서의  $\ln$  함수의 특이점으로 인해 유효하지 않습니다.

### 로그

곡선 공식:

$$y = a * \ln(x) + b$$

변환: **x** 스케일이 변환됩니다.

$$x' = \ln(x); y' = y$$

$$y' = a * x' + b$$

### 지수

곡선 공식:

$$y = b * e^{a * x}$$

변환: **y** 스케일이 변환됩니다.

$$x' = x; y' = \ln(y)$$

$$y' = \ln(b) + a * x'$$

### 로그/로그 피팅

로그/로그 피팅을 계산하기 위해  $\log$  함수를 사용하여 양 및 감응 스케일을 모두 변환합니다. 선형 곡선 피팅 및 가중계수가 변환된 데이터에 적용되고 변환된 데이터에서 곡선이 계산됩니다.

**Include origin** 및 **Force origin** 옵션은 원점에서  $\log$  함수의 특이점으로 인해 유효하지 않습니다.

곡선 공식:

$$\log(y) = a * \log(x) + b$$

변환:  $x$  및  $y$  스케일이 변환됩니다.

$$x' = \log(x); y' = \log(y)$$

$$y' = a * x' + b$$

## 평균 RF 피팅

평균 RF 공식:

$$y = a * x$$

где:

a

기울기

애플리케이션은 먼저 각 검량 시료에 대해 감응 계수(RF)를 계산합니다. 그런 다음 모든 감응 계수의 평균을 구합니다. 평균 RF는 결합된 검량 곡선 범례에 표시되며 선의 기울기에 해당합니다 (“[감응 유형 및 감응 계수](#)” 페이지 95).

힘 기원 옵션이 자동으로 사용되므로 y절편은 항상 0입니다. 가중치법은 자동으로 **None**으로 설정됩니다.

평균 RF 피팅을 사용하면  $r$  및  $R^2$ 는 관련이 없으며 계산되지 않습니다.

## 결합된 검량 곡선 평가

통계 계산을 사용하여 검량 레벨에 대한 결합된 검량 곡선의 피팅 품질 및 이상치(곡선으로부터 먼 거리에 있는 측정값)의 존재 여부를 평가할 수 있습니다. 결합된 검량 곡선 계산은 각 곡선에 대한 상관 계수와 상대 표준 편차, 각 검량 레벨에 대한 상대 잔차 값을 제공합니다.

## 결합된 검량 곡선 확인

계산 후 결합된 검량 곡선을 확인하고 다음과 같은 경우 경고를 설정합니다.

- 곡선 계산을 위한 검량점이 충분하지 않은 경우
- 곡선 기울기가 0 또는 마이너스가 되는 경우
- 기울기가 무한대인 경우
- 결합된 검량 곡선을 계산할 수 없는 경우(예: 숫자 오버플로)

## 상대 잔차

잔차는 계산된 곡선에서 검량점까지의 거리를 측정하는 값입니다.

$$\text{잔차} = y_i - Y_i$$

где:

$y_i$  검량 모드에 따라 측정된 감응(면적 또는 높이) 또는 양.

$Y_i$  레벨  $i$ 에 대한 예측된 감응 또는 양(곡선을 사용하여 계산)

상대 잔차는 다음 공식을 사용하여 각 검량 레벨에 대해 계산됩니다.

$$\text{Rel Residual} = \frac{\text{Residual}}{Y_i} = \frac{(y_i - Y_i)}{Y_i}$$

где:

$y_i$  측정된 감응(면적 또는 높이) 또는 양

$Y_i$  레벨  $i$ 에 대한 예측된 감응 또는 양(곡선을 사용하여 계산)



상대 잔차는 종종 % 단위로 보고됩니다(RelResidual%). 이 경우 RelResidual에 100을 곱해야 합니다.

## 결합된 검량 곡선 통계

결합된 검량 곡선 계산은 각 곡선에 대해 상관 계수, 결정 계수 및 잔차 표준 편차 수치를 제공합니다.

### 상관 계수

상관 계수(r)는 데이터 포인트 간의 결합된 검량 곡선 피팅을 측정합니다. 다음 공식을 사용하여 계산됩니다.

$$r = \frac{\sum (y_i - \bar{y}) * (Y_i - \bar{Y}) * wt_i}{(\sum (y_i - \bar{y})^2 * wt_i) * \sum (Y_i - \bar{Y})^2 * wt_i)^{\frac{1}{2}}}$$

여기에서

r	상관 계수
wt <sub>i</sub>	데이터 포인트의 가중치
?	측정된 감응 또는 양의 평균 값 결합된 검량 곡선이 원점을 강제로 통과하는 경우(처리 방법에서 <b>Origin=Force</b> ) OpenLab CDS은(는) 중심이 없는 결정 계수를 계산합니다. 이 경우 ?는 생략됩니다.
y <sub>i</sub>	검량 모드에 따라 측정된 감응(면적, 면적 비율(ISTD 분석법), 높이 또는 높이 비율(ISTD 분석법)) 또는 양(양, 양 비율(ISTD 분석법))
$\bar{y}$	예측된 감응 또는 양의 평균 값
Y <sub>i</sub>	예측된 감응 또는 양(결합된 검량 곡선 사용)

$\bar{y}$  및  $\bar{Y}$ 은(는) 측정 및 예측된 감응 또는 양의 평균값으로 다음과 같이 계산됩니다.

$$\bar{y} = \frac{\sum (y_i * wt_i)}{\sum (wt_i)}$$

여기에서

$wt_i$	데이터 포인트의 가중치
$\bar{y}$	측정된 감응 또는 양의 평균 값
$y_i$	검량 모드에 따라 측정된 감응(면적, 면적 비율(ISTD 분석법), 높이 또는 높이 비율(ISTD 분석법)) 또는 양(양, 양 비율(ISTD 분석법))

및

$$\bar{Y} = \frac{\sum(Y_i * wt_i)}{\sum(wt_i)}$$

여기에서

$wt_i$	데이터 포인트의 가중치
$\bar{Y}$	예측된 감응 또는 양의 평균 값
$Y_i$	예측된 감응 또는 양(결합된 검량 곡선 사용)

**Forced Origin**의 경우 지점이 0을 중심으로 하며(세 번째 사분면으로 미러링됨) 평균 값이 0으로 치환된다고 가정합니다. 타사 계산 프로그램은 다른 접근 방식을 사용할 수 있으며, 이 경우 약간 다른 결과가 나올 수 있습니다.

상관 계수는 완벽하게 맞는 경우 1입니다. 개별 또는 평균 검량점이 회귀 곡선에서 벗어날수록 감소합니다. 일반적인 값은 0.99에서 1 사이입니다. 상관 계수는 분석법의 정밀도를 직접적으로 나타내는 척도는 아니지만 값이 낮으면 정밀도가 낮다는 것을 의미합니다.

### 결정 계수

결정 계수( $R^2$ )는 다음과 같이 계산됩니다.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(y_i - \bar{y})^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

여기에서

$R^2$	결정 계수
$\bar{y}$	측정된 감응 또는 양의 평균 값 결합된 검량 곡선이 원점을 강제로 통과하는 경우(처리 방법에서 <b>Origin=Force</b> ) OpenLab CDS은(는) 중심이 없는 결정 계수를 계산합니다. 이 경우 ?는 생략됩니다.

y <sub>i</sub>	측정된 감응 또는 양. 감응은 면적(면적, 면적% 또는 면적 비율(ISTD 분석법)) 또는 높이(높이, 높이% 또는 높이 비율(ISTD 분석법))일 수 있습니다. 양은 절대 양 또는 양 비율(ISTD 분석법)일 수 있습니다. 값 유형은 검량 모드에 따라 다릅니다.
Y <sub>i</sub>	예측된 감응 또는 양(결합된 검량 곡선 사용)

잔차 표준 편차

잔차 표준 편차(평균제곱근 오차라고도 함)는 다음 공식을 사용하여 계산합니다.

$$\text{ResidualStdDev} = \sqrt{\frac{\sum (y_i - Y_i)^2}{(n - d)}}$$

где:	
d = 3	이차 곡선의 자유도, 강제된 원점 없음
d = 2	강제된 원점이 있는 이차 곡선의 자유도 또는 선형 곡선의 자유도, 강제된 원점 없음
d = 1	강제된 원점이 있는 선형 곡선의 자유도
ResidualStdDev	잔차 표준 편차
y <sub>i</sub>	검량 모드에 따라 측정된 감응(면적, 면적 비율(ISTD 분석법), 높이 또는 높이 비율(ISTD 분석법)) 또는 양(양, 양 비율(ISTD 분석법))
Y <sub>i</sub>	예측된 감응 또는 양(결합된 검량 곡선 사용)
n	검량점 수

**Include origin** 결합된 검량 곡선 유형의 경우, 원점(0,0)이 계산에 정규 지점으로 포함되며 n으로 계산됩니다.

y값에는 가중치가 적용되지 않습니다.

잔차 표준 편차는 상관 계수보다 곡선 품질을 더 민감하게 측정할 수 있습니다. 완벽하게 맞는 경우 잔차 표준 편차는 0입니다. 잔차 표준 편차 값이 증가하면 검량점이 곡선에서 더 멀어집니다.

표준 편차

표준 편차는 **모표준 편차** 공식을 사용하여 계산합니다:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2}$$

где:

$\sigma$	표준 편차
N	시료 수
$x_i$	측정값 감응 또는 양입니다. 곡선 모델 <b>평균 RF</b> 의 경우, 단일 시료에서 화합물의 감응 계수 RF입니다.
$\mu$	평균 값. 곡선 모델 <b>평균 RF</b> 의 경우, 모든 시료에서 화합물의 평균 감응 계수입니다.

## 주

곡선 모델 **Average RF**의 경우: 일반적으로 모집단(검량점 수)이 다소 작기 때문에 표본 모집단 표준편차(분모는 N-1) 대신 이 공식이 사용됩니다.

## 상대 표준 편차

상대 표준 편차는 다음과 같이 계산됩니다.

$$RSD = 100 \cdot \frac{\sigma}{\mu}$$

где:

RSD	상대 표준 편차
$\sigma$	표준 편차
$\mu$	평균값

정량이란 무엇입니까?	118
정량 계산	118
보정 계수	119
승수	119
회석률	119
농도 및 질량%	120
면적% 및 높이%	121
보정된 화합물의 정량	122
ESTD 계산	122
ISTD 계산	123
교정되지 않은 화합물의 정량	127
검량된 화합물을 사용한 간접 정량	127
수동 인자를 사용한 정량	127
식별되지 않은 피크의 정량	129
고정 감응 계수를 사용하여 식별되지 않은 피크 정량화	129
검량된 화합물을 사용하여 식별되지 않은 피크 정량화	129
정규화	130
정규화된 농도 계산	130
정규화된 양 계산	131
그룹의 정량	133
시간 초과 그룹의 정의	133
시간 초과 그룹 정량화	134
명명된 그룹의 정의	137
명명된 그룹 정량화	138

이 장에서는 화합물을 정량화하는 방법을 설명하고 정량화에 사용되는 계산에 대해 설명합니다.

## 정량이란 무엇입니까?

피크가 적분되고 식별된 후 분석의 다음 단계는 정량입니다. 정량은 피크 면적 또는 높이를 사용하여 시료에 포함된 화합물의 양을 결정합니다.

**정량 분석에는 다음과 같이 간략하게 요약된 여러 단계가 포함됩니다.**

- 미지의 양의 화합물이 포함된 시료를 분석하여 미지의 양으로 인한 감응을 획득합니다.
- 미지의 양의 감응을 알려진 양의 감응과 비교하여 화합물의 양을 결정합니다.

미지의 시료 감응과 알려진 시료 감응의 유효한 비교를 획득하려면 동일한 조건에서 데이터를 수집하고 처리해야 합니다.

## 정량 계산

OpenLab CDS은(는) 혼합물에 존재하는 각 성분의 양을 결정하기 위해 다음과 같은 계산 프로세스를 제공합니다.

- 면적 또는 높이 퍼센트(면적% 또는 높이%)
- 수동 인자를 사용한 정량
- 외부 표준물질(ESTD)
- 내부 표준물질(ISTD)
- 검량된 화합물을 사용한 간접 정량

미지의 시료에서 화합물의 농도를 결정하는 데 사용되는 계산은 정량 유형에 따라 다릅니다. 각 계산 프로세스는 계산을 위해 피크 면적 또는 높이를 사용하며 다른 유형의 분석을 생성합니다.

## 보정 계수

정량 계산은 다양한 보정 계수, **승수**(화합물 또는 주입 승수) 및 **희석률**을 사용합니다. 이러한 계수는 다양한 시료 성분, 농도, 시료 희석, 시료 양, 화합물 순도에 따른 검출기 감응의 변화를 보상하고 단위를 변환하기 위해 검량 프로세스에 사용됩니다.

### 승수

승수는 각 계산 공식에서 각 화합물에 대한 결과를 곱하는 데 사용됩니다. 승수는 농도를 표현하기 위해 단위를 변환하거나 농도를 보정하여 표준 화합물의 다른 순도를 보상하는 데 사용할 수 있습니다.

승수는 주입 레벨(주입 목록 또는 시퀀스 테이블)과 화합물 레벨(검량 테이블, 처리 방법의 일부)에서 설정할 수 있습니다. OpenLab CDS에서는 최대 5개의 주입 승수와 1개의 화합물 승수를 구성할 수 있습니다.

알려진 화합물의 승수는 다음과 같습니다:

$$\text{승수} = \text{화합물 승수} * \text{주입 승수 1} * \text{주입 승수 2} * \dots$$

### 희석률

희석률은 농도를 계산하기 위해 양을 곱하거나 나누는 숫자입니다(농도 참조). 희석률은 주입 레벨에서 설정됩니다(주입 목록의 **Dil. factor** 컬럼). 희석률을 사용하여 결과의 스케일을 변경하거나 사전 분석 작업 중에 시료 구성의 변화를 보정할 수 있습니다. 상수 계수를 사용해야 하는 다른 용도로도 희석률을 사용할 수 있습니다.

시료 희석은 최대 5개의 희석률의 조합으로 이루어집니다.

$$\text{시료 희석} = \text{희석률 1} * \text{희석률 2} * \dots$$

## 농도 및 질량%

농도는 주입 결과의 **Concentration** 컬럼에 표시됩니다.

계산은 다음 설정에 따라 달라집니다(모든 설정은 **Compounds > Calibration** 노드의 **General** 탭에서 사용할 수 있음).

- **Concentration and corrected amount calculation:** 이 설정을 사용하면 희석률을 제수 또는 다른 승수로 사용하도록 선택할 수 있습니다.
- **Calculate mass %:** 농도를 질량 백분율(시료 양 대비 화합물 양)로 계산합니다.

**Calculate mass %**을 선택 취소한 경우(기본 설정):

$$\text{농도} = \text{양} * \text{승수} * \text{희석률}$$

또는

$$\text{Concentration} = \text{Amount} * \frac{\text{Multipliers}}{\text{Dilution Factors}}$$

**Calculate mass %**을 선택한 경우:

농도가 질량 백분율(시료 양 대비 화합물 양)로 계산됩니다.

$$\text{Concentration} = \left( \frac{\text{Amount}}{\text{Sample Amount}} * 100 \right) * \text{Multipliers} * \text{Dilution Factors}$$

또는

$$\text{Concentration} = \left( \frac{\text{Amount}}{\text{Sample Amount}} * 100 \right) * \frac{\text{Multipliers}}{\text{Dilution Factors}}$$

승수 및 희석률 계산에 대한 자세한 내용은 “보정 계수” 페이지 119을(를) 참조하십시오.



## 면적% 및 높이%

**Area%** 계산 절차는 신호에서 각 피크의 면적을 신호 내 모든 피크의 총 면적에 대한 백분율로 보고합니다. **Area%**는 사전 검량이 필요하지 않으며 검출기의 한계 내에서 주입된 시료의 양에 의존하지 않습니다. 감응 계수는 사용되지 않습니다. 모든 성분이 검출기에서 동일하게 반응하는 경우, **Area%**는 성분의 상대량에 대한 적절한 근사치를 제공합니다.

**Area%**는 정량적 결과가 중요하고 다른 검량 절차에 필요한 화합물 테이블을 생성하기 위한 정보를 생성하는 데 일상적으로 사용됩니다.

**Height%** 계산 절차는 신호에서 각 피크의 높이를 신호 내 모든 피크의 총 높이에 대한 백분율로 보고합니다.

면적% 또는 높이% 계산에는 보정 계수가 적용되지 않습니다.

## 보정된 화합물의 정량

외부 표준물질(ESTD), 정규화 및 내부 표준물질(ISTD) 계산 절차에는 검량이 필요하므로 화합물 테이블을 사용합니다. 화합물 테이블은 선택한 절차에 따라 감응을 선택한 단위로 변환하도록 지정합니다.

### ESTD 계산

ESTD 절차는 검량 및 미지 시료를 동일한 조건에서 분석하는 기본 정량화 절차입니다. 그런 다음 미지 시료의 결과를 검량 시료의 결과와 비교하여 미지 시료의 양을 계산합니다.

ESTD 절차는 ISTD 절차와 달리 절대 감응 계수를 사용합니다. 감응 계수는 검량에서 얻은 다음 저장됩니다. 다음 시료 실행에서, 측정된 시료 감응에 이러한 감응 계수를 적용하여 화합물 양을 계산합니다. 주입 크기 또는 시료 준비의 변화를 보정할 시료의 표준물질이 없으므로 시료 주입 크기가 실행마다 재현 가능한지 확인합니다.

ESTD 분석을 준비할 때 미지 시료에서 특정 화합물의 양을 계산하는 작업은 두 단계로 이루어집니다.

- 1 화합물 테이블의 **Mode** 및 **Origin** 설정에 지정된 피팅 유형을 사용하여 이 화합물에 대한 검량점을 통과하는 곡선에 대한 방정식을 계산합니다.
- 2 미지의 화합물의 양은 위에서 설명한 방정식을 사용하여 계산됩니다. 이 양은 보고서에 표시되거나 보고하기 전에 시료 승수, 화합물 승수 또는 희석률 값에 의해 요구되는 추가 계산에 사용될 수 있습니다.

### 단일 레벨 검량

단일 레벨 검량의 경우, 감응 계수는 단순히 검량점 감응과 양의 비율입니다. **Include origin** 및 **Force origin**이 꺼져 있으면 경고가 표시됩니다.

감응 계수 RF는 감응과 양의 비율 또는 그 반대로 정의됩니다(“RF 정의” 페이지 95 참조). RF를 계산하기 위해 애플리케이션은 검량 시료의 화합물 양과 검량 시료의 해당 감응을 사용합니다.

ESTD 결과의 단일 레벨 검량 계산 공식은 처리 방법에서 설정한 감응 유형에 따라 달라집니다.

$$\text{양} = \text{피크 면적} / \text{RF}$$

또는:

양 = 피크 높이 / RF

где:

양	화합물의 양
RF	감응 계수

농도 계산에 대한 자세한 내용은 “농도 및 질량%” 페이지 120을(를) 참조하십시오.

### 다단계 검량

다단계 검량의 경우 결합된 검량 곡선으로부터 감응 계수를 평가합니다.

## ISTD 계산

ISTD 절차는 정규화 계수 역할을 하는 화합물의 알려진 양을 추가하여 ESTD 분석법의 단점을 제거합니다. 이 화합물인 **내부 표준물질**은 검량 시료와 미지 시료 모두에 추가됩니다.

내부 표준물질로 사용되는 화합물은 화학적으로 그리고 머무름/이동 시간에서 검량된 화합물과 유사해야 하지만 크로마토그래피적으로 구별할 수 있어야 합니다.

표 9            ISTD 절차

장점	단점
시료 크기 변화는 중요하지 않습니다.	내부 표준물질은 모든 시료에 추가해야 합니다.
기기 변화는 내부 표준물질에 의해 보상됩니다.	
ISTD와 미지 시료의 화학적 행동이 유사한 경우 시료 준비의 영향이 최소화됩니다.	

비선형 특성을 가진 검량에 ISTD 절차를 사용하는 경우, 계산 원리로 인한 오류가 시스템 오류를 유발하지 않도록 주의를 기울여야 합니다. 다단계 검량에서 ISTD 화합물의 양은 모든 레벨에서 동일하게, 즉 일정하게 유지되어야 합니다.

내부 표준물질 분석에서 관심 화합물의 양은 두 피크의 감응 비율에 의해 내부 표준물질 성분의 양과 관련됩니다.

OpenLab CDS은(는) 최대 5개의 ISTD 화합물을 허용합니다.

ISTD 계산에는 "원시" 감응 및 양 대신 상대 감응 및 상대량이 사용됩니다. 이는 관심 피크의 감응과 양을 해당 ISTD 화합물의 감응과 양으로 나누어 계산합니다.

$$\text{상대적 감응} = \text{감응} / \text{감응}_{\text{ISTD}}$$

$$\text{상대량} = \text{양} / \text{양}_{\text{ISTD}}$$

감응은 면적, 면적%, 높이 또는 높이%일 수 있습니다(["감응 유형 및 감응 계수"](#) 페이지 95 참조).

ISTD 검량에서 미지 시료에서 특정 화합물의 보정량 비율 계산은 여러 단계에 걸쳐 이루어집니다. 이러한 단계는 다음 섹션에 설명되어 있습니다.

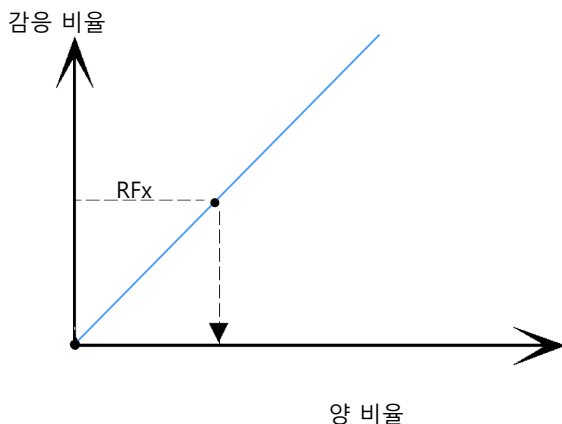
### 검량 시료

- 1 검량점은 화합물 테이블에서 특정 화합물의 각 레벨에 대한 양 비율과 감응 비율을 계산하여 구성됩니다.

양 비율은 화합물의 양을 해당 레벨의 내부 표준물질 양으로 나눈 값입니다.

감응 비율은 화합물의 감응(면적 또는 높이)을 해당 레벨의 내부 표준물질 감응으로 나눈 값입니다.

- 2 검량점을 통과하는 곡선에 대한 방정식은 처리 방법의 화합물 테이블에 지정된 곡선 모델 유형을 사용하여 계산됩니다.



## 미지 시료

- 1 미지 시료의 화합물 감응을 미지 시료의 내부 표준물질 감응으로 나누어 미지 시료에 대한 감응 비율을 구합니다.
- 2 미지 시료에 대한 양 비율은 “**검량 시료**” 페이지 124에서 결정된 곡선 모델 방정식과 시료의 실제 ISTD 양을 사용하여 계산합니다.

## 단일 레벨 ISTD 검량

단일 레벨 검량의 경우, 검량 시료의 감응 및 양 값을 사용하여 상대 감응 계수(RRF)를 평가합니다. 글로벌 검량 설정의 RF 정의에 따라 다음 공식 중 하나가 적용됩니다.

RF가 **Response per amount**으로 정의된 경우:

$$RRF = \frac{\text{Rel Response}}{\text{Rel Amount}}$$

RF가 **Amount per Response**으로 정의된 경우:

$$RRF = \frac{\text{Rel Amount}}{\text{Rel Response}}$$

где:

RRF	Relative response factor(상대 감응 계수)
RelResponse	상대 감응
RelAmount	상대량

양과 농도는 시료 측정의 감응 값을 사용하여 다음 공식에 따라 계산됩니다.

RF가 **Response per amount**으로 정의된 경우:

$$\text{Amount} = \left( \frac{\text{Rel Response}}{RRF} \right) * \text{Amount}_{ISTD}$$

RF가 **Amount per Response**으로 정의된 경우:

$$\text{양} = RRF * \text{RelResponse} * \text{Amount}_{ISTD}$$

где:

양	화합물 양
RelResponse	상대 감응
RRF	Relative response factor(상대 감응 계수)
Amount <sub>ISTD</sub>	내부 표준물질의 양

다단계 검량의 경우 상대 감응 계수는 결합된 검량 곡선으로부터 평가됩니다.

농도 계산에 대한 자세한 내용은 “[농도 및 질량%](#)” 페이지 120을(를) 참조하십시오.

## 교정되지 않은 화합물의 정량

검량되지 않은 화합물은 고정 감응 계수를 사용하거나 검량된 화합물 중 하나의 검량 데이터를 사용하여 정량할 수 있습니다. 고정 감응 계수 또는 검량된 화합물 데이터를 사용한 정량화는 신호에 따라 다릅니다. 후자의 경우, 검량된 화합물을 ISTD 분석법으로 정량하는 경우 검량된 화합물과 동일한 방식으로 식별되지 않은 피크에 대해 ISTD가 사용됩니다.

## 검량된 화합물을 사용한 간접 정량

검량된 화합물의 검량 데이터를 사용하여 검량되지 않은 화합물을 정량하려는 경우 처리 방법에서 검량된 화합물을 식별합니다(**Calibration** 노드, **Compound Table** 탭: **Mode** 아래에서 **Reference** 선택). 계산은 검량된 화합물에 대한 계산과 동일합니다. 참조 화합물이 ISTD 분석법으로 정량된 경우 참조 화합물과 동일한 방식으로 검량되지 않은 화합물에 대해 ISTD가 사용됩니다.

참조 피크가 누락되면 검량되지 않은 화합물의 양이 0이 됩니다.

선택적으로, 보정 계수(**Ref. correction**)를 입력하여 참조 화합물의 감응 계수에서 양을 계산하기 전에 피크의 감응을 곱할 수 있습니다.

## 수동 인자를 사용한 정량

소프트웨어를 사용하면 고정 감응 계수(**Manual Factor** 컬럼)를 기반으로 식별된 화합물을 정량할 수 있습니다. 이 경우 화합물 양은 고정 감응 계수를 사용하여 계산됩니다.

양 = 감응 \* 수동 인자

예:

수동 인자

고정 감응 계수

감응

감응은 면적, 면적%, 높이, 높이%, 상대 면적 또는 상대 양일 수 있습니다("감응 유형 및 감응 계수" 페이지 95 참조).

농도 계산에 대한 자세한 내용은 "농도 및 질량%" 페이지 120을(를) 참조하십시오.

## ISTD 분석법과 함께 수동 인자 사용

고정 감응 계수와 ISTD를 사용하여 화합물 양을 정량화하는 경우 공식은 다음과 같이 읽습니다.

$$\text{상대 면적} = \text{면적} / \text{면적}_{\text{ISTD}}$$

또는:

$$\text{상대 높이} = \text{높이} / \text{높이}_{\text{ISTD}}$$

그러면 양은 다음과 같이 계산됩니다.

$$\text{양} = \text{상대 면적} * \text{수동 인자} * \text{양}_{\text{ISTD}}$$

또는:

$$\text{양} = \text{상대 높이} * \text{수동 인자} * \text{양}_{\text{ISTD}}$$

농도 계산에 대한 자세한 내용은 “농도 및 질량%” 페이지 120을(를) 참조하십시오.

## 수동 인자와 감응 계수(RF)의 의존성

RF가 **Response per amount**(기본 설정)으로 정의된 경우:

$$\text{RF} = 1 / \text{수동 인자}$$

RF가 **Amount per response**으로 정의된 경우:

$$\text{RF} = \text{수동 인자}$$

감응 계수에 대한 자세한 내용은 “감응 유형 및 감응 계수” 페이지 95을(를) 참조하십시오.



## 식별되지 않은 피크의 정량

식별되지 않은 피크는 고정 감응 계수 또는 검량된 화합물 중 하나의 검량 데이터를 사용하여 시간 초과 그룹을 사용하여 정량화할 수 있습니다. 고정 감응 계수 또는 검량된 화합물 데이터를 사용한 정량화는 신호에 따라 다릅니다. 후자의 경우, 검량된 화합물을 ISTD 분석법으로 정량하는 경우 검량된 화합물과 동일한 방식으로 식별되지 않은 피크에 대해 ISTD가 사용됩니다.

시간 초과 그룹에 대한 자세한 내용은 “[시간 초과 그룹의 정의](#)” 페이지 133을(를) 참조하십시오.

### 고정 감응 계수를 사용하여 식별되지 않은 피크 정량화

이 경우 정량 모드 **Manual Factor**로 시간 초과 그룹을 생성합니다. 시간 초과 그룹의 지정된 시간 범위에는 식별되지 않은 관련 피크가 포함됩니다.

또한 정량화된 피크는 제외해야 합니다. **Quantify each peak individually** 옵션을 설정하면 식별되지 않은 모든 피크의 양과 농도가 고정 감응 계수를 사용하여 계산됩니다.

계산에 대한 자세한 내용은 “[수동 인자를 사용하여 시간 초과 그룹 정량화](#)” 페이지 134을(를) 참조하십시오.

### 검량된 화합물을 사용하여 식별되지 않은 피크 정량화

이 경우 정량 모드 **Reference**로 시간 초과 그룹을 생성합니다. 시간 초과 그룹의 지정된 시간 범위에는 식별되지 않은 관련 피크가 포함됩니다. 선택적으로, 보정 계수(**Ref. correction**)를 입력하여 참조 화합물의 감응 계수에서 양을 계산하기 전에 피크의 감응을 곱할 수 있습니다.

또한 정량화된 피크는 제외해야 합니다. **Quantify each peak individually** 옵션을 지정하면 식별되지 않은 모든 피크의 양과 농도가 곡선 기준을 사용하여 계산됩니다.

## 정규화

처리 방법의 일반 검량 설정에서 양을 정규화하도록 선택할 수 있습니다.

정규화 분석은 면적% 및 높이% 계산과 동일한 단점이 있습니다. 전체 피크 면적에 영향을 미치는 모든 변경 사항은 각 개별 피크의 농도 계산에 영향을 미칩니다. 정규화 분석은 관심 있는 모든 성분이 용출되고 적분된 경우에만 사용해야 합니다. 정규화 분석에서 선택한 피크를 제외하면 시료의 보고 결과가 변경됩니다.

시간 초과 그룹에 대한 자세한 내용은 “[시간 초과 그룹의 정의](#)” 페이지 133을(를) 참조하십시오.

개별 피크가 시간 초과 그룹에서 계산되는 경우 이러한 개별 피크는 총 양에 두 번째로 포함되지 않고 이미 시간 초과 그룹 양에 포함됩니다.

Norm% 결과를 생성하기 위한 기본 정규화 계수는 100.00입니다. 그러나 분석법에서 다른 수와 단위를 설정할 수 있습니다. 총 양은 계산된 모든 화합물 및 시간 초과 그룹 양의 합계로, 화합물 주 피크의 신호와는 무관합니다.

ISTD 화합물을 계산에 포함할지 여부를 선택할 수 있습니다. 제외하면(기본 설정) ISTD 양이 총 양에 추가되지 않으며 ISTD에 대한 화합물 정규화 양이 계산되지 않습니다.

**명명된 그룹**의 경우 그룹 양은 총 양에 포함되지 않습니다. 그러나 이 명명된 그룹에 ISTD가 명시적으로 추가된 경우 ISTD가 정규화에서 제외되더라도 그룹 양에 추가됩니다. 이로 인해 명명된 그룹에 대한 정규화 양이 100%보다 커질 수 있습니다.

## 정규화된 농도 계산

화합물의 정규화 농도는 검출된 모든 화합물의 농도 합계에 대한 화합물의 농도를 나타냅니다.

계산은 **Apply correction factors to normalized concentrations** 확인란의 상태에 따라 달라집니다. 이 확인란은 처리 방법의 검량 설정의 일부입니다.

보정 계수를 적용하면 농도 계산에 따라 화합물의 **Normalized concentration**가 다음과 같이 계산됩니다.

$$C_N = \frac{M_{\text{comp}} \cdot A}{\sum (M_{\text{comp}} \cdot A)} \cdot M_{\text{sample}} \cdot D_{\text{sample}} \cdot f$$

또는

$$C_N = \frac{M_{\text{comp}} \cdot A}{\sum (M_{\text{comp}} \cdot A)} \cdot \frac{M_{\text{sample}}}{D_{\text{sample}}} \cdot f$$

보정 계수를 적용하지 않으면 정규화 농도는 다음과 같이 계산됩니다.

$$C_N = \frac{M_{\text{comp}} \cdot A}{\sum (M_{\text{comp}} \cdot A)} \cdot f$$

где:

$C_N$	정규화 농도
$M_{\text{comp}}$	처리 방법에서 설정한 화합물 특정 승수
$A$	양
$M_{\text{시료}}$	주입 목록 또는 시퀀스 테이블에 설정된 시료 특정 승수
$D_{\text{시료}}$	주입 목록 또는 시퀀스 테이블에 설정된 시료별 희석률
$f$	처리 방법에 정의된 정규화 계수

## 정규화된 양 계산

화합물의 **Norm amount**을 계산하는 데 사용되는 방정식은 다음과 같습니다.

$$\text{Compound Norm Amount} = \text{Compound Amount} * \frac{\text{Normalization}}{\text{Total Amount}}$$

где:

화합물 양	화합물의 양
화합물 기준 양	정규화 화합물의 양
정규화	처리 방법에 정의된 정규화 계수
총량	모든 화합물 양과 시간 초과 그룹 양의 합계 명명된 그룹 양은 총량에 포함되지 않습니다. 시간 초과 그룹에 대해 <b>Include identified peaks</b> 을 활성화한 경우 시간 초과 그룹에서 식별된 화합물의 양은 두 번 계산됩니다.

$$\text{Group Norm Amount} = \text{Group Amount} * \frac{\text{Normalization}}{\text{Total Amount}}$$

где:

그룹 양	그룹의 양
그룹 기준 양	정규화 그룹의 양
정규화	처리 방법에 정의된 정규화 계수

$$\text{Peak Norm Amount} = \text{Peak Amount} * \frac{\text{Normalization}}{\text{Total Amount}}$$

где:

정규화

처리 방법에 정의된 정규화 계수

피크 양

피크의 양

피크 기준 양

정규화 피크의 양

## 그룹의 정량

### 시간 초과 그룹의 정의

시간 초과 그룹은 하나 이상의 시간 영역을 포함하며 특정 신호에서 정의됩니다. 그룹의 예상 머무름 시간은 정렬 목적으로만 사용되며 수동으로 입력할 수 있습니다.

시간 초과 그룹은 OpenLab EZChrom에서 검량되지 않은 범위 또는 검량 범위에 해당합니다.

다음 예는 그룹 2와 그룹 3이 겹치는 세 개의 시간 초과 그룹을 보여줍니다. C1과 C2는 식별된 화합물입니다. 5,689 min의 식별되지 않은 피크는 두 그룹 모두에서 평가됩니다. 식별된 피크는 그룹 파라미터가 적절하게 설정된 경우에만 평가됩니다.

그룹	시간 범위	식별된 피크를 포함합니까?
그룹 1	0,8 min - 1,4 min 2,8 min - 3,4 min	아니요
그룹 2	3,8 min - 5,9 min	예
그룹 3	5,4 min - 7,2 min	아니요

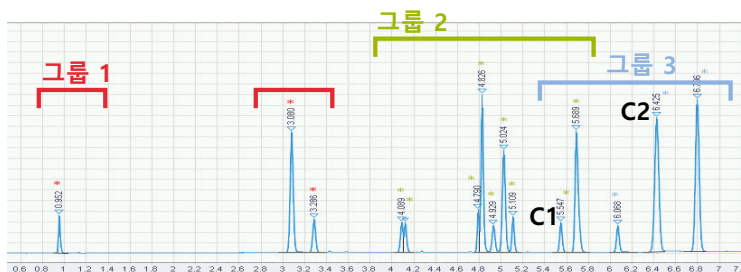


그림93 예시: 시간 초과 그룹

## 주

시간 초과 그룹에 정의된 시간 영역이 없는 경우 해당 면적, 높이 및 양은 계산되지 않습니다. 시간 초과 그룹에 정의된 영역이 하나 이상 있지만 이 영역에서 피크가 발견되지 않으면 해당 면적과 높이는 0이 됩니다.

시간 참조 화합물을 사용하여 머무름 시간을 보정하는 경우 시간 초과 그룹의 시작 시간 및 정지 시간도 해당 변화에 의해 보정됩니다(“[시간 참조 화합물에 대한 계산](#)” 페이지 87 참조).

정량의 경우 그룹의 면적, 높이 또는 스케일링된 감응은 시간 범위에 포함된 개별 피크의 해당 값을 합산하여 계산됩니다(그룹 파라미터에 따라 식별된 피크 포함 또는 제외).

시간 초과 그룹은 해당 그룹의 캘리브레이션 파라미터를 사용하여 검량 및 정량화됩니다. 시간 초과 그룹은 일반 화합물의 모든 검량 및 정량 모드를 지원합니다(**Curve, Manual Factor, Reference**). 그룹 파라미터에서 모든 피크를 개별적으로 정량화하도록 선택할 수 있습니다. 이 경우 그룹의 각 피크는 그룹 감응 계수(RF)를 사용하여 개별적으로 정량화됩니다.

주의: 시간 초과 그룹은 전체 그룹의 캘리브레이션 파라미터를 사용하므로 오프셋이 큰 비선형 및/또는 결합된 검량 곡선과 함께 사용할 때는 주의해야 합니다.

비선형 결합된 검량 곡선과 함께 시간 초과 그룹을 사용하면 계산의 비교적 특성으로 인해 잠재적으로 부정확한 결과가 계산되므로 권장되지 않습니다.

그룹 결합된 검량 곡선에 상당한 오프셋(즉, 큰 절편(b) 값)이 있는 경우 오프셋은 시간 초과 그룹 창 내에서 발견되는 모든 피크에 대해 동일하게 분포됩니다. 동일한 분포는 각 화합물을 적절하게 설명하지 못할 수 있습니다.

피크가 여러 그룹에 속하거나 식별된 피크가 그룹의 일부로 정량화되는 경우 충돌이 발생할 수 있습니다. 충돌 해결에 대한 자세한 내용은 “[시간 초과 그룹 파라미터 평가](#)” 페이지 136을(를) 참조하십시오.

## 시간 초과 그룹 정량화

### 수동 인자를 사용하여 시간 초과 그룹 정량화

이 경우 그룹의 양은 수동으로 입력한 고정 감응 계수에 따라 계산됩니다.

ESTD

그룹 양 = 그룹 감응 \* 수동 인자

где:

수동 인자	고정 감응 계수
그룹 감응	모든 (스케일링된) 감응의 합계

또는 ISTD:

$$\text{Group Amount} = \frac{\text{Group Response}}{\text{Response}_{\text{ISTD}}} * \text{Manual Factor} * \text{Amount}_{\text{ISTD}}$$

где:

Amount <sub>ISTD</sub>	내부 표준물질의 양
수동 인자	고정 감응 계수
Response <sub>ISTD</sub>	내부 표준물질의 (스케일링된) 감응

$$\text{그룹 농도} = \text{그룹 양} * \text{승수} * \text{희석률}$$

또는

$$\text{그룹 농도} = \text{그룹 양} * \text{승수} / \text{희석률}$$

승수 및 희석률을 계산하는 방법에 대한 자세한 내용은 “보정 계수” 페이지 119을(를) 참조하십시오. 농도 계산 방법에 대한 자세한 내용은 “농도 및 질량%” 페이지 120을(를) 참조하십시오.

### 자체 결합된 검량 곡선을 사용하여 시간 초과 그룹 정량화

시간 초과 그룹은 자체 결합된 검량 곡선에 따라 정량화할 수 있습니다. 감응 스케일링 **Response/RT**를 제외한 모든 검량 옵션 또는 레벨이 지원됩니다. ISTD 모드에서는 사용할 ISTD를 선택해야 합니다.

스케일링된 감응 값을 선택하는 경우 스케일링된 감응은 개별적으로 스케일링된 감응의 합입니다.

### 참조 화합물의 곡선으로 시간 초과 그룹 정량화

시간 초과 그룹은 다른 단일 화합물 또는 시간 초과 그룹의 결합된 검량 곡선에 따라 정량화할 수 있습니다. 소프트웨어를 사용하면 참조 결합된 검량 곡선의 감응 계수를 사용할 수 있습니다. 이 경우 보정 계수(**Ref. correction**)를 입력하여 참조 화합물 또는 그룹의 감응 계수에서 양을 계산하기 전에 감응을 곱할 수 있습니다.

시간 초과 그룹의 결합된 검량 곡선은 곡선 모델이 **Linear**이고 곡선이 원점을 강제로 통과하는 경우에만 참조로 사용할 수 있습니다. ISTD의 경우 동일한 ISTD가 참조 화합물로 사용됩니다.

## 시간 초과 그룹에서 개별적으로 피크 정량화

모든 피크를 개별적으로 정량화하도록 선택하면 개별 피크 양은 다음과 같이 계산됩니다.

$$\text{Peak Amount} = \text{Group Amount} * \frac{\text{Peak Response}}{\text{Group Response}}$$

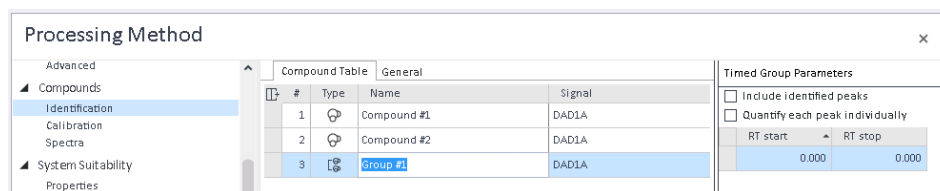
$$\text{피크 농도} = \text{피크 양} * \text{승수} * \text{희석률}$$

또는

$$\text{피크 농도} = \text{피크 양} * \text{승수} / \text{희석률}$$

승수 및 희석률을 계산하는 방법에 대한 자세한 내용은 “보정 계수” 페이지 119을(를) 참조하십시오. 농도 계산 방법에 대한 자세한 내용은 “농도 및 질량%” 페이지 120을(를) 참조하십시오.

## 시간 초과 그룹 파라미터 평가



시간 초과 그룹 정의에서 **Include identified peaks** 확인란을 선택하지 않은 경우 그룹 결과에는 하나 이상의 시간 영역 내에서 발견된 알 수 없는 피크에 대한 결과만 포함됩니다. 이 확인란을 선택하면 식별된 피크에 대한 결과도 고려됩니다.

시간 초과 그룹 정의에서 **Quantify each peak individually** 확인란을 선택하지 않은 경우 그룹에 속한 개별 피크는 정량화되지 않습니다. 개별 피크 결과로는 면적, 높이 및 스케일링된 감응만 제공되며 양이나 농도는 제공되지 않습니다. 이 확인란을 선택하면 지정된 시간 영역의 각 피크가 그룹 캘리브레이션 파라미터를 사용하여 정량화됩니다. 이 확인란을 선택하거나 선택 취소해도 그룹 결과는 변경되지 않습니다.

### 총돌 해결

피크가 여러 그룹에 속하거나 식별된 피크가 그룹의 일부로 정량화되는 경우 총돌이 발생할 수 있습니다. 이러한 경우 다음 규칙이 적용됩니다.

- 알 수 없는 피크가 여러 그룹에 속해 있고 검량 레벨을 포함한 캘리브레이션 파라미터가 두 그룹 모두에 대해 정의되어 있는 경우: 피크가 여러 번 보고되지만 항상 같은 양으로 보고됩니다. 피크는 한 번만 정량화됩니다.

피크는 예상 머무름 시간이 가장 작은 그룹의 파라미터로 정량화됩니다. 두 그룹의 예상 머무름 시간이 동일한 경우 마지막으로 생성된 그룹이 사용됩니다.

- 식별된 피크가 그룹의 일부로 정량화되었지만 자체 캘리브레이션 파라미터가 정의되어 있는 경우 그룹 파라미터가 아닌 자체 파라미터로 정량화됩니다.



- 식별된 피크가 그룹의 일부로 정량화되었지만 특정 캘리브레이션 파라미터가 정의되지 않은 경우 화합물은 그룹 파라미터를 사용하여 정량화됩니다. 그룹의 감응 유형(면적 또는 높이)이 사용됩니다.
- 식별된 피크가 이 그룹의 **내부 표준물질(ISTD)**이고 그룹 파라미터 **Include identified peaks**이 설정된 경우, 이 피크의 감응은 시간 초과 그룹 감응에서 감산됩니다.

#### 스케일링된 감응을 사용한 정량

**Injection Results** 창에서 **Scaled response** 컬럼은 정량화된 각 피크의 감응을 표시합니다. 그룹의 결합된 검량 곡선이 스케일링되지 않은 경우 스케일링된 감응은 피크 면적 또는 높이와 같습니다.

그룹의 스케일링된 감응은 시간 초과 그룹에 포함된 개별 피크의 스케일링된 감응의 **합**으로 계산됩니다. 그룹 검량 및 정량은 이 스케일링된 감응의 합계를 기반으로 합니다.

시간 초과 그룹의 면적과 높이도 합산된 값이지만 감응 값에 스케일링이 적용되지 않은 경우에만 계산됩니다.

## 명명된 그룹의 정의

명명된 그룹은 사용자가 선택한 화합물과 시간 초과 그룹으로 구성됩니다. 각 화합물 또는 시간 초과 그룹은 자체적으로 식별되고 정량화됩니다. ESTD 및 ISTD 계산은 개별 화합물의 검량 데이터를 기반으로 합니다. 계산된 그룹 면적, 높이, 양 및 농도는 개별 면적, 높이, 양 및 농도의 합입니다. 명명된 그룹 자체는 검량되지 않습니다. 하나의 화합물은 여러 개의 명명된 그룹에 포함될 수 있습니다.

그룹의 예상 머무름 시간은 정렬 목적으로만 사용되며 수동으로 입력할 수 있습니다.

명명된 그룹은 OpenLab EZChrom에서 명명된 피크 그룹에 해당합니다.

다음 예는 두 그룹 모두에 하나의 화합물이 포함된 두 개의 명명된 그룹을 보여줍니다.

그룹	그룹 1	그룹 2
포함된 화합물	C1	
	C2	
		C3
	C4	C4
		C5
		C6

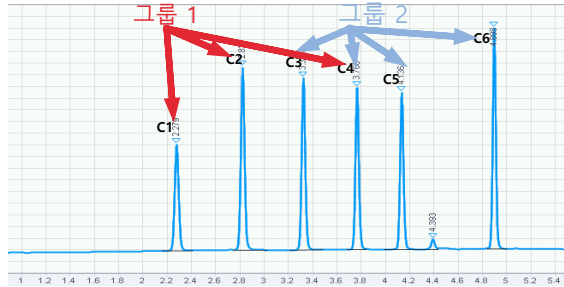


그림94 예시: 명명된 그룹

## 명명된 그룹 정량화

명명된 그룹 테이블의 결과는 다음과 같습니다.

그룹 면적 =  $\Sigma$  화합물 피크 면적 +  $\Sigma$  시간 초과 그룹 면적

그룹 높이 =  $\Sigma$  화합물 피크 높이 +  $\Sigma$  시간 초과 그룹 높이

그룹 양 =  $\Sigma$  화합물 양 +  $\Sigma$  시간 초과 그룹 양

그룹 농도 =  $\Sigma$  화합물 농도 +  $\Sigma$  시간 초과 그룹 농도

명명된 그룹에서 화합물 또는 시간 초과 그룹이 식별되지 않은 경우, 명명된 그룹은 분석에서 "식별되지 않음"으로 표시됩니다.

UV 스펙트럼 분석이란 무엇입니까? 140

UV 불순물 확인 142

노이즈 계산 142

중요 스펙트럼 결정 143

배경 보정 143

유사성 계산 144

임계값 계산 144

불순물 평가 146

임계값, 유사성 곡선 및 감도 정보 146

기준 순도 플롯과의 비교 149

UV 확인 152

이 장에서는 불순물 확인의 개념과 UV 스펙트럼 분석을 기반으로 한 화합물 식별 확인에 대해 설명합니다.

## UV 스펙트럼 분석이란 무엇입니까?

UV 스펙트럼 분석과 관련된 다양한 창과 기능이 있습니다. 이러한 창을 확인하고 기능에 액세스하려면 중점 주입에 스펙트럼 데이터(예: 3D UV 시스템으로 수집한 데이터)가 포함되어 있어야 합니다.

UV 스펙트럼 분석은 일상적인 분석을 위한 추가 품질 기준을 제공합니다.

- **화합물 식별 확인**

이 애플리케이션은 UV 스펙트럼을 특정 UV 참조 스펙트럼과 비교합니다. 일치율이 높으면 화합물이 동일할 가능성이 높다는 것을 나타냅니다.

계산에 대한 자세한 내용은 UV 확인을 참조하십시오 (“[UV 확인](#)” 페이지 152).

- **UV 불순물 확인**

이 애플리케이션은 피크의 모든 UV 스펙트럼을 정점 스펙트럼과 비교합니다. 전체 일치 계수인 UV 순도 값을 계산합니다. UV 순도 값이 낮으면 UV 스펙트럼이 크게 다른 피크가 함께 용출되었음을 나타냅니다.

계산에 대한 자세한 내용은 UV 불순물 확인을 참조하십시오 (“[UV 불순물 확인](#)” 페이지 142).

UV 스펙트럼 분석은 자외선 가시 다이오드 어레이 검출기 또는 형광 검출기에서 수집한 스펙트럼 데이터를 처리합니다. 크로마토그래피 데이터와 함께 사용할 때 분석 데이터에 세 번째 차원을 추가합니다(\*\*\* '스펙트럼 정보' on page 141 \*\*\* 참조).

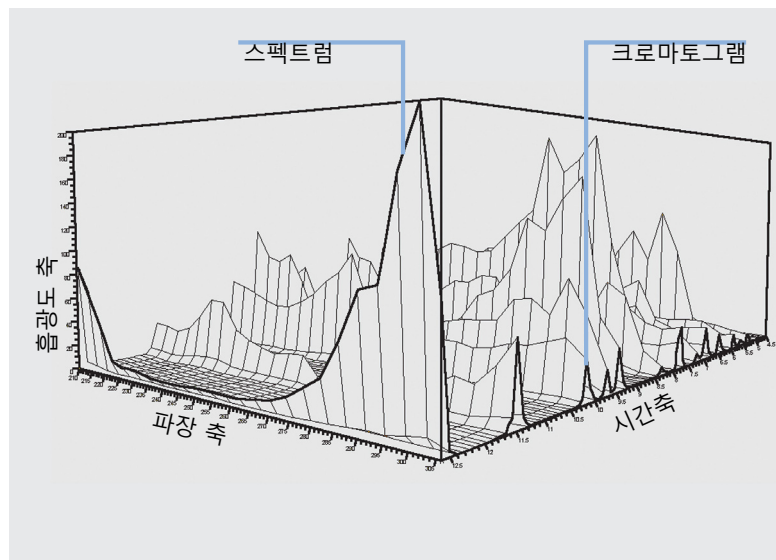


그림95 스펙트럼 정보

## UV 불순물 확인

불순물 확인은 피크가 순수한지 또는 불순물이 포함되어 있는지 평가합니다. 이 평가는 피크 용출 중에 기록된 스펙트럼의 비교를 기반으로 합니다. 바탕선 보정을 적용한 후 피크 정점의 스펙트럼을 피크에 기록된 모든 중요한 스펙트럼과 비교합니다. 애플리케이션은 스펙트럼의 유사성 정도를 특징짓는 일치 계수를 계산합니다.

애플리케이션은 다음 단계를 수행하여 UV 불순물을 평가합니다.

- 1 피크당
  - a “노이즈 계산” 페이지 142
  - b 중요 스펙트럼 결정(“중요 스펙트럼 결정” 페이지 143)
- 2 스펙트럼당:
  - a “배경 보정” 페이지 143
  - b “유사성 계산” 페이지 144
  - c “임계값 계산” 페이지 144
- 3 “불순물 평가” 페이지 146

## 노이즈 계산

추가 평가를 위한 준비 작업으로, 애플리케이션은 바탕선 시작 및 바탕선 끝의 스펙트럼에서 각 피크에 대해 다음 숫자를 계산합니다.

- 노이즈 분산
- 노이즈 표준 편차  $\sigma$

바탕선 시작 및 종료 시간은 적분에 따라 다릅니다. 여러 피크가 드롭 라인으로만 구분되는 경우 모든 피크는 노이즈 계산에 동일한 스펙트럼을 사용합니다.

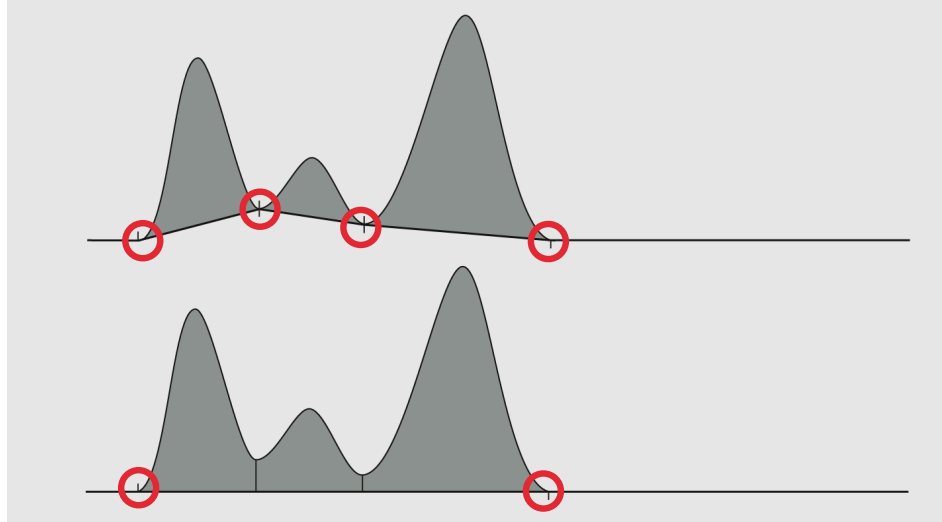


그림96 적분에 따른 바탕선 시작 및 종료

## 중요 스펙트럼 결정

중요한 신호가 있는 스펙트럼만 평가되도록 하기 위해 애플리케이션은 감응 범위가 너무 작은 스펙트럼을 필터링합니다. 스펙트럼은 다음에 해당하는 경우에만 추가 계산에 사용됩니다.

- 감응 범위가  $3\sigma$ 보다 큰 경우
- 감응 범위가 정점 스펙트럼 감응 범위의 10 %보다 크거나 같은 경우 각 스펙트럼의 감응 범위는 최대 - 최소 감응으로 계산됩니다.

## 배경 보정

바탕선 보정을 위해 애플리케이션은 다음 스펙트럼을 평가합니다.

- 피크의 바탕선 시작 시 스펙트럼
- 피크의 바탕선 종료 시 스펙트럼

바탕선 시작 및 종료 시간은 적분에 따라 다릅니다. 여러 피크가 드롭 라인으로만 구분되어 있는 경우 모든 피크는 배경 보정을 위해 동일한 스펙트럼을 사용합니다(\*\* '적분에 따른 바탕선 시작 및 종료' on page 143 \*\*\* 참조).

두 바탕선 스펙트럼의 선형 보간이 계산됩니다. 각 개별 피크 스펙트럼을 보정하기 위해 애플리케이션은 해당 머무름 시간에서 보간 스펙트럼을 감산합니다.

## 유사성 계산

애플리케이션은 나머지 배경 보정된 피크 스펙트럼 각각을 배경 보정된 정점 스펙트럼과 비교합니다. 일치 계수는 0(유사성 없음)과 1000(동일한 스펙트럼) 사이의 값입니다.

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n [(x_i - x_{av}) \cdot (y_i - y_{av})]}{\sqrt{\left[ \sum_{i=1}^n (x_i - x_{av})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - y_{av})^2 \right]}}$$

где:

r	상관
$x_i, y_i$	고려된 데이터 포인트와 피크 정점에서 각각 동일한 파장에서 측정된 흡광도
n	적시에 데이터 포인트당 수집한 파장의 수(처리 방법 파장 대역폭 및 수집 스펙트럼 수집 단계에 따라 다름)
$x_{av}, y_{av}$	고려된 데이터 포인트와 피크 정점 스펙트럼 각각의 평균 흡광도

일치 계수(각 데이터 포인트에서) =  $r^2 * 1000$

## 임계값 계산

50% 감도에서의 기준 임계값은 다음 공식을 사용하여 계산합니다.

$$T = 1000 * \left( 1 - 0,5 * \left( \frac{VAR_{noise}}{VAR_{peak}} + \frac{VAR_{noise}}{VAR_{target}} \right) \right)$$

где:

$VAR_{noise}$	계산된 노이즈 스펙트럼의 분산 임계값
$VAR_{peak}$	피크 스펙트럼의 분산
$VAR_{target}$	비교에 사용된 스펙트럼의 분산(정점 이전 데이터 포인트 순도 계산의 경우 피크 시작, 정점 이후 데이터 포인트 순도 계산의 경우 피크 끝)



소프트웨어에서 사용되는 임계값( $T_s$ )은 감도 값에 따라 달라집니다. 다음 공식으로 계산됩니다.

감도가 50%보다 큰 경우:

$$T_s = T + \frac{(1000 - T) \cdot (S - 50)}{50}$$

감도가 50% 이하인 경우:

$$T_s = T \cdot \frac{\log(S)}{\log(50)}$$

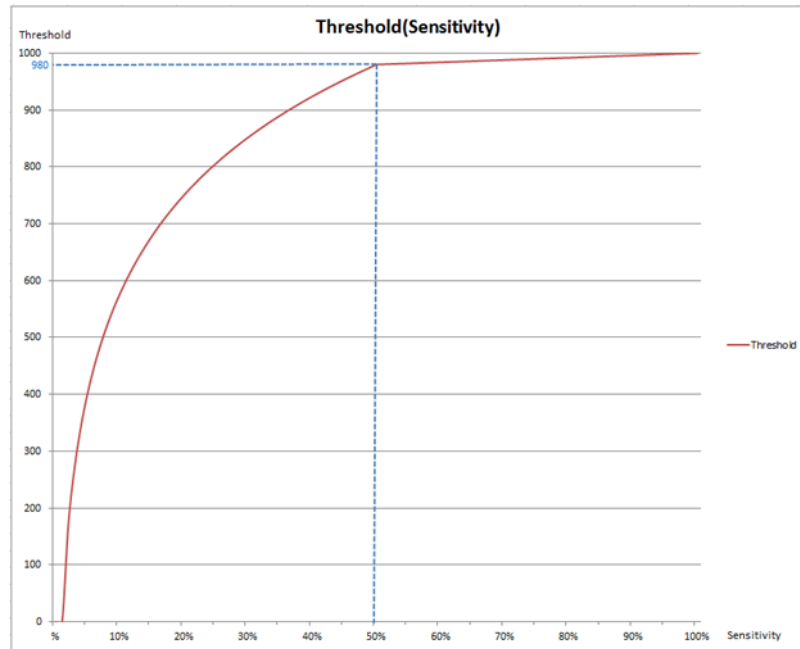
где:

$T_s$                       선택한 감도 S에 대한 임계값 [0 - 1000]

T                         50% 감도에서의 기준 임계값

S                         감도 [0 - 100] %

각 개별 임계값에 대해 각 원시 데이터 포인트에서 이러한 공식 중 하나가 적용됩니다.



빨간색 곡선은 자동으로 계산된 임계값 곡선입니다. 이 곡선 예시의 자동 계산된 임계값은 980(감도 값 50%)입니다.

## 불순물 평가

유사성 곡선의 단일 값은 감도가 보정된 임계값과 일치 계수로부터 계산됩니다 (“임계값 계산” 페이지 144, “유사성 계산” 페이지 144).

$$\text{비율} = \log((1000 - \text{임계값}) / (1000 - \text{일치 계수}))$$

피크의 모든 값은 **유사성 곡선**에 표시됩니다. **Peak Details** 창에서 볼 수 있습니다. 이 유사성 곡선은 피크에 걸쳐 양수 값(순수한 데이터 포인트)과 음수 값(불순한 데이터 포인트)의 분포를 보여주며, 여기서 0은 임계값 한계를 나타냅니다.

## 임계값, 유사성 곡선 및 감도 정보

OpenLab CDS v2.x에서 임계값은 모든 데이터 포인트에 대해 자동으로 계산됩니다. 분석의 선명도는 감도 백분율을 사용하여 조정됩니다.

따라서 감도는 고정된 임계값이 아닙니다. 임계값이 모든 원시 데이터 포인트에서 동일하지 않으므로 감도를 수정해도 선형 관계로 임계값이 변경되지 않습니다. 예를 들어, 아래 그림에서 2,950 min의 임계값이 998이라고 해서 2,960 min의 임계값이 반드시 동일하다는 의미는 아닙니다. 모든 데이터 포인트마다 고유한 임계값이 계산되어 피크를 가로지르는 임계값 곡선이 생깁니다.

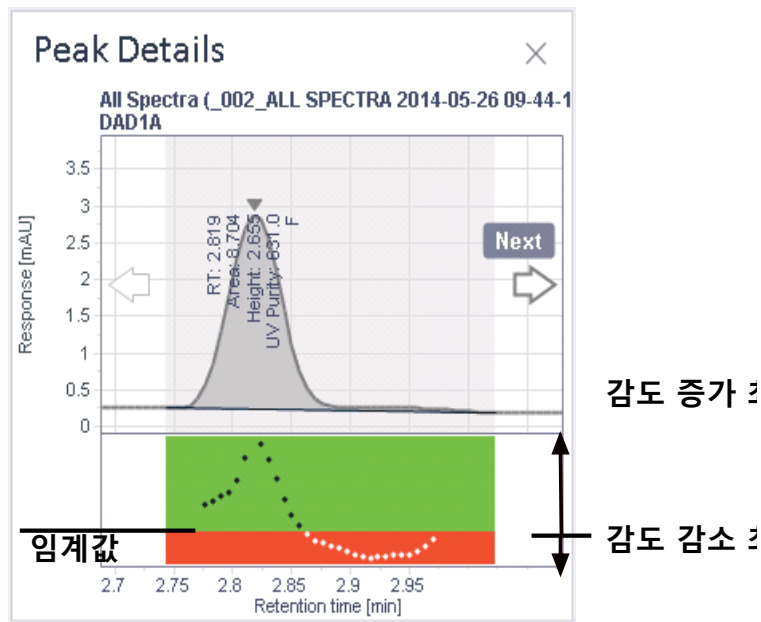


그림97 유사성 곡선

그런 다음 피크 순도 감도가 임계값 곡선에 적용됩니다. 데이터 분석에서는 임계값과 유사성 곡선의 로그 변환이 피크 아래에 그려집니다. 그러면 임계값 곡선은 순수 영역과 불순한 영역 사이의 평평한 선이 됩니다. 유사성 곡선(피크 세부 정보에 표시됨)은 “불순물 평가” 페이지 146에 설명된 공식을 사용하여 그려집니다. 이 유사성 곡선은 피크 전체에 걸쳐 양수 값(순수 데이터 포인트)과 음수 값(불순한 데이터 포인트)의 분포를 표시하며, 여기서 0은 임계값 한계를 나타냅니다.

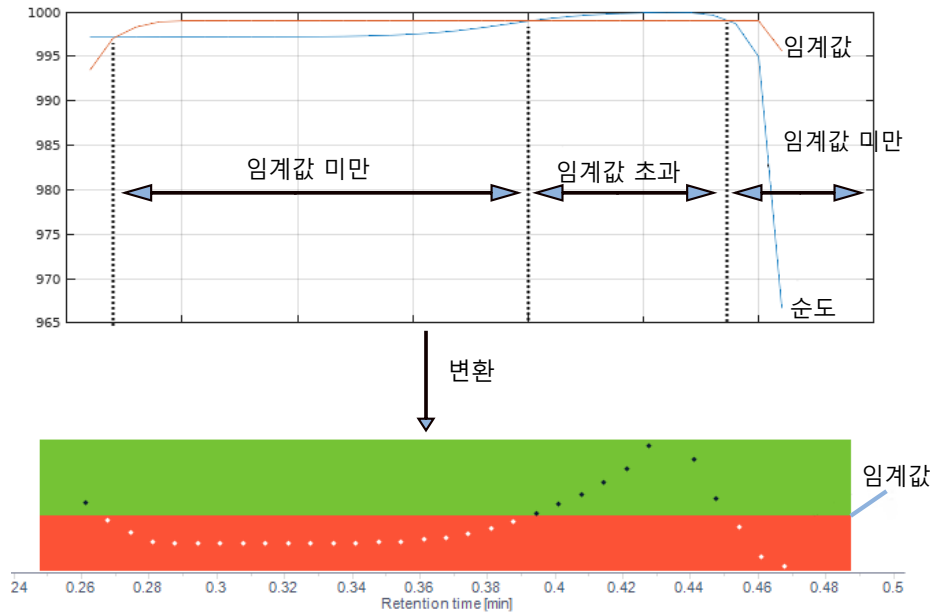


그림98 변환 전과 후

예시:

- 일치 계수가 990이고 임계값이 980인 데이터 포인트:  

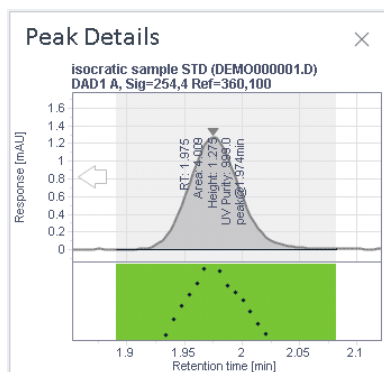
$$\text{비율} = \log( (1000 - 980) / (1000 - 990) ) = \log(2) = +0.3$$
 이 원시 데이터 포인트는 순도 기준을 충족합니다.
- 일치 계수가 970이고 임계값이 990인 데이터 포인트:  

$$\text{비율} = \log( (1000 - 990) / (1000 - 970) ) = \log(0.33) = -0.48$$
 이 원시 데이터 포인트는 순도 기준을 충족하지 않습니다.

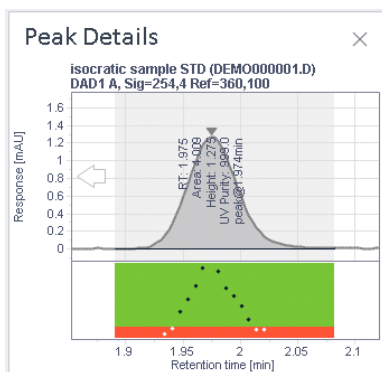
감도를 줄이거나 늘리면 계산된 임계값 곡선의 프로필이 변경된다는 의미입니다. 감도의 전체 범위는 0에서 100 %까지이며, 기본 계산된 임계값은 50 %입니다.

유사성 곡선의 표시는 비선형(그러나 로그)이므로 임계값은 한 데이터 포인트에서 다른 데이터 포인트로의 일대일 관계에 매핑되지 않습니다. 감도가 20 %만큼 증가/감소하면 임계값 곡선이 위 또는 아래로 이동하고 진폭도 함께 변경됩니다. 원시 데이터 포인트 임계값은 +/- 20 % 만큼 변경되지 않습니다.

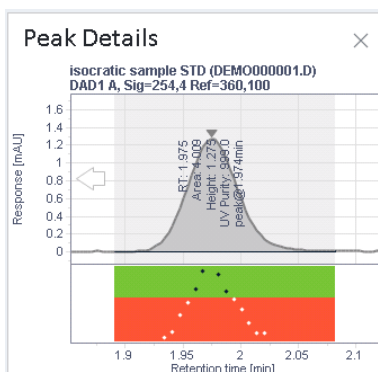
감도	임계값
0 %	가능한 최저값 = 0
$0 \leq s \leq 100$	계산된 임계값 곡선(기준 곡선을 50%로 설정)
100 %	가능한 최대값 = 1000



낮은 감도 - 이 피크는 순수한 것으로 간주됩니다



기본 감도 - 이 피크는 순수하지 않은 것으로 간주됩니다



높은 감도 - 이 피크는 순수하지 않은 것으로 간주됩니다

전체 UV 피크 순도 계수가 1000에 가까워도 데이터 포인트 하나가 임계값에 미달하면 피크가 불순한 것으로 플래그가 지정됩니다.

## 기존 순도 플롯과의 비교

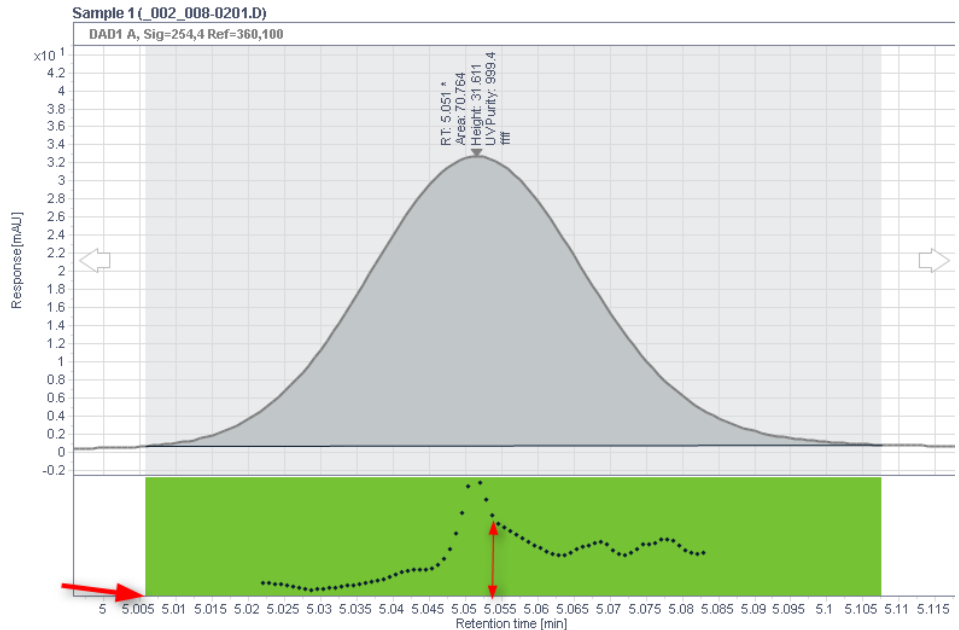
OpenLab ChemStation에서는 임계값을 고정 값 또는 임계값 곡선 유형으로 사용할 수 있는 다양한 임계값 계산 유형이 있습니다. 고정 임계값은 피크에 걸친 노이즈 기여도의 변화를 고려하지 않습니다. 따라서 OpenLab CDS v2.x에서는 모든 데이터 포인트에 대해 이 임계값이 자동으로 계산되어 임계값 곡선으로 이어집니다. 그런 다음 감도 백분율을 사용하여 분석의 선명도를 조정합니다.

새로운 플롯은 ChemStation에서와 동일한 정보를 표시하지만 더 편리한 방식으로 표시됩니다. 기존 임계값 곡선 대신 임계값과 기존 임계값 곡선의 차이(델타)의 로그 값을 표시합니다. 이렇게 하면 플롯의 빨간색 부분과 녹색 부분 사이의 경계인 평평한 선이 생성됩니다. 임계값을 초과하는 모든 포인트는 녹색 면적(검은색 점)에 있고 임계값을 초과하는 모든 포인트는 빨간색 면적(흰색 점)에 있습니다.

ChemStation과 비교하면 좋은 부분과 나쁜 부분이 뒤집혀 있습니다. 양호(녹색)는 상단에, 불량(빨간색)은 하단에 있습니다. 녹색 면적의 임계값 선과의 거리가 클수록 좋은 값입니다. 곡선 아래의 빨간색 면적의 거리가 클수록 나쁩니다.

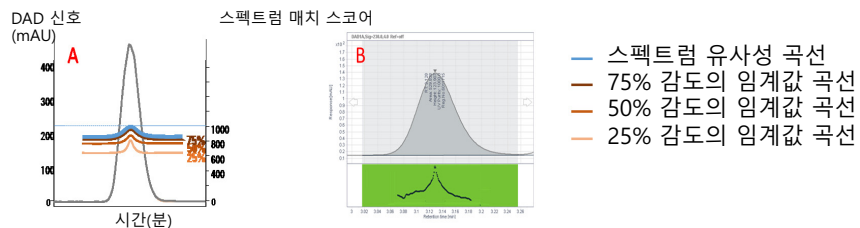
모든 값이 임계값을 초과하는 경우 임계값 선이 플롯의 맨 아래에 있습니다:

### Peak Details



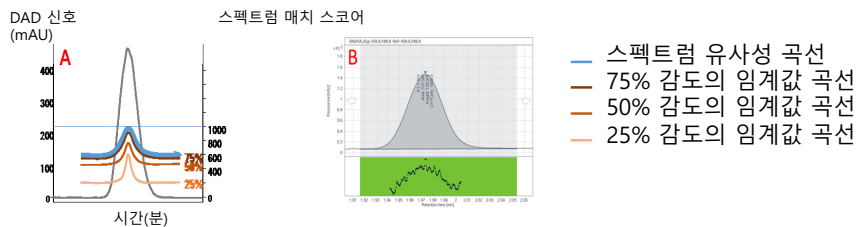
다음 예는 OpenLab CDS ChemStation edition 유사성 곡선(유사성 곡선이 역방향으로 표시됨)과 유사한 기준 순도 플롯과 OpenLab CDS v2.x 유사성 곡선 간의 차이점을 보여 줍니다.

### 순수 피크



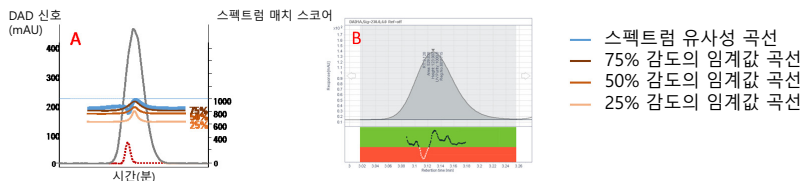
- 
- 1A 서로 다른 감도에서의 유사성 곡선과 **계산된 임계값 곡선**의 개략도
- 
- 2B 유사성 곡선의 데이터 분석 보기
- 

## 노이즈 값이 높은 순수 피크



- 
- 1A 서로 다른 감도에서의 유사성 곡선과 **계산된 임계값 곡선**의 개략도
- 
- 2B 유사성 곡선의 데이터 분석 보기
- 

## 불순한 피크



- 
- 1A 서로 다른 감도에서의 유사성 곡선과 **계산된 임계값 곡선**의 개략도
- 
- 2B **50% 감도**에서의 유사성 곡선과 **로그 임계값** 선의 데이터 분석 보기
- 

## 요약

임계값 곡선 유형 분석법만 OpenLab CDS v2.x와 OpenLab CDS ChemStation Edition 간에 비교할 수 있으며, 나머지 차이점은 OpenLab CDS v2.x에서는 피크 시작과 피크 종료 시 기준 배경 노이즈가 자동으로 선택되고 감도는 OpenLab CDS ChemStation Edition에서 사용할 수 없는 추가 요소라는 점입니다.

기본 감도 50%를 사용하는 경우 두 크로마토그래피 데이터 시스템의 알고리즘은 동일하지만 서로 다른 노이즈 기준으로 인해 결과가 달라질 수 있습니다. 감도를 높이거나 낮추면 임계값 곡선 프로파일 OpenLab CDS ChemStation Edition 임계값 곡선과 비교하여 변경됩니다.

## UV 확인

UV 기준 스펙트럼은 잘 정의된 크로마토그래피 조건에서 참조 시료로부터 수집됩니다. 피크 정점의 현재 스펙트럼을 UV 참조 스펙트럼과 비교하여 화합물의 신원을 확인할 수 있습니다. 애플리케이션은 두 스펙트럼의 일치 계수를 계산합니다.

비교를 위한 알고리즘은 UV 불순물 확인에 사용된 알고리즘과 동일합니다(“유사성 계산” 페이지 144 참조). 배경 보정은 선택 사항이며 처리 방법에서 선택할 수 있습니다.

UV 확인의 경우, 일치 계수가 지정된 한계보다 커야 주입 결과에서 녹색으로 표시됩니다. 처리 방법에서 일치 계수 제한을 설정합니다. 그에 따른 UV 확인 일치 계수가 주입 결과에 표시됩니다.

Injection Results					
Peaks		Summary			
#	Name	Signal description	RT (min)	UV Conf. Match Factor	
1	A	DAD1A	0.895	1000	
2	B	DAD1A	1.330	1000	
3	C	DAD1A	1.789	1000	
4	D	DAD1A	2.272	693	
5	E	DAD1A	2.441	1000	
6	F	DAD1A	2.623	999	

그림99 주입 결과의 UV 확인 일치 계수



## 8

## 질량 분석

MS 시료 순도 154

MS 피크 순도 156

이 장에서는 질량 분석을 기반으로 한 시료 순도 계산에 대해 설명합니다.

## MS 시료 순도

MS 시료 순도 계산은 시료가 순수한지 또는 불순물이 포함되어 있는지 평가합니다. 이 평가는 감응의 비교를 기반으로 합니다. 한편으로는 시료에 포함된 모든 화합물과 조각의 감응이 있습니다. 다른 한편으로는 특정 표적 이온에 의한 감응이 있습니다. 시료 순도는 두 감응의 비율로 계산됩니다.

애플리케이션은 선택한 기준 신호와 계산에 따라 다양한 단계를 수행하여 MS 시료 순도를 계산합니다.

### 표적을 찾았습니까?

- 1 **Injection List**의 **Target** 컬럼에 지정된 표적 질량을 가져옵니다(예: 270). 공식이 입력된 경우 공식에서 분자량을 계산합니다.
- 2 처리 방법에 지정된 첨가 생성물을 적용합니다(예: +H 및 +Na와 표적 질량이 270인 경우 표적 271 및 293이 됩니다).
- 3 모든 표적에 대한 EIC를 추출하고 이러한 EIC를 단일 EIC로 합산합니다.
- 4 합산된 단일 EIC에서 피크의 머무름 시간을 결정합니다.
- 5 기준 신호의 크로마토그램에서 일치하는 피크를 찾습니다.

일치하는 피크를 찾을 수 있으면 표적은 **found**으로 표시됩니다.

### 기준 신호는 MS 검출기에서 나온 것입니다.

계산 TIC % 사용

$$\text{MS sample purity} = \frac{\text{area of matching peak (TIC)}}{\text{area of all integrated peaks (TIC)}} \times 100$$

계산 EIC/TIC % 사용:

$$\text{MS sample purity} = \frac{\text{area of single peak (summed EIC)}}{\text{area of all integrated peaks (TIC)}} \times 100$$

#### 주

MS를 기준 신호로 선택한 경우(**MS Sample Purity > Properties** 아래의 처리 방법에서) 그리고 여러 TIC 신호가 있는 경우, **Sample Purity Results** 창의 왼쪽 테이블에 각 TIC 신호가 기준 신호로 표시됩니다.

기준 신호는 다른 검출기(비MS)의 신호입니다.

$$\text{MS sample purity} = \frac{\text{area of matching peak (base signal)}}{\text{area of all integrated peaks (base signal)}} \times 100$$

### 전제 사항

MS 시료 순도는 다음 가정 하에 계산됩니다.

- MS 시료 순도 계산은 대략적인 근사치일 뿐입니다.
- **EIC/TIC %** 계산의 경우: 대부분의 이온 존재비가 분자 이온 클러스터에 있도록 MS 데이터를 수집합니다. 소량의 소스 내 해리만 존재합니다.
- 비MS 검출기의 기준 신호의 경우: 다른 검출기는 MS 검출기보다 감응이 더 균일하고 보편적입니다.
- 시료의 모든 화합물은 균일한 감응 계수를 갖습니다.

## MS 피크 순도

MS 피크 순도 계산은 함께 그룹화되어 존재하는 다른 성분에 비해 표적을 구성하는 스펙트럼에서 성분 이온의 백분율을 기반으로 합니다.

애플리케이션은 다음 단계를 수행하여 MS 피크 순도를 계산합니다.

- 1 전체 크로마토그래피 범위에서 디콘볼루션을 실행합니다.
  - a 검출된 상위 (n)개  $m/z$  값에 대해 추출 이온 크로마토그램(EIC)을 생성합니다. 처리 방법의 **Compounds > Spectra, MS Peak Purity** 탭에서 숫자를 설정할 수 있습니다.
  - b 각 EIC에서 피크 머무름 시간을 구합니다.
  - c 동일한 머무름 시간에 용출되는 EIC 피크를 기준으로 성분을 정의합니다.
- 2 표적 화합물과 일치하는 표적 성분을 결정합니다.
  - a 추가 계산을 위한 기본 파라미터를 가져옵니다,
    - 내부 기본 설정( $m/z$  -0.3 ~ +0.7)의  $m/z$  델타 범위
    - TIC 피크 정점에서 MS 스펙트럼을 추출하고 가장 높은 존재비의  $m/z$ 를 찾아서 표적 정량자  $m/z$ 를 지정합니다.
    - **Compounds > Identification**의 처리 방법에서 표적 화합물(현재 화합물)에 대한 머무름 시간 창입입니다.
  - b 디콘볼루션으로 찾은 각 성분에 대해 표적 정량자  $m/z$ 의  $m/z$  델타 범위에 속하는 모든  $m/z$  값을 구합니다.
  - c 이러한 모든  $m/z$  값에 대해 표적 정량자 EIC 피크의 머무름 시간 창 내에 EIC가 정점을 갖는지 확인합니다.
  - d 이러한 피크가 가장 큰 성분을 가져와서 표적 성분으로 사용합니다.
- 3 시스템이 표적 성분을 찾지 못하면 2의 계수로 감소된 RT 창 크기 계수를 사용하여 **고해상도** 모드에서 전체 시료 디콘볼루션을 실행하여 재시도합니다. 고해상도 결과는 캐시되며 일반 해상도 성분 목록에서 찾을 수 없는 표적 성분을 검색합니다. 고해상도 결과의 자동 생성을 통해 이전에는 놓쳤던 많은 표적 성분을 식별할 수 있습니다.
- 4 시스템은 동일한 RT 및 기본 피크  $m/z$ 를 공유하는 **이중 성분**을 검출하려고 시도합니다. 이러한 성분 이중향이 존재하면 순도 추정치가 크게 아래쪽으로 편향될 수 있습니다. RT 창 크기 계수가 너무 작으면 성분 이중향이 발생할 수 있습니다. 따라서 시스템은 저해상도 모드에서 2의 계수로 증가된 창 크기 계수를 사용하여 전체 시료 디콘볼루션을 다시 실행하여 자동으로 복구를 시도합니다. 저해상도 결과는 캐시되어 성분 이중향과 일치하는 모든 표적을 검색합니다.

- 5 모든 기여 성분, 즉 표적 정량자  $m/z$ 의  $m/z$  델타 범위 내에 스펙트럼 피크가 있고 머무름 시간에서 표적 피크와 겹치는 모든 성분을 가져옵니다.
- 6 다음 공식을 사용하여 순도를 계산합니다.

$$Purity(Target\ compound) = \frac{Area(Target\ component\ shape)}{\sum (Area(Contributing\ component\ shape))}$$

시스템 적합성 평가	159
노이즈 결정	161
표준 편차의 6배를 사용한 노이즈 계산	162
피크 대 피크 공식을 사용한 노이즈 계산	162
ASTM 분석법에 의한 노이즈 계산	164
평균제곱근(RMS)을 사용한 노이즈 계산	165
신호 대 잡음비 계산	166
드리프트 및 변동잡음	168
피크 비대칭성 및 대칭성 계산	170
시스템 적합성 공식 및 계산	172
성능 테스트 정의	173
참고: 성능 테스트에 사용되는 머무름 시간	173
개요 성능 테스트	174
실제 피크 폭 $W_x$ [분]	176
용량 인자(USP), 용량 비율(ASTM) $k'$	176
대칭 인자, 테일링 인자(USP) $t$	177
컬럼당 이론 단수의 수(USP)	178
미터당 이론 단수의 수 $N[1/m]$	178
상대 머무름, 선택성	178
분리능(USP, ASTM) $R$	179
분리능(EP/JP) $R_s$	179
피크 대 골짜기 비율(EP/JP)	180

이 장에서는 분석 장비와 분석법의 성능을 평가하기 위해 OpenLab CDS이(가) 수행할 수 있는 작업에 대해 설명합니다.

## 시스템 적합성 평가

시료 분석에 사용하기 전에 분석 장비의 성능과 일상적으로 사용하기 전에 분석법을 모두 평가하는 것이 좋은 분석 관행입니다. 또한 일상적인 분석 전과 분석 중에 분석 시스템의 성능을 확인하는 것도 좋은 생각입니다. OpenLab은 이 세 가지 유형의 테스트를 자동으로 수행할 수 있는 도구를 제공합니다. **기기 테스트**에는 검출기 감도, 피크 머무름 시간의 정밀도 및 피크 면적의 정밀도가 포함될 수 있습니다. **분석법 테스트**에는 머무름 시간 및 양의 정밀도, 선택성, 일상적인 작동 분산에 대한 방법의 견고성이 포함될 수 있습니다. **시스템 테스트**에는 양 정밀도, 두 특정 피크 사이의 분리능 및 피크 테일링이 포함될 수 있습니다.

**실험실은 다음을 준수해야 할 수 있습니다.**

- 우수 실험실 관리기준 규정(GLP)
- 우수 의약품 제조 및 품질 관리 규정(GMP) 및 현재 우수 의약품 제조 및 품질 관리 규정(cGMP)
- 우수 자동 실험실 관리기준(GALP)

실험실은 이러한 테스트를 수행하고 결과를 철저히 문서화할 것을 권장합니다. 예를 들어 ISO9000 인증을 준수하기 위해 품질 관리 시스템의 일부인 실험실은 기기의 적절한 성능을 입증해야 합니다.

여러 번의 실행 결과를 취합하고 통계적으로 평가하기 위해 OpenLab CDS은(는) 결과 세트 요약 보고서를 생성하는 기능을 제공합니다. 이러한 요약 보고서에는 다양한 보고서 템플릿을 사용할 수 있습니다(예: SequenceSummary\_Extended.rdl). 필요에 따라 조정할 수 있습니다.

**테스트는 규제 당국 및 독립 감사자가 일반적으로 인정하는 형식으로 문서화됩니다. 통계에는 다음이 포함됩니다.**

- 피크 머무름 시간
- 피크 면적
- 양
- 피크 높이
- 특정 높이에서의 피크 폭
- 피크 대칭성
- 피크 테일링
- 용량 인자( $k'$ )
- 플레이트 수

- 피크 사이의 분리능
- 이전 피크에 대한 선택성

확장된 성능 결과는 검량된 화합물에 대해서만 계산되므로 머무름 시간 및 화합물 이름에 따른 특성화가 보장됩니다.

**일반적인 시스템 성능 테스트 보고서에는 다음과 같은 성능 결과가 포함됩니다.**

- 컬럼 세부 정보
- 처리 방법
- 시료 정보
- 수집 정보
- 신호 설명 및 바탕선 노이즈 결정
- 머무름 시간 또는 화합물 이름으로 레이블이 지정된 신호

**또한 크로마토그램에서 검량된 각 화합물에 대해 다음 정보가 생성됩니다.**

- 머무름/이동 시간
- $k'$
- 대칭성
- 피크 폭
- 플레이트 수
- 분리능
- 신호 대 잡음비
- 화합물 이름



## 노이즈 결정

노이즈는 현재 신호의 시간 범위에서 데이터 포인트 값으로부터 결정할 수 있습니다. 노이즈는 다음과 같은 방식으로 처리됩니다.

- 드리프트 선형 회귀의 표준 편차(SD)의 6배로
- 피크 투 피크(드리프트 보정)로
- ASTM 분석법(ASTM E 685-93)에서 결정한 대로
- 드리프트의 선형 회귀의 평균제곱근(RMS)으로

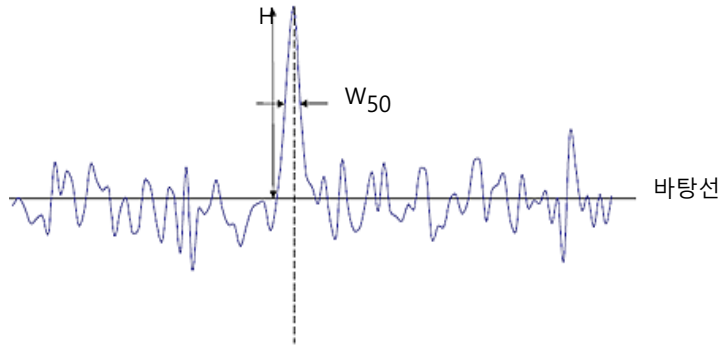


그림100 피크 신호와 노이즈가 있는 크로마토그램

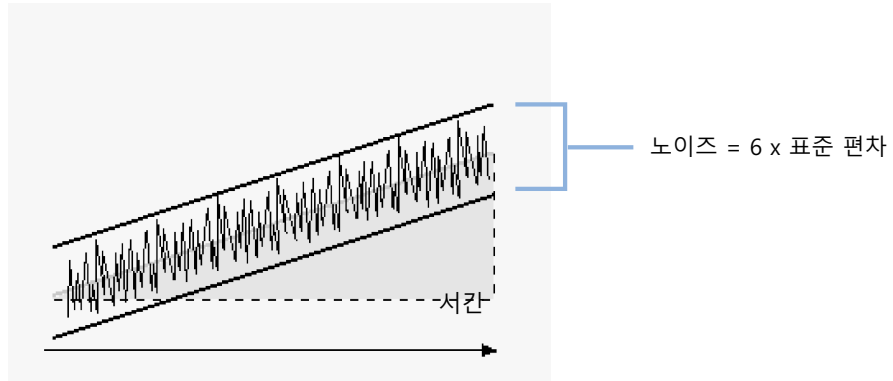
H 상단에서 바탕선까지의 피크 높이(노이즈를 통과하는 최상의 직선)

$W_{50}$  반높이에서 피크 폭

### 주

매우 작은 피크의 경우 애플리케이션에서 피크 종료 후의 머무름 시간을 발견하여 피크 폭이 마이너스가 될 수 있습니다. 이 코너의 경우 노이즈 값이 계산되지 않습니다.

## 표준 편차의 6배를 사용한 노이즈 계산



선형 회귀는 현재 신호의 시간 범위 내의 모든 데이터 포인트를 사용하여 계산됩니다. 노이즈는 다음 공식으로 계산됩니다.

$$N = 6 \times Std$$

где:

N

6배 표준 편차 방식에 기반한 노이즈

Std

선택한 시간 범위에 있는 모든 데이터 포인트의 선형 회귀의 표준 편차

## 피크 대 피크 공식을 사용한 노이즈 계산

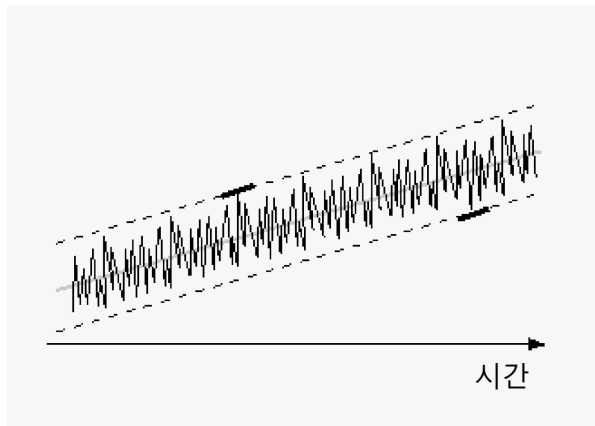


그림101 드리프트가 있는 피크 대 피크 노이즈의 그림

먼저 피크의 시간 범위에 있는 모든 데이터 포인트를 사용하여 선형 회귀를 결정하여 드리프트를 계산합니다. 시간 범위 내의 모든 데이터 포인트에서 선형 회귀선을 감산하여 드리프트 보정 신호를 구합니다.

그런 다음 공식을 사용하여 피크 대 피크 노이즈를 계산합니다.

$$N = I_{\max} - I_{\min}$$

где:

N	피크 대 피크 노이즈
$I_{\max}$	시간 범위에서 가장 높은(최대) $I_x$ 값
$I_{\min}$	시간 범위의 가장 낮은(최소) $I_x$ 값
$I_x$	드리프트에 의해 보정된 신호의 강도(드리프트는 LSQ 공식을 사용하여 계산됨)

유럽 약전 계산의 경우 피크 대 피크 노이즈는 각 피크 옆에 있는 -10 및 +10배의  $W_{50}$  범위에 걸쳐 바탕 기준 신호를 사용하여 계산됩니다. 이 영역은 관심 신호와 대칭이거나 매트릭스 신호로 인해 필요한 경우 비대칭일 수 있습니다.

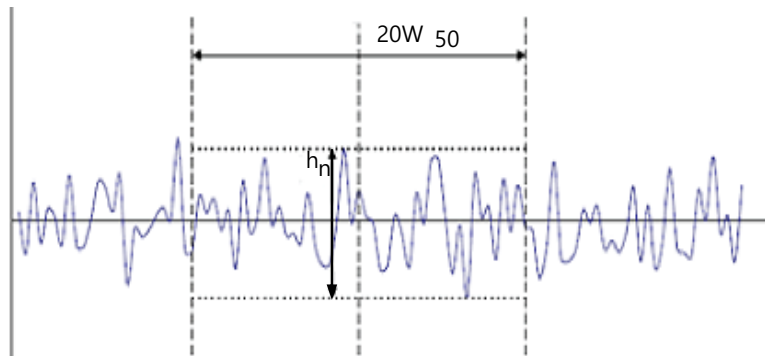


그림102 바탕 시료의 크로마토그램에서 노이즈 결정

여기에서

20  $W_{50}$ 는  $W_{50}$ 의 20배에 해당하는 영역입니다.

$h_n$ 는 20배  $W_{50}$  영역에서 바탕선 노이즈의 최대 진폭입니다.

## ASTM 분석법에 의한 노이즈 계산

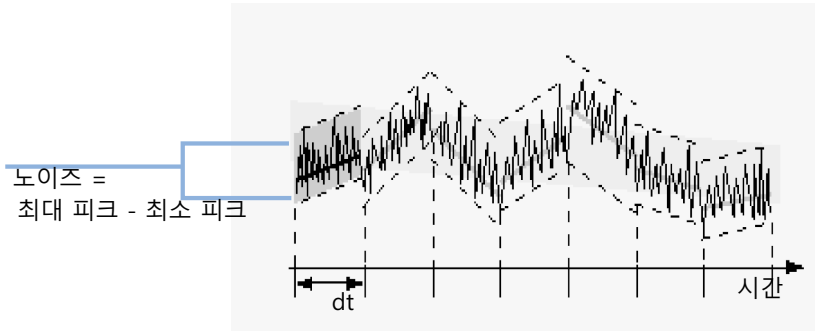


그림103 ASTM 분석법에 의한 노이즈 결정

ASTM 노이즈 결정(ASTM E 685-93)은 미국 재료시험협회에서 정의한 액체 크로마토그래피에 사용되는 가변 파장 광도계 검출기 테스트의 표준 관행을 기반으로 합니다. 시간 범위의 크기에 따라 세 가지 유형의 노이즈를 구분할 수 있습니다. 노이즈 결정은 정의된 시간 범위 내에서 피크 대 피크 측정을 기반으로 합니다.

- 주기 시간,  $t$

**장기 노이즈**, 시간당 6~60주기 사이 주파수의 검출기 신호의 모든 무작위 변화에 대한 최대 진폭. 장기 노이즈는 선택한 시간 범위가 1시간을 초과할 때 결정됩니다. 각 주기의 시간 범위(dt)는 10분으로 설정되어 선택한 시간 범위 내에서 최소 6주기를 제공합니다.

**단기 노이즈**, 분당 1주기보다 큰 주파수의 검출기 신호의 모든 무작위 변화에 대한 최대 진폭. 단기 노이즈는 10분에서 60분 사이의 선택된 시간 범위에 대해 결정됩니다. 각 주기의 시간 범위(dt)는 1분으로 설정되어 선택한 시간 범위 내에서 최소 10주기를 제공합니다.

**초단기 노이즈(ASTM E 685-93에 포함되지 않음)**, 이 용어는 0.1분당 1주기보다 큰 주파수의 검출기 신호의 모든 무작위 변화에 대한 최대 진폭을 설명하기 위해 도입되었습니다.

초단기 노이즈는 1분에서 10분 사이의 선택된 시간 범위에서 결정됩니다. 각 주기의 시간 범위(dt)는 0.1분으로 설정되어 선택한 시간 범위 내에서 최소 10주기를 제공합니다.

- 주기 수,  $n$

주기 수는 다음과 같이 계산됩니다.

$$n = \frac{t_{\text{tot}}}{t}$$

여기서  $t$ 는 주기 시간이고  $t_{\text{tot}}$ 는 노이즈가 계산되는 총 시간입니다.

- 각 주기의 피크 대 피크 노이즈

드리프트는 먼저 시간 범위의 모든 데이터 포인트를 사용하여 선형 회귀를 결정하여 계산합니다. 시간 범위 내의 모든 데이터 포인트에서 선형 회귀선을 감산하여 드리프트 보정 신호를 구합니다. 그런 다음 공식을 사용하여 피크 대 피크 노이즈를 계산합니다.

$$N = I_{\max} - I_{\min}$$

여기서 N은 피크 대 피크 노이즈이고,  $I_{\max}$ 는 시간 범위에서 가장 높은(최대) 강도 피크이며,  $I_{\min}$ 는 가장 낮은(최소) 강도 피크입니다.

- **ASTM 노이즈**

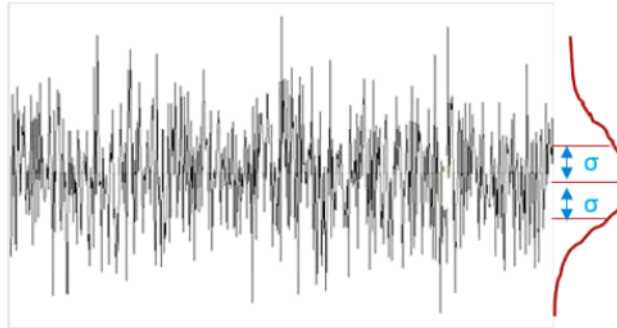
ASTM 노이즈는 다음과 같이 계산됩니다.

$$N_{ASTM} = \frac{\sum_{i=1}^n N}{n}$$

여기서  $N_{ASTM}$ 는 ASTM 분석법에 따른 노이즈입니다.

선택한 시간 범위가 1분 미만인 경우 ASTM 노이즈 결정은 수행되지 않습니다. 범위에 따라, 선택한 시간 범위가 1분보다 크거나 같으면 앞서 설명한 ASTM 분석법 중 하나를 사용하여 노이즈가 결정됩니다. 계산에는 주기당 최소 7개의 데이터 포인트가 사용됩니다.

## 평균제곱근(RMS)을 사용한 노이즈 계산



선형 회귀는 현재 신호의 시간 범위 내의 모든 데이터 포인트를 사용하여 계산됩니다. 노이즈는 다음 공식으로 계산됩니다.

$$RMS = S$$

где:

RMS	표준 편차 분석법에 따른 노이즈
S	표준 편차

선택한 시간 범위에 있는 모든 데이터 포인트의 선형 회귀에 대한 표준 편차로, 선형 함수  $y(X) = a + bX$ 를 사용합니다.

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - a - bX_i)^2}{N-2}}$$

где:

a	Y절편
b	기울기
N	불연속 관찰 수
$X_i$	독립 변수, $i^{\text{th}}$ 관측치

## 신호 대 잡음비 계산

OpenLab CDS에는 신호 대 잡음비 계산에 대한 다양한 옵션이 있습니다. 알고리즘과 노이즈 범위를 모두 선택할 수 있습니다.

### 6 시그마 또는 RMS 분석법

신호 대 잡음비는 다음 공식을 사용하여 계산됩니다.

$$\text{Signal-to-Noise} = \frac{\text{Height of the peak}}{\text{Noise of closest range}}$$

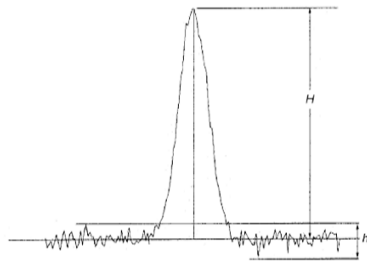


그림104 신호 대 잡음비

피크 대 피크  
또는 ASTM  
분석법

신호 대 잡음비는 다음 공식을 사용하여 계산됩니다.

$$S/N = 2H/h$$

где:

H

규정된 기준 용액으로 얻은 크로마토그램에 관련된 성분에 해당하는 피크의 높이입니다.

h

주입 또는 바탕 적용 후 얻은 크로마토그램에서 바탕선으로부터 가장 큰 노이즈 변동의 절대값으로, 규정된 기준 용액으로 얻은 크로마토그램에서 피크의 절반 높이에서 폭의 20배에 해당하는 거리에서 관찰되고 이 피크가 발견되는 지점 주위에 동일하게 위치합니다.

유럽 약전의 정의에 따르면 신호 대 잡음비는 바탕 기준 신호와 S/N 비율이 계산되는 피크가 포함된 시간 범위에 걸쳐 계산된 노이즈에 대해 계산됩니다.

## 노이즈 범위

노이즈는 다음 시간 영역 및 신호에 대해 계산할 수 있습니다.

- 바탕 기준 신호에서 자동으로 결정된 시간 영역 절반 높이에서 피크 폭의 20배에 해당하는 노이즈 범위.
- 동일한 신호 또는 바탕 기준 신호에서 자동으로 결정된 시간 영역 절반 높이에서 피크 폭의 n배에 해당하는 노이즈 범위
- 동일한 신호 또는 바탕 기준 신호에서 고정된 시간 영역
- 동일한 신호 또는 바탕 기준 신호에서 피크 시작 또는 끝을 기준으로 한 시간 영역

자동으로 결정된 시간 영역은 다음 알고리즘 중 하나에 따라 계산됩니다.

- 기준 신호가 충분히 길지 않은 경우

$$(EndTime - StartTime < N * W_{50})$$

- StartTime = 신호의 시작 시간
- EndTime = 신호의 종료 시간

N = 피크의 절반 높이에서 폭의 배수(약전에 따라 5~20 사이)

- 기준 신호가 충분히 길지만 피크가 시작 시간에 너무 가깝게 위치한 경우

$$(t_R - (N/2) * W_{50} < \text{기준 신호의 시작 시간})$$

- StartTime = (기준 신호의) 시작 시간
- EndTime = StartTime + 20 \* W<sub>50</sub>

- 기준 신호가 충분히 길지만 피크가 종료 시간에 너무 가깝게 위치한 경우

$$(t_R + (N/2) * W_{50} > \text{기준 신호의 종료 시간})$$

- $\text{EndTime} = (\text{기준 신호의}) \text{종료 시간}$
- $\text{StartTime} = \text{EndTime} - N * W_{50}$
- 기준 신호가 충분히 길고 피크가 기준 신호의 시작 시간 및 종료 시간으로부터 충분히 멀리 떨어져 있는 경우  
 $(t_R - (N/2) * W_{50} > \text{starttime}, t_R + (N/2) * W_{50} < \text{endtime})$ 
  - $\text{StartTime} = t_R - (N/2) * W_{50}$
  - $\text{EndTime} = t_R + (N/2) * W_{50}$

여기에서

$t_R$ 는 머무름 시간입니다,

$W_{50}$ 는 절반 높이에서 피크 너비입니다.

$N$ 은 피크의 절반 높이에서 폭의 배수입니다(약전에 따라 5~20 사이).

## 드리프트 및 변동잡음

드리프트 및 변동잡음은 처리 방법에서 **Signal to noise**를 선택한 경우 계산됩니다.  
선택한 노이즈 계산 유형에 관계없이 계산됩니다.

**드리프트**    드리프트는 선형 회귀의 기울기로 제공됩니다. 드리프트는 먼저 시간 범위의 모든 데이터 포인트를 사용하여 선형 회귀를 결정하여 계산합니다. 시간 범위 내의 모든 데이터 포인트에서 선형 회귀선을 감산하여 드리프트 보정 신호를 구합니다.

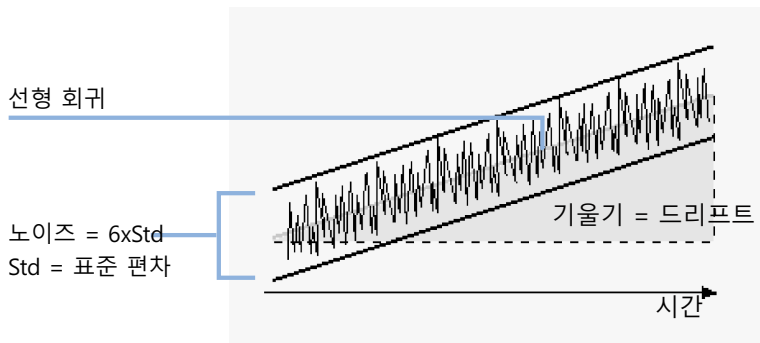


그림105 표준 편차의 6배로 노이즈에 대한 드리프트

곡선 공식:

$$y(x) = a + bX$$



rde:

N	불연속 관찰 수
$X_i$	독립 변수, $i^{\text{th}}$ 관측치
$Y_i$	종속 변수, $i^{\text{th}}$ 관측치

계수:

$$a = \frac{1}{\Delta X} \left( \sum_{i=1}^N X_i^2 * \sum_{i=1}^N Y_i - \left( \sum_{i=1}^N X_i * \sum_{i=1}^N X_i Y_i \right) \right)$$

$$b = \frac{1}{\Delta X} \left( N * \sum_{i=1}^N X_i Y_i - \left( \sum_{i=1}^N X_i * \sum_{i=1}^N Y_i \right) \right)$$

$$\Delta X = N * \sum_{i=1}^N X_i^2 - \left( \sum_{i=1}^N X_i \right)^2$$

**변동잡음** 변동잡음은 ASTM 노이즈 주기에서 중간 데이터 값의 피크 대 피크 노이즈로 결정됩니다(“표준 편차의 6배를 사용한 노이즈 계산” 페이지 162 참조).

변동잡음

노이즈 =  
최대 피크 - 최소

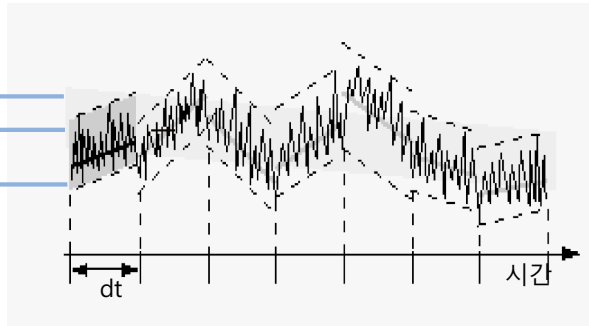


그림106 ASTM 분석법에 의해 결정된 노이즈의 변동잡음

## 피크 비대칭성 및 대칭성 계산

**비대칭성** 피크 비대칭성은 피크 높이의 10%에서 피크 반폭을 비교하여 계산합니다.

$$A_s = \frac{W_{10}}{2W_{f,10}}$$

где:

$A_s$  비대칭성 10%

$W_{10}$  피크 높이의 10%에서 피크 폭

$W_{f,10}$  피크 높이의 10%에서 피크 폭의 앞쪽 절반입니다.

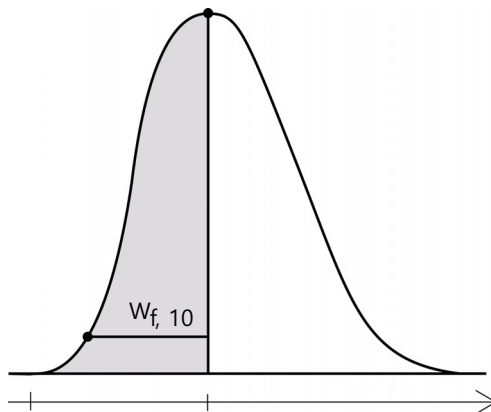


그림107 피크 비대칭성 계산

**대칭성** 대부분의 약전에서 피크의 대칭 인자는 피크 반폭을 5%에서 비교하여 계산합니다. OpenLab에서는 이 계수를 계산하여 테일링 인자로 저장합니다([“대칭 인자, 테일링 인자\(USP\) t”](#) 페이지 177 참조). OpenLab에서 대칭성은 다음 모멘트 방정식을 사용하여 적분기에 의해 의사 모멘트로 계산됩니다.

$$m_1 = a_1 \left( t_2 + \frac{a_1}{1.5H_f} \right)$$

$$m_2 = \frac{a_2^2}{0.5H_f + 1.5H}$$

$$m_3 = \frac{a_3^2}{0.5H_r + 1.5H}$$

$$m_4 = a_4 \left( t_3 + \frac{a_4}{1.5H_r} \right)$$

$$\text{Peak symmetry} = \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{m_3 + m_4}}$$

변곡점이 발견되지 않거나 변곡점이 하나만 보고되면 피크 대칭성은 다음과 같이 계산됩니다.

$$\text{Peak symmetry} = \frac{a_1 + a_2}{a_3 + a_4}$$

где:

$a_i$	슬라이스의 면적
$t_i$	슬라이스의 시간
$H_f$	전면 변곡점의 높이
$H_r$	후면 변곡점의 높이
$H$	정점 높이

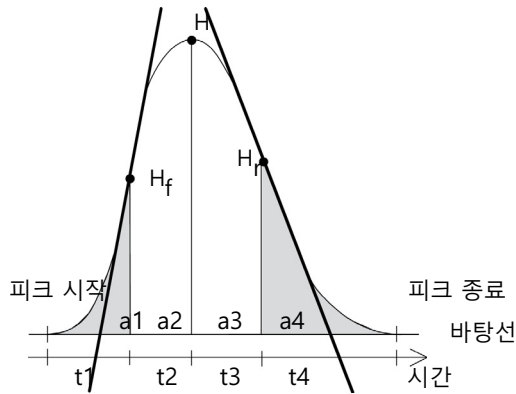


그림108 피크 대칭성 인자 계산

## 시스템 적합성 공식 및 계산

다음 수식은 다양한 시스템 적합성 테스트의 결과를 획득하는 데 사용됩니다. 결과는 **Performance+Noise** 및 **Extended Performance** 보고서를 사용하여 보고됩니다.

주어진 정의에 대해 ASTM 또는 USP가 지정된 경우, 해당 정의는 해당 참조에 명시된 정의를 따릅니다. 그러나 여기에 사용된 기호는 참조에 사용된 기호와 동일하지 않을 수 있습니다.

이 문맥에서 사용되는 참조는 다음과 같습니다.

- ASTM: 섹션 E 685 - 93, 연간 ASTM 표준집, Vol.14.01
- USP: 미국 약전, XX. 개정, 943 - 946페이지  
USP 2022: 미국 약전, USP-NF 2022 3호
- EP: 유럽 약전, 11판
- JP: 일본 약전, 16판

## 성능 테스트 정의

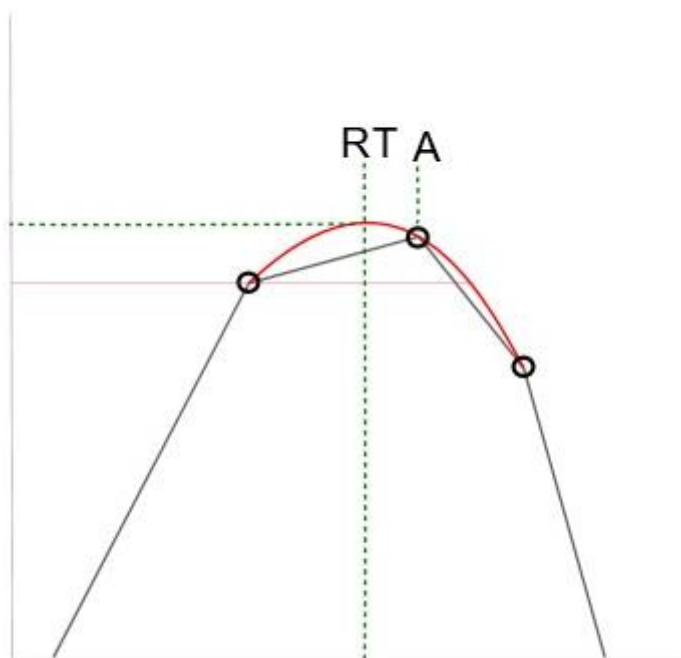
### 참고: 성능 테스트에 사용되는 머무름 시간

피크 성능은 로드된 데이터의 모든 적분 피크와 수동으로 적분된 새로운 피크에 대해 계산할 수 있습니다. 애플리케이션은 내부적으로 계산된 피크 모델 머무름 시간을 사용하여 피크 특성 및 컬럼 성능 값을 계산합니다. 이는 주입 결과, 크로마토그램 또는 보고서에 표시된 머무름 시간과 약간 다를 수 있습니다. 피크 모델 머무름 시간은 보고할 수 있습니다(보고 도움말에서 시스템 적합성에 사용되는 데이터 필드 참조 또는 **PeakModelRT** 검색).

#### 주

아래 그림에 표시되고 피크 적분기에 의해 결정되는 머무름 시간(RT)이 반드시 가장 높은 데이터 포인트와 연관되는 것은 아닙니다. 머무름 시간은 일반적으로 포물선 보간 모델을 사용하여 계산됩니다. 즉, 머무름 시간 RT는 가장 높은 데이터 포인트의 머무름 시간보다 작거나 클 수 있으며 높이도 가장 높은 데이터 포인트보다 높거나 낮을 수 있습니다.

피크 모델 머무름 시간은 노이즈의 간섭을 피하기 위해 신호를 평활화하여 계산합니다. 그 후 피크의 RT에 가장 가까운 가장 높은 데이터 포인트가 결정됩니다. 이 데이터 포인트의 RT가 피크 모델 머무름 시간으로 사용됩니다.



где:

RT

주입 결과에 표시된 머무름 시간

A

성능 계산에 사용되는 피크 모델 머무름 시간

## 개요 성능 테스트

표 10 OpenLab CDS의 약전 값

USP	EP	JP	정의	주입 결과의 컬럼 이름	보고에 사용되는 필드
대칭 인자 또는 테일링 인자	대칭 인자	대칭 인자	$S = \frac{W_5}{2f}$	테일링	Peak_TailFactor
분리 계수	-	분리 계수	$\alpha = \frac{k'_2}{k'_1} = \frac{t_{R2} - t_0}{t_{R1} - t_0}$	선택성	Peak_Selectivity
상대 머무름	상대 머무름	-	RRT 화합물 사용: $\frac{RT_{peak} - t_0}{RT_{ref} - t_0}$	RRT EP	Peak_RelativeRetTime_EP
상대 머무름 시간(RRT)	조정되지 않은 상대 머무름 시간	조정되지 않은 상대 머무름 시간	RRT 화합물 사용 $\frac{RT_{peak}}{RT_{ref}}$	RRT	Peak_RelativeRetTime
USP 2022: 분리능	분리능	분리능	$R_s = 1.18 \cdot \frac{t_{R2} - t_{R1}}{W_{50(1)} + W_{50(2)}}$	Resol.USP 2022 Resol.EP Resol.JP	Peak_Resolution_EP Peak_Resolution_JP
USP: 분리능	-	-	$R = 2 \cdot \frac{t_{R2} - t_{R1}}{W_{t(2)} + W_{t(1)}}$	Resol.USP	Peak_Resolution_USP
이론 단수의 수(효율성)	-	-	$n = 16 \left( \frac{t_R}{W_t} \right)^2$	플레이트 USP	Peak_TheoreticalPlates_USP
USP 2022: 플레이트 단수(효율성) "	플레이트 단수(효율성)	플레이트 단수(효율성)	$n = 5.54 \left( \frac{t_R}{W_{50}} \right)^2$	EP 플레이트 JP 플레이트 플레이트 USP 2022	Peak_TheoreticalPlates_EP Peak_TheoreticalPlates_JP
신호대 잡음비	신호대 잡음비	신호대 잡음비	P2P 또는 ASTM 노이즈 계산 사용: $\frac{S}{N} = \frac{2H}{h}$ 6SD 또는 RMS 노이즈 계산 사용: $\frac{S}{N} = \frac{H}{h}$	S/N	Peak_SignalToNoise
피크 대 골짜기 비율	피크 대 골짜기 비율	피크 대 골짜기 비율	$\frac{p}{v} = \frac{H_p}{H_v}$	P/V 비율	Peak_PeakValleyRatio

## 실제 피크 폭 $W_x$ [분]

$W_x$  = 전체의 x% 높이에서의 피크 폭

где:

$W_t$  변곡점을 통과하는 탄젠트를 바탕으로 교차하여 얻은 탄젠트 피크 폭, 4 시그마

$W_{4.4}$  높이의 4.4%에서의 폭(5 시그마 폭)

$W_5$  높이의 5%에서의 폭(테일링 피크 폭)으로, USP 테일링 인자에 사용됨

$W_{10}$  높이의 10%에서의 폭

$W_{50}$  높이의 50%에서 폭(실제 절반 높이 피크 폭 또는 2.35 시그마).

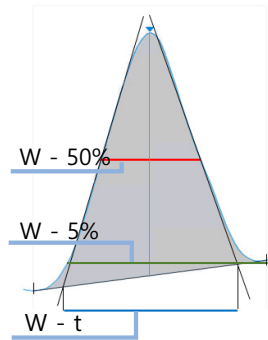


그림109 높이의 x%에서의 피크 폭

## 용량 인자(USP), 용량 비율(ASTM) $k'$

$$k' = \frac{t_R - t_0}{t_0}$$

где:

$t_R$  피크의 머무름 시간[분]

$t_0$  보이드 시간[분](처리 방법에 제공된 대로)



## 대칭 인자, 테일링 인자(USP) t

주

대칭 인자(USP, EP, JP)는 테일링 인자(USP)와 동일합니다. 둘 다 지능형 보고에서 "Peak\_TailFactor"로 사용할 수 있습니다. 표 10 페이지 175 또한 참조하십시오.

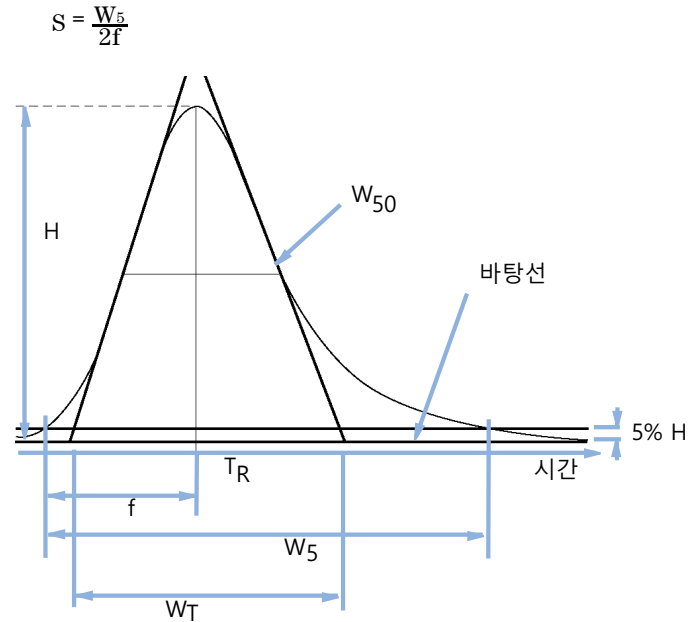


그림110 성능 파라미터

S	대칭 인자, 테일링 인자(USP)
H	피크 높이
$t_R$	머무름 시간
f	피크 높이의 5%에서 측정한 피크 전면과 $t_R$ 사이의 거리(분)
$W_{50}$	높이의 50%에서 피크 폭[분]
$W_5$	피크 높이의 5%에서 피크 폭[분]
$W_t$	탄젠트 피크 폭

## 컬럼당 이론 단수의 수(USP)

탄젠트 분석법(USP, ASTM):

$$n = 16 \left( \frac{t_R}{W_t} \right)^2$$

где:

$t_R$  머무름 시간

$W_t$  탄젠트 폭[분]

반폭 분석법(ASTM, EP, JP, USP 2022):

$$n = 5.54 \left( \frac{t_R}{W_{50}} \right)^2$$

где:

$t_R$  머무름 시간

$W_{50}$  절반 높이에서 피크 폭[분]

## 미터당 이론 단수의 수 N[1/m]

$$N = 100 \cdot \frac{n}{l}$$

где:

$n$  이론 단수의 수

$l$  컬럼의 길이[cm](처리 방법에 제공된 대로)

## 상대 머무름, 선택성

**선택성** 선택성은 첫 번째 피크를 제외한 모든 신호 피크에 대한 알파 값을 계산합니다. 인접한 모든 피크 쌍(피크 1과 2, 피크 1의  $t_R <$  피크 2의  $t_R$ )에 대해 선택성은 다음과 같이 계산됩니다.

$$\alpha = \frac{k'_{i+1}}{k'_i} = \frac{t_{R,i+1} - t_0}{t_{R,i} - t_0}, \alpha > 1$$

где:

$k'_{(x)}$  피크 x에 대한 용량 인자:  $(t_{Rx}-t_0)/t_0$

**상대 머무름(EP)** RRT(EP)는 RRT 기준 피크가 정의되고 식별된 경우에만 계산할 수 있습니다. **알파** 값은 피크가 RRT 기준의 왼쪽에 있는 경우 1 미만이고, 피크가 RRT 기준의 오른쪽에 있는 경우 1을 초과합니다.

$$\frac{RT_{peak} - t_0}{RT_{ref} - t_0}$$

## 분리능(USP, ASTM) R

탄젠트 분석법(피크 1 및 2와 관련, 피크 1의  $t_R <$  피크 2의  $t_R$ ,  $t_R$ (분))

$$R = 2 \cdot \frac{t_{R2} - t_{R1}}{W_{t(2)} + W_{t(1)}}$$

где:

$t_R$  머무름 시간

$W_t$  탄젠트 폭[분]

## 분리능(EP/JP) Rs

분리능(USP 2022), 분리능(JP) 및 분리능(EP)은 반폭 방법으로 계산됩니다(성능 보고서에 사용된 해상도).

$$Rs = 1.18 \cdot \frac{t_{R2} - t_{R1}}{W_{50(1)} + W_{50(2)}}$$

где:

$t_R$  머무름 시간

$W_{50}$  절반 높이에서 피크 폭[분]

## 피크 대 골짜기 비율(EP/JP)

피크 대 골짜기 비율(주입 결과의 **p/v ratio**)은 피크 분리의 품질을 나타내기 위해 계산됩니다. 유럽 및 일본 약전(EP, JP)을 사용하여 계산됩니다.

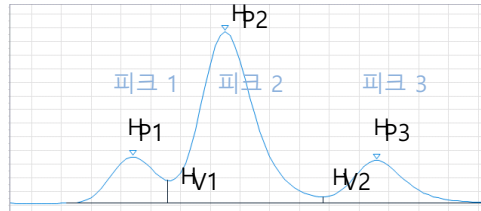
### 주

이 값은 고급 적분 파라미터에서 설정한 피크 대 골짜기 비율과 다릅니다!

피크 대 골짜기 비율은 골짜기로 구분된 피크에 대해 계산됩니다.

$PV = \text{피크 높이} / \text{골짜기 높이}$

피크의 왼쪽과 오른쪽에 골짜기가 있는 경우, 전면과 테일 모두에 대해 피크 대 골짜기 비율이 계산됩니다. 최소 P/V가 표시됩니다.



피크 1의 경우:

$$PV = \frac{H_{P1}}{H_{V1}}$$

피크 2의 경우:

$$PV_F = \frac{H_{P2}}{H_{V1}}$$

$$PV_T = \frac{H_{P2}}{H_{V2}}$$

$$PV = \text{Min}(PV_F, PV_T)$$

피크 3의 경우:

$$PV = \frac{H_{P3}}{H_{V2}}$$

где:

PV	피크 대 골짜기 비율
$PV_F$	피크 대 골짜기 비율, 전면
$PV_T$	피크 대 골짜기 비율, 테일

$H_{Px}$	피크 x의 높이
$H_{Vx}$	골짜기 x의 높이

피크에 골짜기로 구분되는 여러 개의 솔더가 있는 경우, 각 솔더에 대해 피크 대 골짜기 비율이 계산됩니다.

골짜기의 정의:

- 두 개의 연속된 피크 사이에 높이와 시간이 공유되는 구간입니다.
- 바탕선은 두 개의 연속된 피크 간에 공유됩니다.
- 절대 바탕선 높이는  $10^{-5}$ 보다 큼니다.

피크 대 골짜기 계산은 항상 절대값을 사용합니다. 따라서 하나 이상의 피크가 음수인 경우에도 피크 대 골짜기 비율은 항상 양수로 표시됩니다.

## 주

너무 적은 수의 데이터 포인트로 구성된 신호의 경우 피크 대 골짜기 비율이 계산되지 않습니다.

## UI 용어집

### A

**Advanced**  
고급

**Advanced+**  
고급+

**After calibration standards**  
검량 표준물질 후

**After each run**  
각 실행 후

**Amount per response**  
감응당 양

**Amount per Response**  
감응당 양

**Apply correction factors to normalized concentrations**  
정규화 농도에 보정 계수 적용

**Area**  
면적

**Area reject**  
면적 제한

**Area Reject**  
면적 제한

**Area Sum**  
면적 합

**Area sum off**  
면적 합 꺼짐

**Area sum on**  
면적 합 켜짐

**Area sum slice**  
면적 합 슬라이스

**Area Sum Slice**  
면적 합 슬라이스

**Area%**  
면적%

### Average RF

평균 RF

### B

**Baseline at valleys**  
골짜기에서의 바탕선

**Baseline backwards**  
바탕선 뒤로 이동

**baseline point**  
바탕선 지점

### C

**Calculate mass %**  
질량 % 계산

**Calibration**  
검량

**Classical**  
고전 아형

**Clear**  
지우기

**Clear all calibration**  
모든 검량 지우기

**Clear all Calibration**  
모든 검량 지우기

**Clear Calibration at Level**  
레벨에서 검량 지우기

**Closest**  
가장 가까운

**Closest nested**  
가장 가까운 겹친

**Compound Table**  
화합물 테이블

**Compounds**  
화합물

**Concentration**  
농도

**Concentration and corrected amount calculation**  
농도 및 보정량 계산

### Curve

곡선

### Curve calculation

곡선 계산

### Custom

사용자 정의

### D

**detector response**  
검출기 감응

**Dil. factor**  
희석률

**Disable end of peak detection**  
피크 검출 종료 비활성화

**Disable End of Peak Detection**  
피크 검출 종료 비활성화

**Drop**  
드롭

### E

**End**  
끝

**Exponential**  
지수

**Exponential skim**  
지수 스킴

**Extended Performance**  
확장 성능

### F

**Factor**  
계수

**First**  
첫 번째

**Force**  
힘

**Force origin**  
힘 기원

**Force peak end**

강제 피크 종료

**Forced Origin**

강제된 원점

**found**

찾음

**From average per level**

레벨별 평균에서

**From individual calibration points**

개별 검량점에서

**Front exponential skim**

전방 지수 스킴

**Front skim height ratio**

전면 스킴 높이 비율

**Front Skim Height Ratio**

전면 스킴 높이 비율

**Front tangent skim**

전방 탄젠트 스킴

**G**

**Gaussian**

가우시안

**General**

일반

**H**

**Height**

높이

**height reject**

높이 제한

**Height reject**

높이 제한

**Height Reject**

높이 제한

**Height%**

높이%

**Identification**

식별

**Include**

포함

**Include identified peaks**

식별된 피크 포함

**Include origin**

원점 포함

**Injection List**

주입 목록

**Injection Results**

주입 결과

**Integration**

적분기

**integration events**

적분기 이벤트

**Integration Events**

적분기 이벤트

**Integration Off**

적분 꺼짐

**L**

**Largest area**

최대 면적

**Largest height**

최대 높이

**Last**

마지막

**Left**

왼쪽

**Linear**

선형

**log/log**

로그/로그

**M**

**Manual Factor**

수동 인자

**Minimum area**

최소 면적

**Mode**

모드

**Moving average**

이동 평균

**MS Peak Purity**

MS 피크 순도

**MS Sample Purity**

MS 시료 순도

**N**

**Negative peak**

마이너스 피크

**Negative Peaks On**

마이너스 피크 켜짐

**Never**

안 함

**New Exponential**

새 지수

**No penetration**

침투 없음

**No penetrations**

침투 없음

**Non overlap**

겹치지 않음

**None.**

없음

**Norm amount**

기준 양

**Normalized concentration**

정규화 농도

**O**

**Off**

꺼짐

**On**

켜기

**Origin**

원점

**Overall**

전체

**Overlap**

오버랩

**P**

**p/v ratio**

p/v 비율

**Peak Details**

피크 세부 정보

**Peak match**

피크 일치

**peak width**

피크 폭

**Performance+Noise**

성능+노이즈

**Properties**

특성

**Q**

**Quantify each peak individually**

각 피크 개별 정량화

**R**

**Range 1**

범위 1

**Range 9**

범위 9

**Ref. correction**

기준 보정

**Reference**

참조

**Reset baseline**

바탕선 재설정

**Reset baseline at valley**

골짜기에서 바탕선 재설정

**Response per amount**

양당 감응

**Response/RT**

감응/RT

**RF definition**

RF 정의

**Right**

오른쪽

**RT update factor (%)**

RT 업데이트 계수(%)

**RT update factor [%]**

RT 업데이트 계수 [%]

**Run type**

실행 유형

**Run Type**

실행 유형

**S**

**Sample Purity Results**

시료 순도 결과

**Scaled response**

스케일링된 감응

**Set Baseline from Range**

범위에서 바탕선 설정

**Set Low Baseline from Range**

범위에서 낮은 바탕선 설정

**Shoulder Sensitivity**

숄더 감도

**Shoulders Mode**

숄더 모드

**Signal to noise**

신호 대 잡음비

**Skim valley ratio**

스킴 골짜기 비율

**Skim Valley Ratio**

스킴 골짜기 비율

**Slope Sensitivity**

기울기 감도

**Spectra**

스펙트럼

**Split peak**

갈라진 피크

**Split Peak**

갈라진 피크

**Standard**

표준

**Start**

시작

**Start no penetration**

침투 없음 시작

**Start-negA.**

시작-마이너스 면적

**Straight**

스트레이트

**T**

**Tail skim height ratio**

꼬리 스킴 높이 비율

**Tail Skim Height Ratio**

꼬리 스킴 높이 비율

**Tangent skim**

탄젠트 스킴

**Tangential**

탄젠트

**Target**

표적

**Threshold**

임계값

**Time (min)**

시간(분)

**Time Stop (min)**

시간 정지(분)

**Time Stop [min]**

시간 정지[분]



## U

### **Update peak height**

피크 높이 업데이트

### **Update RT**

RT 업데이트

### **Use baseline from range**

범위에서 바탕 설정

### **Use Baseline from Range**

범위에서 바탕선 사용

## V

### **Valley**

골짜기

### **Valley to valley**

골짜기 대 골짜기

### **Value**

값

## W

### **Weighting Method**

가중치법

### **Width**

폭

# 온라인 도움말

이 안내서에는 Agilent OpenLab CDS에서 사용되는 작동 원리, 계산 및 데이터 분석 알고리즘에 대한 참조 정보가 포함되어 있습니다. 여기에 포함된 정보는 검증 전문가가 시스템 검증 작업을 계획하고 실행하는 데 사용될 수 있습니다.

- ChemStation 알고리즘을 통한 적분
- EZChrom 알고리즘을 통한 적분
- 피크 식별
- 검량
- 정량
- UV 스펙트럼 분석
- 질량 분석
- 시스템 적합성

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

© Agilent Technologies Inc. 2012-2024  
간행 판 : 01/2024

문서 번호: D0028019ko Rev. A

