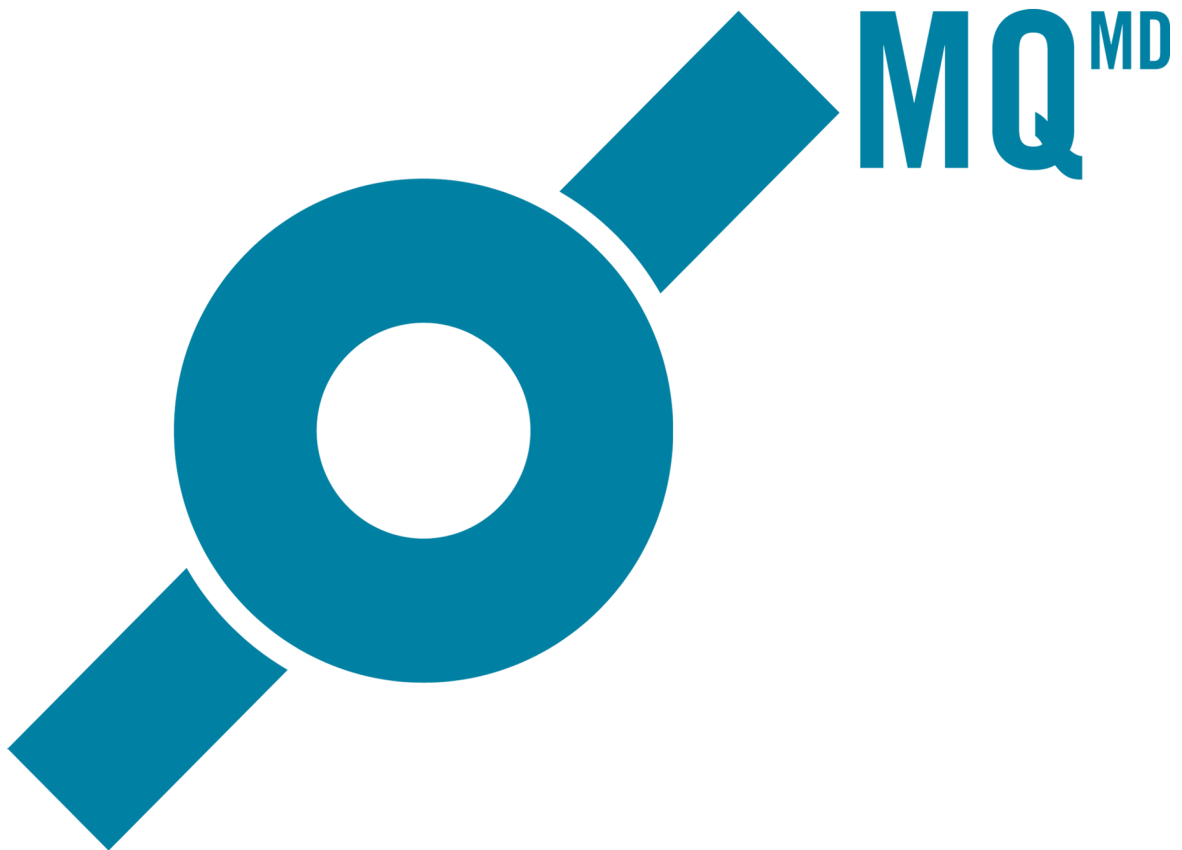

MultiQuant™ MD 3.0.3 소프트웨어

참조 안내서



본 문서는 SCIEX 장비를 구매한 고객들이 SCIEX 장비를 작동하는 데 이용할 수 있도록 제공됩니다. 본 문서는 저작권 보호를 받으며 본 문서 또는 본 문서의 어느 일부에 대한 복제도 엄격히 금지됩니다. 단, SCIEX가 서면으로 허가한 경우는 제외됩니다.

이 문서에서 설명될 수 있는 소프트웨어는 사용권 하에 제공됩니다. 사용권에서 특별히 허용된 경우를 제외하고 어떠한 수단으로든 소프트웨어를 복사, 수정 또는 배포하는 것은 법률 위반입니다. 또한, 사용권은 소프트웨어를 어떠한 목적으로든 디스어셈블하거나 리버스 엔지니어링하거나 디컴파일하는 것을 금할 수 있습니다. 제품 보증은 그 안에 명시되어 있습니다.

이 문서의 일부는 다른 제조업체 및/또는 제조업체의 제품의 참조자료가 될 수 있으며, 여기에는 각 소유자의 상표에 따라 상표 및/또는 기능으로 등록된 부품의 이름이 포함될 수 있습니다. 이러한 이용의 목적은 SCIEX가 장비에 포함시키기 위해 공급하는 해당 제조업체 제품을 지명하는 것에만 국한되며, 이는 타인이 이러한 제조업체 및/또는 제조업체의 제품 이름을 상표로 이용할 수 있는 권한 및/또는 허가를 의미하거나 타인이 이러한 이름을 상표로 이용하도록 허용하지 않습니다.

SCIEX 보증은 제품 판매 또는 허가 시점에 제공되는 명시적 보증에만 국한되며 SCIEX의 독자적 및 독점적 진술, 보증 및 의무입니다. SCIEX는 법령이나 그 외의 법률 또는 거래 과정이나 거래의 관습으로 인한 발생 여부와 관계없이 상품성 보증 또는 특정 목적에 대한 적합성 보증을 포함하나 이에 국한되지 않는 명시적 혹은 암묵적 보증 등 기타 어떤 종류의 보증도 제공하지 않습니다. 이와 같은 모든 보증은 명확히 부인되며 직간접적 손해를 포함해 구매자가 여기에 설명된 장비를 사용할 수 있는 모든 용도 또는 이로 인해 발생한 모든 불리한 상황에 대해 어떠한 책임 또는 불확정 책임도 지지 않습니다.

체외 진단용.

Rx only.

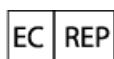
모든 국가에서 사용할 수 없음. 세부 정보는 SCIEX 영업 담당자에게 문의하십시오.

AB Sciex는 SCIEX로 사업을 운영하고 있습니다.

여기에서 언급된 상표는 AB Sciex Pte. Ltd. 또는 각 소유주의 재산입니다.

AB SCIEX™는 사용 허가를 받아 사용되고 있습니다.

© 2017년 AB Sciex



AB Sciex Netherlands B.V.
1e Tochtweg 11,
2913LN Nieuwerkerk aan den IJssel
Netherlands



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPORE 739256

IVD

CE

목차

1 소프트웨어 소개.....	7
소프트웨어 도움말.....	7
파일 유형.....	8
문의.....	8
기술 지원 부서.....	8
2 파일 메뉴.....	9
정량화 방법 가져오기.....	10
내보내기 하위 메뉴.....	11
결과 표 내보내기.....	11
결과 표 내보내기-메트릭.....	13
LIMS로 전송.....	14
3 편집 메뉴.....	15
결과 표 방법 수정.....	17
프로젝트 단위 및 교정 기본값.....	18
프로젝트 보안 내보내기 설정.....	18
4 프로세스 메뉴.....	19
교정 내보내기.....	19
외부 교정 가져오기.....	20
5 감사 트레일 메뉴.....	22
감사 트레일 뷰어.....	22
감사 트레일 뷰어에서 감사 트레일 결과 보기.....	22
키워드 검색 수행.....	24
감사된 이벤트 필터링.....	24
감사 트레일 뷰어 내보내기.....	26
감사 트레일 뷰어 인쇄.....	26
감사 트레일 관리자.....	26
감사 맵 정보.....	27
감사 맵 생성.....	27
감사 맵 변경.....	30
감사 맵 편집.....	31
포함된 감사 구성 보기.....	33
6 도움말 메뉴.....	35
7 결과 표.....	36
구성 요소 및 그룹 목록.....	37
결과 표 오른쪽 클릭 메뉴.....	38
현재 분석 물질의 실제 농도를 모두 적용.....	39
열 설정.....	39
샘플 유형 필터.....	41

목차

숨겨진 행 보기.....	41
Results Table 대화 상자.....	42
샘플 선택.....	42
방법 선택.....	43
대표 샘플 선택.....	44
구성 요소 정의.....	45
통합 정의.....	47
이상값 설정.....	50
결과 열 표.....	52
8 피크 검토.....	60
수동 통합.....	60
적용.....	61
피크 검토 팁.....	61
피크 검토 오른쪽 클릭 메뉴	62
Peak Review Options 대화 상자: Appearance 탭.....	62
Peak Review Options 대화 상자: Zooming 탭.....	65
피크 검토 제목 형식 설정.....	66
매개 변수 복사.....	67
매개 변수 붙여넣기.....	67
피크를 '찾을 수 없음'으로 설정.....	68
피크 사용.....	68
구성 요소 정량화 방법 업데이트.....	68
그룹 정량화 방법 업데이트.....	68
통합 매개 변수를 그룹 내 샘플에 적용하기.....	69
피크를 원본 방법으로 되돌리기.....	69
구성 요소의 모든 피크 되돌리기.....	69
9 병렬 샘플 검토.....	70
병렬 샘플 검토 수행.....	70
10 교정 창.....	72
Regression Options 대화 상자.....	72
교정 팁.....	73
교정 오른쪽 클릭 메뉴.....	73
11 통계 표.....	75
통계 표 팁.....	76
통계 표 오른쪽 클릭 메뉴.....	76
12 메트릭 플롯.....	77
메트릭 플롯 생성.....	77
메트릭 플롯 설정 저장.....	77
메트릭 플롯 팁.....	77
메트릭 플롯 오른쪽 마우스 클릭 메뉴.....	78
Regression 대화 상자.....	79
13 정량화 방법 편집기.....	80
구성 요소 탭.....	80
그룹 하위 메뉴.....	81
내부 표준 물질 하위 메뉴.....	83
통합 탭	84
구성 요소 강조 대화 상자.....	85

Update Retention Time 대화 상자.....	85
이상값 설정 탭	86
14 정량화 분석 워크플로우 자습서.....	88
교정 곡선 정보.....	88
선행 조건.....	88
결과 표에 표시된 열 수정하기.....	88
SignalFinder™ 통합 알고리즘.....	89
피크 통합 매개 변수 설정.....	90
결과 표 생성.....	91
피크 검토.....	94
교정 곡선 수정.....	95
샘플 통계 검토.....	96
MQ4 통합 알고리즘을 사용하는 프로세스 데이터.....	97
피크 통합 매개 변수 설정.....	97
결과 표 생성.....	98
피크 검토.....	102
교정 곡선 수정.....	103
샘플 통계 검토.....	104
통합 알고리즘.....	105
SignalFinder 통합 알고리즘 정보.....	105
SignalFinder™ 이용한 프로세스 데이터 매개 변수.....	108
MQ4 통합 알고리즘 매개 변수.....	112
선택적인 작업.....	115
메트릭 플롯 생성.....	115
사용자 지정 열 생성.....	116
정량화 방법 파일 및 포함된 방법 정보.....	116
A 통합 알고리즘 매개 변수.....	117
SignalFinder 통합 알고리즘 매개 변수.....	117
MQ4 통합 알고리즘 매개 변수.....	120
B 회귀 수식.....	123
가중치 인자.....	124
회귀.....	124
선형.....	125
영점을 이용한 선형.....	125
평균 응답 인자.....	125
이차.....	126
제곱.....	126
Wagner.....	126
Hill.....	127
최종 농도 계산.....	127
선형.....	127
영점을 이용한 선형 및 평균 감응 인자.....	127
이차.....	127
제곱.....	127
Wagner.....	127
Hill.....	128
C 보고서.....	129
보고서 생성.....	129

목차

사용자 지정 보고서 템플릿 생성.....	130
보고서 템플릿.....	131
보고서 템플릿 태그.....	133
D 상대 노이즈 및 신호 대 노이즈 계산.....	145
SignalFinder 통합 알고리즘 사용 시 신호 대 노이즈 참고 사항.....	149
E 소프트웨어 아이콘.....	150
F MultiQuant™ MD 소프트웨어 액세스.....	156
보안 설정.....	159
개정 이력.....	162

본 문서는 MultiQuant™ MD 소프트웨어에서 사용 가능한 기능에 대해 설명합니다.

소프트웨어 액세스는 Analyst® MD 소프트웨어의 사용자에게 할당된 역할에 기반합니다. 각 사용자는 올바른 소프트웨어 액세스 권한을 할당받아야 합니다.

다음과 같은 Microsoft 운영 체제의 영어 버전만 지원됩니다.

- SP1을 포함한 Windows 7 (32비트 및 64비트)
- Windows 10

주의: 숫자, 통화, 날짜 및 시간은 **English (United States)** 형식으로 설정해야 합니다. 형식을 다른 값으로 설정하면 오류 데이터가 발생할 수 있습니다.

감사 트레일 및 보안 기능이 있는 MultiQuant™ MD 소프트웨어는 전체 라이선스가 필요하며 Analyst® MD 소프트웨어를 설치해야 합니다.

소프트웨어에서 데이터를 출력하는 제어 방식은 Results Tables를 내보내고 LIS에 전송하여 보고하는 것입니다. Results Tables에서 복사하여 붙여넣기 등으로 생성된 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않습니다. 규제된 사용 목적에 따라 사용자는 이러한 통제되지 않은 출력 방법을 사용하지 않습니다.

참고: MultiQuant™ MD 소프트웨어는 Analyst® MD 소프트웨어 화면 잠금 정보를 사용합니다. MultiQuant™ MD 소프트웨어에서 Help를 클릭합니다.

참고: 파일 및 폴더 구조는 크로마토그램을 볼 수 있는 방식으로 관리해야 합니다. 데이터를 이동시키는 경우에는 전체 프로젝트를 이동시켜 파일 구조를 유지하십시오.

소프트웨어 도움말

소프트웨어에는 소프트웨어 기능에 대한 추가 정보를 제공하는 도구 설명과 메시지가 포함되어 있습니다.

- 필드를 사용할 수 없는 경우에는 필드 위로 커서를 이동시켜 도구 설명을 표시함으로써 해당 기능을 사용할 수 없는 이유를 확인할 수 있습니다. 추가 정보에는 필드를 활성화하는 방법 또는 필드 활성화에 필요한 보안 설정이 포함되어 있습니다.
- 오류 메시지에는 기능을 사용하는 데 필요한 보안 설정에 대한 정보가 포함됩니다.

파일 유형

표 1-1 소프트웨어 파일 유형

파일 유형	설명
*.qsession	MultiQuant 소프트웨어 Results Table. 정량화 감사 트레이일 데이터 포함.
*.qmethod	MultiQuant 소프트웨어 정량화 방법.
*.qmap	MultiQuant 소프트웨어 감사 맵.
*.mqcal	외부 교정 파일.
*.cset	열 설정 파일.

문의

SCIEX 지원 부서

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

고객 교육

- 북아메리카: NA.CustomerTraining@sciex.com
- 유럽: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 유럽 및 북미 이외 지역의 연락처 정보는 sciex.com/education을 참조하십시오.

온라인 학습 센터

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/education)

SCIEX 제품의 사이버보안에 관한 최신 지침은 sciex.com/productsecurity를 참조하십시오.

기술 지원 부서

SCIEX 및 전 세계 대리점은 충분히 교육을 받은 서비스 및 기술 전문가를 보유하고 있습니다. 이 전문가들이 발생할 수 있는 시스템 문제 또는 모든 기술적인 문제에 답변해 드립니다. 자세한 정보는 SCIEX 웹사이트 sciex.com을 방문하십시오.

표 2-1 파일 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
New Results Table	데이터 세트를 정량화한 뒤 Results Table을 생성하십시오. 처리할 데이터 파일을 비롯해 적용할 정량화 방법도 선택하십시오. Results Table 대화 상자 페이지의 42 내용을 참조하십시오.
New Quantitation Method	샘플이 선택된 후에 빈 정량화 Method Editor가 생성됩니다. 일반적으로 사용자는 New Results Table 마법사 진행 과정에서 방법을 생성합니다. 그러나 이 명령은 사용자가 방법을 생성하고 싶지만 Results Table을 생성하는 샘플 컬렉션에 즉시 적용하고 싶지 않을 때 유용합니다. <ul style="list-style-type: none"> 탐색 창은 선택된 프로젝트의 Data 폴더에서 사용할 수 있는 하위 폴더, wiff 파일, 샘플을 표시합니다. 하위 폴더 또는 wiff 파일을 보려면 개별 폴더를 확장하십시오. wiff 파일을 확장하면 사용 가능한 샘플이 표시됩니다.
Open Results Table	이전에 저장한 Results Table을 엽니다. 명령을 선택하면 표준 Open 대화 상자가 열립니다. 결과 표 페이지의 36 내용을 참조하십시오.
Open Quantitation Method	이전에 저장한 정량화 방법을 엽니다. 명령을 선택하면 표준 Open 대화 상자가 열립니다. 정량화 방법 편집기 페이지의 80 내용을 참조하십시오.
Save	활성 Results Table 또는 Quantitation Method Editor를 파일에 저장할 때 사용합니다. Results Table 또는 Quantitation Method Editor가 저장되지 않은 경우에는 사용자에게 파일 이름 프롬프트가 제시됩니다. 그렇지 않은 경우에는 이전 버전을 덮어씁니다.
Save As	활성 Results Table 또는 Quantitation Method Editor를 새 파일에 저장할 때 사용합니다.
Recent Results Table	최근에 사용된 각 Results Table의 하위 메뉴 항목을 포함합니다. 해당 파일을 열려면 항목들 중 하나를 선택하십시오.
Recent Quantitation Methods	최근에 사용된 각 정량화 방법의 하위 메뉴 항목을 포함합니다. 해당 파일을 열려면 항목들 중 하나를 선택하십시오.

표 2-1 파일 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Import	텍스트 파일로부터 새 정량화 방법을 생성합니다. 일반적으로 사용자는 New Quantitation Method 명령(정량화 방법 편집기 페이지의 80 참조)을 사용하거나 새 Results Table을 생성하는 과정(결과 표 페이지의 36 참조)에서 방법을 수동으로 생성합니다. 이 명령은 사용자가 정량화 방법을 생성하거나 수정하고자 할 때 가장 유용합니다. 이 경우 수동으로 방법을 생성한 뒤 Quantitation Method as Text 명령을 사용하십시오.
Export	정량화 방법을 .qmethod 또는 .txt 파일로 내보내는 명령을 포함합니다. 내보내기 하위 메뉴 페이지의 11 내용을 참조하십시오. 소프트웨어에서 데이터를 출력하는 제어 방식은 Results Tables를 내보내고 LIMS에 전송하여 보고하는 것입니다. Results Tables에서 복사하여 붙여넣기 등으로 생성된 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않습니다. 사용자는 규제된 목적을 위해 제어되지 않은 출력 방법을 사용해서는 안 됩니다.
Transfer to LIMS	이 기능을 활성화하려면 LIMS 라이선스 파일이 필요합니다. LIMS로 전송 페이지의 14 내용을 참조하십시오.
Export and Save Results Table	Results Tables를 내보내는 것은 데이터 출력의 제어 방식 중 하나입니다.
Create Report and Save Results Table	Reporter 소프트웨어를 이용하여 Microsoft Word에서 보고서를 생성합니다. 보고서 페이지의 129 내용을 참조하십시오. 사용자 지정 템플릿을 생성하는 경우에는 사용자가 템플릿 유효성을 검사해야 합니다. 사용자는 보고서 템플릿 편집기의 숫자 형식을 편집할 수 있습니다. 숫자 형식이 템플릿에 지정되어 있지 않은 경우에는 Results Table Column Setting 의 형식이 보고서에 사용됩니다.
Exit	프로그램에서 나갑니다. 사용자에게 저장되지 않은 데이터를 저장할 것인지 묻는 프롬프트가 제시됩니다.

정량화 방법 가져오기

1. **File > Import > Quantitation Method from Text**을 클릭하십시오.
2. 텍스트 파일을 선택하십시오.
3. 대표 샘플을 선택하십시오.

Quantitation Method Editor가 열립니다.

4. 방법을 이후 새 데이터 세트의 정량화에 사용할 수 있도록 *.qmethod 형식으로 저장합니다.

내보내기 하위 메뉴

소프트웨어에서 데이터를 출력하는 제어 방식은 Results Tables를 내보내고 LIMS에 전송하여 보고하는 것입니다. Results Tables에서 복사하여 붙여넣기 등으로 생성된 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않습니다. 규제된 사용 목적에 따라 사용자는 이러한 통제되지 않은 출력 방법을 사용하지는 않습니다.

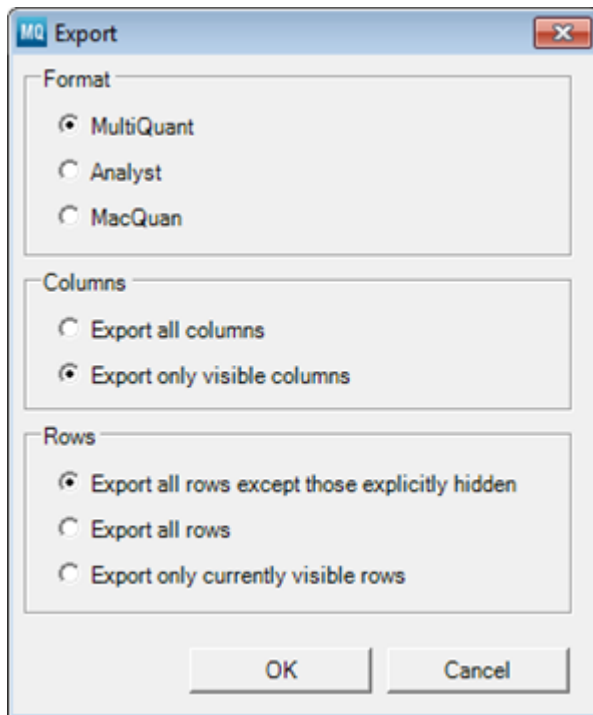
표 2-2 내보내기 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Results Table-Metric	활성 Results Table의 정보를 포함하는 탭 구분 텍스트 파일을 생성합니다. 결과 표 내보내기-메트릭 페이지의 13 내용을 참조하십시오.
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	정량화 방법을 새 파일로 내보냅니다. Results Table이 생성되면 표를 생성하는 데 사용된 정량화 방법 사본이 표에 내부적으로 저장됩니다. 이 기능은 원본 정량화 방법이 삭제되었거나 수정되었으며 사용자가 Results Table을 생성하는 새 샘플 배치에 기존 방법을 적용하고자 할 때 유용합니다.
Results Table's Quantitation Method as Text	이 방법의 사본을 텍스트 형식으로 내보냅니다. Results Table이 생성되면 표를 생성하는 데 사용된 정량화 방법 사본이 표에 내부적으로 저장됩니다.
Quantitation Method as Text	이러한 파일에는 머리글 행과 각 구성 요소(분석 물질 또는 내부 표준 물질)의 행이 포함됩니다. 구성 요소 이름, 질량 범위, 각 통합 매개변수 등에 대한 해당 열이 존재합니다. 정량화 방법을 MultiQuant™ MD 소프트웨어에서는 사용할 수 없습니다. 통합 매개 변수를 지정하는 열의 머리글 행이 변경되거나 열 자체가 삭제되면 해당 통합 매개 변수의 User Integration Defaults에서 지정된 기본값이 모든 구성 요소에 적용됩니다. 다른 열의 머리글 행이 변경되거나 삭제되는 경우에는 방법을 가져올 수 없습니다. 사용자는 방법을 열고 가져온 정량화 방법에 모든 필수 변경 사항이 적용되었는지 확인해야 합니다. 표 2-1 내용을 참조하십시오.

결과 표 내보내기

참고: 제조업체는 데이터가 소프트웨어에서 내보내진 후 직간접적 손해를 비롯한 어떠한 손해에 대해서도 책임 또는 불확정 책임을 지지 않습니다. Results Table은 열 설정의 숫자 형식과 무관하게 전체 정밀도로 내보내집니다.

그림 2-1 Export 대화 상자



레이블	설명
형식	
MultiQuant	전체 정밀도로 내보내려면 선택하십시오. 이 형식에서는 텍스트 파일이 Results Table 에 표시되는 열 이름을 동일하게 사용하는 머리글 행을 포함합니다. 이는 Results Tables 를 내보낼 때 권장되는 형식입니다.
Analyst	열 설정에서 정의된 정밀도로 내보내려면 선택하십시오. 이 형식은 Analyst® MD 소프트웨어 정량화 Results Tables 에서 내보내는 것과 동일합니다. 이 형식과 이전 형식의 차이점은 열 머리글에 미묘하게 다른 이름이 사용되는 경우가 종종 있으며(Analyst® MD 소프트웨어 형식을 일치시킬 때) 각 분석 물질에 대해 교정을 설명하는 추가 머리글 행이 존재한다는 것입니다.
MacQuan	이 형식은 Analyst® MD 소프트웨어와 유사하지만 열 머리글 이름이 MacQuan 정량화 패키지에서 사용하는 것과 일치합니다.
열	
Export all columns	Results Table 에 현재 숨겨진 열을 비롯한 모든 가능 필드를 내보내려면 선택하십시오.

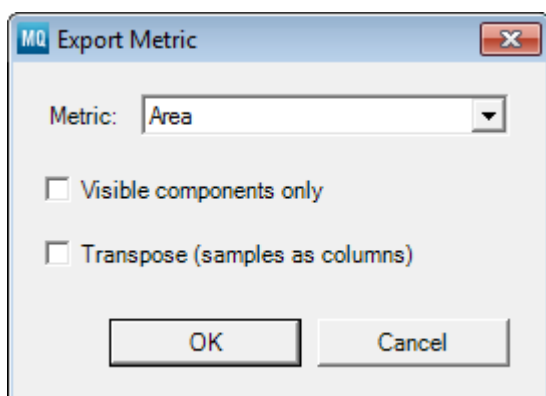
레이블	설명
Export only visible columns	Results Table 에 현재 표시된 열만 내보내려면 선택하십시오. 또한 사용자는 Results Table Column Settings 명령을 이용하여 표시할 열을 선택할 수 있습니다. 결과 표 오른쪽 클릭 메뉴 페이지의 38 내용을 참조하십시오.
행	
Export all rows except those explicitly hidden	특정 필터링으로 숨겨진 행을 제외한 모든 행을 내보내려면 선택하십시오. 소프트웨어 아이콘 페이지의 150 내용을 참조하십시오. Sample Type 필터링 또는 Component 필터링으로 인해 숨겨진 행들이 내보내집니다.
Export all rows	모든 행을 내보내려면 선택하십시오(모든 샘플의 모든 구성 요소).
Export only currently visible rows	Results Table 에 현재 표시된 행만 내보내려면 선택하십시오. Sample Type 필터링 또는 Component 필터링으로 인해 숨겨진 행들은 포함되지 않습니다.

결과 표 내보내기-메트릭

참고: 제조업체는 데이터가 소프트웨어에서 내보내진 후 직간접적 손해를 비롯한 어떠한 손해에 대해서도 책임 또는 불확정 책임을 지지 않습니다. **Results Table**는 열 설정의 숫자 형식과 무관하게 전체 정밀도로 내보내집니다.

활성 Results Table의 정보를 포함하는 탭 구분 텍스트 파일을 생성할 때 사용합니다.

그림 2-2 Export Metric 대화 상자



레이블	설명
Metric	내보내기 할 필드를 선택하십시오. 결과 열 표 페이지의 52 내용을 참조하십시오.
Visible components only	이 옵션을 선택하면 최소 한 개 이상의 해당 행이 Results Table에 표시된 구성 요소만 파일로 내보내집니다. 이 옵션을 선택하지 않으면 모든 구성 요소의 정보가 내보내집니다.
Transpose (samples as columns)	이 옵션을 선택하면 결과 파일에 각 열에 샘플이 포함되고 각 구성 요소(분석 물질 또는 내부 표준 물질)에 행이 포함됩니다. 이 옵션을 선택하지 않는 경우에는 각 구성 요소의 열과 각 샘플의 행이 존재합니다.

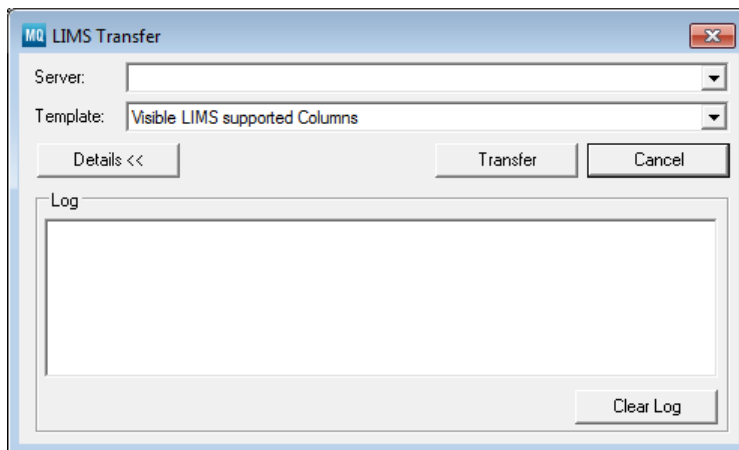
LIMS로 전송

이 명령은 Results Table이 열려 있을 때만 사용할 수 있습니다. 이 기능을 활성화하려면 LIMS 라이선스 파일이 필요합니다.

소프트웨어에서 데이터를 출력하는 제어 방식은 Results Tables을 내보내고 LIMS에 전송하여 보고하는 것입니다. Results Tables에서 복사하여 붙여넣기 등으로 생성된 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않습니다. 사용자는 규제된 목적을 위해 제어되지 않은 출력 방법을 사용해서는 안 됩니다.

1. 라이선스를 활성화하려면 **Help > Install License**를 클릭하십시오.

그림 2-3 LIMS Transfer 대화 상자



2. **Server** 필드에: **http:\\server IP address;port number(http:\\서버 IP 주소;포트 번호)** 형식으로 서버 이름을 입력합니다.
3. **Template** 목록에서 템플릿을 선택하십시오.
4. **Transfer**를 클릭합니다.

표 3-1 편집 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Clear	현재 선택 사항을 지웁니다. 이 기능은 Quantitation Method Editor 의 Components 탭에 선택된 행이 한 개 이상일 때 적용됩니다.
Copy	Results Table 이 활성화 상태이면 이 명령이 표의 선택된 부분을 복사하여 클립보드에 붙여넣습니다. Peak Review 또는 Calibration 플롯이 활성화 상태이면 플롯 그림이 복사됩니다.
Paste	Results Table 이 선택된 편집 가능 영역을 포함한 상태로 활성화된 경우에는 이 명령이 클립보드의 셀 또는 열을 붙여넣습니다.
Copy Entire Table	이 명령은 Results Table 또는 Statistics Table 이 활성화 상태일 때 모든 데이터를 클립보드에 복사합니다. Results Table 는 현재 표시된 행과 열만 복사됩니다.
Fill Down	Results Table 이 활성화 상태이며 편집 가능 영역이 선택된 경우 이 명령은 첫 번째로 선택된 행의 정보를 이후에 선택되는 모든 행에 복제합니다.
Select all Rows	현재 활성화 Results Table 또는 Statistics Table 의 모든 행을 선택하십시오. 이 명령은 사용자가 Copy 등과 같이 선택된 행에 대해 작동되는 명령을 이후에 적용하고자 하는 경우에 유용합니다.
Modify Results Table Method	<p>현재 활성화 Results Table에 연결된 정량화 방법을 변경합니다. 이 기능은 사용자가 구성 요소를 추가하거나 제거하고자 할 때 유용합니다. 통합 매개 변수만 수정하려면 Update Quantitation Method for Group을 사용하십시오. 피크 검토 페이지의 60 내용을 참조하십시오.</p> <p>이 명령이 선택되면 Quantitation Method Editor 대화 상자가 열립니다. 데이터는 재처리되며 Results Table은 데이터를 표시하도록 업데이트됩니다. 정량화 방법 편집기 페이지의 80 및 Results Table 대화 상자 페이지의 42 내용을 참조하십시오.</p> <p>Quantitation Method를 다시 적용하면 지정된 구성 요소에 대해 수동으로 수정된 모든 피크를 덮어쓰며 Results Table의 Modified 확인란의 선택이 해제됩니다.</p>

표 3-1 편집 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Project Integration Defaults	정량화 방법을 생성할 때 사용되는 기본 피크 찾기 매개 변수를 설정합니다. 구성 요소의 수가 여러 개일 때는 모든 구성 요소에 개별적으로 조정할 필요 없이 크로마토그래피에 기반하여 기본값을 설정하십시오. 그러나 모든 구성 요소에 적합한 하나의 매개 변수 세트는 없으므로 일부 구성 요소에 대해 일부 매개 변수를 개별적으로 조정해야 할 수 있습니다. 통합 알고리즘 매개 변수 페이지의 117 내용을 참조하십시오.
Project Units & Calibration Defaults	정량화 방법을 생성할 때 사용되는 기본 농도 단위 및 회귀 매개 변수를 설정합니다. 사용자는 방법 자체를 생성할 때도 이 매개 변수를 설정할 수 있습니다. 그러나 동일한 설정을 사용하는 경우에는 이 명령을 사용한 후에 기본값을 설정하는 것이 더욱 쉽습니다. 프로젝트 단위 및 교정 기본값 페이지의 18 내용을 참조하십시오.
Project Secure Export Settings	이 기능이 선택되면 텍스트 파일의 데이터가 내보내기 중 암호화됩니다. 비밀번호가 암호화를 활성화하도록 설정하십시오. 프로젝트 보안 내보내기 설정 페이지의 18 내용을 참조하십시오.
Enable Project Modified Peak Warning	선택되지 않도록 기본 설정되어 있습니다. 이 기능을 선택하면 사용자가 Results Table 의 크로마토그램을 변경한 뒤 변경 사항을 저장할 때 경고 메시지가 열리면서 변경 사항이 적용되었음을 알립니다. 사용자는 저장을 진행하거나 Results Table 로 돌아갈 수 있습니다. 결과 표 방법 수정 페이지의 17 내용을 참조하십시오.

표 3-1 편집 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>이 기능이 활성화되면 특정 샘플 및 구성 요소에 대해 추출된 이온 크로마토그램(XIC)이 계산될 때마다 연결된 Results Table이 열려 있는 동안 이후에 사용할 수 있도록 저장됩니다.</p> <p>예를 들어 이 기능이 활성화될 때 사용자가 Results Table을 생성할 수 있는 경우 Results Table 생성을 위해 Peak Review 창의 크로마토그램이 초기 통합 프로세스 과정에서 미리 캐시되기 때문에 빠르게 표시되며 .wiff 파일 정보에 기반하여 재계산할 필요가 없습니다. 사용자가 이전에 저장된 Results Table을 여는 경우에는 개별 크로마토그램이 Peak Review 창에 표시될 때 이 크로마토그램을 계산해야 합니다. 그러나 이전의 특정 크로마토그램으로 돌아가는 것이 더 빠릅니다.</p> <p>모든 크로마토그램을 캐시하려면 컴퓨터 메모리가 충분해야 합니다. 그러나 대량의 분석 물질을 포함한 대용량 샘플 세트에 대해서는 이 옵션을 비활성해야 메모리 부족 메시지를 방지할 수 있습니다.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Chromatograms for Faster Peak Review 명령을 활성화하면 활성 Results Table의 모든 크로마토그램을 계산하고 캐시하는 데 이 명령이 사용됩니다. 대용량의 데이터 세트에 대해서는 이 명령이 실행될 때 다소 시간이 소요될 수 있습니다. 그러나 이 명령이 완료되면 모든 크로마토그램이 캐시되어 피크 검토 프로세스가 더욱 빨라집니다. 이 명령은 필요 시 중지할 수 있습니다.</p> <p>여러 크로마토그램을 검토할 때 이 작업을 수행하십시오. Cache Chromatograms for Faster Peak Review 옵션을 처음에 활성화한 경우에는 크로마토그램이 이미 캐시되기 때문에 Results Table을 생성한 후에 이 작업을 다시 수행할 필요가 없습니다. 이 명령은 이전에 저장한 Results Table을 연 후에 유용하게 사용됩니다.</p>

결과 표 방법 수정

현재 활성 Results Table에 연결된 정량화 방법을 변경합니다. 이 기능은 사용자가 구성 요소를 추가하거나 제거하고자 할 때 유용합니다. 통합 매개 변수만 수정하려면 **Update Quantitation Method for Group** 명령을 사용하십시오. [그룹 정량화 방법 업데이트 페이지의 68](#) 내용을 참조하십시오.

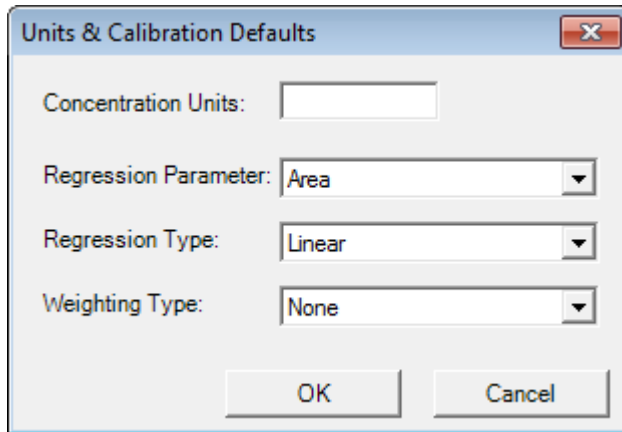
이 명령이 선택되면 Quantitation Method Editor 대화 상자가 열립니다. 데이터는 재처리되며 Results Table은 새 데이터를 표시하도록 업데이트됩니다. [정량화 방법 편집기 페이지의 80](#) 내용을 참조하십시오.

Quantitation Method를 다시 적용하면 지정된 구성 요소에 대해 수동으로 수정된 모든 피크를 덮어쓰며 **Results Table**의 **Modified** 확인란의 선택이 해제됩니다.

프로젝트 단위 및 교정 기본값

Concentration Units, **Regression Parameter** (Area 또는 Height), **Regression Type** 및 **Weighting Type**를 설정하십시오. 다양한 회귀 및 가중치 유형은 [회귀 수식 페이지의 123](#)에서 설명됩니다.

그림 3-1 Units & Calibration Defaults



프로젝트 보안 내보내기 설정

텍스트 파일의 데이터가 내보내기 중 암호화됩니다. 비밀번호가 암호화를 활성화하도록 설정하십시오. [그림 3-2](#) 내용을 참조하십시오.

그림 3-2 Secure Export Settings 대화 상자

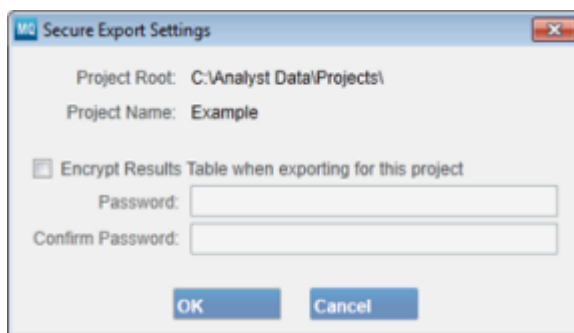


표 4-1 프로세스 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Add Samples	현재 활성 상태인 Results Table 에 추가 샘플을 추가합니다. 샘플 선택 페이지의 42 내용을 참조하십시오. 새 샘플이 통합되고 기존 표에 추가되는 동안에는 진행률 표시줄이 표시됩니다. 사용자는 이 작업을 수행하려면 Add samples to Results Table 권한을 보유해야 합니다.
Remove Selected Samples	현재 활성 상태인 Results Table 에서 선택한 샘플을 제거합니다. 사용자는 이 작업을 수행하려면 Remove samples from Results Table 권한을 보유해야 합니다.
Show Only Outliers	이상값을 포함한 행을 표시합니다. Process > Show Only Outliers 를 클릭하십시오. 모든 행을 표시하려면 Process > Show Only Outliers 를 다시 클릭하십시오.
Go to Next Outlier	Results Table 에서 다음 이상값으로 이동합니다. Process > Go to Next Outlier 를 클릭하십시오.
Export Calibration and Save Results Table	활성 Results Table 과 연결된 모든 분석 물질의 교정 수식 사본을 외부 파일(*.mqcal)에 저장합니다. 이 경우 한 가지 표준 샘플 세트의 교정을 동일한 Results Table 에 포함되지 않은 다른 샘플에 적용할 수 있습니다. 교정 내보내기 페이지의 19 내용을 참조하십시오.
Import External Calibration	이전에 내보낸 교정을 활성 Results Table 에 적용합니다. 이 명령을 사용하는 것 외에 또 다른 방법은 통합 정의 페이지의 47 에 설명된 바와 같이 New Results Table wizard 에서 외부 교정 파일을 지정하는 것입니다. 외부 교정 가져오기 페이지의 20 내용을 참조하십시오.
Remove External Calibration	이전에 적용한 외부 교정을 활성 Results Table 에서 제거합니다.

교정 내보내기

활성 **Results Table**과 연결된 모든 분석 물질의 교정 수식 사본을 외부 파일(*.mqcal)에 저장합니다. 이 경우 한 가지 표준 샘플 세트의 교정을 동일한 **Results Table**에 포함되지 않은 다른 샘플에 적용할 수 있습니다.

일반 워크플로우는 다음과 같습니다.

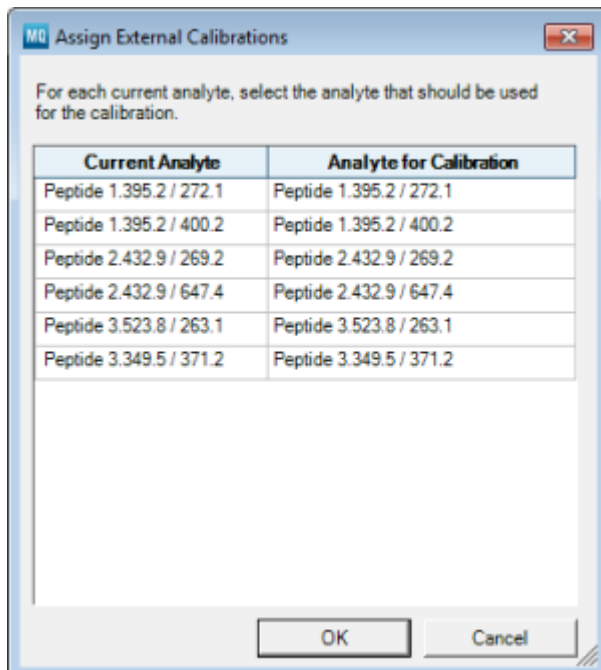
1. **Standard**만 포함한 **Results Table**을 새로 생성합니다.
2. 통합이 성공적으로 완료되었는지 확인하기 위해 **Peak Review** 창을 사용합니다.
3. 교정 사본을 저장하려면 **Export Calibration** 명령을 사용합니다.
4. 미확인 농도의 샘플을 포함한 **Results Table**을 새로 생성합니다.
5. **Import External Calibration** 명령을 사용하거나 교정 파일을 지정하여 이전에 내보낸 교정을 새 표에 적용합니다.
6. 필요 시 4단계와 5단계를 반복 수행합니다.

기존 **Results Table** (**Standard** 샘플 포함)이 변경되면 이전에 내보낸 교정이 자동으로 업데이트되지 않습니다. **Results Table**을 다시 내보내야 합니다.

외부 교정 가져오기

내보낸 교정과 동일한 분석 물질 이름을 현재 **Results Table**에 사용하면 대화 상자가 자동으로 완료되며 사용자가 **OK**를 클릭할 수 있습니다. 현재 **Results Table**의 분석 물질이 특정 그룹에 할당되고 내보낸 교정의 분석 물질이 같은 이름의 그룹에 할당되면 대화 상자가 자동으로 완료됩니다. 분석 물질이 여러 개인 경우에는 두 경우에 모두 같은 분석 물질 이름을 사용하거나 일관적인 **Group** 이름을 사용하십시오.

그림 4-1 Assign External Calibrations 대화 상자



레이블	설명
Current Analyte	현재 Results Table 에 대한 정량화방법의 각 분석 물질 항목을 포함합니다.
Analyte for Calibration	외부 교정 파일에서 사용 가능한 모든 분석 물질의 이름 목록을 포함합니다. 각각의 현재 분석 물질에 대해서는 교정을 확보할 해당 외부 분석 물질을 선택하십시오.

참고: 감사 맵은 **Results Table**이 처음 생성될 때 세션에 추가됩니다. 이것은 추가된 후 변경할 수 없습니다.

표 5-1 감사 트레일 메뉴

메뉴 항목	설명
Audit Trail Viewer	Audit Trail Viewer 를 엽니다.
Audit Map Manager	Audit Maps 를 선택, 수정 및 활성화합니다.
View Session Audit Map	활성 Results Table 의 현재 맵을 엽니다.

감사 트레일 뷰어

Audit Trail Viewer는 Results Table 내 특정 샘플의 전체 기록을 표시합니다. Results Tables는 <drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results 폴더에 저장됩니다.

참고:

Results Table을 다른 작업 중에 숨겨서는 안 됩니다. 예를 들어 Audit Trial을 저장하는 중에 숨겨서는 안 됩니다.

데이터를 더 자세히 보기 위해 Peak Review 창 등 다른 창을 최대화하려면 도구 모음의 **Toggles tab mode** 버튼을 사용하십시오.

Audit Trail Viewer를 사용하면 사용자가 다음을 수행할 수 있습니다.

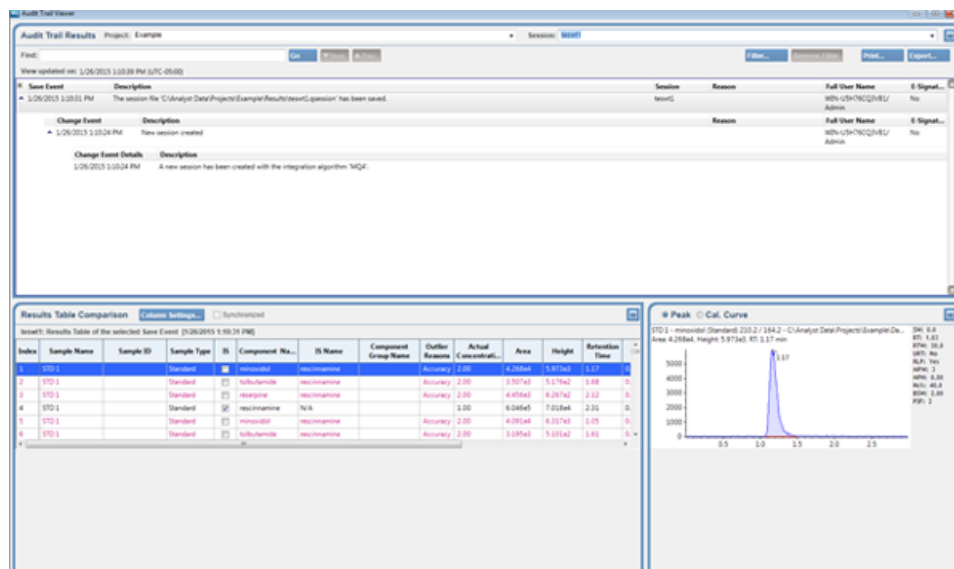
- 각 **Results Table**의 감사 트레일 기록을 봅니다.
- 텍스트의 모든 항목을 강조하는 키워드 검색을 수행합니다.
- 소프트웨어 감사 트레일에서 지정 기준 세트에 기반하여 감사된 이벤트를 필터링합니다.
- 감사 트레일 기록을 .txt 파일로 내보냅니다. 내보낸 파일은 편집할 수 있습니다.
- 보안 PDF로 인쇄합니다.

감사 트레일 뷰어에서 감사 트레일 결과 보기

1. Results Table을 엽니다.
2. **Audit Trail > Audit Trail Viewer**를 클릭하십시오.

3. 프로젝트를 변경하려면 **Projects** 목록을 클릭한 뒤 다른 프로젝트를 선택하십시오.
4. 다른 세션을 보려면 **Sessions** 목록을 클릭한 뒤 다른 세션을 선택하십시오. 사용자는 프로젝트의 모든 세션을 동시에 보도록 선택할 수도 있습니다.

그림 5-1 Audit Trail Viewer



레이블	Description
Project	목록에서 프로젝트를 선택하십시오.
Session	세션 파일을 선택합니다
Find	필터링 없는 키워드 검색. 텍스트의 모든 항목을 강조합니다.
Go	검색을 시작하려면 클릭하십시오.
Next	다음 단어로 이동하려면 클릭하십시오.
Prev	이전 단어로 이동하려면 클릭하십시오.
Filter	선택된 기준과 일치하는 이벤트만 표시할 때 클릭하십시오.
Remove Filter	필터를 제거할 때 클릭하십시오.
Print	감사 트레일을 인쇄하려면 클릭하십시오.
Export	감사 트레일을 내보내려면 클릭하십시오.
Save Event	세션 파일이 저장되면 저장 이벤트가 생성됩니다. 저장 이벤트는 이전 저장 이벤트의 모든 변경 사항과 Results Table 의 모든 값을 기록합니다.
Description	변경 이벤트의 세부 사항.
Session	세션 파일 이름을 표시합니다.

레이블	Description
Reason	Results Table 에 적용된 변경 사항의 이유를 표시합니다.
Full User Name	Results Table 에 변경 사항을 적용한 사용자의 이름을 표시합니다.
E-Signature	Results Table 변경 사항이 수락되었는지 표시합니다.
Column Settings	Results Table 에서 열을 표시하거나 숨기려면 클릭하십시오.
Synchronized	두 Results Tables 를 동시에 수평으로 스크롤하려면 선택하십시오.
Previous version	선택된 세션 파일의 이전 버전을 표시합니다.
Peak	선택한 샘플의 피크를 표시하려면 클릭하십시오.
Cal Curve	선택한 샘플의 교정 곡선을 표시하려면 클릭하십시오.

키워드 검색 수행

사용자는 텍스트의 모든 항목을 강조하는 키워드 검색을 수행할 수 있습니다.

1. Results Table을 엽니다.
2. **Audit Trail > Audit Trail Viewer**를 클릭하십시오.
3. **Find** 필드에 검색하고자 하는 단어를 입력한 뒤 **Go**를 클릭합니다.

검색 결과가 발견되면 **Find** 필드가 녹색으로 변하며, 검색 결과 수가 표시되고 단어가 노랑색으로 강조 표시됩니다. 검색 결과가 발견되지 않으면 **Find** 필드가 분홍색으로 바뀝니다.

4. 검색 결과 간에 이동하려면 **Next** 및 **Prev** 버튼을 사용합니다.

감사된 이벤트 필터링

사용자는 감사 트레일에서 지정 기준 세트에 기반하여 감사된 이벤트를 필터링할 수 있습니다.

1. Results Table을 엽니다.
2. **Audit Trail > Audit Trail Viewer**를 클릭하십시오.
3. **Filter**를 클릭합니다.

그림 5-2 Filter Audit Trail Events 대화 상자

품목	설명
1	Results Table 파일의 이름. 하나의 Results Table 파일 또는 모든 Results Table 파일을 필터링할 수 있습니다.
2	Description: 일부 또는 전체 이벤트 유형을 입력합니다. Sample Name: 일부 또는 전체 샘플 이름을 입력합니다. Full User Name: 일부 또는 전체 사용자 이름을 입력합니다. E-Signature: Yes 또는 No를 선택하십시오. Reason: 일부 또는 전체 이유를 입력합니다.
3	is: 특정 단어 또는 문구를 필터링할 때 사용합니다.
4	contains: 일부 단어 또는 문구를 필터링할 때 사용합니다.
5	Date: 특정 날짜 및 시간에 발생한 이벤트를 필터링할 때 사용합니다.

4. **Filter Audit Trail Events** 대화 상자에서 필터링 기준을 선택할 목록을 사용하십시오.

참고: Results Table 필드는 편집할 수 없습니다.

감사 트레일 메뉴

5. 필터 기준을 **No filter**로 재설정하려면 **Clear**를 클릭하십시오.
6. 이벤트를 필터링하려면 **OK**를 클릭하십시오.

팁! 필터를 제거하려면 **Audit Trail Viewer**에서 **Remove Filter**를 클릭하십시오.

감사 트레일 뷰어 내보내기

1. Results Table을 엽니다.
2. **Export**를 클릭한 뒤 파일 이름을 입력합니다.

파일은 탭 구분 텍스트 파일로 내보내집니다.

참고: Audit Trail Viewer에서 저장된 이벤트 부분만 내보내집니다.

감사 트레일 뷰어 인쇄

1. Results Table을 엽니다.
2. **Print**를 클릭한 뒤 프린터를 선택하십시오.

사용자는 pdfFactory를 사용하여 보안 PDF를 인쇄할 수 있습니다.

참고: Audit Trail Viewer에서 저장된 이벤트 부분만 인쇄됩니다.

감사 트레일 관리자

소프트웨어는 감사된 이벤트를 감사 트레일로 그룹화합니다. 감사 트레일은 감사된 이벤트의 기록을 저장하는 파일입니다. wiff 파일, 정량화 방법 및 **Results Table** 파일과 통합된 감사 트레일은 준수 목적으로 이용할 수 있는 유효한 전자 기록을 구성합니다.

Audit Trail Manager 소프트웨어는 감사 맵에서 정의된 모든 이벤트를 관리합니다. 소프트웨어는 사용자, 날짜, 변경 내용 세부 사항을 비롯해 전자 서명과 이유를 기록합니다. 또한 감사 맵에 따라 의견과 같은 추가 정보도 기록합니다.

팁! 세션 파일은 **Results Table**, 정량화 방법 사본, Audit Map 생성 시 사본을 비롯해 전체 세션의 전체 감사 트레일을 포함합니다.

소프트웨어가 .qsession 또는 .qmethod 파일을 생성하거나 수정할 때 내 **History** 탭의 **Project Audit Trail**에 이벤트가 기록됩니다. Analyst[®] MD 소프트웨어에서는 사용할 수 없습니다. 다음 이벤트가 기록됩니다.

- 정량화 방법 파일이 생성되었습니다.
- 정량화 방법 파일이 수정되었습니다.

- 정량화 **Results Table** 파일이 생성되었습니다.
- 정량화 **Results Table** 파일이 수정되었습니다.

정량화 방법 파일을 생성하거나 수정할 때 **E-signature** 또는 **Reason Prompt**가 선택되면 Analyst[®] MD 소프트웨어가 생성한 Audit Trail 대화 상자가 MultiQuant[™] MD 에 열립니다,

표 5-2 감사 트레일

감사 트레일	기록된 이벤트 예시
Quantitation Audit Trail (결과 표당 한 개)	변경 대상: <ul style="list-style-type: none"> • 세션 파일의 생성 및 수정. • 샘플 정보. • 피크 통합 매개 변수.

감사 맵 정보

MultiQuant[™] MD 소프트웨어는 정량화 결과와 관련된 처리 설정 정보에 모든 변경 기록을 보관합니다. 소프트웨어는 활성 프로젝트 감사 맵에 따라 모든 이벤트를 감사하며 모든 전자 서명을 기록하고 각 기록에 연결합니다.

감사 맵 생성

소프트웨어에는 여러 감사 맵을 설치합니다. 이러한 감사 맵을 보면서 이러한 감사 맵 중 한 가지 이상을 수정하는 것이 새 감사 맵을 생성하는 것보다 쉬울지 결정하십시오. 감사 맵을 생성 또는 수정하는 것은 Analyst[®] MD 소프트웨어 프로젝트 감사 트레일에서 감사되는 이벤트입니다.

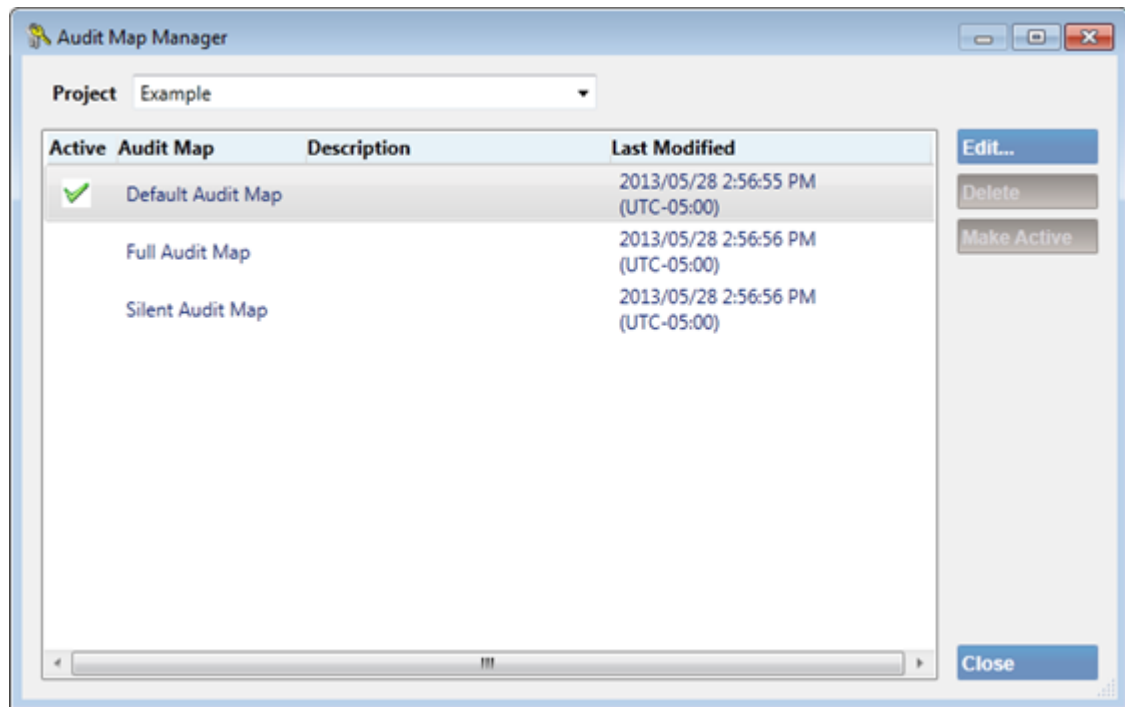
주의: 두 명의 사용자가 동시에 동일한 감사 맵을 수정하는 경우에는 마지막으로 파일을 저장한 사용자가 적용한 변경 사항만 사용됩니다.

프로젝트의 활성 감사 맵은 생성되는 모든 **Results Tables**의 감사 트레일에 기록될 이벤트를 결정합니다.

참고: **Results Table**이 저장되면 활성 감사 맵이 **Results Table**과 함께 저장되며 감사 맵은 수정할 수 없습니다.

1. **Audit Trail > Audit Map Manager**를 클릭하십시오.

그림 5-3 Audit Map Manager



레이블	설명
Project	목록에서 프로젝트를 선택하십시오.
Edit	활성 감사 맵을 편집할 때 클릭합니다.
Delete	선택한 감사 맵을 삭제할 때 클릭합니다.

2. **Project** 목록에서 감사 맵을 생성하고자 하는 프로젝트를 클릭하십시오.
3. 감사 맵을 선택한 뒤 **Edit**를 클릭하십시오.

그림 5-4 Audit Map Editor

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

레이블	설명
Description	감사 맵 설명을 입력합니다.
Check	확인란을 선택할 때 클릭합니다.
Uncheck	체크 박스의 체크 표시를 지울 때 클릭합니다.
Add Predefined Reasons	사전 정의 이유를 목록에 추가할 때 클릭합니다.

- 필요 시 **Description** 필드에 감사 맵 설명을 입력하십시오.
- Audit Map** 표에서 각 이벤트를 다음과 같이 구성하십시오.
 - 이벤트 감사를 원하는 경우에는 **Audited** 열에서 확인란을 선택하십시오.

팁! 체크 박스 값으로 열에 연속하는 셀을 입력하려면 **Ctrl** 또는 **Shift**를 누르고 셀을 클릭한 뒤 **Check**를 클릭하십시오.

감사 트레일 메뉴

- 작업자가 사용자 지정 이유를 입력하거나 사전 정의 이유를 선택하도록 설정하려면 **Reason Prompt** 열의 확인란을 선택하십시오.
- 이벤트 발생 시 작업자가 변경 사항에 대한 사전 정의 이유만 선택하도록 설정하려면 **Reason Prompt** 및 **Predefined Reasons Only** 열의 확인란을 선택하십시오. **Predefined Reason** _ 열에서 최대 열 개의 이유를 선택하십시오.

팁! 사전 정의 이유를 추가하려면 **Add Predefined Reasons**를 추가하십시오.

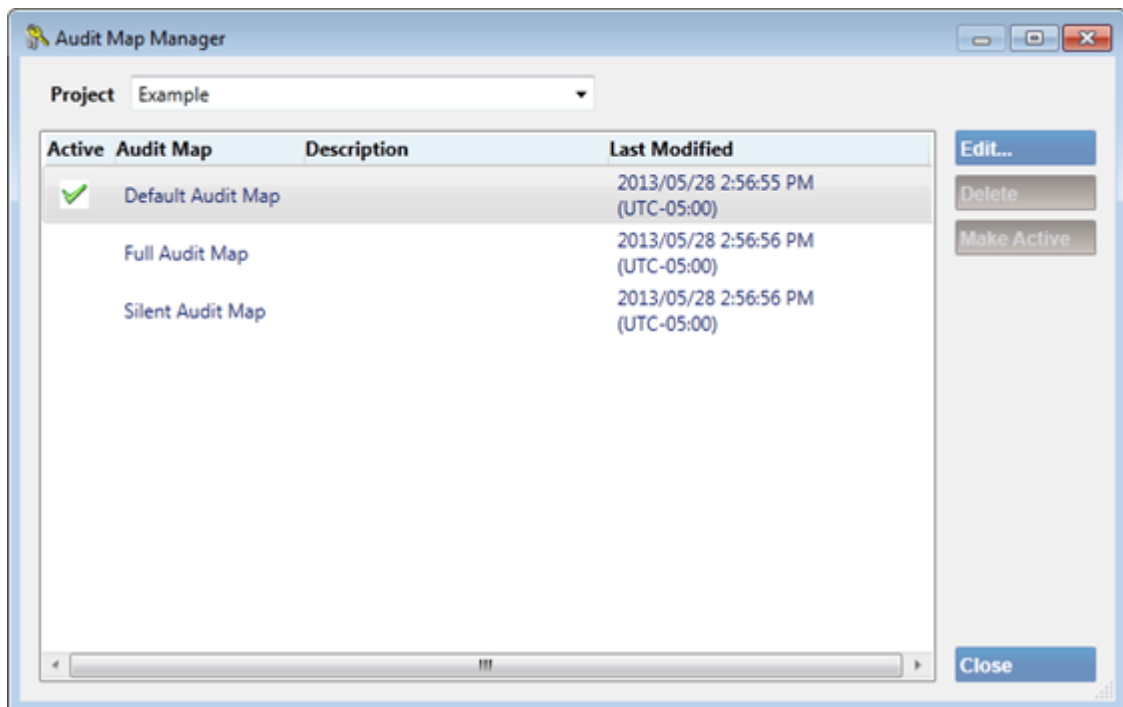
- 이벤트의 전자 서명을 사용하고자 하는 경우에는 **E-Sig** 열의 확인란을 선택하십시오.
6. **Save As**를 클릭한 뒤 **Save Audit Map As** 대화 상자에 이름을 입력합니다.
 7. **Save**를 클릭합니다.
 8. **Audit Map Editor** 대화 상자에서 **Close**를 클릭합니다.
 9. **Make Active**를 클릭합니다.

감사 맵이 적용되면 이것이 활성 감사 맵이 됩니다. 이 시점 이후로는 활성 감사 맵의 감사 구성이 감사 트레일에 기록될 감사를 결정합니다.

감사 맵 변경

1. **Audit Trail > Audit Map Manager**를 클릭하십시오.

그림 5-5 Audit Map Manager



레이블	설명
Project	목록에서 프로젝트를 선택하십시오.
Edit	활성 감사 맵을 편집할 때 클릭합니다.
Delete	선택한 감사 맵을 삭제할 때 클릭합니다.

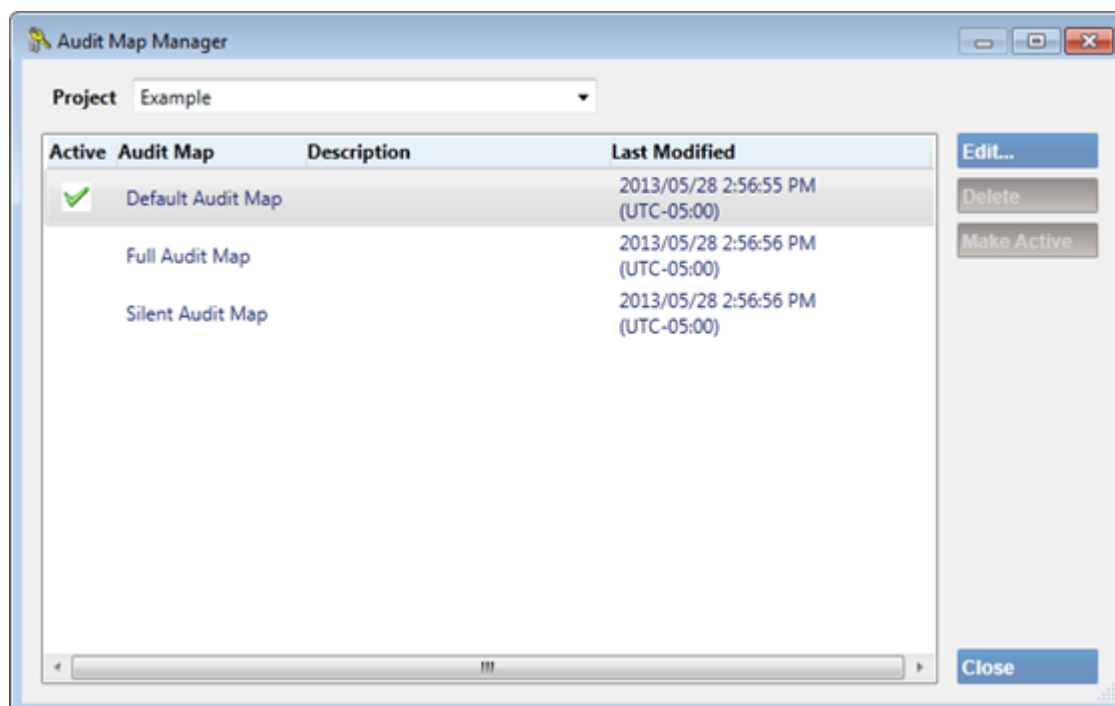
2. **Project** 목록에서 감사 맵을 변경하고자 하는 프로젝트를 클릭합니다.
3. 다른 맵을 선택한 뒤 **Make Active**를 클릭합니다.
4. **Close**를 클릭합니다.

감사 맵 편집

Print Report, Export Results Table, Transfer to LIMS 이벤트는 항상 기록되므로 Audit Map Editor에 표시되지 않습니다.

1. **Audit Trail > Audit Map Manager**를 클릭하십시오.

그림 5-6 Audit Map Manager



감사 트레일 메뉴

레이블	설명
Project	목록에서 프로젝트를 선택하십시오.
Edit	활성 감사 맵을 편집할 때 클릭합니다.
Delete	선택한 감사 맵을 삭제할 때 클릭합니다.

2. 감사 맵을 선택한 뒤 **Edit**를 클릭하십시오.

그림 5-7 Audit Map Editor

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

레이블	설명
Description	감사 맵 설명을 입력합니다.
Check	확인란을 선택할 때 클릭합니다.
Uncheck	체크 박스의 체크 표시를 지울 때 클릭합니다.
Add Predefined Reasons	사전 정의 이유를 목록에 추가할 때 클릭합니다.

3. 필요 시 **Description** 필드에 감사 맵 설명을 입력하십시오.

4. **Audit Map** 표에서 각 이벤트를 다음과 같이 구성하십시오.

- 이벤트 감사를 원하는 경우에는 **Audited** 열에서 확인란을 선택하십시오.

팁! 체크 박스 값으로 열에 연속하는 셀을 입력하려면 **Ctrl** 또는 **Shift**를 누르고 셀을 클릭한 뒤 **Check**를 클릭하십시오.

- 작업자가 사용자 지정 이유를 입력하거나 사전 정의 이유를 선택하도록 설정하려면 **Reason Prompt** 열의 확인란을 선택하십시오.
- 이벤트 발생 시 작업자가 변경 사항에 대한 사전 정의 이유만 선택하도록 설정하려면 **Reason Prompt** 및 **Predefined Reasons Only** 열의 확인란을 선택하십시오. **Predefined Reason** _ 열에서 최대 열 개의 이유를 선택하십시오.

팁! 사전 정의 이유를 추가하려면 **Add Predefined Reasons**를 추가하십시오.

- 이벤트의 전자 서명을 사용하고자 하는 경우에는 **E-Sig** 열의 확인란을 선택하십시오.

5. **Save**를 클릭합니다.

6. **Make Active**를 클릭합니다.

감사 맵이 적용되면 이것이 활성 감사 맵이 됩니다. 이 시점 이후로는 활성 감사 맵의 감사 구성이 감사 트레일에 기록될 감사를 결정합니다.

포함된 감사 구성 보기

Results Table에 사용되는 감사 구성은 Results Table이 생성될 때 Results Table 파일에 포함됩니다. 이 구성은 변경할 수 없습니다. 감사 맵 이름 옆에 표시된 타임스탬프는 구성을 포함하는 데 사용된 감사 맵이 마지막으로 저장된 시기를 나타냅니다.

1. Results Table을 엽니다.

2. **Audit Trail > View Session Audit Map**을 클릭하십시오.

그림 5-8 Session Audit Map

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

Audit Map: Default Audit Map Last Modified: 2013/05/28 2:56:55 PM (UTC-05:00)

Description:

Event	Audited	Reason Prom ...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

Close

이 메뉴는 **About** 항목을 제외하고 표 6-1에 제시된 항목들을 포함합니다. 이 파일은 자동으로 설치되며 <drive>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help 폴더에서도 찾을 수 있습니다.

문서 또는 폴더(또는 해당 바로 가기)는 이 Help 폴더에 복사하여 메뉴에 자동으로 표시할 수 있습니다.

표 6-1 도움말 메뉴

메뉴 항목	설명
Install License	MultiQuant™ MD Activation 대화 상자를 열려면 클릭하십시오.
Verify Installation	파일 및 설치를 확인하려면 클릭하십시오.
Software Reference Guide	소프트웨어의 기능을 설명합니다.
Software Release Notes	소프트웨어 정보를 비롯해 소프트웨어 설치 절차를 제시합니다.
About	프로그램 버전, 저작권, 기타 프로그램 정보와 설치되는 라이선스 기능 정보를 표시합니다.

결과 표

7

Results Table은 데이터 검토 및 내보내기의 시작점입니다. Results Table을 생성하려면 **New Results Table wizard**를 사용하거나 **File > New Results Table**을 클릭하십시오. [Results Table 대화 상자 페이지의 42](#) 내용을 참조하십시오.

참고: Sample Name 및 Sample ID 옆에는 다음을 포함할 수 없습니다: \/: * ? " < > |=.

Results Table에 사용되는 감사 구성은 **Results Table**이 생성될 때 **Results Table** 파일에 포함됩니다. 이 구성은 변경할 수 없습니다. 감사 맵 이름 옆에 표시된 타임스탬프는 구성을 포함하는 데 사용된 감사 맵이 마지막으로 저장된 시기를 나타냅니다.

참고: 데이터를 이동시킬 때는 파일 구조를 유지할 수 있도록 전체 프로젝트를 이동시키십시오. 파일 및 폴더 구조가 유지되지 않으면 **Results Table** 또는 크로마토그램을 볼 수 없습니다.

기존에 선택한 각 샘플의 각 구성 요소마다 별도의 행이 존재합니다.

그림 7-1 Results Table 예시

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Retention	Actual Concentration	Area	Height	Repetition Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.20e4	5.07e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.22e4	101.10
2	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.97e3	5.17e3	1.00	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.10e4	104.30
3	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.49e4	6.26e3	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.89e4	140.21
4	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.56e4	7.07e4	2.20	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.30e4	6.37e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.10e4	100.20
6	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.10e4	5.10e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.90e4	100.30
7	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.80e3	6.37e3	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.53e4	100.00
8	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e4	6.95e4	2.20	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.05e4	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.94e4	100.00
10	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.26e3	1.36e3	1.00	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.77e4	110.41
11	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.67e3	9.87e3	2.00	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.20e4	100.00
12	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e4	6.37e4	2.20	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.10e4	1.05e4	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.20e4	100.00
14	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.80e3	1.05e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e4	100.00
15	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.00e3	1.31e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e4	100.00
16	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.87e4	7.02e4	2.20	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.52e4	2.25e4	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.02e4	97.02
18	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.30e4	2.25e4	1.00	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.00e4	90.70
19	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.41e4	1.87e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.01e4	97.07
20	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.71e4	7.32e4	2.20	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.40e4	2.05e4	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.32e4	104.04
22	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.20e4	1.00e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.14e4	107.70
23	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.30e4	1.00e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.97e4	90.42
24	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.70e4	6.02e4	2.20	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.05e4	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.00e4	90.00
26	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.80e4	4.17e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.00e4	97.07
27	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.70e4	3.97e3	2.00	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.02e4	90.20
28	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.70e4	6.02e4	2.20	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.92e4	4.10e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.00e4	97.11
30	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.84e4	4.20e3	1.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.00e4	90.10
31	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.12e3	2.00	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.04e4	90.70
32	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e4	6.37e4	2.20	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- IS, Component Name 및 IS Name 옆에는 분석 물질 관련 정보가 포함됩니다.
- 확인란을 선택하면 샘플의 내부 표준 물질이 제시됩니다.
- **Column Settings** 대화 상자를 사용하여 **Results Table**에 표시될 열을 선택하십시오. [열 설정 페이지의 39](#) 내용을 참조하십시오.
- 두 열의 머리글을 분할하는 선을 드래그하여 열 폭을 변경하십시오. 이 정보는 자동으로 저장되며 사용자가 이전에 저장한 **Results Tables**를 열 때 적용됩니다.

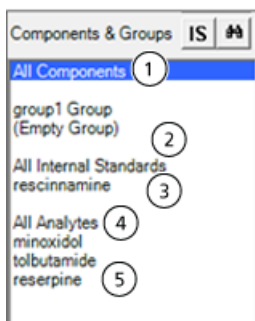
- 열 머리글을 클릭한 뒤 새 위치로 드래그하여 열 순서를 변경하십시오. 이 정보는 자동으로 저장되며 사용자가 이전에 저장한 **Results Tables**를 열 때 적용됩니다.
- 사용자는 Results Table이 특정 분석 물질 또는 내부 표준 물질에 해당되는 행만 표시하도록 제한할 수 있습니다. 도구 모음을 사용하여 표시되는 샘플 유형을 제한할 수 있습니다. [구성 요소 및 그룹 목록 페이지의 37](#) 및 [샘플 유형 필터 페이지의 41](#) 내용을 참조하십시오.
- Peak Review** 창을 이용한 동기화 등의 특정 작업은 현재 선택된 행에 적용됩니다. 행은 첫 번째 열의 왼쪽 영역을 클릭하여 선택할 수 있습니다.

구성 요소 및 그룹 목록

Results Table가 열려 있으면 현재 구성 요소 및 그룹 목록이 주 창의 왼쪽에 표시됩니다. 이 목록을 사용하면 **Results Table**을 비롯해 연결된 모든 **Peak Review** 창 또는 **Calibration** 플롯에 표시할 구성 요소를 변경할 수 있습니다.

구성 요소는 단일 전환 또는 질량 범위로 정의됩니다. 그룹은 구성 요소가 소속되는 그룹 이름으로 정의됩니다.

그림 7-2 Components & Groups 목록



품목	레이블	설명
1	모든 구성 요소	Results Table 과 관련 Peak Review 및 Calibration 에서 모든 사용 가능 분석 물질과 내부 표준 물질을 보려면 클릭하십시오.
2	모든 내부 표준 물질	모든 내부 표준 물질을 보고 모든 분석 물질을 숨길 때 클릭하십시오. 이 항목은 내부 표준 물질이 정의되지 않은 경우에 부재합니다.
3	특정 내부 표준 물질	각 개별 내부 표준 물질의 이름이 목록에 포함됩니다. 해당 내부 표준 물질을 보고 다른 모든 구성 요소를 숨기려면 이 항목 중 하나를 클릭하십시오.

결과 표

품목	레이블	설명
4	모든 분석 물질	모든 분석 물질을 보고 모든 내부 표준 물질을 숨길 때 클릭하십시오. 이 항목은 내부 표준 물질이 정의되지 않은 경우에 포함되지 않습니다.
5	특정 분석 물질	각 개별 분석 물질의 이름이 목록에 포함됩니다. 해당 분석 물질을 보고 다른 모든 구성 요소를 숨기려면 이 항목 중 하나를 클릭하십시오.

해당 항목의 구성 요소만 표시하려면 목록에서 각 항목을 클릭하십시오. 여러 항목을 선택하려면 **Shift** 또는 **Ctrl**을 누르십시오. 이 기능은 두 개의 특정 분석 물질만 표시하는 등의 경우에 유용합니다. 항목을 이동시키려면 목록이 활성 상태일 때 위 및 아래 화살표 키를 사용하십시오.

팁! 창의 오른쪽 가장자리를 왼쪽 또는 오른쪽으로 드래그하여 목록을 더 넓게 또는 더 좁게 조정하십시오.

Results Table 내 행의 실제 순서는 필터링의 영향을 받지 않습니다. Results Table은 정량화 방법에 제시된 순서에 따라 처음에 샘플별로 순서가 정렬된 뒤에 구성 요소별로 순서가 정렬되도록 사전 설정되어 있습니다. 그러나 표는 [소프트웨어 아이콘 페이지의 150](#)에 설명된 바와 같이 특정 순서로 정렬할 수도 있습니다.

결과 표 오른쪽 클릭 메뉴

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 Results Table에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 7-1 Results Table 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Column Settings	Results Table 열을 편집할 때 이 명령을 사용하십시오. 변경 사항이 프로젝트 기본값으로 저장되지 않는 경우에는 현재 Results Table 에만 적용됩니다.
Add Custom Column	표에 편집 가능 열을 새로 추가합니다. 이 열은 셀에 직접 입력하거나 내용을 붙여넣는 방식으로 입력하십시오. 의견 또는 사용자 지정 계산 결과 등 모든 텍스트를 입력할 수 있습니다.
Rename Custom Column	기존 사용자 지정 열의 이름을 바꿉니다. 이 명령을 사용하기 전에 사용자 지정 머리글을 클릭하여 사용자 지정 열을 선택하십시오.
Remove Custom Column	기존 사용자 지정 열을 삭제할 때 사용하십시오. 이 명령을 사용하기 전에 사용자 지정 머리글을 클릭하여 사용자 지정 열을 선택하십시오.

표 7-1 Results Table 오른쪽 클릭 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	표준 물질 샘플에 두 개 이상의 분석 물질이 있고 존재하는 모든 분석 물질의 농도가 동일한 경우 Standard 유형의 샘플에 대한 모든 분석 물질 Actual Concentration 필드를 설정할 수 있는 바로 가기를 제공합니다. 현재 분석 물질의 실제 농도를 모두 적용 페이지의 39 내용을 참조하십시오.
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	이 기능은 분석 물질이 아닌 내부 표준 물질에 적용된다는 점을 제외하고 Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All 과 유사합니다.
Set 'Used'	특정 Standard 샘플을 해당 분석 물질의 교정 곡선 계산에 사용해야 하는지의 여부를 결정하기 위해 절대 정량화를 수행하려면 이 명령을 사용하십시오. Results Table 에서 현재 선택된 행의 Used 필드를 선택하거나 선택 표시를 지울 때 첫 번째 두 가지 항목이 사용됩니다. 세 번째 및 네 번째 항목도 유사하지만 이 작업이 선택된 행에 대응되는 모든 샘플의 모든 분석 물질에 적용됩니다.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	현재 선택한 행의 피크 통합을 지우려면 이 명령을 이용하십시오.

현재 분석 물질의 실제 농도를 모두 적용

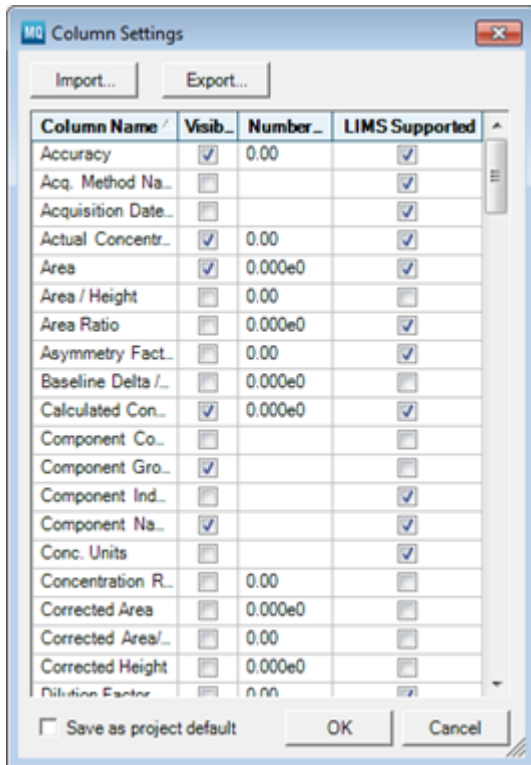
1. 표에서 하나의 특별한 분석 물질만 표시하도록 제한하려면 [구성 요소 및 그룹 목록 페이지의 37](#)를 사용합니다.
2. **Standard** 샘플만 보려면 **Sample Type Filter**를 선택적으로 사용합니다. [샘플 유형 필터 페이지의 41](#) 내용을 참조하십시오.
3. 농도를 텍스트 형식으로 다른 곳에서 사용할 수 있는 경우에는 분석 물질의 실제 농도를 셀에 직접 입력하거나 열을 선택하고 **Paste**를 선택하는 방법으로 지정합니다.
4. **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**을 클릭합니다.
5. 필요 시 모든 구성 요소 및 모든 샘플 유형 보기로 돌아갑니다.

열 설정

열 이름이 잘린 경우에는 필드 위에 커서를 올려서 도구 설명에 열 이름을 표시할 수 있습니다.

숫자 필드에서는 비과학적 표기법에 0.00 형식을 이용하고 과학적 표기법에 0.00e0 형식을 이용하십시오. 표시되는 숫자의 정밀도를 나타내는 소수점을 변경하십시오. 소수점 구분 기호는 소수점 구분 기호로 사용할 수 있습니다. 자릿수 구분 단위는 지원되지 않습니다.

그림 7-3 Column Settings 대화 상자



필드	설명
Import	Export 를 이용하여 이전에 저장한 열 설정 파일을 선택하려면 클릭하십시오. 대화 상자 필드는 선택한 파일의 정보를 이용하여 업데이트됩니다.
Export	현재 대화상자 설정을 파일에 저장하려면 클릭하십시오. 이 기능은 사용자가 다양한 열 설정 간에 전환할 수 있도록 도와줍니다.
Column Name	열 이름을 알파벳 순서로 표시합니다. 결과 열 표 페이지의 52 내용을 참조하십시오.
Visible	열을 표시하려면 선택하십시오. 그렇지 않은 경우에는 열이 숨겨집니다.
Number Format	숫자 필드에서는 비과학적 표기법에 0.00 형식을 이용하고 과학적 표기법에 0.00e0 형식을 이용하십시오. 표시된 정밀도에 대해서는 소수점을 변경하십시오.
LIMS Supported	선택된 LIMS Supported를 표시하는 행은 LIMS에서 사전 정의하며 열 선택 사항은 변경할 수 없습니다.
Save as project default	이후에 Results Tables에서 열 설정을 사용하려면 선택하십시오.

샘플 유형 필터

표 7-2 샘플 유형 필터 설명

필터 유형	설명
All Sample Types	모든 샘플 유형을 표시합니다.
Unknowns	미확인 농도의 정상 샘플인 Unknown 샘플만 표시합니다. Standard 샘플을 사용하는 경우에는 이 샘플의 농도가 교정 곡선에서 역산되며 Results Table에 Calculated Concentration으로 보고됩니다. 회귀 수식 페이지의 123 내용을 참조하십시오.
Standards	확정 농도의 샘플만 표시합니다. 이 샘플은 교정 곡선을 생성할 때 사용됩니다.
Quality Controls	Quality Control 샘플만 표시합니다. 이러한 확정 농도의 샘플들은 교정 곡선의 정확도를 확인하는 데 사용되지만 실제 생성에는 영향을 미치지 않습니다.
Standards & QCs	Standard 및 Quality Control 샘플을 모두 표시합니다.
Unknowns, Standards & QCs	Unknown, Standard, Quality Control 샘플을 모두 표시합니다.
Blanks	Blank 샘플만 표시합니다. 이 샘플들은 일반적으로 내부 표준 화합물을 포함하는 샘플들이지만 분석 물질이 없으며 일반 샘플 준비 절차를 거친 샘플들입니다. 이 샘플들은 교정 곡선의 생성에 사용되지 않습니다. 이 샘플들을 포함하려면 Standard 샘플 유형을 선택한 다음 Actual Concentration를 0으로 설정합니다.
Double Blanks	Double Blank만 표시합니다. 내부 표준 물질과 분석 물질을 포함하지 않습니다.
Solvents	Solvent 샘플만 표시합니다. 이 샘플들은 일반 샘플 검사 절차를 거치지 않은 이중 공시료입니다.
Blanks, Double Blanks & Solvents	다음과 같은 모든 공시료 유형을 표시합니다: Blank, Double Blank 및 Solvent samples.

숨겨진 행 보기

Results Table에서 모든 구성 요소의 행은 해당 MRM 전환이 사용 가능한 샘플에 대해서만 표시됩니다. 지정된 샘플에 전환을 사용할 수 없는 구성 요소의 미사용 행은 표에 존재하지만 숨겨지도록 기본 설정되어 있습니다.

1. **Results Table**의 **Peak Comment**가 표시되어 있지 않은 경우 이를 표시합니다.
2. 이 열을 이용하여 표를 정렬합니다.

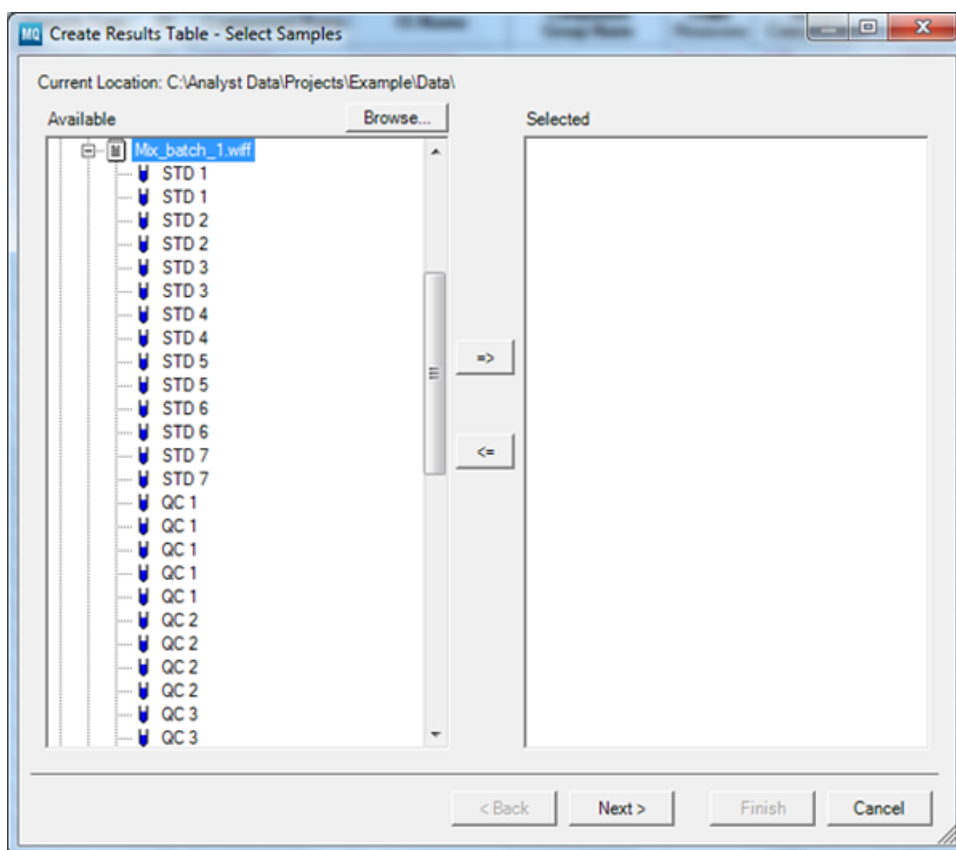
3. **Not Present** 의견을 포함한 행(인접)을 선택하십시오.
4. **Hide selected rows(s)** 아이콘을 클릭합니다. [소프트웨어 아이콘 페이지의 150](#) 내용을 참조하십시오.

Results Table 대화 상자

샘플 선택

wiff 파일에서 처리할 샘플을 선택하십시오.

그림 7-4 Create Results Table - Select Samples 페이지



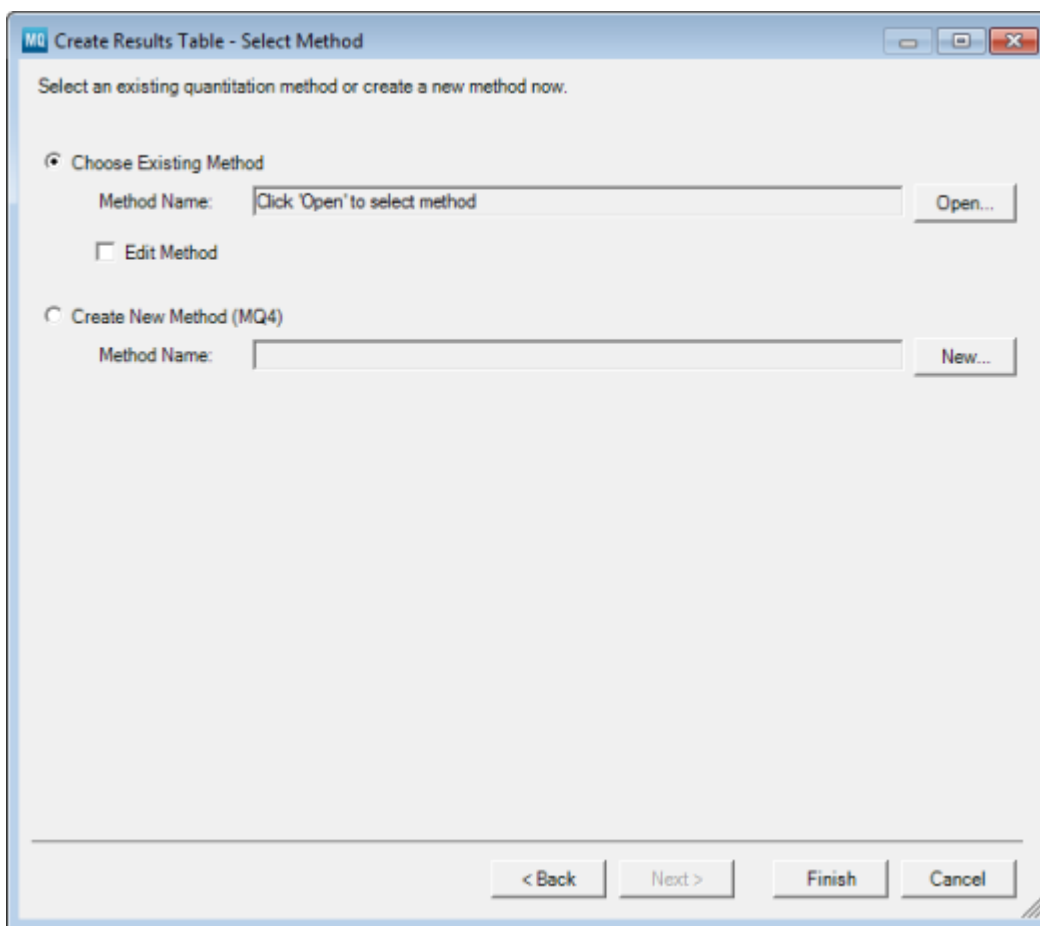
- **Available** 창은 선택된 폴더의 **Data** 폴더에서 사용할 수 있는 하위 폴더, wiff 파일 및 샘플을 표시합니다.
- 하위 폴더 또는 wiff 파일을 보려면 개별 폴더를 확장하십시오. wiff 파일을 확장하면 파일이 열리면서 사용 가능한 샘플이 표시됩니다.
- 샘플을 추가하거나 제거하려면 화살표를 사용하십시오.

- 개별 샘플을 두 번 클릭하거나 샘플 또는 데이터 파일을 선택한 뒤 => 버튼을 누르거나 왼쪽 창의 샘플 또는 데이터 파일을 오른쪽으로 드래그하는 방법으로 샘플을 선택하십시오. 여러 파일 또는 샘플을 이동시키기 전에 선택하려면 **Shift** 또는 **Ctrl**을 누르십시오.

방법 선택

정량화 방법을 확인란을 선택하십시오. 기존 방법이 선택되었으며 편집되지 않은 경우에는 선택된 샘플이 처리되는 동안 진행률 표시줄이 표시됩니다. 이 프로세스가 끝나면 **Results Table**이 생성됩니다.

그림 7-5 Create Results Table - Select Method 페이지



레이블	설명
Choose Existing Method	기존 정량화 방법을 선택하려면 Open 을 클릭하십시오.
Edit Method	기존 방법을 편집하려면 이 명령을 선택하십시오. 이후의 마법사 페이지는 필요에 따라 수정할 수 있는 기존 방법의 정보가 입력됩니다.
Create New Method	새 정량화 방법을 생성하려면 New 를 클릭하십시오. 괄호 속의 알고리즘은 Integration Defaults 대화 상자에서 선택된 알고리즘입니다.

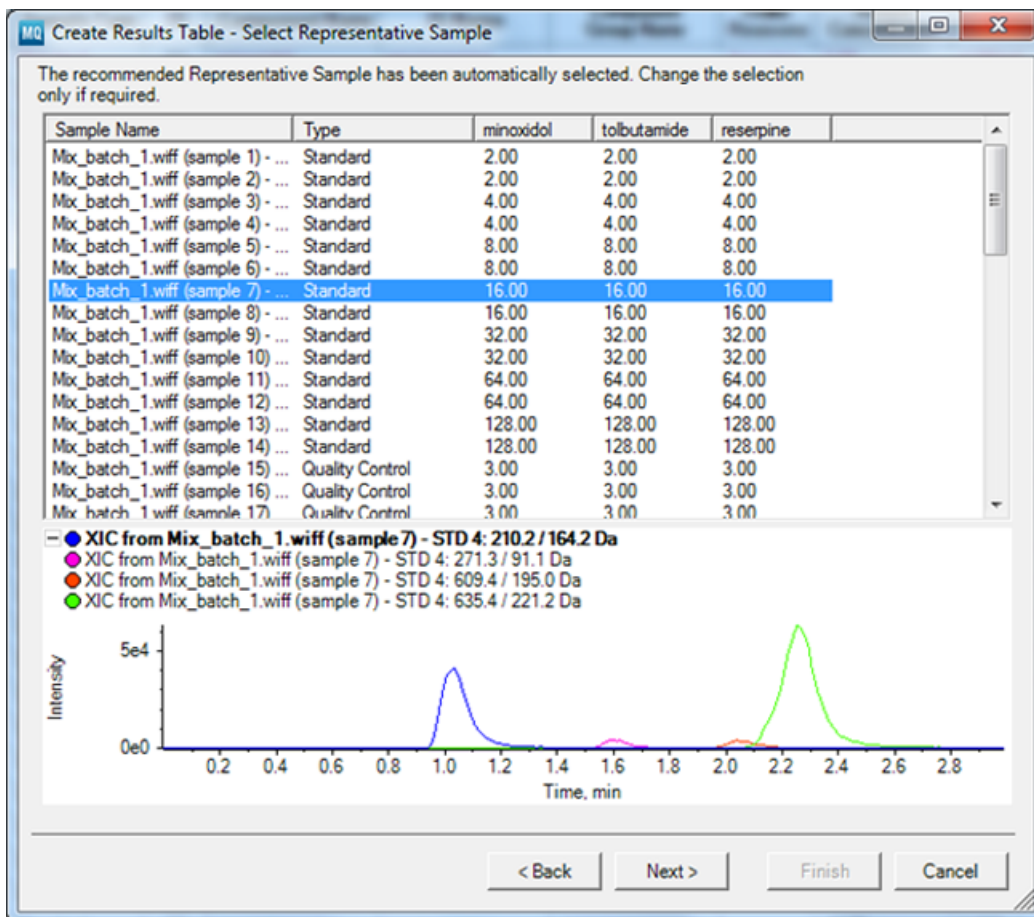
대표 샘플 선택

Select Representative Sample 페이지는 피크 찾기 및 통합 매개 변수를 시각적으로 설정할 때 크로마토그램이 표시되도록 선택된 대표 샘플을 보여 줍니다. 이 샘플은 정량화 방법에 포함될 모든 화합물을 포함해야 합니다.

샘플이 획득되기 전에 샘플 유형과 분석 물질 농도가 Analyst® MD 소프트웨어 Batch Editor를 이용하여 선택된 경우에는 이 정보가 추가 열로 표시됩니다.

소프트웨어는 샘플을 선택하도록 기본 설정되어 있습니다. 선택된 샘플이 적절하지 않으면 다른 대표 샘플을 선택하십시오. SignalFinder™ 알고리즘이 선택된 경우에는 모든 샘플에서 TIC 수준이 1.0e6을 초과할 때 소프트웨어에서 잘못된 통합 모델을 생성하지 않도록 대표 샘플을 선택하지 않는 것을 권장합니다. 사용자는 이 시나리오에서 대표 샘플을 수동으로 선택할 수 있습니다.

그림 7-6 Create Results Table - Select Representative Sample 페이지



구성 요소 정의

Define Components 페이지에는 각 분석 물질 또는 내부 표준 물질 행이 포함됩니다. 해당되는 분석 물질 및 내부 표준 물질 이름을 선택하십시오. [구성 요소 정의 오른쪽 클릭 메뉴 페이지의 46](#) 내용을 참조하십시오.

그림 7-7 Create Results Table - Define Components 페이지

MQ Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

레이블	설명
Experiment	목록에서 처리할 실험을 선택하십시오. 다중 기간 또는 다중 실험 데이터에 대해서는 반드시 처리해야 하는 실험을 각각 선택한 뒤 표에 해당 실험의 구성 요소를 입력하십시오.
Row	현재 행 번호를 포함합니다.
IS	행에 대해 정의된 구성 요소가 분석 물질인지(미선택) 또는 내부 표준 물질인지(선택) 나타냅니다.
Name	구성 요소 이름을 포함합니다. MRM 실험의 이름은 Q1/Q3 전환 질량으로 자동 입력됩니다. 특정 이름은 필드에 직접 입력하십시오.

결과 표

레이블	설명
Group	<p>행의 구성 요소를 포함하는 그룹의 이름을 표시합니다. 서로 관련된 분석 물질 또는 내부 표준 물질이 동일한 그룹에 배치되면 더 쉽게 검토 및 동시 조작할 수 있습니다. 이는 동일한 화합물에 대한 여러 MRM 전환과 같이 머무름 시간이 동일한 항목에 해당됩니다.</p> <p>그룹 이름을 직접 입력하거나 자동 입력하십시오. 구성 요소 정의 오른쪽 클릭 메뉴 페이지의 46 내용을 참조하십시오.</p>
IS Name	<p>행에 정의된 분석 물질에 사용해야 하는 선택 사항 내부 표준 물질의 이름을 포함합니다. 이 필드는 내부 표준 물질 자체에 해당되지 않습니다.</p>
Mass Info	<p>MRM 실험에서는 이 열의 제목이 Q1/Q3이며 행에 정의된 구성 요소의 질량 쌍을 포함합니다. 실험에 사용 가능한 전환을 모두 표시하는 목록에서 필요한 전환을 선택하십시오. 대개 이 열은 사용 가능 전환으로 자동 시작됩니다.</p> <p>프로필(스캔) 실험에서는 이 열의 제목이 Start - Stop이며 행에 정의된 구성 요소의 XIC(추출된 이온 크로마토그램)를 계산하는 데 사용되는 질량 범위를 포함합니다. 두 질량을 구분하는 하이픈을 포함하여 질량 범위를 입력하십시오. 예를 들어 200-201 또는 200-1과 같습니다. 후자의 경우 질량 범위가 199.5-200.5입니다.</p>

구성 요소 정의 오른쪽 클릭 메뉴

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Define Components** 페이지에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 7-3 구성 요소 정의 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Clear	<p>선택된 모든 행 또는 열의 내용을 지웁니다. 행은 행 번호 앞의 영역을 클릭하거나 드래그하여 선택할 수 있습니다.</p>
Copy	<p>선택된 모든 행 또는 열을 클립보드에 복사합니다.</p>
Paste	<p>클립보드의 내용을 붙여넣습니다.</p>
Find Component by Name	<p>Name이 텍스트와 일치하는 구성 요소를 선택하십시오. 검색 결과를 찾을 때 반드시 정확한 텍스트가 필요하지는 않습니다. 이 기능은 여러 구성 요소가 존재하는 경우에 특정 구성 요소를 선택하고자 할 때 유용합니다.</p> <p>스프레드시트에서 처음에 선택된 행이 없는 경우에는 첫 번째 행부터 검색이 시작됩니다. 그렇지 않은 경우에는 선택한 행 이후부터 검색이 시작되며 시작 지점부터 다시 시작됩니다. 이 기능은 Name에 텍스트가 포함된 구성 요소가 두 개 이상일 때 유용합니다. 첫 번째 검색에서 구성 요소를 찾지 못한 경우에는 첫 번째 구성 요소를 선택한 채로 표 내 다른 검색 결과를 찾을 수 있도록 다시 검색하십시오.</p>
Insert Row Above	<p>현재 선택된 행 바로 위의 하나의 빈 행을 삽입합니다.</p>

표 7-3 구성 요소 정의 오른쪽 클릭 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Delete Selected Rows	표에서 현재 선택된 행을 제거합니다.
Sum Multiple Ions	여러 MRM 전환 또는 전체 스캔 질량 범위의 크로마토그램을 총합합니다. 이 명령이 선택되면 Components 표에 추가 질량 열이 추가됩니다. 해당 행에서 선택된 모든 질량은 해당 분석 물질 또는 내부 표준 물질의 총합 XIC를 생성하는 데 사용됩니다. 이 기능은 항상 선택하는 것이 좋습니다.
Groups	그룹 하위 메뉴 페이지의 81 내용을 참조하십시오.
Internal Standards	내부 표준 물질 하위 메뉴 페이지의 83 내용을 참조하십시오.

통합 정의

각 구성 요소의 예상 머무름 시간 및 기타 피크 찾기 매개 변수를 선택하십시오.

왼쪽 목록은 이전 마법사 페이지에서 정의된 각 구성 요소 항목을 표시합니다. 대표 샘플의 해당 크로마토그램과 현재 통합을 표시하려면 특정 행을 클릭하십시오. 위 및 아래 화살표 키를 사용하거나 스크롤 휠을 사용하여 목록을 스크롤하십시오. 일반적으로 모든 구성 요소는 통합 정확성 여부를 검토하는 것이 좋습니다. 그러나 구성 요소가 많은 경우에는 **Highlight Components with Uncertain RT** 명령을 사용하여 검토할 개수를 제한할 수 있습니다.

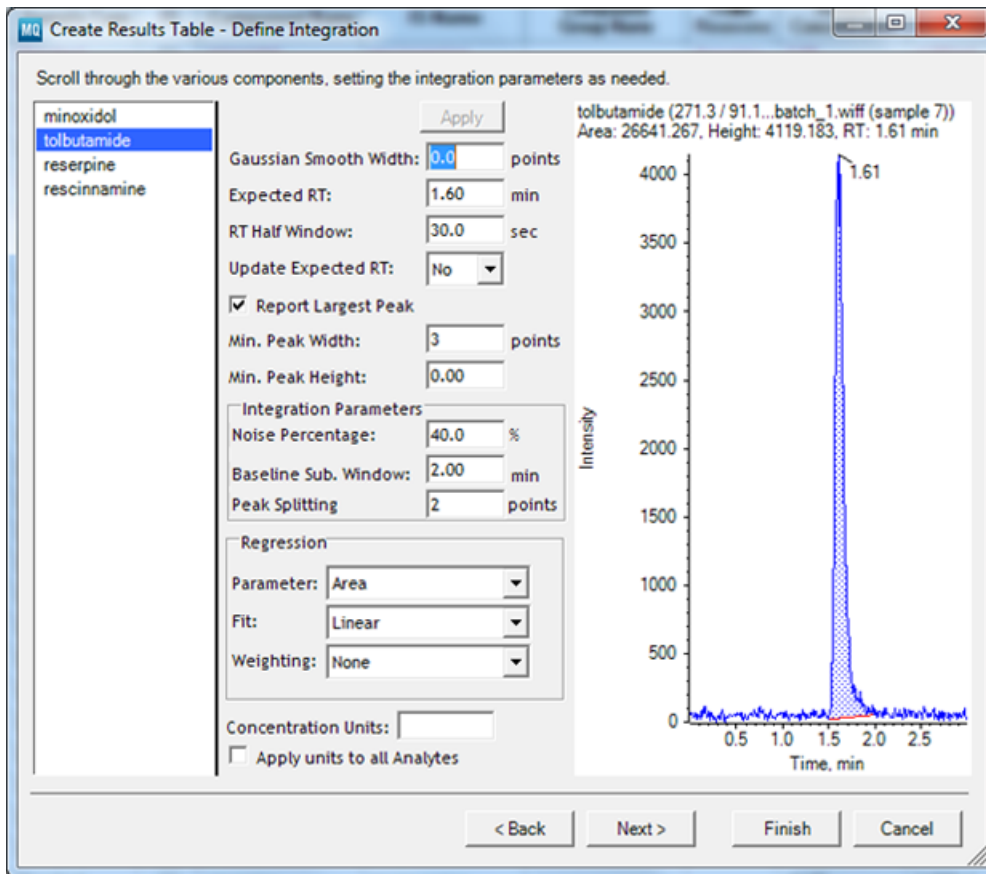
참고: 구성 요소가 여러 개인 경우에는 각 구성 요소의 매개 변수를 조정할 필요가 없도록 마법사를 실행하기 전에 피크 찾기 매개 변수가 적합한 기본값으로 설정되어 있는지 확인하십시오.

사용 가능 명령을 보려면 페이지에서 오른쪽 마우스를 클릭하십시오. [통합 정의 오른쪽 클릭 메뉴 페이지의 49](#) 내용을 참조하십시오.

Results Table이 생성된 후 **Regression** 그룹에서 모든 구성 요소 또는 선택된 구성 요소의 교정 옵션을 변경하십시오. 기본 농도 단위와 회귀 매개 변수를 매번 조정할 필요가 없도록 설정하십시오.

팁! x축 또는 y축 영역을 드래그하여 그래프를 확대하십시오. 컨텍스트 메뉴(**Home Graph Axes**)를 사용하거나 축 영역을 두 번 클릭하여 사전 설정 보기로 돌아가십시오.

그림 7-8 Create Results Table - Define Integration 페이지



레이블	설명
Apply	필요 시 해당 구성 요소의 피크 찾기 매개 변수를 조정하십시오. 새 Results Table을 생성할 때는 데이터 통합 시 해당 구성 요소의 지정된 매개 변수가 모든 샘플의 해당 구성 요소에 적용됩니다. 통합 알고리즘 매개 변수 페이지의 117 내용을 참조하십시오.
Expected RT	처음에 크로마토그램의 최대 강도를 갖는 포인트 머무름 시간으로 설정됩니다. 보통 이 피크는 필요한 피크입니다. 그러나 이성체가 존재하면 이 값을 조정해야 할 수 있습니다. 이 값을 조정하려면 Expected RT 필드에 새 값을 입력한 뒤 Apply 를 클릭하십시오. 또는 그래프를 클릭한 뒤 관심 피크를 드래그할 수 있습니다. 그래프 내 커서를 실수로 드래그하여 예상 머무름 시간을 조정하지 않도록 주의하십시오.
Parameter	Area 또는 Height 를 선택하십시오.
Fit	다양한 적합도 유형은 회귀 수식 페이지의 123 에서 설명됩니다.
Weighting	다양한 가중치 유형은 가중치 인자 페이지의 124 에서 설명됩니다.

레이블	설명
Concentration Units	분석 물질과 모든 내부 표준 물질에 사용되는 농도 단위를 입력하십시오. 상대 정량화를 수행하는 경우에는 이 필드를 비워 두십시오. 마법사는 모든 구성 요소에 같은 단위가 사용되는 것으로 가정합니다. 그렇지 않은 경우에는 Quantitation Method Editor 를 사용하십시오.
Apply units to all Analytes	사용자는 개별 구성 요소의 농도 단위를 입력할 수 있습니다. 모든 구성 요소에 같은 단위를 적용하려면 이 확인란을 선택하십시오. 정보는 Concentration Units 와 일치해야 합니다.

통합 정의 오른쪽 클릭 메뉴

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Define Integration** 페이지에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 7-4 통합 정의 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Find Component by Name	Components 페이지의 명령과 유사하지만 Components 스프레드시트의 행을 선택하지 않고 구성 요소 목록의 개별 항목을 선택한다는 차이점이 있습니다.
Highlight components with Uncertain RT	기본 예상 머무름 시간(각 크로마토그램의 최대 강도를 갖는 피크 RT)이 잘못된 구성 요소를 강조하는 데 사용됩니다. 구성 요소 개수가 적으면 이 명령을 사용하지 않고 각각 개별적으로 검토하십시오. 그러나 구성 요소 개수가 많으면 이 명령을 사용하여 크로마토그램 내에 중요 피크가 두 개 이상인 구성 요소만 시각적으로 확인하십시오. 구성 요소 강조 대화 상자 페이지의 85 내용을 참조하십시오.
Home Graph Axes	확대한 그래프를 모든 데이터가 표시되는 홈 뷰로 되돌립니다.

표 7-4 통합 정의 오른쪽 클릭 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Overlay Other Components for Group	<p>여러 구성 요소를 그룹에 할당하고 해당 그룹에 할당된 구성 요소들의 머무름 시간이 동일하지 않은 것으로 예상되는 경우에 크로마토그램을 겹치려면 이 명령을 사용하십시오. 예를 들어 이러한 구성 요소들이 동일한 실제 화합물의 다른 MRM 전환을 나타내는 경우와 같습니다.</p> <p>이 기능이 선택되면 통합 매개 변수가 정의된 현재 구성 요소의 크로마토그램이 실선 파란색 트레이스를 사용하여 그려지며, 통합된 피크 면적이 표시됩니다. 동일 샘플 내 다른 구성 요소의 크로마토그램(통합 피크 면적 제외)은 파선 스타일로 겹쳐집니다.</p>
Update Retention Times	<p>이전에 생성된 정량화 방법의 예상 머무름 시간을 재설정하는 데 사용됩니다. 기존 정량화 방법이 열려 있고 Set New Typical Sample이 선택되어 있는 경우에는 표시되는 크로마토그램이 새 샘플에 대응되지만 예상 머무름 시간은 변경되지 않습니다.</p> <p>각 구성 요소의 예상 머무름 시간은 기존 예상 머무름 시간을 기준으로 지정된 폭의 범위 내에서 최대 강도를 갖는 피크의 머무름 시간에 부합하도록 업데이트됩니다.</p> <p>Update Retention Time 대화 상자 페이지의 85 내용을 참조하십시오.</p>

이상값 설정

사용자는 **Standards, QCs, Ion Ratio, Calculated Concentration**에 대해 정확도 이상값을 플래그 지정할 수 있습니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

그림 7-9 Outlier Settings 대화 상자

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std): %

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ: %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC: %

☒ Ion Ratio ☒ Calculated Concentration

Component	IS	Group	Ion Ratio Tolerance (%)	Lower Limit of Calculated Conce..	Upper Limit of Calculated Conce..
▶ minoxidol	<input type="checkbox"/>	Group A			
tolbutamide	<input type="checkbox"/>	Group A	20		
reserpine	<input type="checkbox"/>				
rescinnamine	<input checked="" type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

레이블	설명
Accuracy for Standards	Standard 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	실험실 표준 작업 절차에 부합하는 값을 갖는 Standard 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	실험실 표준 작업 절차가 최저 농도 Standard 에 대해 다양한 오차를 제시하는 경우 이 Standard 의 정확도 오차를 편집합니다.
Accuracy for QCs	Quality Control 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Max. Accuracy Tolerance for QC%	실험실 표준 작업 절차에 부합하는 값을 갖는 Quality Control 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Ion Ratio	구성 요소가 그룹에 할당된 경우에만 사용할 수 있습니다. 피크 면적 또는 피크 높이의 이온 비율을 사용할 때 선택하십시오. 피크 면적 또는 피크 높이는 정량화 방법 개발 중 회귀 매개 변수를 선택할 때 설정됩니다.
Calculated Concentration	확정 농도의 Standard 샘플을 사용하는 경우에는 이 농도가 교정 곡선에서 역산된 농도입니다. 회귀 수식은 다양한 회귀 유형 및 가중치에 대해 회귀가 수행되는 방식을 설명합니다.

결과 표

레이블	설명
Component	모든 샘플의 분석 물질 또는 내부 표준 물질.
IS	선택된 내부 표준 물질. Ion Ratio 확인란이 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.
Group	머무름 시간이 같은 구성 요소(동일한 화합물의 전환이 다름)는 그룹화할 수 있습니다. Ion Ratio 확인란이 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.
Ion Ratio Tolerance (%)	기본 설정을 사용하거나 실험실 표준 작업 절차에 따라 이 설정을 편집하십시오. Ion Ratio 확인란이 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.
Lower Limit of Calculated Concentration	허용 농도 범위의 하한을 입력합니다. 이 값보다 낮은 Calculated Concentration 의 모든 샘플은 농도 이상값으로 플래그가 지정됩니다.
Upper Limit of Calculated Concentration	허용 농도 범위의 상한을 입력합니다. 이 값보다 높은 Calculated Concentration 의 모든 샘플은 농도 이상값으로 플래그가 지정됩니다.

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Outlier Settings** 페이지에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다.

표 7-5 이상값 설정 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

레이블	설명
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	모든 분석 물질의 기준이 동일한 경우에 계산 농도 하한을 모든 분석 물질에 적용합니다.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	모든 분석 물질의 기준이 동일한 경우에 계산 농도 상한을 모든 분석 물질에 적용합니다.

결과 열 표

참고: **Sample Name**, **Sample ID** 등 일부 중요 샘플 정보 열들은 사용자가 **Results Table** 열 설정을 사용자 지정할 때 숨겨서는 안 됩니다.

숫자 필드에서는 비과학적 표기법에 0.00 형식을 이용하고 과학적 표기법에 0.00e0 형식을 이용하십시오. 표시되는 숫자의 정밀도를 나타내는 소수점을 변경하십시오. 소수점 구분 기호는 소수점 구분 기호로 사용할 수 있습니다. 자릿수 구분 단위는 지원되지 않습니다.

표 7-6 결과 표 열

레이블	설명
Accuracy	Standard 샘플과 Quality Control 샘플에 확정 농도의 Standard 샘플을 사용하는 경우 이는 다음과 같이 정의됩니다. $100\% * (\text{Calculated Concentration}) / (\text{Actual Concentration})$ 다른 샘플 유형에서 이 값은 N/A입니다.
Acq. Method Name	샘플을 획득할 때 사용하는 획득 방법의 이름입니다.
Acquisition Date & Time	wiff 샘플이 획득되는 날짜와 시간입니다.
Actual Concentration	Standard 샘플과 Quality Control 샘플에 대한 예상 확정 농도입니다.
Area	검출된 피크 면적입니다. 피크가 검출되지 않은 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Area / Height	검출된 피크 면적을 높이로 나눈 값입니다. 피크가 검출되지 않은 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Area Ratio	내부 표준 물질을 사용하는 분석 물질의 경우에는 Area 대 IS Area 비율입니다. 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Asymmetry Factor	피크 중심선부터 뒷면 기울기까지의 거리를 피크 중심선부터 앞면 기울기까지의 거리로 나눈 값이며, 모든 측정값은 최대 피크 높이의 10%에서 측정됩니다.
Baseline Delta / Height	기준선의 높이 차이(피크 시작 높이와 피크 종료 높이) 절대값 대 실제 피크 높이입니다. 이 값이 약 0.1보다 크면 기준선이 잘못 통합되었음을 나타내며 피크를 검토해야 합니다.
Calculated Concentration	확정 농도의 Standard 샘플을 사용하는 경우에는 이 농도가 교정 곡선에서 역산된 농도입니다. 다양한 회귀 유형 및 가중치에 대해 회귀가 수행되는 방식은 회귀 수식 페이지의 123 내용을 참조하십시오.
Component Comment	모든 샘플의 분석 물질 또는 내부 표준 물질에 적용되는 임의 의견입니다.
Component Group Name	분석 물질 또는 내부 표준 물질과 연결된 그룹 이름(있을 경우)입니다.
Component Index	원본 정량화 방법의 분석 물질 또는 내부 표준 물질 인덱스입니다. 이 기능은 이 필드에 기반하여 표를 정렬할 때 사용할 수 있습니다.
Component Name	분석 물질 또는 내부 표준 물질의 이름입니다.
Conc. Units	농도 단위입니다.
Concentration Ratio	내부 표준 물질을 사용하는 분석 물질의 경우에는 Actual Concentration 대 IS Actual Concentration 비율입니다. 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 이 값이 N/A입니다.

결과 표

표 7-6 결과 표 열 (계속)

레이블	설명
Corrected Area	검출된 피크 면적입니다. 피크가 검출되지 않은 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Corrected Area / Height	검출된 피크 면적을 높이로 나눈 값입니다. 피크가 검출되지 않은 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Corrected Height	검출된 피크 높이입니다. 피크가 검출되지 않은 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Dilution Factor	샘플 희석의 기준이 되는 비율입니다. 이 인자는 교정 곡선의 계산에 사용됩니다. 회귀 수식 페이지의 123 내용을 참조하십시오.
End Time	검출된 피크의 종료 머무름 시간(분 단위)입니다.
End Time at 10%	강도가 피크 높이의 10%일 때 피크 뒷면 시간(분 단위)입니다.
End Time at 5%	강도가 피크 높이의 5%일 때 피크 뒷면 시간(분 단위)입니다.
Expected Ion Ratio	모든 샘플 유형의 예상 이온 비율입니다.
Expected RT	정량화 방법의 기준 예상 머무름 시간(분 단위)입니다.
Height	검출된 피크 높이입니다. 피크가 검출되지 않은 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Height Ratio	내부 표준 물질을 사용하는 분석 물질의 경우에는 Height 대 IS Height 비율입니다. 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Index	정렬되지 않은 원래 순서의 행 인덱스입니다. 표가 다른 열을 기준으로 정렬되면 이 열을 정렬하여 원래 순서로 되돌릴 수 있습니다.
Injection Volume	오토샘플러로 주입된 샘플 용량(mL 단위)입니다.
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"> • Baseline 값은 독립 피크가 일반적인 방식으로 통합되었음을 나타냅니다. • Valley 값은 두 개의 인접한 피크가 존재하며 신호가 두 피크 간 기준선 값으로 돌아오지 않았음을 나타냅니다. • Manual 값은 피크가 수동으로 통합되었음을 나타냅니다. • N/A 값은 피크가 검출되지 않았음을 나타냅니다.

표 7-6 결과 표 열 (계속)

레이블	설명
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> • Ion Ratios는 단일 분석 물질에서 최소 두 가지 MRM 전환이 그룹으로 수집될 때 결정됩니다. • 하위 그룹의 첫 번째 구성 요소는 Quantifier 이온으로 사용됩니다. 하위 그룹의 나머지 구성 요소는 Qualifier 이온으로 사용됩니다. • $\text{Ion Ratio} = (\text{Peak Area or Height of Qualifier}) / (\text{Peak Area or Height of Quantifier})$ • Subgroups <ul style="list-style-type: none"> • 그룹의 모든 분석 물질은 Analyte 하위 그룹을 구성합니다. • 그룹의 모든 내부 표준 물질은 IS 하위 그룹을 구성합니다. • 구성 요소가 그룹에 포함되지 않은 경우에는 Ion Ratio가 N/A입니다. • 피크가 발견되지 않으면 Ion Ratio가 N/A입니다. • Quantifier의 경우 Analyte 및 IS 하위 그룹 내 모든 구성 요소에 적용되며 Qualifier는 그 자체입니다. • Quantifier 또는 Qualifier 피크의 통합이 변경되면 Ion Ratio가 다시 계산됩니다. • 피크 면적 또는 피크 높이에 대해 계산될 수 있습니다. Results Table의 첫 번째 구성 요소(Component Index 1)에 대해 .qmethod의 회귀 부분에서 Area가 사용되는 경우 전체 Results Table의 Ion Ratio 계산 시 피크 면적이 사용됩니다. 첫 번째 구성 요소의 회귀에 Height가 사용되면 피크 높이가 계산에 사용됩니다.
IS	확인란이 선택되면 행의 구성 요소가 분석 물질이 아닌 내부 표준 물질임을 의미합니다.
IS Actual Concentration	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 실제 농도이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Area	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 면적이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Area / Height	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 Area 대 Height 비율이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Baseline Delta / Height	Baseline Delta / Height (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Comment	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 임의 의견이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.

결과 표

표 7-6 결과 표 열 (계속)

레이블	설명
IS Corrected Area	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 수정된 면적이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Corrected Area / Height	Corrected Area / Corrected Height (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Corrected Height	Corrected Height (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS End Time	End Time (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Expected RT	Expected RT (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Height	Height (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Integration Type	Integration Type (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Mass Info	Mass Info (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Name	Component Name (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Peak Comment	Peak Comment (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Quality	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 품질이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Region Height	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 품질 메트릭이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Retention Time	Retention Time (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.

표 7-6 결과 표 열 (계속)

레이블	설명
IS Signal / Nose	Signal / Noise (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Start Time	Start Time (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Total Width	Total Width (현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 경우)이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
IS Width at 50%	현재 분석 물질에 연결된 내부 표준 물질의 50% 폭이거나 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 N/A입니다.
Mass Info	구성 요소에 연결된 질량 정보입니다. MRM 실험에서는 Q1/Q3 이며 프로필(전체 스캔) 실험에서는 Start - Stop 입니다.
Modified	체크 표시는 피크 찾기 매개 변수가 정량화 방법에 표시된 원본 값에서 Peak Review 를 사용하여 수정되었음을 의미합니다.
Operator Name	샘플을 획득하는 기기 작업자의 이름입니다.
Original Filename	wiff 파일 이름입니다.
Outlier Reasons	<p>정량화 방법에서 이상값 기준이 설정되면 이 열이 구성 요소의 사전 지정 한계를 벗어나는 것으로 발견되는 기준을 표시합니다.</p> <p>Outlier Reasons 열은 정량화 방법의 Outlier Settings에만 연결되며 이것은 Results Table의 사전 설정 열입니다.</p> <p>이상값에 플래그가 지정되는 이유:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Accuracy • Concentration • Ion Ratio 수량자이지만 한정자는 아닌 피크가 존재하는 경우에 이온 비율은 두 구성 요소에 대해 모두 플래그 지정됩니다. 한정자이지만 수량자는 아닌 피크가 존재하는 경우에 이온 비율은 두 구성 요소에 대해 모두 플래그 지정됩니다. 둘 다 피크가 없는 경우에는 두 구성 요소 모두 플래그가 지정되지 않습니다. • Expected Ion Ratio를 계산할 수 없습니다.
Peak Comment	행의 임의 의견입니다.
Plate Number	데이터 획득에 사용되는 Batch Editor 에서 원래 지정되었던 오토샘플러 플레이트 번호입니다.

결과 표

표 7-6 결과 표 열 (계속)

레이블	설명
Points Across Baseline	피크 시작부터 중지까지의 스캔 수입니다.
Points Across Half Height	높이의 약 50%에서 피크 범위 내 스캔 수입니다.
Quality	이 메트릭은 통합 피크의 품질을 표시하고자 시도합니다. <ul style="list-style-type: none"> 이 값이 0에 가까우면 피크가 불량으로 통합되었음을 의미합니다(또는 실제 피크가 존재하지 않음). 이 값이 1.0에 가까우면 피크가 올바르게 통합되었으며 검토할 필요가 없음을 의미합니다.
Rack Number	데이터 획득에 사용되는 Batch Editor 에서 원래 지정되었던 오토샘플러 랙 번호입니다.
Region Height	실제 검출된 피크 근처의 최대 피크 높이입니다. 이는 Quality 필드와 함께 사용할 때 유용합니다. 품질이 낮으면서 Region Height 가 상당한 피크는 검토해야 합니다. Region Height 가 작으면 중요한 피크가 존재하지 않는 것입니다.
Relative RT	내부 표준 물질을 사용하는 분석 물질의 경우에는 Retention Time 대 IS Retention Time 비율입니다. 내부 표준 물질 또는 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 경우에는 이 값이 N/A입니다.
Retention Time	검출된 피크의 실제 머무름 시간(분 단위)입니다.
Sample Comment	샘플의 임의 의견입니다.
Sample ID	샘플의 임의 식별자입니다. 이는 데이터 획득에 사용되는 Batch Editor 에서 원래 지정되었던 값에서 초기화됩니다.
Sample Index	현재 샘플의 인덱스입니다.
Sample Name	샘플의 임의 이름입니다. 이는 데이터 획득에 사용되는 Batch Editor 에서 원래 지정되었던 값에서 초기화됩니다.
Sample Type	샘플 유형입니다. 샘플 유형 필터 페이지의 41 내용을 참조하십시오.
Signal / Noise	검출된 피크의 피크 높이 대 크로마토그램에 존재하는 노이즈 비율의 추정치입니다. SignalFinder 통합 알고리즘을 사용하면 계산된 상대 노이즈와 피크 광선 위치에서의 기준선을 이용하여 노이즈가 추정됩니다. MQ4 통합 알고리즘은 유사한 접근 방법을 사용하지만 전체 크로마토그램을 이용하여 기준선을 추정합니다. 상대 노이즈 및 신호 대 노이즈 계산 페이지의 145 내용을 참조하십시오.
Slope of Baseline	기준선 경사를 나타냅니다.

표 7-6 결과 표 열 (계속)

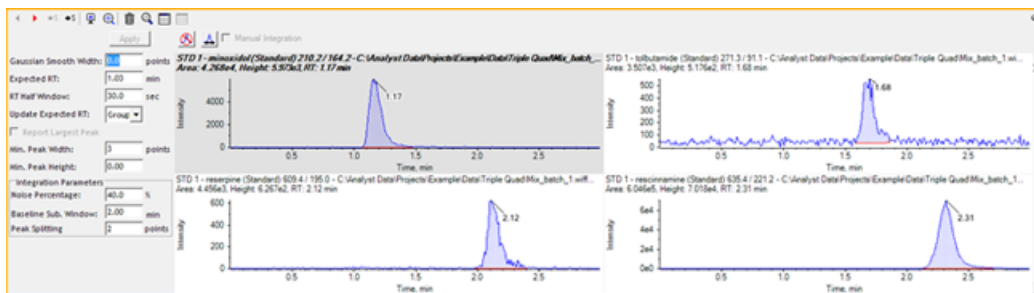
레이블	설명
Start Time	검출된 피크의 시작 머무름 시간(분 단위)입니다.
Start Time at 10%	강도가 피크 높이의 10%일 때 피크 앞면 시간(분 단위)입니다.
Start Time at 5%	강도가 피크 높이의 5%일 때 피크 앞면 시간(분 단위)입니다.
Tailing Factor	피크 앞면 기울기부터 뒷면 기울기까지의 거리를 피크 중심선부터 앞면 기울기까지의 거리 두 배 값으로 나눈 값이며, 모든 측정값은 최대 피크 높이의 5%에서 측정됩니다.
Total Width	기준선에서 크로마토그래피 피크 폭(분 단위)입니다.
Used	Standard 샘플의 경우에 체크 표시는 해당 분석 물질이 교정 곡선의 생성에 사용되었음을 의미합니다. Quality Control 샘플의 경우 체크 표시는 분석 물질이 QC 통계 계산에 사용되었음을 의미합니다. 다른 샘플 유형의 경우에는 이 필드가 정보적인 용도로만 사용됩니다.
Vial Number	데이터 획득에 사용되는 Batch Editor 에서 원래 지정되었던 오토샘플러 바이알 번호입니다.
Width at 10%	피크 높이 10%에서 측정된 피크 폭입니다.
Width at 5%	피크 높이 5%에서 측정된 피크 폭입니다.
Width at 50%	검출된 피크의 크로마토그래픽 피크 폭(분 단위)이며, 광선 강도의 절반에서 측정됩니다.

피크 찾기 프로세스의 품질을 파악할 수 있도록 원시 크로마토그램을 시각적으로 검사하려면 **Peak Review** 창을 사용하십시오. **Results Table**이 활성 상태일 때 Results Table 도구 모음에서 **Show Peak Review** 아이콘을 클릭하여 Peak Review 창을 여십시오. 검토자들은 각자의 표준 작업 절차(SOP)의 피크 통합 및 데이터 수용 기준에 따라 정량적 데이터를 검토해야 합니다.

숫자 그룹화는 지원되지 않습니다. 사용자는 모든 텍스트 박스(통합 매개 변수 등)와 그리드 (**Results Tables** 등)의 숫자들을 그룹화해서는 안 됩니다.

개선된 **Peak Review**는 겹쳐진 크로마토그램의 **Ion Ratio** 수용을 표시합니다. 또한 사용자는 단일 크로마토그램을 확대할 수 있습니다.

그림 8-1 피크 검토 창



피크 찾기 매개 변수를 적절히 조정하거나 통합 시작 포인트 및 종료 포인트를 수동으로 선택하는 방법으로 통합되지 않는 크로마토그램을 수정하려면 **Peak Review** 창을 사용하십시오. 크로마토그램을 통합하면 **Results Table**가 자동으로 새 피크 면적 및 기타 매개 변수로 자동 업데이트됩니다.

정량화 방법에는 통합에 선택된 피크를 정량화하는 데 사용되는 기준이 포함됩니다. 검토자들은 각자의 SOP의 피크 통합 및 데이터 수용 기준에 따라 정량적 데이터를 검토해야 합니다.

수동 통합

특정 크로마토그램의 피크가 수동으로 통합된 후에는 이 확인란을 선택하여 크로마토그램이 수동으로 통합되는 것을 표시할 수 있습니다. 이 상태에서 사용자가 이 확인란의 선택을 취소하면 피크의 수동 통합이 취소되고 피크가 방법 매개 변수를 사용하여 자동으로 재통합됩니다.

이 확인란과 **Enable Manual Integration Mode** 버튼의 차이는 이 확인란은 현재 피크의 상태를 반영하는 반면 이 버튼은 크로마토그램을 드래그할 때 동작을 지정한다는 것입니다.

참고: 수동 통합 모드는 활성화된 후에 확인란의 선택이 해제될 때까지 모든 창에서 활성화 상태로 유지됩니다.

적용

사용자가 피크 찾기 매개 변수를 조정한 경우에는 **Apply** 버튼이 활성화됩니다. 수정된 피크 찾기 매개 변수를 활성 크로마토그램에 적용하려면 버튼을 클릭하십시오.

크로마토그램의 특정 피크를 드래그하는 것은 수동 통합 모드인 경우 외에 **Expected RT** 매개 변수를 조정한 뒤 **Apply**를 클릭하는 것과 같습니다.

참고: 사용자가 피크 찾기 매개 변수를 수정한 뒤 **Apply** 버튼을 클릭하지 않고 다른 크로마토그램을 활성화하면 매개 변수가 적용되지 않고 변경 사항이 손실됩니다.

피크 검토 팁

- 특정 열의 **Results Table**을 정렬하고 표의 최상단 또는 최하단으로 정렬되는 크로마토그램만 검토하십시오.
- **Peak Review** 창은 항상 해당 **Results Table**과 동기화되며 **Results Table**과 동일한 피크의 크로마토그램을 동일한 순서로 표시합니다. **Results Table**에 적용된 모든 변경 사항(행 정렬, 샘플 유형 필터링 또는 구성 요소 선택)은 **Peak Review** 창에 자동으로 반영됩니다.
- 보고자 하는 크로마토그램의 수를 한 번에 선택하십시오.
- 사용 가능한 크로마토그램을 스크롤하려면 창의 오른쪽에서 스크롤 바를 이용하십시오. **Peak Review** 창이 활성 상태일 때 크로마토그램 간에 이동하려면 키보드의 위 및 아래 화살표 키를 사용하거나 스크롤 휠을 사용하십시오.
- 특정 크로마토그램은 언제든지 한 번에 한 개만 활성 상태인 것으로 간주되며 이 크로마토그램은 굵은 글꼴의 제목으로 표시됩니다. 특정 크로마토그램 내 아무 곳을 클릭하면 이 크로마토그램을 활성화할 수 있습니다.
- 크로마토그램이 활성화되면 창 왼쪽에 통합 매개 변수가 표시되고 새로 활성화된 크로마토그램을 반영하도록 업데이트됩니다. 사용자가 피크 통합 매개 변수를 조정한 뒤 **Apply**를 클릭하면 현재 활성 상태인 크로마토그램에도 영향을 미칩니다.
- **Peak Review** 창에서 해당 피크를 표시하려면 첫 번째 열 왼쪽의 회색 영역을 클릭하여 **Results Table**의 행을 선택하십시오. 사용자가 **Peak Review** 창에서 특정 크로마토그램으로 스크롤하는 경우에는 **Results Table**이 해당 행을 강조한 뒤 보기로 스크롤합니다.
- 사용자가 크로마토그램의 특정 피크를 드래그하면 **Expected RT** 통합 매개 변수가 피크의 실제 머무름 시간으로 업데이트됩니다. 그 후 새 머무름 시간이 자동으로 적용되며 피크가 다시 통합되면서 **Results Table**이 업데이트됩니다.
- 사용자가 피크를 수동 통합 모드에서 검토하는 경우에는 피크를 드래그할 때 선택된 피크가 수동으로 통합됩니다.
- 피크 검토 프로세스는 이전에 계산된 크로마토그램을 캐시하여 더 빠르게 수행할 수 있습니다. [편집 메뉴 페이지의 15](#) 내용을 참조하십시오.

피크 검토 오른쪽 클릭 메뉴

이 기능은 크로마토그램의 왼쪽에 표시되는 통합 매개 변수의 표시 여부를 제어합니다. 컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Peak Review** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

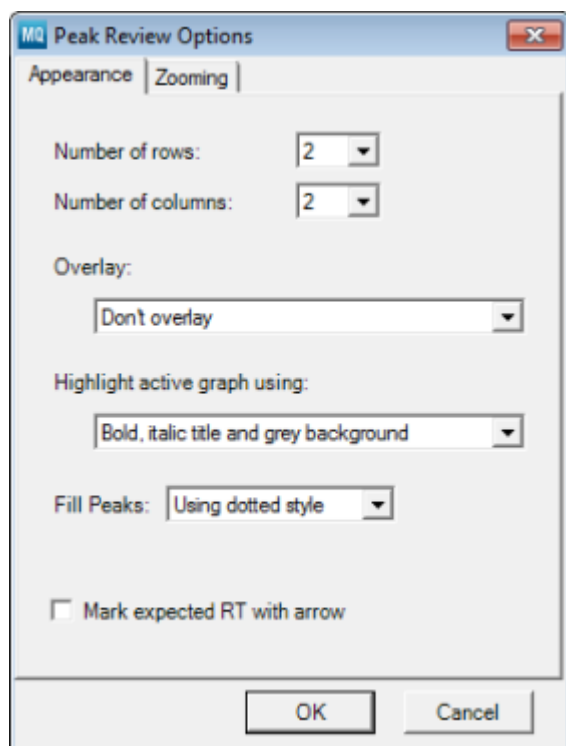
표 8-1 피크 검토 매개 변수

작업	명령
Peak Review 창의 모양을 변경합니다.	Peak Review Options 대화 상자: Appearance 탭 페이지의 62 또는 Peak Review Options 대화 상자: Zooming 탭 페이지의 65 .
피크 검토 제목 형식을 설정합니다.	피크 검토 제목 형식 설정 페이지의 66 .
개별 매개 변수에 대해 설명이 포함된 이름을 사용하여 매개 변수를 표시합니다.	Show Parameters-Normal Width 는 항상 설정되도록 기본 설정되어 있습니다.
매개 변수를 복사합니다.	매개 변수 복사 페이지의 67 .
매개 변수를 붙여넣습니다.	매개 변수 붙여넣기 페이지의 67 .
피크를 '찾을 수 없음'으로 설정합니다.	피크를 '찾을 수 없음'으로 설정 페이지의 68 .
피크를 사용합니다.	피크 사용 페이지의 68 .
구성 요소의 정량화 방법을 업데이트합니다.	구성 요소 정량화 방법 업데이트 페이지의 68 .
그룹의 정량화 방법을 업데이트합니다.	그룹 정량화 방법 업데이트 페이지의 68 .
통합 매개 변수를 그룹 내 샘플에 적용합니다.	통합 매개 변수를 그룹 내 샘플에 적용하기 페이지의 69 .
피크를 원본 방법으로 되돌립니다.	피크를 원본 방법으로 되돌리기 페이지의 69 .
구성 요소의 모든 피크를 되돌립니다.	구성 요소의 모든 피크 되돌리기 페이지의 69 .

Peak Review Options 대화 상자: Appearance 탭

Peak Review 창의 모양에 영향을 주는 옵션을 조정하려면 **Peak Review** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭하십시오. 행과 열은 각각 네 개 이하로 설정하는 것이 좋습니다.

그림 8-2 Peak Review Options 대화 상자: Appearance 탭

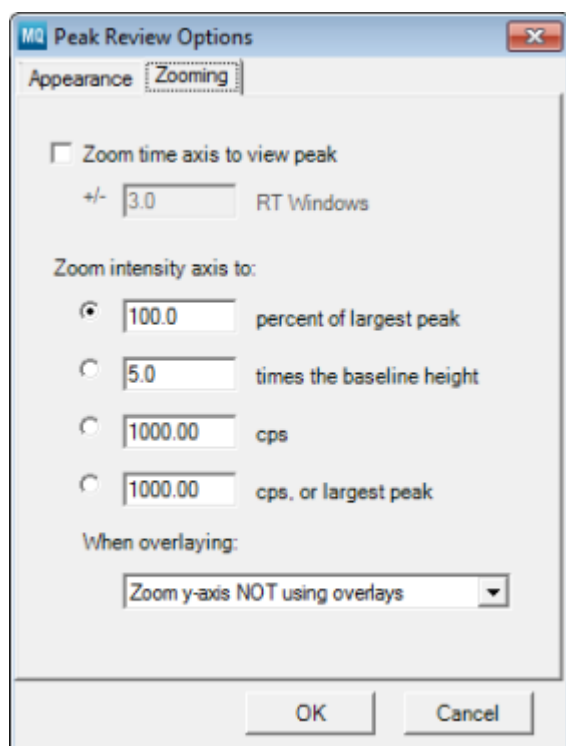


레이블	설명
Number of rows and Number of columns	동시에 표시되는 크로마토그램의 수를 제어합니다. 크로마토그램이 미리 캐시되지 않은 경우에 여러 크로마토그램을 표시하면 페이지 간에 스크롤하는 데 더 많은 시간이 소요될 수 있습니다. 편집 메뉴 페이지의 15 내용을 참조하십시오.
Overlay	<p>각 하위 창에서 주 크로마토그램의 상단에 다른 크로마토그램을 겹칠 것인지의 여부를 결정합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Don't Overlay: 다른 크로마토그램의 오버레이를 방지합니다. • All components for group: 주 구성 요소(현재 샘플)와 동일한 그룹 내 구성 요소의 모든 크로마토그램을 겹칩니다. • Analytes and IS's separately for group: 이전 옵션과 유사하지만 동일한 그룹의 모든 구성 요소를 겹치지 않고 분석 물질과 내부 표준 물질이 별도로 보관됩니다. • Internal Standard with Analyte: 분석 물질의 경우에는 분석 물질에서 사용하는 내부 표준 물질을 겹칩니다(내부 표준 물질 크로마토그램에 다른 오버레이가 없음). • Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines: 이온 비율 선을 표시합니다. Results Table에서 이온 비율 수용을 시각화할 때 이 옵션을 선택하십시오. 사용자는 정량화 방법에 정의된 그룹이 존재할 때 이온 비율 수용을 볼 수 있습니다. 그러나 Ion Ratio Lines는 수용을 표시할 뿐 최종 결과를 나타내지 않습니다. 이 선들은 크로마토그램에 피크 높이로 표시되지만 정량화 방법에서 정의한 설정에 따라 피크 면적 또는 높이에 기반하여 계산됩니다. 높이와 면적이 일치하지 않으면 사용자가 Results Table의 Ion Ratio 이상값을 확인해야 합니다.
Highlight active graph using:	현재 활성 상태인 크로마토그램의 표시 방식을 제시합니다. 굵은 글꼴 및 기울임꼴 제목과 회색 배경을 사용하도록 설정하십시오.
Fill peaks	<p>피크 통합 면적의 표시 방식을 제시합니다. 선택 사항은 다음과 같습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 문서 내 화면 캡처에 사용되는 굵은 점선 스타일을 사용합니다. • 실선 스타일을 사용합니다. • 채우기를 사용하지 않습니다. 모든 사례에서 피크 기준도 그려집니다(붉은색). <p>세 번째 옵션을 사용하면 기준선만 그려지며 피크는 채워지지 않습니다.</p>
Mark expected RT with arrow	시간 축 아래에 그려진 파란색 화살표로 Expected Retention Time 을 표시합니다. 이 기능은 통합 피크가 예상 RT에 근접한지의 여부를 결정할 때 유용합니다.

Peak Review Options 대화 상자: Zooming 탭

Peak Review 창의 모양에 영향을 주는 옵션을 조정하려면 **Peak Review** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭하십시오. **Zoom intensity axis to** 기능은 크로마토그램의 y 축을 자동 조정하는 데 사용됩니다.

그림 8-3 Peak Review Options 대화 상자: Zooming 탭



레이블	설명
Zoom time axis to view peak	이 기능을 선택하면 크로마토그램의 x 축이 전체 실행의 일부만 표시하도록 자동 조정됩니다. 이 기능은 긴 LC 실행에 유용하게 사용되며 관심 영역을 더욱 분명하게 표시합니다. 범위 폭은 여러 RT Window 통합 매개 변수와 관련하여 표시됩니다. 확대 영역의 총 폭은 RT Window 에 지정된 다중 항목 수의 두 배입니다.
Zoom intensity axis to percent of largest peak	크로마토그램의 y 축을 자동 조정하는 데 사용됩니다. 크로마토그램의 표시된 x 범위 내에서 지정된 최대 피크 백분율로 y 축을 조정합니다. 이는 Zoom time axis to view peak 기능을 사용할 경우 총 LC 실행 길이보다 작습니다.
Zoom intensity axis to times the baseline height	크로마토그램의 y 축을 자동 조정하는 데 사용됩니다. 기준선 영역 자체에 포커스를 맞추는 데 사용됩니다.
Zoom intensity axis to cps	y 축을 지정 값으로 직접 조정합니다.

피크 검토

레이블	설명
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	y 축을 지정 값 또는 최대 피크 중 작은 값으로 조정합니다.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Zoom intensity axis to the section using only the main data set 설정을 유지합니다. 이 설정은 이 오버레이의 강도가 주 데이터 세트보다 강할 경우에 일부만 표시되는 상황을 초래할 수 있습니다.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	주 데이터 세트와 모든 오버레이를 사용하며 최대 전체 y 값을 사용합니다. 이 기능은 항상 오버레이를 표시하는 상태로 유지합니다.
When overlaying Use a percentage y-axis	백분율 배율을 이용하여 주 데이터 세트와 오버레이를 각각 조정합니다. 이 경우 각 트레이스가 전체 사용 가능 높이를 사용합니다. 그러나 상대 피크 높이는 시각적으로 직접 비교할 수 없습니다.

팁! 축을 전체 데이터 세트 내에서 가장 강력한 피크로 조정하려면 y 축에서 더블 클릭하십시오.

이 기능이 선택되면 파란색 실선으로 된 트레이스를 사용하여 현재 검토되는 피크의 크로마토그램이 그려지며, 통합된 피크 면적이 표시됩니다. 다른 구성 요소(동일 샘플)의 크로마토그램(통합 피크 면적 제외)은 파선으로 겹쳐집니다.

그래프가 이 방식으로 오버레이를 표시하면 제목 영역 중 아무 곳을 더블 클릭하여 모든 크로마토그램의 제목을 표시하는 방식과 활성화된 크로마토그램의 제목만 표시하는 방식 간에 전환할 수 있습니다.

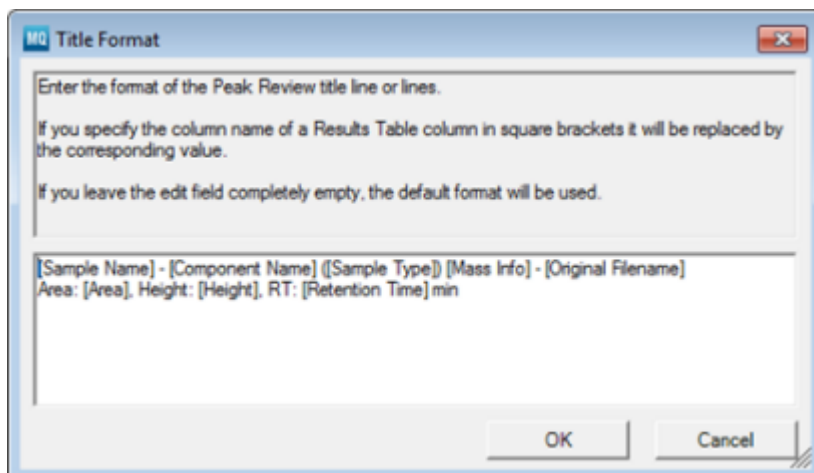
팁! x 축에서 두 번 클릭하면 그래프가 홈 보기로 돌아가면서 모든 데이터가 표시됩니다. 시간 범위를 선택하려면 축에서 드래그하여 확대하십시오.

피크 검토 제목 형식 설정

각 크로마토그램의 그래프 타이틀에 표시되는 정보를 사용자 지정하려면 이 대화 상자를 사용하십시오. 사용자가 **Results Table**에 대괄호로 열 이름을 입력하면 이 이름이 현재 샘플 및 구성 요소의 필드 값으로 대체됩니다. 사용자는 그 상태 그대로 추가 텍스트 또한 입력할 수 있습니다. 피크 검토 제목에 샘플 이름 [Sample Name]이 포함되는 것이 좋습니다.

- **Peak Review** 창의 오른쪽을 클릭한 후 **Set Peak Review Title Format**을 클릭하십시오.

그림 8-4 Title Format 대화 상자



매개 변수 복사

Peak Review 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭하여 이 명령에 액세스할 수 있습니다. 이 명령은 크로마토그램 간에 피크 찾기 매개 변수를 복사할 때 **Paste Parameters**와 함께 사용하십시오. 이 명령은 매개 변수의 조정 사항이 여러 크로마토그램에 동일하게 적용되어야 하는 경우에 사용할 수 있습니다.

1. 활성 크로마토그램이 열린 그래프에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Copy Parameters**를 클릭합니다.
2. 구성 요소의 모든 크로마토그램에 변경 사항을 적용하려면 **Update Quantitation Method for Component**를 사용하십시오

매개 변수 붙여넣기

1. 활성 크로마토그램이 열린 그래프에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Copy Parameters**를 클릭합니다.
2. 다른 크로마토그램에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Paste Parameters**를 클릭합니다.

이전에 복사한 매개 변수가 새 크로마토그램에 적용됩니다.

피크를 '찾을 수 없음'으로 설정

- 활성 크로마토그램이 열린 그래프에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Set Peak to 'Not Found'**를 클릭하면 선택한 크로마토그램에서 통합이 제거됩니다.

피크 사용

- 활성 크로마토그램이 열린 그래프에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Use Peak**를 클릭하면 고정 곡선에 활성 피크를 포함하거나 제거할 수 있습니다.

구성 요소 정량화 방법 업데이트

특정 크로마토그램의 피크 찾기 매개 변수를 조정한 후에 이러한 구성 요소 매개 변수를 이용하는 Results Table에 저장되는 정량화 방법 사본을 조정하려면 이 기능을 선택하십시오.

- 피크 찾기 매개 변수를 조정하고 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Update Quantitation Method for Component**를 클릭하십시오.

특정 구성 요소는 모든 샘플이 자동으로 통합되어 새 매개 변수가 이용되며 **Peak Review** 창 및 **Results Table**이 업데이트됩니다. 피크를 수동으로 통합한 경우에는 사용자가 재통합을 모든 피크에 적용할 것인지 또는 수동 통합된 피크에만 적용할 것인지 선택해야 합니다.

그룹 정량화 방법 업데이트

Update Quantitation Method for Component 명령과 유사하지만 현재 활성 상태인 크로마토그램의 구성 요소와 동일한 그룹에 포함되는 모든 구성 요소에 통합이 적용됩니다. 사용자가 여러 구성 요소를 여러 그룹에 할당함에 따라 해당 그룹에 할당된 구성 요소들이 동일한 머무름 시간을 가질 것으로 예상되는 경우에는 이 기능이 유용하게 사용되기 때문에 사용자가 그룹 내

모든 구성 요소의 예상 머무름 시간 등 매개 변수들을 한 번에 재설정할 수 있습니다. 이 기능은 그룹의 구성 요소들이 동일한 머무름 시간을 갖지 않는 경우에 유용하지 않습니다.

- 피크 찾기 매개 변수를 조정하고 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Update Quantitation Method for Group**를 클릭하십시오.

통합 매개 변수를 그룹 내 샘플에 적용하기

이 기능을 사용하면 특정 크로마토그램의 피크 찾기 매개 변수를 조정한 후 **Results Table**로 저장된 정량화 방법 사본의 원본 매개 변수를 크로마토그램에 적용할 수 있습니다.

- 특정 크로마토그램의 피크 찾기 매개 변수를 조정한 후에 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**를 클릭하십시오.

피크를 원본 방법으로 되돌리기

이 기능을 사용하면 특정 크로마토그램의 피크 찾기 매개 변수를 조정한 후 **Results Table**로 저장된 정량화 방법 사본의 원본 매개 변수를 크로마토그램에 적용할 수 있습니다.

- 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Revert Peak to Original Method**를 클릭하십시오.

구성 요소의 모든 피크 되돌리기

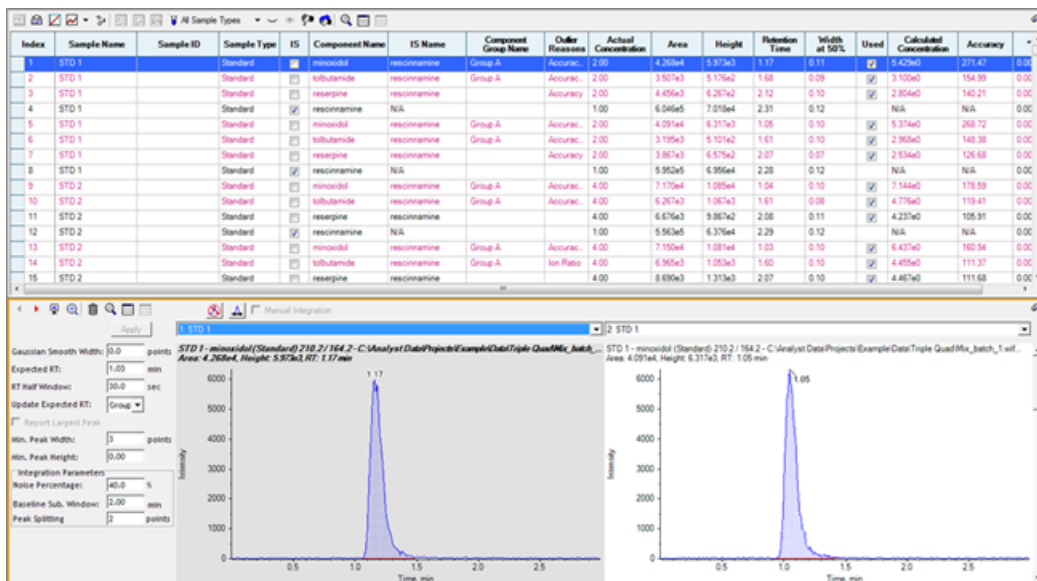
이 기능을 사용하면 일부 크로마토그램의 피크 찾기 매개 변수를 조정한 후 **Results Table**에 저장된 정량화 방법 사본의 원본 매개 변수를 활성 크로마토그램과 같은 구성 요소의 모든 크로마토그램에 적용할 수 있습니다. 피크를 수동으로 통합한 경우에는 사용자가 재통합을 모든 피크에 적용할 것인지 또는 수동 통합된 피크에만 적용할 것인지 선택해야 합니다.

- 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Revert All Peaks for Component**를 클릭하십시오.

특정 표적 화합물을 스크리닝하려면 **Side-by-side Sample Review** 기능을 사용하십시오. 사용자가 샘플 간 피크 반응을 비교하기 위해 최대 여섯 개 샘플을 선택할 수 있습니다. 검토자들은 각자의 표준 작업 절차(SOP)의 피크 통합 및 데이터 수용 기준에 따라 정량적 데이터를 검토해야 합니다.

Results Table이 활성 상태일 때 **Results Table** 도구 모음에서 **Side by Side Sample Review** 아이콘을 클릭하여 **Side by Side Sample Review** 창을 여십시오.

그림 9-1 좌/우 샘플 검토 창



정량화 방법에는 통합에 선택된 피크를 정량화하는 데 사용되는 기준이 포함됩니다. 검토자들은 각자의 SOP의 피크 통합 및 데이터 수용 기준에 따라 정량적 데이터를 검토해야 합니다.

병렬 샘플 검토 수행

1. Results Table을 엽니다.
2. **Side by Side Sample Review** 아이콘을 클릭합니다.
3. **Side by Side Sample Review** 창의 목록에서 샘플을 선택하십시오.

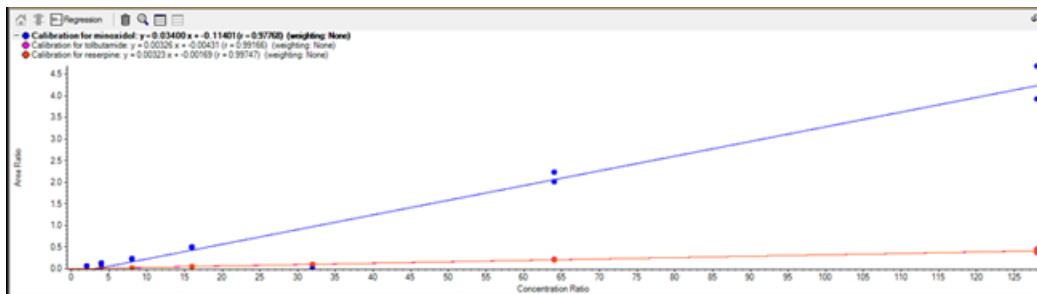
통합 매개 변수가 표시됩니다.

팁! Side by Side Sample Review 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Options**를 클릭하여 좌/우 검토에서 행 또는 열 수를 변경하십시오.

4. 다른 목록에서 다른 샘플을 선택하십시오.

확정 농도의 **Standard** 샘플을 사용하는 경우 각 분석 물질의 회귀 분석을 시각적으로 검사하려면 **Calibration** 창을 사용하십시오. 이 창은 사용자가 상대 정량화를 수행하며 **Standard** 샘플을 보유하지 않은 경우에 적용되지 않습니다. **Results Table**이 활성 상태일 때 도구 모음에서 **Show Calibration**을 클릭하십시오.

그림 10-1 교정 창

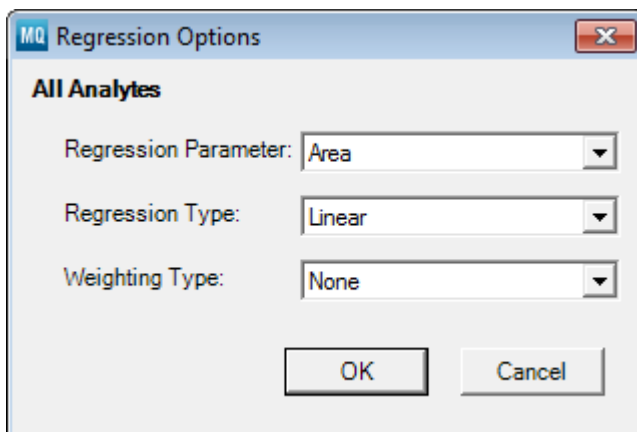


사용자는 회귀 검사뿐 아니라 **Standard** 샘플을 회귀에 사용되지 않도록 제외할 수도 있습니다. 조정을 수행한 후에는 새 회귀가 자동으로 계산되며 각 분석 물질의 모든 샘플에 대해 **Calculated Concentration** 및 **Accuracy**와 같은 매개 변수들이 재계산됩니다. [회귀 수식 페이지의 123](#) 내용을 참조하십시오.

Regression Options 대화 상자

분석 물질이 여러 개인 경우에는 회귀 매개 변수를 하나씩 변경하는 것보다 **Regression Options** 대화 상자를 사용하여 변경 사항을 적용하는 것이 더 쉽습니다.

그림 10-2 Regression Options 대화 상자



교정 팁

- 연결된 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 y 축은 정량화 방법에서 선택된 피크 **Area** 또는 **Height**입니다. 내부 표준 물질이 있는 분석 물질의 y 축은 피크 **Area** 또는 **Height** 비율입니다(내부 표준 물질에 대한 분석 물질의 비율).
- 연결된 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 x 축은 **Actual Concentration**입니다. 그 반대의 경우에는 **Actual Concentration** 비율입니다(내부 표준 물질에 대한 분석 물질의 비율).
- **Components & Groups List**에서 두 개 이상의 분석 물질을 선택하면 모든 분석 물질의 교정이 겹쳐집니다. 그렇지 않은 경우에는 선택된 분석 물질의 교정이 표시됩니다.
- 제목 영역은 항상 활성 분석 물질의 이름 및 연결된 회귀 수식을 상관 계수와 함께 표시합니다. **Standard** 샘플이 없는 경우와 같이 회귀를 계산할 수 없는 경우에는 제목을 통해 표시됩니다. 여러 분석 물질의 교정이 겹쳐진 경우에는 제목을 전환하여 모든 분석 물질의 정보를 표시하거나 제목 영역 내 아무 곳을 두 번 클릭하여 하나의 활성 분석 물질만 표시하십시오. 겹쳐진 분석 물질이 많은 경우에는 모든 정보를 표시하지 못할 수 있습니다. 이 경우에는 드래그하여 제목을 스크롤하십시오.
- 사용 중인 **Standard** 샘플의 데이터 포인트는 항상 이 포인트를 사용하는 교정 수식으로 플롯이 그려집니다. 사용자는 제외된 **Standard** 샘플 및 **Quality Control** 샘플의 데이터 포인트를 선택적으로 표시할 수 있습니다.
- 사용자가 데이터 포인트를 클릭하면 **Results Table** 내에 해당 행이 어딘가에 현재 표시되어 있으며 숨겨져 있지 않은 경우 이 행이 자동으로 선택되고 뷰로 스크롤됩니다.

교정 오른쪽 클릭 메뉴

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Calibration** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 10-1 교정 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Exclude (or Include)	사용자가 제외되지 않은 표준 물질 데이터 포인트에서 마우스 오른쪽으로 직접 클릭하는 경우에는 회귀 계산에서 샘플을 제외할 때 이 옵션이 사용됩니다(클릭한 데이터 포인트의 샘플 및 분석 물질). 샘플이 이미 제외된 경우에는 메뉴 항목의 텍스트가 Include 로 표시되며 이 텍스트를 선택할 경우 해당 포인트가 포함됩니다. 선택을 완료하면 회귀가 계산되고 Results Table 이 업데이트됩니다. 이 기능은 Results Table 내에서 해당 행의 Used 체크 박스 표시를 지우거나 선택하는 것과 동일하게 작동합니다.
Exclude – All Analytes (or Include – All Analytes)	선택된 데이터 포인트에 해당되는 분석 물질뿐 아니라 모든 분석 물질을 제외하거나 포함합니다.

표 10-1 교정 오른쪽 클릭 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Show Excluded Standards	이 기능을 선택하면 제외된 표준 물질(있을 경우)의 데이터 포인트가 열린 원으로 그려집니다. 이 기능의 체크 표시를 지우면 제외된 표준 물질이 표시되지 않습니다.
Show QCs	이 기능을 선택하면 Quality Control(QC) 샘플이 열린 마름모꼴로 그려집니다. 이 기능의 체크 표시를 지우면 QC 샘플이 표시되지 않습니다.
Show Legend	<p>이 기능을 선택하면 다양한 샘플 유형의 포인트 기호를 표시하는 플롯 오른쪽에 범례가 그려집니다(Standard 샘플은 닫힌 원, 제외된 Standards는 열린 원, Quality Control 샘플은 열린 마름모꼴).</p> <p>참고: Show QCs 옵션이 선택되지 않은 경우와 같이 사용자가 특정 샘플 유형을 보고 있지 않을 때는 이러한 샘플 유형의 항목이 표시되지 않습니다. QC 샘플과 제외된 표준이 모두 표시되지 않는 경우에는 이 옵션을 사용할 수 없으며 범례가 그려지지 않습니다.</p>
Use Percent Y-Axis	<p>이 기능을 선택하지 않으면 플롯의 y 축이 절대 피크 Area 또는 Height(또는 내부 표준 물질을 이용하는 경우 피크 Area 또는 Height 비율)의 단위로 표시됩니다. 이 기능을 선택하면 y 축이 각 분석 물질의 최대 y 값을 갖는 데이터 포인트의 백분율로 개별 표시됩니다.</p> <p>백분율 축은 두 개 이상의 분석 물질이 겹쳐져 있고 해당 절대 감응률이 큰 차이를 보일 때 각 트레이스가 전체 사용 가능 수직 면적을 이용할 수 있도록 조정할 수 있기 때문에 매우 유용합니다. 그렇지 않은 경우에는 감응률이 낮은 분석 물질이 x 축과 가까이 위치하며 플롯을 자세히 보려면 확대해야 합니다.</p>
Log-Log Plot	플롯 그리기 Area 와 Concentration 간 보기 및 Log(Area) 와 Log(Concentration) 간 보기를 전환하는 데 사용됩니다.

분석의 재현 가능성과 관련된 정보를 보려면 **Statistics Table**을 사용하십시오. 이 표의 각 행은 동일한 반응을 보일 것으로 예상되는 동일한 분석 물질의 관련 피크 그룹에 대한 평균 및 표준 편차와 같은 정보를 요약합니다.

그림 11-1 통계 창

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	monocidin	2.00	2 of 2	5.402e0	3.554e-2	0.70	270.59	5.429e0	5.375e0
2	monocidin	4.00	2 of 2	6.791e0	4.993e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	monocidin	8.00	2 of 2	1.025e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	monocidin	16.00	2 of 2	1.791e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.814e1	1.768e1
5	monocidin	32.00	1 of 2	3.396e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.396e0
6	monocidin	64.00	2 of 2	6.580e1	4.679e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	monocidin	128.00	2 of 2	1.302e2	1.582e1	12.16	101.69	1.414e2	1.199e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.352e-2	3.08	161.69	3.109e0	2.965e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.619e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.779e0	4.456e0
10	tolbutamide	8.00	2 of 2	7.819e0	4.579e-1	5.86	97.74	7.496e0	8.143e0
11	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.570e1	2.324e-1	1.48	98.10	1.553e1	1.586e1
12	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.906e1	1.189e0	3.98	93.32	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.405e1	3.313e0	5.11	101.33	6.251e1	6.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.429e2	1.146e2
15	reserpine	2.00	2 of 2	2.889e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.894e0	2.834e0
16	reserpine	4.00	2 of 2	4.362e0	1.633e-1	3.76	108.80	4.237e0	4.467e0
17	reserpine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.813e0	7.970e0
18	reserpine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.549e1

레이블	설명
Row	행 번호입니다. 다른 열 머리글 중 하나를 클릭하면 표를 정렬할 수 있습니다. 이 머리글을 클릭하면 원본 보기로 표를 되돌립니다.
Component Name	분석 물질 이름입니다.
Actual Concentration (or Sample Name)	실제 농도별로 그룹화하면 이 열에서 농도를 표시합니다. 샘플 이름별로 그룹화하면 열 제목이 변경되고 샘플 이름이 표시됩니다.
Num. Values	n의 m을 표시합니다. 이 때 n은 실제 농도 (또는 동일한 샘플 이름)의 총 샘플 수이며 m은 계산에 사용되는 이러한 샘플의 수입니다. 샘플은 해당 피크가 통합되지 않거나 Used 필드가 수동으로 지워진 경우에 사용되지 않습니다.
Mean	사용된 샘플의 평균입니다.
Standard Deviation	사용된 샘플의 표준 편차입니다.
Percent CV	백분율로 표시한 변동 계수이며: $100 * (\text{Standard Deviation}) / \text{Mean}$.
Accuracy	평균값을 실제 농도로 나눈 값의 백분율로서: $100 * \text{Mean} / (\text{"Actual Concentration"})$. 이 필드는 실제 농도별로 그룹화할 때만 표시되며 샘플 이름별로 그룹화할 때 표시되지 않습니다.
Values	샘플의 개별 값은 추가 열에 나타납니다. 해당 샘플이 통합되지 않으면 이 값은 N/A입니다. Used 필드가 수동으로 지워지면 이 값은 취소선이 그어진 상태로 표시됩니다.

통계 표 팁

- **Statistics Table**은 선택된 분석 물질의 해당 행을 표시하도록 **Components & Groups List**에 연결됩니다. **All Components** 또는 **All Analytes** 항목이 선택된 경우에는 모든 분석 물질의 항목이 존재합니다. 개별 분석 물질이 선택된 경우에는 해당 분석 물질의 항목만 존재합니다. 목록에서 개별 내부 표준 물질을 선택한 경우에는 **Statistics Table**이 빈 상태가 됩니다. [구성 요소 및 그룹 목록 페이지의 37](#) 내용을 참조하십시오.
- 사용자가 **Value** 셀 중 하나를 클릭하면 분석 물질과 샘플의 **Results Table**에 해당되는 행이 선택됩니다. 단, 이 때 이 행이 현재 **Statistics Table**에 표시된 상태여야 합니다. **Results Table**에 **Unknown** 샘플만 표시됩니다. **Statistics Table**에 **Standard** 샘플 정보가 포함되면 해당 행이 **Results Table**에 표시되지 않습니다. **Peak Review** 창이 표시된 경우에는 이 창이 **Results Table**에 연결되며 셀을 클릭할 때 업데이트됩니다.
- 열 제목 중 하나를 클릭하면 **Statistics Table**을 정렬할 수 있습니다.
- 사용자는 전체 **Statistics Table**을 복사하거나 관심 행만 복사할 수 있습니다.
 - 전체 표를 복사하려면, **Edit > Copy**를 클릭하십시오.
 - 관심 행만 복사하려면 수동으로 행을 선택한 뒤 **Edit > Copy**를 클릭하십시오.
- 열 폭을 조정한 경우에는 **Statistics Table**을 다음에 다시 표시할 때 이 폭이 복구됩니다.
- 형식과 정밀도는 **Results Table**과 같습니다.
- **Group by Concentration for Standards and QCs**는 **Displayed Actual Concentration**에 기반하며 **Results Table**에 저장되는 **Actual Concentration**에 기반하지 않습니다. Std 1 농도가 0.001이고 Std 2 농도가 0.005이며 표시 형식이 0인 경우에는 Std 1 및 Std 2가 0으로 취급되기 때문에 함께 그룹화됩니다. 두 가지를 별도로 그룹화하려면 **Column Settings** 대화 상자에서 **Analyte Concentration**의 정밀도를 0.000으로 설정하십시오. Std 1이 0.500이고 Std 2가 0.499인 경우에는 정밀도를 0.00으로 설정하여 함께 그룹화할 수 있습니다.

통계 표 오른쪽 클릭 메뉴

Use Peak 명령에 액세스하려면 **Statistics Table**에서 마우스 오른쪽으로 클릭하십시오. 이 명령을 사용하면 **Value** 열 중 한 곳에서 선택한 셀에 대응되는 샘플과 분석 물질의 **Used** 필드를 설정할 수 있습니다. 마우스 오른쪽으로 클릭하여 메뉴를 열기 전에 **Value** 열 중 한 곳에 해당 셀을 클릭하여 선택하십시오.

Results Table 열의 값을 행 번호 또는 다른 열과 비교하여 플롯으로 그리려면 Metric Plots을 사용하십시오. 이 플롯은 특히 모든 크로마토그램을 Peak Review 창에서 수동으로 검토해야 하는 경우를 비롯해 시각적 데이터 검토 시 매우 유용합니다.

메트릭 플롯 생성

1. **Results Table**에서 한 두 개의 열을 선택하십시오.
2. **Show Metric Plot**을 클릭합니다.

한 개의 열을 선택한 경우에는 결과 플롯에 열 값이 표의 행 번호 함수로 표시됩니다. 두 개의 열을 선택한 경우에는 두 열 값의 플롯이 그려집니다. 선택된 두 열 중 첫 번째는 x 값을 포함하며 두 번째는 y 값을 포함합니다.

메트릭 플롯 설정 저장

1. 열을 선택하여 메트릭 플롯을 연 뒤 **Show Metric Plot**을 클릭합니다.
2. 플롯에서 오른쪽 마우스를 클릭한 뒤 **Save Setting**을 클릭합니다.

이 경우 사용자가 해당 열을 매번 선택할 필요 없이 자주 사용하는 **Metric Plots**를 빠르게 생성할 수 있습니다.

메트릭 플롯 팁

- 사용자가 데이터 포인트를 마우스 왼쪽 버튼으로 클릭하면 Results Table의 해당 행이 자동으로 선택되고 보기로 스크롤됩니다. 또한 Peak Review 창이 열린 경우에는 해당 크로마토그램을 표시하도록 업데이트됩니다. 이 경우 이상값 피크 검토를 수행할 때 한결 편리합니다.
- Components & Groups 목록에서 두 개 이상의 구성 요소를 선택하면 모든 구성 요소의 트레이스가 겹쳐집니다. 그렇지 않은 경우에는 선택된 하나의 구성 요소의 트레이스가 표시됩니다.
- 제목 영역은 항상 활성 트레이스 이름을 표시합니다. 여러 구성 요소의 트레이스가 겹쳐진 경우에는 제목을 전환하여 모든 트레이스의 정보를 표시하거나 제목 영역 내 아무 곳을 더블 클릭하여 하나의 활성 분석 물질만 표시하십시오. 특정 트레이스는 해당 제목 왼쪽의 색상 지점을 클릭하면 활성화할 수 있습니다.
- Metric Plot 설정을 다시 사용하려면 이 설정을 저장하십시오. Metric Plot에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 뒤 **Save Settings As**를 클릭하십시오.

메트릭 플롯 오른쪽 마우스 클릭 메뉴

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 Metric Plot에서 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 12-1 메트릭 플롯 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Regression	메트릭 플롯에 회귀선을 표시합니다. <ul style="list-style-type: none"> • Regression Type • Weighting Type • Include standard deviation lines and Multiplier Regression 대화 상자 페이지의 79 내용을 참조하십시오.
Display "N/A" as 0.0	이 옵션이 선택되면 y 값 0을 이용하여 숫자가 아닌 플롯 값이 됩니다. 그렇지 않은 경우에는 이 포인트가 플롯에서 누락됩니다. 예를 들어 통합할 수 없는 피크의 Retention Time 은 N/A로 보고됩니다. 이 기능은 이러한 피크에 포인트를 제시하여 사용자가 이와 같은 잠재적인 문제 샘플을 보고 포인트를 클릭하여 이것을 Peak Review 창에 연결할 수 있습니다.
Show Legend	다양한 샘플 유형에 이용되는 포인트 기호에 주석을 추가하는 범례를 변경합니다.
Label Active Series (using sample names)	데이터 포인트가 Results Table 의 Sample Name 필드 텍스트를 이용하여 레이블 지정되는지의 여부를 변경합니다. 겹치는 트레이스가 두 개 이상인 경우에는 현재 활성 트레이스가 레이블 지정됩니다.
Use Percent Y-Axis	y축이 최대 y 값의 절대 단위를 사용하는지 또는 백분율을 사용하는지의 여부를 변경합니다. 백분율 기능을 사용하면 겹쳐진 각 트레이스와 무관하게 백분율이 계산됩니다. 이 기능은 여러 구성 요소의 겹쳐진 트레이스의 플롯을 그리는 데 사용할 수 있으며 구성 요소의 메트릭 반응은 큰 차이를 보입니다.
Start Y-Axis at Zero	y 축이 y=0에서 시작하는지 또는 플롯을 그려야 하는 최소 y 값에서 시작하는지의 여부를 변경합니다.
Connect Points With Lines	데이터 포인트가 선으로 연결되는지의 여부를 변경합니다.
Save Setting	현재 플롯이 설정과 연결된 경우에는 이 기능이 현재 기능을 저장합니다. 그렇지 않은 경우에는 이 기능이 Save Setting As 기능과 동일하게 작동합니다.

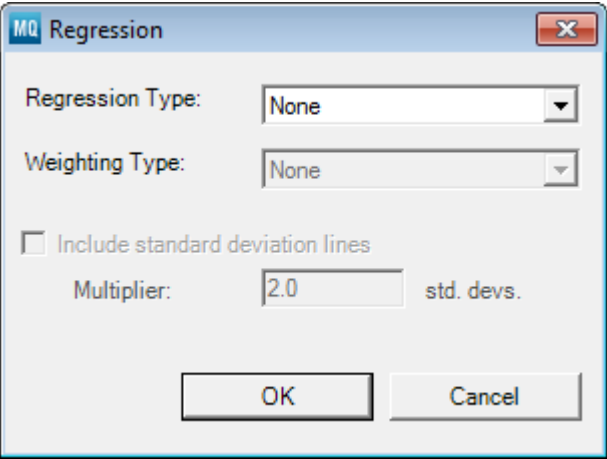
표 12-1 메트릭 플롯 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Save Setting As	동일한 열의 플롯을 자주 그리는 경우에는 사용자가 플롯 그리기 옵션을 설정으로 저장할 수 있습니다. 이 경우 필요한 열이 현재 Results Table 에 표시될 때도 사용자가 플롯을 빠르게 생성할 수 있습니다. 해당 열뿐만 아니라 여러 플롯 그리기 옵션도 저장됩니다. 설정이 저장되면 Metric Plot 메뉴에 이름이 표시됩니다.
Delete Setting	현재 플롯이 설정과 연결된 경우에는 이 기능을 이용하여 설정을 삭제하십시오.

Regression 대화 상자

메트릭 플롯에 회귀선을 표시할 때 클릭하십시오.

그림 12-1 Regression 대화 상자



레이블	설명
Regression Type	다양한 회귀 유형을 포함합니다(선형, 이차 등). Mean 회귀 유형은 모든 데이터 포인트의 평균 y 값 위치에서 수평선을 제시하고 Median 회귀 유형은 포인트의 y 값의 중앙값 위치에서 수평선을 제시합니다. 또한 이전의 모든 회귀를 제거하는 None 기능도 있습니다.
Weighting Type	다양한 가중치 유형은 가중치 인자 페이지의 124 에서 설명됩니다.
Include standard deviation lines and Multiplier	이 옵션은 Mean 또는 Median 회귀 유형을 선택했을 때 사용할 수 있습니다. 이 옵션을 선택하면 기본 선 초과 및 미만 표준 편차에 대해 지정된 수를 플롯으로 그릴 수 있도록 추가적인 수평 파선이 추가됩니다. 이 옵션은 평균으로부터 표준 편차 2 또는 3을 초과하는 포인트를 볼 때 사용하십시오.

정량화 방법을 생성하거나 기존 정량화 방법을 편집하려면 **Quantitation Method Editor**를 사용하십시오.

일반 워크플로우는 **New Results Table wizard**를 이용하여 정량화 방법을 생성하는 것입니다. 그러나 사용자는 필요할 때 이용할 수 있는 정량화 방법을 생성하기 위해 **Quantitation Method Editor**를 사용할 수 있습니다.

구성 요소 탭

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Components** 탭에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 13-1 구성 요소 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Find Component by Name	Name 이 텍스트와 일치하는 구성 요소를 선택할 때 사용합니다. 검색 결과를 찾을 때 반드시 정확한 텍스트가 필요하지는 않습니다. 이 기능은 여러 구성 요소가 존재하는 경우에 특정 구성 요소를 선택하고자 할 때 유용합니다. 스프레드시트에서 처음에 선택된 행이 없는 경우에는 첫 번째 행부터 검색이 시작됩니다. 그렇지 않은 경우에는 선택한 행 이후부터 검색이 시작되며 시작 지점부터 다시 시작됩니다. 이 기능은 Name 에 텍스트가 포함된 구성 요소가 두 개 이상일 때 유용합니다. 첫 번째 검색에서 구성 요소를 찾지 못한 경우에는 첫 번째 구성 요소를 선택한 채로 표 내 다른 검색 결과를 찾을 수 있도록 다시 검색하십시오.
Insert Row Above	현재 선택된 행 바로 위의 하나의 빈 행을 삽입합니다.
Delete Selected Rows	표에서 현재 선택된 행을 제거합니다.
Sum Multiple Ions	여러 MRM 전환 또는 전체 스캔 질량 범위의 크로마토그램을 총합합니다. 이 명령이 선택되면 Components 표에 추가 질량 열이 추가됩니다. 해당 행에서 선택된 모든 질량은 해당 분석 물질 또는 내부 표준 물질의 총합 XIC를 생성하는 데 사용됩니다. 이 기능은 항상 선택하는 것이 좋습니다.
Groups	그룹 하위 메뉴 페이지의 81 내용을 참조하십시오.
Internal Standards	내부 표준 물질 하위 메뉴 페이지의 83 내용을 참조하십시오.

그룹 하위 메뉴

표 13-2 그룹 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Using Constant Group Size	Set Automatic Groups 대화 상자를 여는 데, 이는 각 그룹의 첫 번째 구성 요소 이름을 사용해 Group 열을 자동으로 채우는 데 사용되며 각 그룹에 동일한 구성 요소 수가 있다고 추정합니다. Set Automatic Groups 대화 상자 페이지의 82 내용을 참조하십시오.
By Filling Down Existing Groups	여러 개의 연속적인 구성 요소에 동일한 그룹 이름을 자동으로 작성합니다. 이 명령을 사용하려면 각 개별 그룹의 첫 번째 구성 요소에 대한 그룹 이름을 수동으로 지정한 뒤 이 명령을 선택하십시오. 지정된 그룹 이름은 그룹 이름이 비어 있는 이후의 모든 구성 요소에 대해 아래로 채워집니다. Name 이 채워진 행만 고려 대상입니다.
Using Q1 Masses	MRM 실험에만 이용 가능합니다. Q1 질량을 사용하는 Group 열을 채우는 데 사용됩니다. 이 기능은 동일한 화합물의 여러 전환에 Q1 질량을 지정하고 다양한 단편을 모니터링할 때 유용합니다. 수많은 구성 요소가 있고 동일한 Q1 질량을 일부가 동시 공유할 경우, 동일한 그룹으로 배정됩니다.
Using Q3 Masses	MRM 실험에만 이용 가능합니다. Q3 질량을 사용하는 Group 열을 채우는 데 사용됩니다. 이 기능은 한 화합물의 여러 동위 원소 유형을 모니터링하는 동시에(다양한 Q1 질량) 연속적인 Q3 질량을 모니터링할 때 유용합니다. 수많은 구성 요소가 있고 동일한 Q3 질량을 일부가 동시 공유할 경우, 동일한 그룹으로 배정됩니다.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Q1 및 Q3 질량의 차이를 사용해 Group 열을 채우는 데 사용됩니다(MRM 실험에만 이용 가능). 이 기능은 한 화합물의 여러 동위 원소 유형을 모니터링하는 동시에(다양한 Q1 질량) 수정된 모든 동위 원소를 포함하는 연속적인 Q3 단편을 모니터링할 때 유용합니다. 구성 요소가 여러 개이며 그 중 일부가 우연히 동일한 질량 차이를 공유하는 경우에는 이 구성 요소들이 같은 그룹에 할당됩니다.
Add Group to Start of Component Name	분석 물질 또는 내부 표준 이름의 시작부에 그룹 이름을 첨부합니다. 이 기능은 초기 이름이 고유하지 않을 때 유용할 수 있습니다.

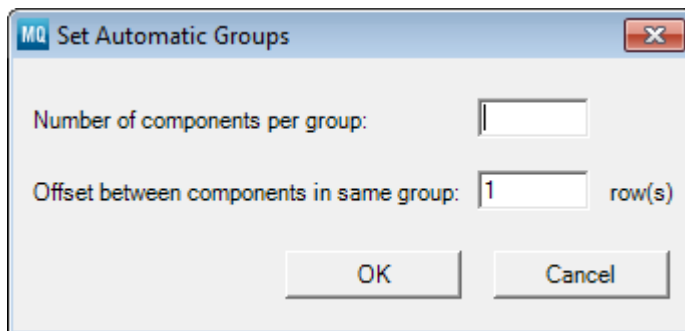
표 13-2 그룹 메뉴 옵션 (계속)

메뉴 옵션	설명
Remove Group from Start of Component Name	있을 경우 분석 물질 또는 내부 표준 이름의 시작부에서 그룹 이름을 제거합니다.
Append Summed Ions for Groups	Sum Multiple Ions 옵션을 사용하면, 이 명령은 그룹의 총 크로마토그램을 사용하는 각 그룹의 새 구성 요소를 첨부합니다. 그룹의 분석 물질과 내부 표준 물질이 모두 정의된 경우에는 분석 물질과 내부 표준 물질에 별도의 구성 요소가 추가됩니다. 새 분석 물질 이름은 그룹 이름으로 되돌아가고 내부 표준 물질 이름은 .IS가 추가된 그룹 이름으로 되돌아갑니다. 기존 단일 질량 구성 요소가 아닌 총합 구성 요소가 필요한 경우에는 전자가 삭제됩니다.

Set Automatic Groups 대화 상자

각 그룹의 첫 번째 구성 요소 이름을 사용하여 Group 열을 자동으로 채우며, 구성 요소 수가 같은 것으로 가정합니다.

그림 13-1 Set Automatic Groups 대화 상자



레이블	설명
Number of components per group	각 그룹의 총 구성 요소 수입니다.
Offset between components in same group	같은 그룹 내 연속적인 구성 요소 간의 행 오프셋입니다. 이 값은 보통 1이지만 그룹의 구성 요소들이 가까운 행에 존재하지 않을 때 더 커질 수 있습니다.

내부 표준 물질 하위 메뉴

표 13-3 내부 표준 물질 메뉴 옵션

메뉴 옵션	설명
Set IS for All Analytes	모든 분석 행의 IS 이름 필드를 설정합니다. 한 개의 내부 표준 물질이 정의되면 이 이름이 사용됩니다. 그렇지 않은 경우에는 열리는 대화 상자에서 필요한 내부 표준 물질을 선택하십시오.
Set IS for Selected Analytes	동일한 내부 표준이 한 개 이상의 분석 물질에 사용될 경우, 각 분석 물질의 내부 표준을 개별적으로 설정하기 위한 손쉬운 방법을 제공합니다. 내용을 참조하십시오 선택 분석 물질에 대해 IS 설정 한 페이지의 83 .
Set Last Component of Group as IS	다양한 구성 요소가 Groups에 배정된 경우 수동으로 또는 Set Groups 하위 메뉴의 항목을 사용해 이 명령을 사용합니다. 각 그룹의 마지막 구성 요소에 대한 IS 체크 박스를 선택하고, 분석 물질로 추정되는 그룹의 모든 기타 구성 요소는 내부 표준으로 마지막 구성 요소를 사용하도록 설정됩니다.
Set for All Groups as for Selected Group	현재 선택된 행에 해당하는 그룹의 내부 표준 정렬을 체계적인 방식으로 다른 모든 그룹으로 복사하는 데 사용됩니다. 각 그룹에 한 개 이상의 내부 표준이 있을 경우 유용합니다. 내용을 참조하십시오 선택한 그룹과 같이 모든 그룹에 대해 설정 페이지의 83 .

선택 분석 물질에 대해 IS 설정 한

1. 필요한 내부 표준 물질이 정의되었는지 확인하십시오(**Name**과 **IS** 확인란이 모두 선택되어야 함).
2. 내부 표준 물질로 사용할 분석 물질 행을 선택하십시오.
3. 메뉴 항목을 선택하십시오.

정의된 내부 표준 물질이 두 개 이상이면 대화 상자에서 사용자에게 필요한 한 가지를 선택하도록 요구하는 프롬프트를 엽니다.

선택한 그룹과 같이 모든 그룹에 대해 설정

1. 그룹을 할당합니다.
2. 첫 번째 그룹의 첫 번째 열의 상자를 선택하여 내부 표준 물질인 구성 요소를 수동으로 표시합니다.
3. **IS Name** 열의 콤보 상자를 선택하여 첫 번째 그룹에 대해 각 분석 물질의 내부 표준 물질을 수동으로 표시합니다.
4. 첫 번째 그룹에 해당되는 단일 행을 선택하십시오.
5. **Set for All Groups as for Selected Group**을 클릭합니다.

통합 탭

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Integration** 탭에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

표 13-4 통합 및 회귀 탭 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

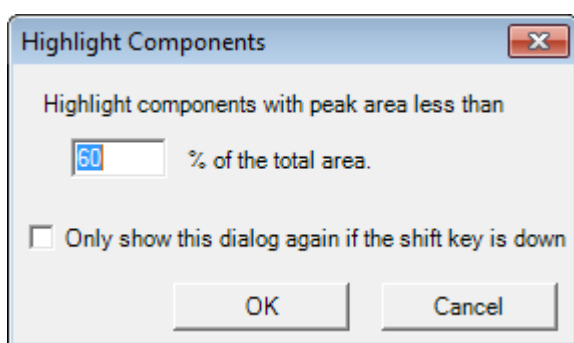
메뉴 옵션	설명
Find Component by Name	Components 탭의 명령과 유사하지만 Components 스프레드시트의 행을 선택하지 않고 구성 요소 목록의 개별 항목을 선택한다는 차이점이 있습니다.
Highlight components with Uncertain RT	기본 예상 머무름 시간(각 크로마토그램의 최대 강도를 갖는 피크 RT)이 잘못된 구성 요소를 강조하는 데 사용됩니다. 구성 요소 개수가 적으면 이 명령을 사용하지 않고 각각 개별적으로 검토하십시오. 그러나 구성 요소 개수가 많으면 이 명령을 사용하여 크로마토그램 내에 중요 피크가 두 개 이상인 구성 요소만 시각적으로 확인하십시오. 구성 요소 강조 대화 상자 페이지의 85 내용을 참조하십시오.
Home Graph Axes	확대한 그래프를 모든 데이터가 표시되는 홈 뷰로 되돌립니다.
Overlay Other Components for Group	여러 구성 요소를 그룹에 할당하고 해당 그룹에 할당된 구성 요소들의 머무름 시간이 동일하지 않은 것으로 예상되는 경우에 크로마토그램을 겹치려면 이 명령을 사용하십시오. 예를 들어 이러한 구성 요소들이 동일한 실제 화합물의 다른 MRM 전환을 나타내는 경우와 같습니다. 이 기능이 선택되면 통합 매개 변수가 정의된 현재 구성 요소의 크로마토그램이 실선 파란색 트레이스를 사용하여 그려지며, 통합된 피크 면적이 표시됩니다. 동일 샘플 내 다른 구성 요소의 크로마토그램(통합 피크 면적 제외)은 파선 스타일로 겹쳐집니다.
Update Retention Times	이전에 생성된 정량화 방법의 예상 머무름 시간을 재설정하는 데 사용됩니다. 기존 정량화 방법이 열려 있고 Set New Typical Sample 이 선택되어 있는 경우에는 표시되는 크로마토그램이 새 샘플에 대응되지만 예상 머무름 시간은 변경되지 않습니다. 각 구성 요소의 예상 머무름 시간은 기존 예상 머무름 시간을 기준으로 지정된 폭의 범위 내에서 최대 강도를 갖는 피크의 머무름 시간에 부합하도록 업데이트됩니다. Update Retention Time 대화 상자 페이지의 85 내용을 참조하십시오.
Set New Typical Sample	대표 샘플을 방법에 연결할 때 사용합니다. 이 기능은 잠재적으로 Q1/Q3 컬럼(MRM 실험) 또는 Start - Stop 컬럼(프로필 실험)에서 사용할 수 있는 선택 사항에 영향을 미칩니다. 또한 이 기능은 Integration 탭에 표시되는 크로마토그램에 영향을 줍니다.

구성 요소 강조 대화 상자

자동 선택된 피크가 최소한 크로마토그램 내 총 피크 면적에 대해 지정된 백분율을 차지하지 않는 모든 구성 요소의 이름은 굵은 글꼴로 표시됩니다. 예를 들어, [그림 13-2](#)에서 기본 선택 피크가 총 영역의 70%에서 100%를 차지할 경우, 플래그 표시되지 않습니다. 구성 요소 목록에서 선택하는 방법으로만 이 피크를 검토합니다

Only show this dialog again if the shift key is down 체크 박스를 선택한 경우, 대화 상자는 사용자가 **Shift**를 누르지 않는한 명령이 선택된 다음 번에 열리지 않습니다. 이전에 지정된 총 면적 백분율 매개 변수가 자동으로 사용됩니다.

그림 13-2 Highlight Components 대화 상자



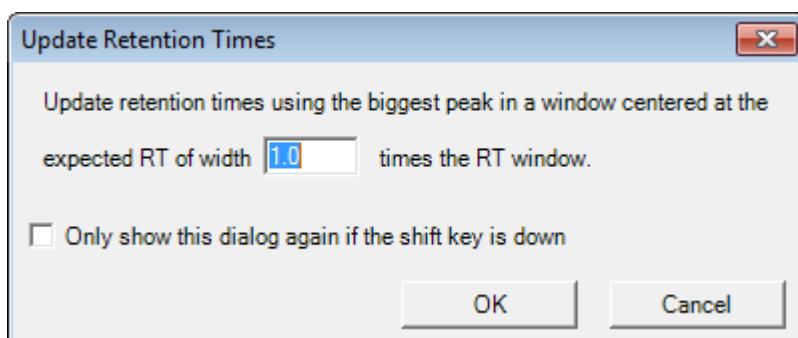
Update Retention Time 대화 상자

이전에 생성된 정량화 방법의 예상 머무름 시간을 재설정하는 데 사용됩니다. 기존 정량화 방법이 열려 있고 Set New Typical Sample이 선택되어 있는 경우에는 표시되는 크로마토그램이 새 샘플에 대응되지만 예상 머무름 시간은 변경되지 않습니다.

각 구성 요소의 예상 머무름 시간은 기존 예상 머무름 시간을 기준으로 지정된 폭의 범위 내에서 최대 강도를 갖는 피크의 머무름 시간에 부합하도록 업데이트됩니다.

Only show this dialog again if the shift key is down 체크 박스를 선택한 경우, 대화 상자는 사용자가 **Shift**를 누르지 않는한 명령이 선택된 다음 번에 열리지 않습니다. 이전에 지정된 머무름 시간이 자동으로 사용됩니다.

그림 13-3 Update Retention Times 대화 상자



이상값 설정 탭

컨텍스트 메뉴에 액세스하려면 **Outlier Settings** 탭에서 마우스 오른쪽으로 클릭합니다. 다음 명령을 사용할 수 있습니다.

레이블	설명
Accuracy for Standards	Standard 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Max. Accuracy Tolerance for Std's except LLOQ%	실험실 표준 작업 절차에 부합하는 값을 갖는 Standard 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	실험실 표준 작업 절차가 최저 농도 Standard 에 대해 다양한 오차를 제시하는 경우 이 Standard 의 정확도 오차를 편집합니다.
Accuracy for QCs	Quality Control 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Max. Accuracy Tolerance for QC%	실험실 표준 작업 절차에 부합하는 값을 갖는 Quality Control 샘플의 정확도 오차를 편집합니다.
Ion Ratio	구성 요소가 그룹에 할당된 경우에만 사용할 수 있습니다. 피크 면적 또는 피크 높이의 이온 비율을 사용할 때 선택하십시오. 피크 면적 또는 피크 높이는 정량화 방법 개발 중 회귀 매개 변수를 선택할 때 설정됩니다.
Calculated Concentration	확정 농도의 Standard 샘플을 사용하는 경우에는 이 농도가 교정 곡선에서 역산된 농도입니다. 회귀 수식은 다양한 회귀 유형 및 가중치에 대해 회귀가 수행되는 방식을 설명합니다.
Component	모든 샘플의 분석 물질 또는 내부 표준 물질.
IS	선택된 내부 표준 물질. Ion Ratio 확인란이 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.
Group	머무름 시간이 같은 구성 요소(동일한 화합물의 전환이 다름)는 그룹화할 수 있습니다. Ion Ratio 확인란이 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.
Ion Ratio Tolerance (%)	기본 설정을 사용하거나 실험실 표준 작업 절차에 따라 이 설정을 편집하십시오. Ion Ratio 확인란이 선택된 경우에만 사용할 수 있습니다.
Lower Limit of Calculated Concentration	허용 농도 범위의 하한을 입력합니다. 이 값보다 낮은 Calculated Concentration 의 모든 샘플은 농도 이상값으로 플래그가 지정됩니다.
Upper Limit of Calculated Concentration	허용 농도 범위의 상한을 입력합니다. 이 값보다 높은 Calculated Concentration 의 모든 샘플은 농도 이상값으로 플래그가 지정됩니다.

표 13-5 이상값 설정 오른쪽 클릭 메뉴 옵션

레이블	설명
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	모든 분석 물질의 기준이 동일한 경우에 계산 농도 하한을 모든 분석 물질에 적용합니다.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	모든 분석 물질의 기준이 동일한 경우에 계산 농도 상한을 모든 분석 물질에 적용합니다.

목표:

- SignalFinder™ 알고리즘을 사용하여 데이터를 처리하는 방법을 학습합니다.
- MQ4 통합 알고리즘을 사용하여 데이터를 처리하는 방법을 학습합니다.
- MQ4 및 SignalFinder™ 통합 알고리즘 매개변수를 사용하는 방법을 학습합니다.

정량화 방법에는 통합을 위해 선택된 피크를 정량화하는 방법에 대한 하나의 지침세트가 포함되어 있습니다. 이 자습서에서 정량화 방법은 Results Table과 동시에 생성됩니다.

또한 **Results Table**에서 데이터를 조작하는 데 사용할 수 있는 추가 작업과 사용 가능 소프트웨어 아이콘 관련 정보가 포함됩니다.

참고: Audit Trail 및 Security 에디션 사용자는 Analyst Data 폴더 구조의 사용이 제한됩니다. 사용자는 Analyst® MD 소프트웨어 파일 구조에 있는 데이터 파일만 처리할 수 있습니다. 파일과 폴더가 유지되지 않으면 사용자가 크로마토그램을 보지 못할 수도 있습니다.

교정 곡선 정보

교정 곡선(표준 농도 곡선)은 **Unknown** 샘플을 특정 농도의 **Standard** 샘플 세트와 비교하여 **Unknown** 샘플 내 물질 농도를 결정하는 메서드입니다. 교정 곡선은 기기가 분석 물질(측정 대상 물질)의 농도 변화에 반응(분석 신호)하는 과정에 대한 플롯입니다. 사용자는 **Unknown** 샘플 내 분석 물질의 예상 농도에 가까운 농도 범위에서 일련의 **Standard** 샘플을 준비합니다.

선행 조건

Analyst® MD 소프트웨어에서, **Example** 프로젝트를 선택하십시오.

The Mix_batch_1. Wiff 파일은 Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad 폴더에서 찾을 수 있습니다.

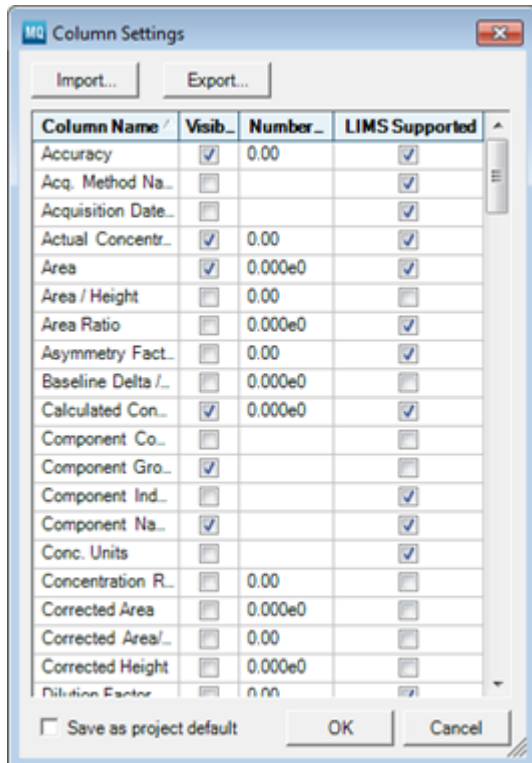
결과 표에 표시된 열 수정하기

이 절차를 이용하여 **Results Table**의 열을 숨기거나 표시할 수 있으며 숫자 형식의 정밀도를 변경할 수 있습니다. 숫자 필드에서는 비과학적 표기법에 0.00 형식을 이용하고 과학적 표기법에 0.00e0 형식을 이용하십시오. 표시되는 숫자의 정밀도를 나타내는 소수점을 변경하십시오. 소수 구분 기호는 소수점 구분 기호로 사용할 수 있습니다. 자릿수 구분 단위는 지원되지 않습니다.

참고: **Sample Name**, **Sample ID** 등 일부 중요 샘플 정보 열들은 사용자가 **Results Table** 열 설정을 사용자 지정할 때 숨겨서는 안 됩니다.

1. **Results Table**에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Column Settings**를 클릭하십시오.

그림 14-1 Column Settings 대화 상자



2. 필요에 따라 **Visible** 열의 확인란을 선택하거나 선택 해제하십시오.
3. **Number Format** 열에서 형식을 정수 또는 과학적 표기법으로 변경하십시오. 표시할 소수점 수도 변경할 수 있습니다.

팁! 프로젝트의 모든 **Results Tables**에 열 설정을 적용하려면 **Save as project default** 확인란을 선택하십시오.

4. **OK**를 클릭합니다.

SignalFinder™ 통합 알고리즘

Analyst® MD 달리, SignalFinder™는 정량화 방법 생성 시 선택된 샘플을 이용하여 피크 모델을 빌드합니다. 이 모델은 알고리즘에 사용되도록 선택된 피크의 모양을 설명합니다. SignalFinder 통합 알고리즘은 통합 시간에 이 모델을 다른 샘플에 적용하여 샘플을 확대하거나 기울입니다. 이 경

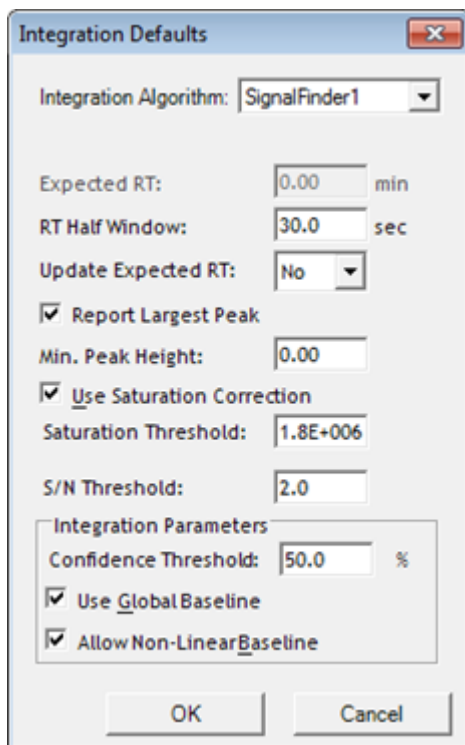
우 여러 샘플의 해당 분석 물질 또는 내부 표준 물질에 대해 피크 샘플이 유사하지만 동일하지 않은 상태가 됩니다.

피크 통합 매개 변수 설정

다음 절차에 따라 데이터를 처리 통합 알고리즘을 확인하거나 설정하십시오. [SignalFinder 통합 알고리즘 정보 페이지](#)의 105 내용을 참조하십시오.

1. Analyst® MD 소프트웨어의 **Navigation** 바에서 **Companion Software** 아래의 **MultiQuant 3.0.3**을 두 번 클릭합니다.
2. **Edit > Project Integration Defaults**를 클릭하십시오.
3. **Integration Defaults** 대화 상자에서 **Integration Algorithm** 목록의 **SignalFinder1**을 선택하십시오.
4. **Use Saturation Correction** 확인란을 선택한 뒤 **Saturation Threshold**를 **1.8E+006**으로 설정합니다.

그림 14-2 Integration Defaults 대화 상자



참고: **Saturation Threshold**를 초과하는 피크는 포화 상태로 간주됩니다. 이 값은 탐지기에 좌우됩니다.

5. **OK**를 클릭합니다.

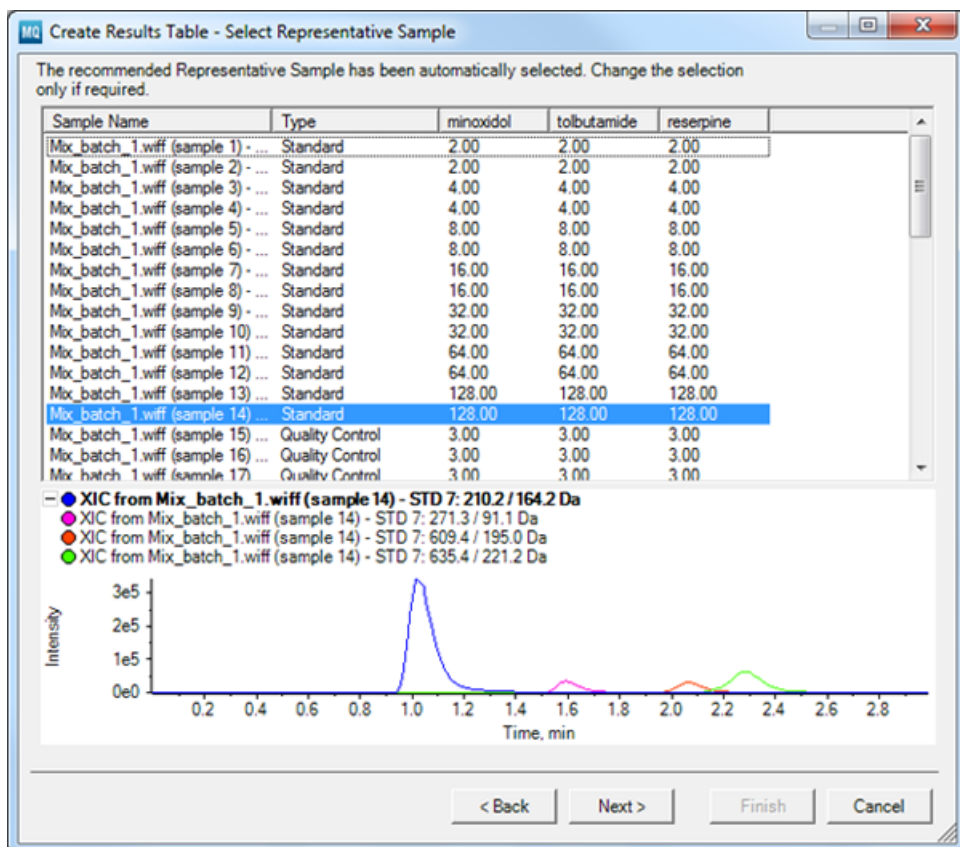
결과 표 생성

1. **File > New Results Table**을 클릭합니다.
2. **Create Results Table - Select Samples** 페이지에서 **Example Data** 폴더를 확장한 뒤 **Mix_batch_1.wiff** 파일을 **Selected** 창으로 드래그합니다.
3. **Next**를 클릭합니다.
4. **Create New Method (SignalFinder1)** 옵션을 클릭합니다.
5. **New**를 클릭합니다.
6. **Save Quantitation Method As** 대화 상자에 이름을 입력한 뒤 **Save**를 클릭합니다.
7. **Next**를 클릭합니다.

Create Results Table - Select Representative Sample 페이지에서 각 대표 샘플이 선택됩니다. 소프트웨어는 전체 배치에 적합한 통합 매개 변수를 선택하기에 가장 좋은 크로마토그램을 선택하여 대표 샘플을 권장합니다. 비포화 고농도 표준 또는 **QC** 샘플(TIC 1E+006 cps 미만)을 선택할 것을 권장합니다.

팁! 피크 검토 중에는 피크 검토 동안 피크 모델을 빌드할 다른 샘플을 선택할 수 있습니다.

그림 14-3 Create Results Table - Select Representative Sample 페이지



8. **Create Results Table - Define Components** 페이지에서 분석 물질과 내부 표준 물질을 확인하십시오.
9. **Next**를 클릭합니다.

그림 14-4 Create Results Table - Define Components 페이지

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: **MRM (4 transitions)**

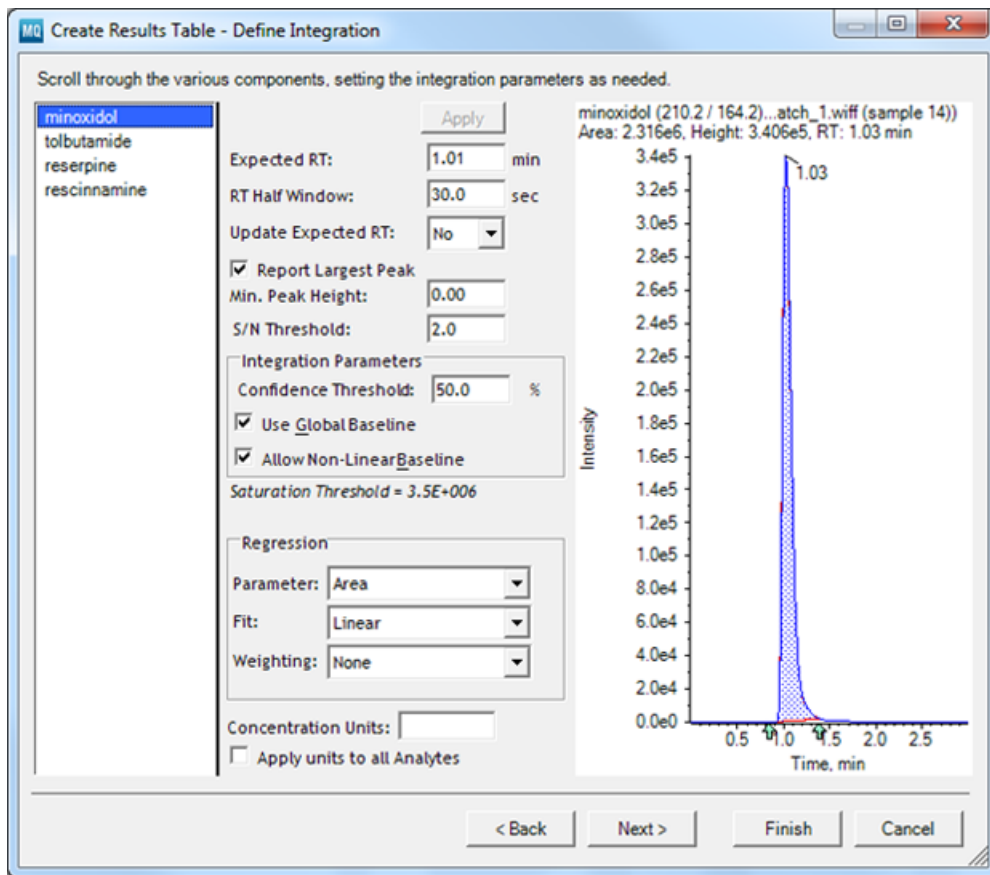
Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

참고: 획득 방법이 생성되면 질량 범위 표의 **ID** 열에 구성 요소 이름이 포함되며 이 이름은 **Define Components** 페이지에서 자동 입력됩니다. 구성 요소 이름이 포함되지 않은 경우에는 표에 구성 요소 이름을 수동으로 업데이트하십시오.

Create Results Table - Define Integration 페이지의 왼쪽에 분석 물질 및 내부 표준 물질이 표시됩니다. 현재 통합 매개 변수는 대표 샘플에 적용되었으며 크로마토그램이 표시됩니다. 이전에 선택한 대표 샘플의 구성 요소는 **Integration** 창에 표시됩니다. **Integration Defaults** 대화 상자에서 설정한 매개 변수를 이용하여 이 대표 샘플의 피크가 발견되고 통합됩니다.

그림 14-5 Create Results Table - Define Integration 페이지



필요 시 크로마토그램의 피크 찾기 매개 변수와 x축 녹색 화살표 위치를 조정할 수 있습니다. 이 경우 사용자가 피크 통합의 시작 및 종료 위치를 더욱 정확하게 설정할 수 있습니다. 이 방법은 정량화 방법에 저장되고 모든 통합 피크에 적용되는 두 개의 피크 찾기 매개 변수를 시각적으로 조정하기에 매우 효과적입니다. 소프트웨어는 피크 범위에 대한 적합한 한계로 간주되는 범위 내에서 이 매개 변수의 한계를 제약합니다.

크로마토그램에 피크가 두 개 이상이며 올바른 피크가 자동으로 선택되지 않은 경우에는 피크를 드래그하여 예상 머무름 시간을 설정하십시오. 피크의 실제 시작 영역부터 실제 종료 영역까지 드래그하십시오. 지나치게 넓거나 지나치게 좁은 영역을 선택하지 마십시오. 이 경우 이 알고리즘이 선택 범위 내에 하나의 피크만 존재하는 것으로 가정할 수 있습니다. 예를 들어 데이터 세트에 노이즈가 포함되어 있으며 한 개의 피크만 존재할 때 알고리즘이 두 개의 병합 피크를 찾는 경우에는 두 피크를 모두 포함한 영역을 선택함으로써 알고리즘이 내부 매개 변수를 조정하여 하나의 피크만 발견되도록 유도하십시오. 또는 두 개의 피크 또는 더 인접한 피크가 존재하는 것으로 예상될 때 알고리즘이 하나의 피크를 발견한 경우에는 관심 피크를 포함하는 영역을 선택하십시오.

10. 전체 크로마토그램을 기준선으로 사용하려면 **Integration Parameters** 그룹에서 **Global Baseline** 확인란을 선택하십시오.

이 옵션을 선택하지 않으면 소프트웨어가 관심 피크 주변의 좁은 영역만 인식합니다.

11. 선형 또는 비선형 기준선 중 하나를 선택하려면 **Allow Non-Linear Baseline** 확인란을 선택하십시오. 비선형 기준선은 각 피크 아래의 기준선을 추정합니다. 선형 기준선은 특정 피크 그룹의 시작과 끝에 위치한 포인트 사이에 선을 맞춥니다.
12. 왼쪽 창의 구성 요소 이름을 클릭하여 각 구성 요소의 피크 통합을 검토합니다. 적절히 통합된 대표 피크를 확보할 수 있도록 통합 매개 변수를 조정합니다.
13. **Minoxidol** 및 **Tolbutamide, Reserpine** 구성 요소에 대해서는 **Regression** 그룹 매개 변수를 이용하여 다음 사항을 설정한 뒤 **Apply**를 클릭합니다.

- **Parameter:** Area
- **Fit:** Linear
- **Weighting:** None

14. **Concentration Units**는 **ng/mL**로 설정한 뒤 **Apply units to all Analytes** 확인란을 선택하십시오.
15. **Apply**를 클릭합니다.
16. **Finish**를 클릭합니다.

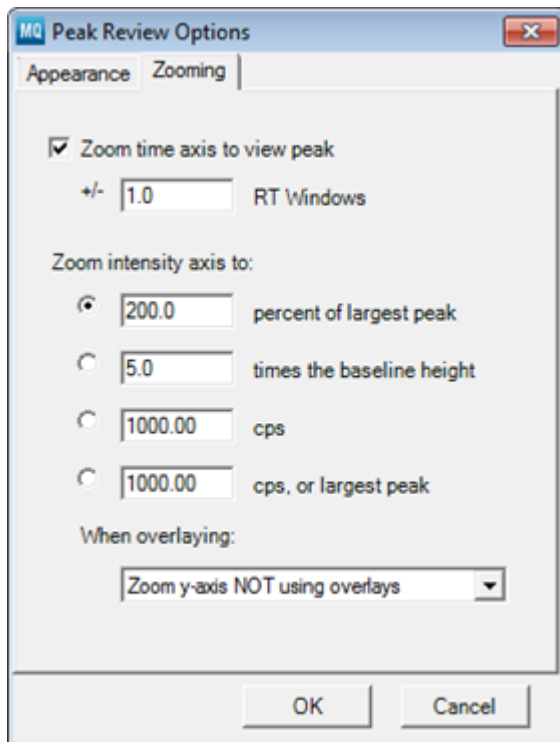
샘플 파일은 자동으로 통합되며 **Results Table**이 생성됩니다.

Results Table에서 데이터를 관리하려면 [피크 검토 페이지의 94](#) 내용을 참조하십시오. 보고서 생성 정보는 [보고서 페이지의 129](#) 내용을 참조하십시오.

피크 검토

1. **Peak Review** 아이콘을 클릭합니다.
2. 표에서 오른쪽 마우스를 클릭한 뒤 **Column Settings**를 클릭하십시오.
3. **SF Saturated** 열을 표시합니다.
4. **Peak Review** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Options**를 클릭합니다.
5. **Zooming** 탭에서 **Zoom time axis to view peak**를 1로 변경합니다.
6. **Zoom intensity axis**를 200 percent of largest peak로 설정합니다.

그림 14-6 Peak Review Options



7. 피크를 스크롤할 때 빨간색 화살표를 사용하십시오.

검출기가 포화되면 피크가 평소보다 평평하게 나타납니다. 예를 들어 이 피크는 피크 강도가 포화 임계값 1.8^6 cps를 초과하기 때문에 피크 주위에 빨간색 프로파일로 나타났으며 **SF Saturated** 열에 **Yes**가 표시됩니다.

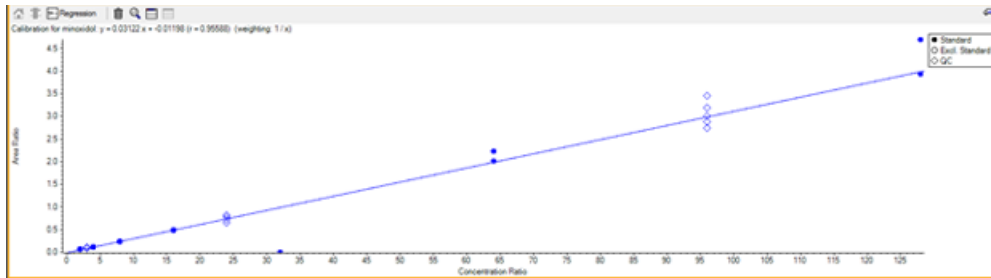
참고: 대표 샘플은 모든 구성 요소에 적합하지 않을 수도 있습니다. 피크 검토 및 새 모델 생성 중에 새 대표 샘플을 선택할 수 있습니다.

8. 새 모델을 생성하려면 새 피크를 선택한 뒤 **Update Peak Model** 아이콘을 클릭하십시오. 모양이 다른 피크와 유사하며 포화되지 않은 피크를 선택하십시오.
9. 모든 변경 사항을 구성 요소의 모든 샘플에 적용하려면 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Update Quantitation Method for Component**를 클릭하십시오

교정 곡선 수정

1. 교정 곡선을 보려면 **Show Calibration Curve** 아이콘을 클릭합니다.
2. 범례를 추가하려면 **Calibration** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Show Legend**를 클릭합니다.

그림 14-7 Calibration Curve



3. 곡선에 QC를 추가하려면 **Calibration** 창에서 다시 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Show QCs**를 클릭합니다.

팁! 곡선에서 포인트를 제외하려면 곡선의 포인트를 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Exclude**를 클릭합니다.

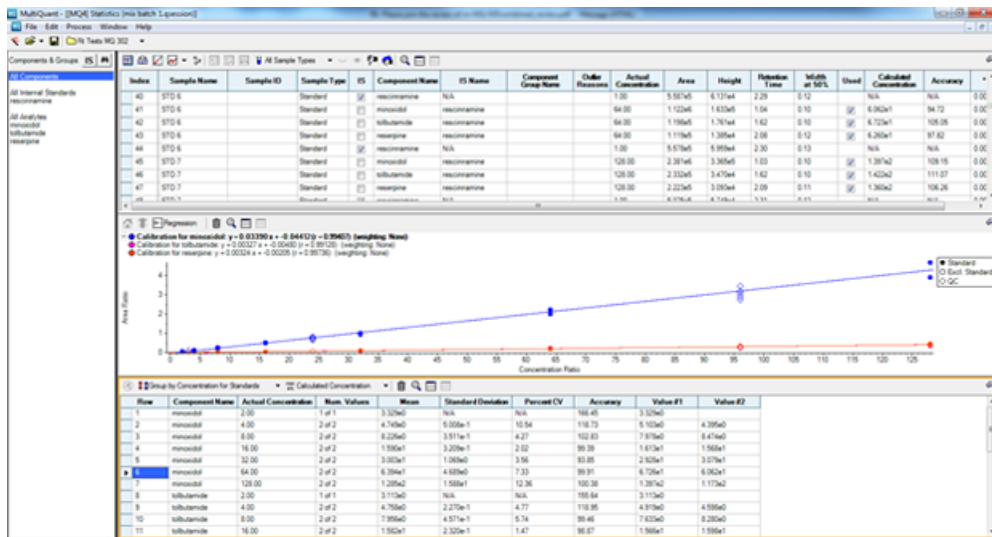
4. 개별 분석 물질의 회귀 매개 변수를 확인하거나 편집하려면 **Components and Group** 목록에서 분석 물질을 선택한 뒤 도구 모음의 **Regression** 버튼을 클릭합니다.

샘플 통계 검토

사용자는 단일 Results Table의 통계를 검토할 수 있습니다. 피크 통합, 교정 곡선 및 샘플 통계를 검토하는 것은 상호적인 프로세스입니다.

1. Results Table이 열린 상태에서 **Show Statistics Table** 아이콘을 클릭하십시오.
2. **Sample Grouping** 목록에서 통계 계산에 샘플(해당 분석 물질)을 그룹화할 방식을 지정하기 위한 항목을 클릭하십시오.

그림 14-8 Statistics Pane



3. **Metric** 목록에서 통계 계산에 사용할 실제 메트릭을 지정하기 위한 항목을 클릭하십시오.

4. **Value** 열을 검토하십시오. 취소선이 그어진 포인트는 제외된 포인트를 의미합니다.

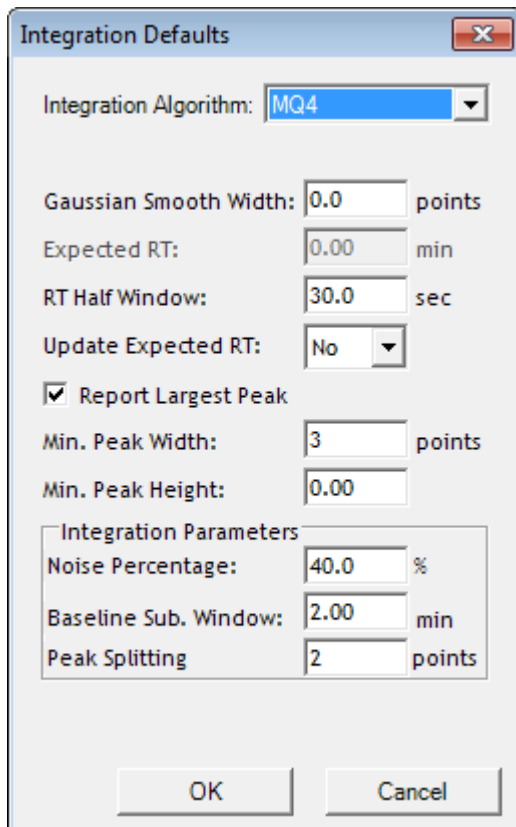
MQ4 통합 알고리즘을 사용하는 프로세스 데이터

픽크 통합 매개 변수 설정

데이터를 처리하기 전에 다음 절차에 따라 통합 알고리즘을 확인하거나 설정하십시오. [MQ4 통합 알고리즘 매개 변수 페이지의 112](#) 내용을 참조하십시오.

1. Analyst® MD 소프트웨어의 **Navigation** 바에서 **Companion Software** 아래의 **MultiQuant 3.0.3**을 두 번 클릭합니다.
2. **Edit > Project Integration Defaults**를 클릭합니다.
3. **Integration Defaults** 대화 상자의 **Integration Algorithm** 목록에서 **MQ4**를 선택하십시오.

그림 14-9 Integration Defaults 대화 상자



- 필요 시 프로젝트 매개 변수를 변경한 뒤 **OK**를 클릭합니다.

MQ4 통합 알고리즘과 매개 변수 설정은 **Example** 프로젝트 폴더에 생성되는 모든 새 방법에 사용됩니다. 이 기본 설정은 프로젝트 기반입니다. 다른 프로젝트의 기본 설정을 변경하려면 선택된 프로젝트에 이 절차를 반복 수행하십시오.

결과 표 생성

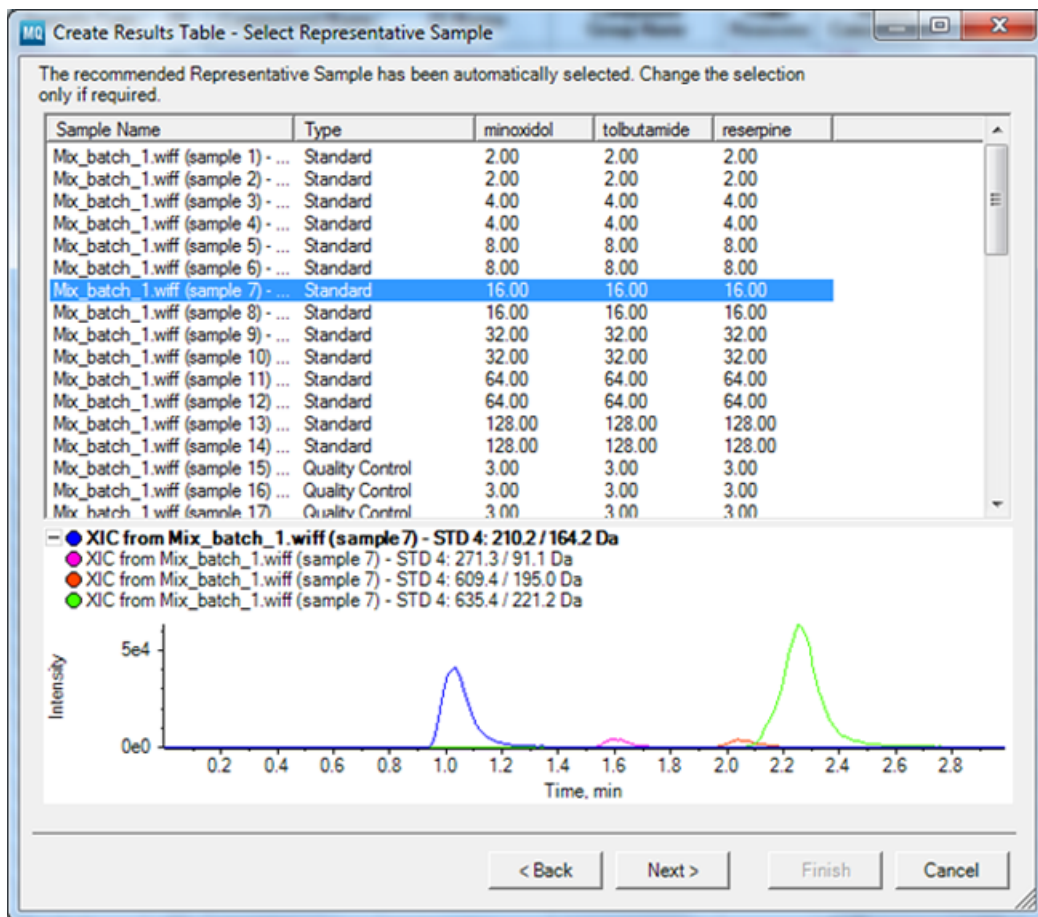
- File > New Results Table**을 클릭합니다.
- Create Results Table - Select Samples** 페이지에서 **Example Data** 폴더를 확장한 뒤 **Mix_batch_1.wiff** 파일을 **Selected** 창으로 드래그합니다.
- Next**를 클릭합니다.
- Create New Method (MQ4)** 옵션을 클릭합니다.
- New**를 클릭합니다.
- Save Quantitation Method As** 대화 상자에 이름을 입력한 뒤 **Save**를 클릭합니다.

이 튜토리얼에서 방법이 생성되었습니다. 방법을 생성하면 데이터 통합에 대한 여러 매개 변수를 검토하고 적용할 수 있습니다.

기존 방법이 존재하는 경우에는 **Choose Existing Method** 옵션을 선택한 뒤 **Edit Method** 확인란을 선택하여 여러 매개 변수를 검토하고 방법에 적용하십시오. **Edit Method** 체크 박스가 선택되지 않으면 마법사가 기존 방법을 이용하여 **Results Table**을 생성합니다.

7. **Create Results Table - Select Representative Sample** 페이지에서 각 대표 샘플이 권장되고 선택됩니다.

그림 14-10 Create Results Table - Select Representative Sample 페이지

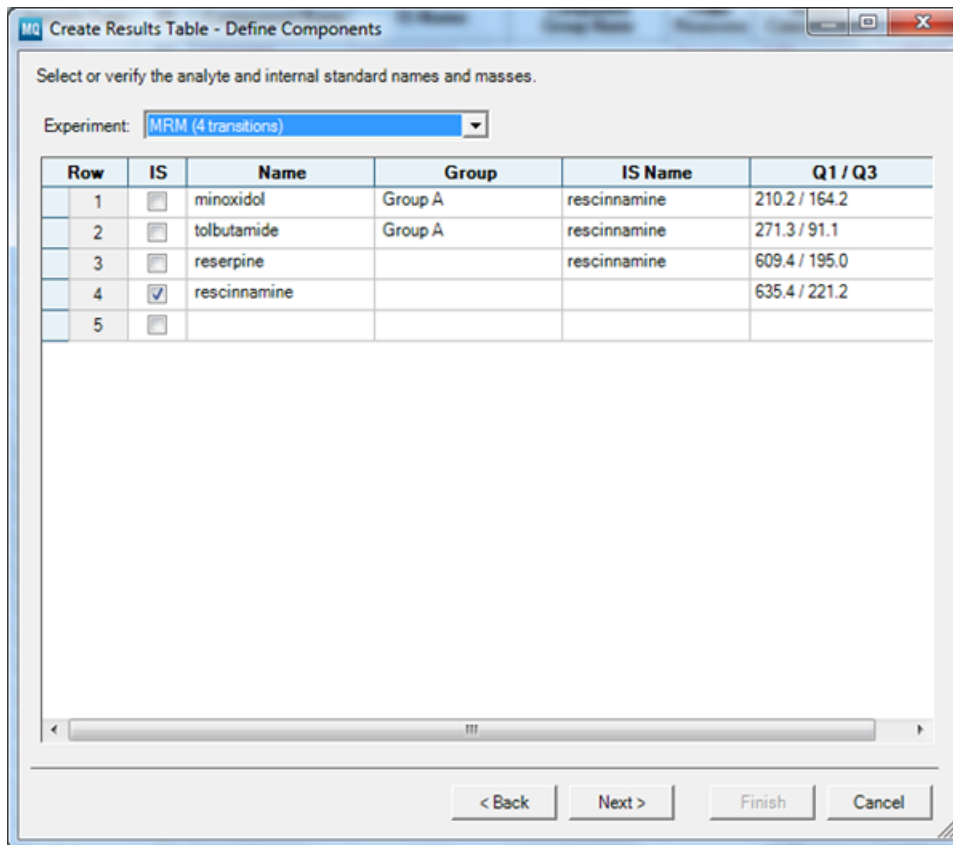


8. **Next**를 클릭합니다.

소프트웨어는 전체 배치에 적합한 통합 매개 변수를 선택하기에 가장 좋은 크로마토그램을 선택하여 대표 샘플을 권장합니다. .wiff 파일에 분석 물질 농도 정보가 포함된 경우에는 MQ4 통합 알고리즘에서 두 번째 최저 농도 표준 물질 또는 QC 샘플을 선택하는 것이 바람직합니다. 예를 들어 농도 범위는 1 - 8이며 두 번째 최저 농도는 2입니다. 기본 대표 샘플의 강도가 불충분한 경우에는 마법사에서 **Back** 버튼을 클릭하고 다른 샘플을 선택하여 다른 대표 샘플을 선택하십시오. 다른 샘플은 피크 검토 중에 선택할 수 있습니다. [피크 검토 페이지의 102](#) 내용을 참조하십시오.

9. **Create Results Table - Define Components** 페이지에서 분석 물질과 내부 표준 물질을 확인하십시오.

그림 14-11 Create Results Table - Define Components 페이지



10. **Next**를 클릭합니다.

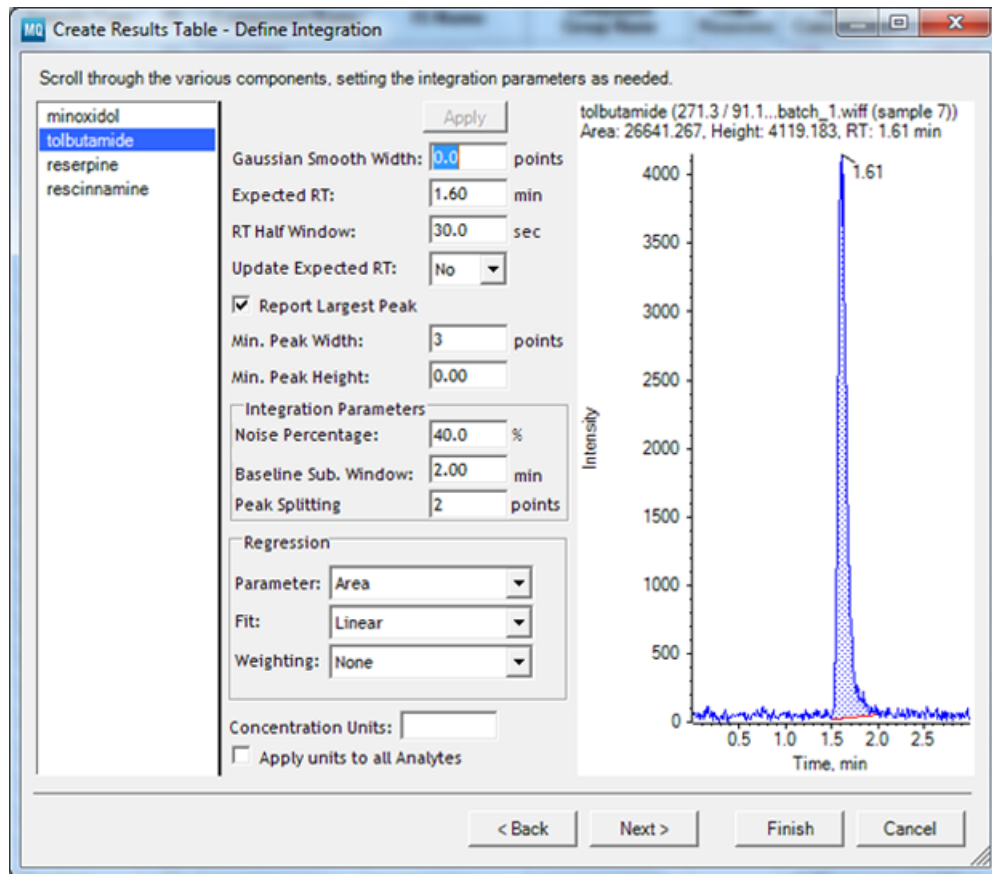
참고: 획득 방법이 생성되면 질량 범위 표의 **ID** 열에 구성 요소 이름이 포함되며 이 이름은 **Define Components** 페이지에서 자동 입력됩니다. 구성 요소 이름이 포함되지 않은 경우에는 표에 구성 요소 이름을 수동으로 업데이트하십시오. 구성 요소 이름에 .IS 확장자가 추가되면 소프트웨어가 이 구성 요소를 내부 표준 물질로 식별하고 .IS 구성 요소를 내부 표준 물질에 해당하는 분석 물질에 할당합니다.

Create Results Table - Define Integration 페이지의 왼쪽에 분석 물질 및 내부 표준 물질이 표시됩니다. 현재 통합 매개 변수는 대표 샘플에 적용되었으며 크로마토그램이 표시됩니다.

이전에 선택한 대표 샘플의 구성 요소는 **Integration** 창에 표시됩니다. **Integration Defaults** 대화 상자에서 설정한 매개 변수를 이용하여 이 대표 샘플의 피크가 발견되고 통합됩니다.

11. 왼쪽 창의 구성 요소 이름을 클릭하여 각 구성 요소의 피크 통합을 검토합니다. 적절히 통합된 대표 피크를 확보할 수 있도록 통합 매개 변수를 조정합니다. [피크 통합 매개 변수 설정 페이지의 97](#) 내용을 참조하십시오.

그림 14-12 Create Results Table - Define Integration 페이지



12. **Minoxidol** 및 **Tolbutamide**, **Reserpine** 구성 요소에 대해서는 **Regression** 그룹 매개 변수를 이용하여 다음 사항을 설정한 뒤 **Apply**를 클릭합니다.

- **Parameter:** Area
- **Fit:** Linear
- **Weighting:** None

13. **Concentration Units**는 **ng/mL**로 설정한 뒤 **Apply units to all Analytes** 확인란을 선택하십시오.

14. **Apply**를 클릭합니다.

15. **Finish**를 클릭합니다.

샘플 파일은 자동으로 통합되며 Results Table이 생성됩니다.

그림 14-13 Results Table

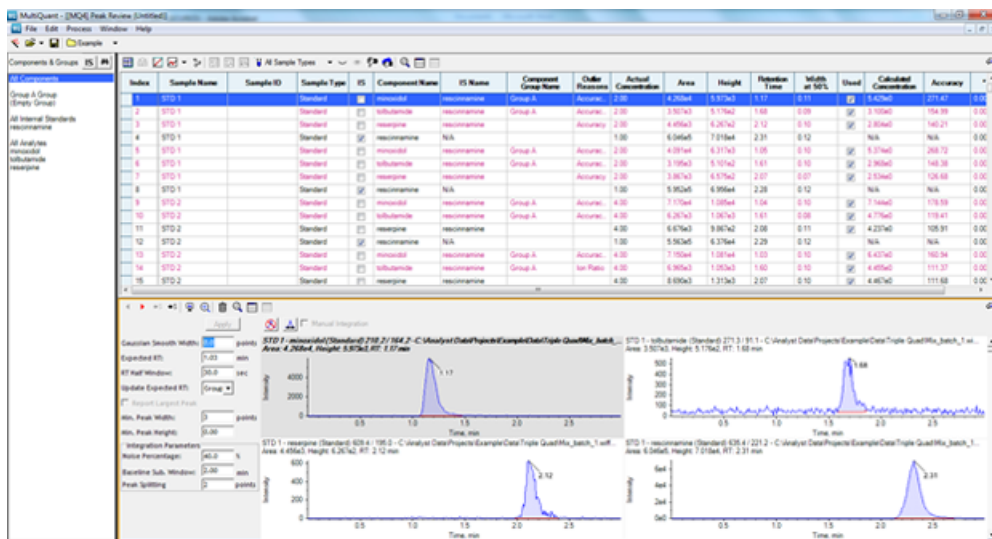
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Other Reasons	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD 1		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Accuracy	2.30	4.256e5	5.573e3	1.17	0.15	☑	5.625e5	271.47
2	STD 1		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Accuracy	2.30	3.927e3	5.175e2	1.68	0.09	☑	3.105e4	104.99
3	STD 1		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.30	4.495e3	6.267e2	2.12	0.10	☑	2.854e5	140.21
4	STD 1		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	6.945e3	7.918e4	2.31	0.12	☑	N/A	N/A
5	STD 1		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Accuracy	2.30	4.937e4	6.317e3	1.08	0.10	☑	3.168e5	106.39
6	STD 1		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Accuracy	2.30	3.105e3	5.107e2	1.61	0.10	☑	2.365e5	140.38
7	STD 1		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.30	3.927e3	6.575e2	2.07	0.07	☑	2.534e5	126.68
8	STD 1		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.952e3	6.956e4	2.28	0.12	☑	N/A	N/A
9	STD 2		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	☑	4.945e5	123.64
10	STD 2		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.267e3	1.567e3	1.61	0.08	☑	2.175e5	119.47
11	STD 2		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.675e3	9.367e2	2.08	0.11	☑	4.227e5	108.91
12	STD 2		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.952e3	6.375e4	2.29	0.12	☑	N/A	N/A
13	STD 2		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	7.175e4	1.085e4	1.03	0.10	☑	4.275e5	105.90
14	STD 2		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		4.00	6.952e3	1.053e3	1.60	0.10	☑	4.495e5	111.37
15	STD 2		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	5.695e3	3.315e3	2.07	0.10	☑	4.495e5	111.68
16	STD 2		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	6.617e3	7.835e4	2.28	0.13	☑	N/A	N/A
17	STD 3		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		8.00	1.525e4	2.287e4	1.03	0.10	☑	7.625e5	97.62
18	STD 3		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		8.00	1.307e4	2.547e3	1.60	0.09	☑	7.495e5	93.70
19	STD 3		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.475e4	1.875e3	2.07	0.11	☑	7.915e5	97.67
20	STD 3		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	6.754e3	7.328e4	2.28	0.13	☑	N/A	N/A
21	STD 3		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		8.00	1.455e4	2.055e4	1.03	0.10	☑	8.325e5	104.54
22	STD 3		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		8.00	1.255e4	1.935e3	1.60	0.10	☑	8.145e5	101.79
23	STD 3		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.307e4	1.885e3	2.07	0.11	☑	7.915e5	98.62
24	STD 3		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.705e3	4.955e4	2.29	0.13	☑	N/A	N/A
25	STD 4		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		16.00	2.057e4	4.395e4	1.03	0.10	☑	1.055e6	99.95
26	STD 4		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		16.00	2.055e4	4.115e3	1.61	0.10	☑	1.055e6	97.07
27	STD 4		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.735e4	3.367e3	2.08	0.11	☑	1.525e6	95.28
28	STD 4		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.705e3	4.255e4	2.26	0.13	☑	N/A	N/A
29	STD 4		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		16.00	2.857e4	4.185e4	1.04	0.10	☑	1.055e6	97.11
30	STD 4		Standard	☑	inulinide	recombinant	group 1		16.00	2.947e4	4.295e3	1.63	0.10	☑	1.055e6	99.13
31	STD 4		Standard	☑	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.055e4	4.135e3	2.09	0.10	☑	1.545e6	96.78
32	STD 4		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.705e3	6.675e4	2.30	0.13	☑	N/A	N/A

Results Table에서 데이터를 관리하려면 [피크 검토 페이지의 94](#) 내용을 참조하십시오. 보고서 생성 정보는 [보고서 페이지의 129](#) 내용을 참조하십시오.

피크 검토

1. **Peak Review** 아이콘을 클릭합니다.

그림 14-14 Peak Review 창



2. 표에서 오른쪽 마우스를 클릭한 뒤 **Column Settings**를 클릭하십시오.
3. **Peak Review** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Options**를 클릭합니다.

4. **Zooming** 탭에서 **Zoom time axis to view peak**를 **3RT Windows**로 변경합니다.
5. 크로마토그램에 여러 피크가 포함되어 있으며 올바르게 통합된 경우에는 올바른 피크를 드래그하여 새 **Expected RT**를 설정합니다. 필요 시 피크 찾기 및 통합 매개 변수를 조정합니다. [통합 알고리즘 페이지의 105](#) 내용을 참조하십시오.
6. 새 매개 변수를 다른 모든 샘플에 적용하려면 같은 구성 요소에 대해 크로마토그램에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Update Quantitation Method for Component**를 클릭합니다.
7. 포함된 정량화 방법은 **Results Table**을 보는 중에도 **Edit > Modify Results Table Method**를 클릭하여 수정할 수 있습니다. 사용자는 각 구성 요소에 대한 구성요소 정보 및 통합 매개 변수 회귀 옵션을 변경할 수 있습니다.

각 구성 요소의 통합 매개 변수 회귀 옵션과 구성 요소 정보가 변경되면 **Results Table**에 포함된 정량화 방법이 수정됩니다. **Results Table**을 생성하는 데 사용되는 실제 정량화 방법 파일은 수정되지 않습니다. 다른 데이터 파일을 처리하기 위해 이 포함된 정량화 방법을 사용하려면 **Export** 기능을 사용하여 이 포함된 정량화 방법을 방법 파일로 내보냅니다.

참고: 수동으로 피크를 통합하기 전에 원시 데이터를 보려면 **Set Peak to Not Found**를 클릭하여 통합을 지웁니다.

8. 수동 통합 모드를 사용하려면 **Peak Review** 창에서 **Enable Manual Integration Mode** 아이콘을 클릭합니다. 커서를 관심 피크 베이스 한 쪽에서 다른 쪽으로 드래그합니다. 이 피크는 이제 수동으로 통합되며 이전에 사용된 통합 매개 변수는 사용할 수 없습니다.

팁! 피크가 방금 수정된 경우에는 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Revert Peak to Original Method**를 클릭하여 피크를 원본 방법으로 되돌릴 수 있습니다.

참고: **Results Table**의 **Calculated Concentration** 필드는 곡선을 표준 포인트에 맞춤으로써 발생하는 모든 변경 사항을 반영합니다.

교정 곡선 수정

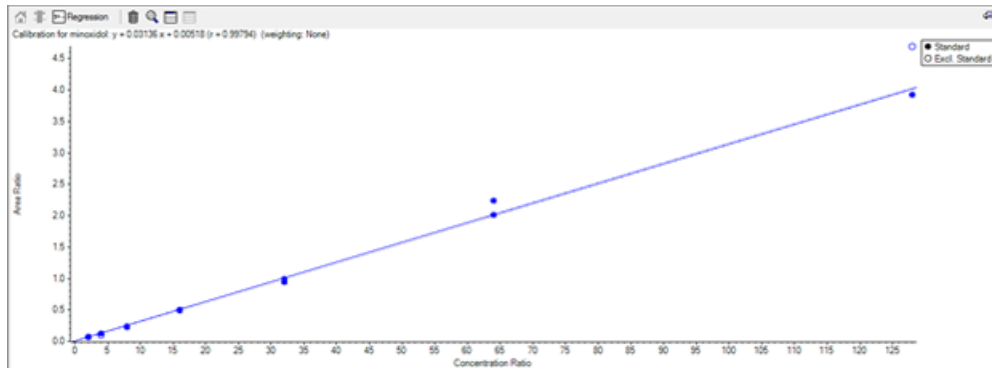
1. 교정 곡선을 보려면 **Show Calibration Curve** 아이콘을 클릭합니다.
2. 범례를 추가하려면 **Calibration** 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Show Legend**를 클릭합니다.
3. 곡선에 QC를 추가하려면 **Calibration** 창에서 다시 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Show QCs**를 클릭합니다.

팁! 곡선에서 포인트를 제외하려면 곡선의 포인트를 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Exclude**를 클릭합니다.

4. 개별 분석 물질의 회귀 매개 변수를 확인하거나 편집하려면 **Components and Group** 창에서 분석 물질을 선택한 뒤 도구 모음의 **Regression** 버튼을 클릭합니다.

5. 교정 곡선 적합도를 개선하려면 두 번째 Std 2 샘플(농도 4.00 ng/mL)과 첫 번째 Std 7 샘플(농도 128.00 ng/mL)을 제외하십시오. 이는 **Actual Concentration** 열과 **Used** 열을 사용하여 샘플을 제거하는 방법으로 수행할 수 있습니다. 곡선에서 포인트를 제거하려면 Used 열의 확인란을 선택 해제하십시오. 이제 교정 곡선이 [그림 14-15](#)에 제시된 것과 같이 표시될 것입니다.

그림 14-15 Calibration Curve with Excluded Samples



샘플 통계 검토

사용자는 단일 Results Table의 통계를 검토할 수 있습니다. 피크 통합, 교정 곡선 및 샘플 통계를 검토하는 것은 상호적인 프로세스입니다.

1. Results Table이 열린 상태에서 **Show Statistics Table** 아이콘을 클릭하십시오.

그림 14-16 Statistics Table

MultiQuant (3MQ4) Statistics Table

File Edit Process Window Help

Sample

Components & Groups IS

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Retention	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy	
2	STD 1		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Accurate	2.00	3.52E3	5.17E2	1.60	0.00			2.42E0	121.33	0.00
6	STD 1		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	2.00	3.19E3	5.10E2	1.61	0.10			2.25E0	114.59	0.00
10	STD 2		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	4.00	6.26E3	1.06E3	1.61	0.00			4.13E0	103.43	0.00
14	STD 2		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	4.00	6.90E3	1.05E3	1.60	0.10			3.89E0	95.23	0.00
18	STD 3		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	8.00	1.35E4	2.04E3	1.60	0.00			6.91E0	86.40	0.00
22	STD 3		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	8.00	1.26E4	1.93E3	1.60	0.10			7.57E0	84.05	0.00
26	STD 4		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	16.00	2.65E4	4.11E3	1.61	0.10			1.51E1	84.44	0.00
30	STD 4		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	16.00	2.84E4	4.29E3	1.63	0.10			1.54E1	86.54	0.00
34	STD 5		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	32.00	5.62E4	8.42E3	1.61	0.00			2.88E1	80.23	0.00
38	STD 5		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	32.00	5.51E4	8.43E3	1.62	0.00			3.08E1	85.89	0.00
42	STD 6		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	64.00	1.15E5	1.70E4	1.61	0.00			4.30E1	86.50	0.00
46	STD 6		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	64.00	1.16E5	1.76E4	1.62	0.10			4.76E1	105.97	0.00
50	STD 7		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	128.00	2.33E5	3.47E4	1.62	0.10			1.44E2	110.83	0.00
54	STD 7		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	128.00	2.20E5	3.49E4	1.60	0.00			1.15E2	86.26	0.00
58	QC 1		Quality Control		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Accurate	3.00	5.75E3	8.39E2	1.60	0.00			3.70E0	125.16	0.00

Group by Concentration for Standards

Calculated Concentration

Row	Component Name	Actual Concentration	Sum Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	ibuprofen	2.00	2 of 2	2.35E0	5.54E-2	4.34	117.36	2.42E0	2.25E0
2	ibuprofen	4.00	2 of 2	3.37E0	2.30E-1	5.84	99.35	4.13E0	3.89E0
3	ibuprofen	8.00	2 of 2	7.24E0	4.67E-1	6.45	90.52	6.91E0	7.57E0
4	ibuprofen	16.00	2 of 2	1.52E1	2.37E-1	1.55	95.49	1.51E1	1.54E1
5	ibuprofen	32.00	2 of 2	2.97E1	1.21E0	4.08	92.91	2.88E1	3.08E1
6	ibuprofen	64.00	2 of 2	6.94E1	3.30E0	5.17	102.23	4.30E1	4.76E1
7	ibuprofen	128.00	2 of 2	1.30E2	2.04E1	15.70	101.95	1.44E2	1.15E2

2. **Sample Grouping** 목록에서 통계 계산에 샘플(해당 분석 물질)을 그룹화할 방식을 지정하기 위한 항목을 클릭하십시오.

3. Value #1 열을 클릭하십시오.

참고: Group by Concentration for Standards and QCs는 Displayed Actual Concentration에 기반하며 Results Table에 저장되는 Actual Concentration에 기반하지 않습니다. Std 1 농도가 0.001이고 Std 2 농도가 0.005이며 표시 형식이 0인 경우에는 Std 1 및 Std 2가 0으로 취급되기 때문에 함께 그룹화됩니다. 두 가지를 별도로 그룹화하려면 Column Settings 대화 상자에서 Analyte Concentration의 정밀도를 0.000으로 설정하십시오. Std 1이 0.500이고 Std 2가 0.499인 경우에는 정밀도를 0.00으로 설정하여 함께 그룹화할 수 있습니다. 내용을 참조하십시오 [결과 표에 표시된 열 수정하기 페이지의 88](#).

4. 통계 계산에 사용할 실제 메트릭을 지정하려면 Metric 목록에서 항목을 클릭하십시오.

5. Value 열을 검토하십시오. 취소선이 그어진 포인트는 제외된 포인트를 의미합니다.

통합 알고리즘

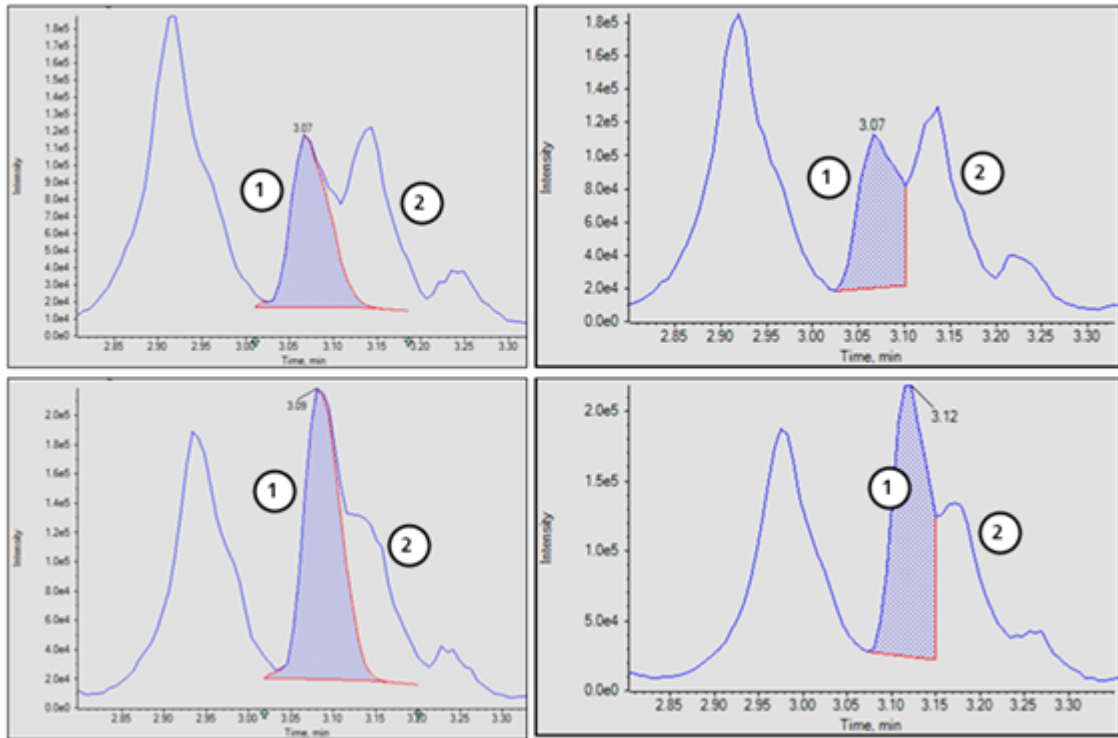
이 섹션은 각 알고리즘에 사용할 수 있는 다양한 매개 변수를 설명합니다.

SignalFinder 통합 알고리즘 정보

가까이 용리되는 피크

SignalFinder™는 가까이 용리되는 피크의 피크 면적을 더욱 정확하게 표시합니다. [그림 14-17](#)은 MQ4(오른쪽 그래프)와 SignalFinder(그래프 왼쪽) 통합 알고리즘을 통한 가까이 용리되는 피크 처리 방법의 예시를 보여줍니다. 이 예시에서 배경 피크(항목 2)는 관심 피크(항목 1)를 간섭합니다. 간섭 피크는 LC 또는 매트릭스에서 유래하기 때문에 전체 배치에서 매우 일관적입니다. 그러나 분석 물질 피크 강도는 분석 물질 농도가 증가할수록 높아지기 때문에 결합 피크 모양을 크게 변동시킵니다. MQ4 통합 알고리즘이 밸리에서 기준선까지 수직선만 그릴 수 있는 반면 사용자 정의 피크 모델에 기반한 SignalFinder 통합 알고리즘은 모든 농도 수준의 관심 피크를 일관적으로 식별할 수 있습니다. 전자는 부분적인 피크만 통합하며 피크 면적에 오류를 추가합니다.

그림 14-17 가까이 용리되는 피크



품목	설명
1	관심 피크
2	동시 용리 배경 피크

테일링 피크

테일링 피크의 이전 알고리즘은 피크가 끝나는 머무름 시간을 선택할 때 일관적이지 않은 경우가 많았습니다. 유사해 보이는 두 개의 피크도 이 영역 내 정확한 노이즈 특징에 따라 보고되는 피크 끝이 다를 수 있습니다. 통합은 보통 피크 찾기 매개 변수를 조정하는 방법을 통해 더 일관적인 방식으로 수행할 수 있습니다. 그러나 이 작업은 시간과 노력을 요합니다. 모델링 접근 방식을 이용하면 모델이 임계값 미만일 때 통합이 차단되어 노이즈의 영향을 덜 받습니다.

포화된 피크

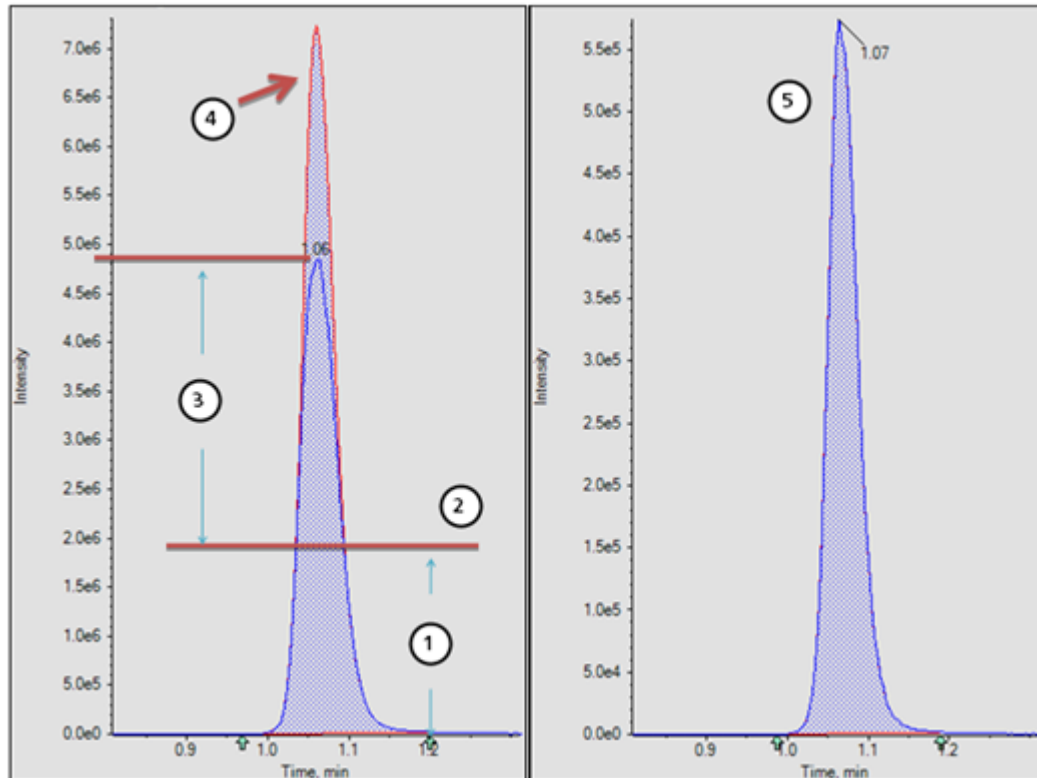
알고리즘은 피크가 포화 상태인 것을 감지하면 검출기가 포화되지 않았을 때의 예상 피크 모양을 예측하는 모델을 사용합니다. 이는 검출기가 포화되지 않았다면 확보될 수 있었던 반응에 가까운 피크를 초과하도록 확장되는 빨간색 프로필로 표시됩니다. 이 기능은 검출기 포화도만 수정하며 이온 소스 포화도 또는 컬럼 포화도를 수정하지 않습니다. [그림 14-18](#) 포화도 수정의 예시를 보여 줍니다.

SignalFinder™ 알고리즘을 사용하기 전에 피크 모델을 빌드할 때 사용할 비포화 샘플을 선택한 뒤 포화도 임계값을 검출기에 적합한 값으로 설정하십시오. 이 예시에서 포화도 임계값은 1.8E+006

cps가 사용되었습니다. 이 알고리즘은 남아 있는 피크 중 $1.8E+006$ cps 미만의 비포화 부분을 피크 모델에 일치시킵니다. 그 후 이 알고리즘은 선택된 피크 모델에 기반하여 빨간색 트레이스로 표시된 피크의 나머지를 예측합니다.

참고: 포화도 임계값은 검출기 유형, 검출기 수명, 관심 화합물 등 인자 수에 좌우됩니다. 최적의 결과를 위해서는 포화도 임계값을 적절히 조정해야 합니다.

그림 14-18 검출기 포화도 수정



품목	설명
1	비포화 부분(피크 모델에 일치)
2	임계값 $1.8e6$ cps
3	포화 부분
4	수정된 피크 프로파일
5	피크 모델

사용시 참고 사항

일부 워크플로우는 모든 관심 구성 요소를 포함하는 일반 샘플이 없을 수도 있습니다. 예를 들어 의약품 발견 작업에서 사용자가 모약물의 Q1 질량에 +16을 추가하고 Q3 질량에 +0 또는 +16을 추가하여 산화 대사물을 검색할 수 있습니다. 이러한 대사물은 대개 일부 샘플에 존재하지만 정

량화 방법을 생성하는 데 사용하는 모델로 선택된 샘플에 반드시 존재하지는 않습니다. 이 상황에서, SignalFinder™ 알고리즘은 해당 MRM 전환에 대해 일반 샘플 내 적합한 피크가 존재하지 않는 경우 기본 모델을 사용합니다. 대부분 이 기본 모델은 충분한 정확도를 보여 줍니다. 그러나 이후 피크 검토 중에 관심 피크를 포함하지 않은 샘플을 사용하여 새 모델을 생성할 수도 있습니다.

SignalFinder™ 이용한 프로세스 데이터 매개 변수

다음 매개 변수는 관심 피크를 식별하고 보고하는 데 사용됩니다. 사용 가능 매개 변수에 대한 전체 목록은 [통합 알고리즘 매개 변수 페이지의 117](#) 내용을 참조하십시오.

채도 보정 사용

이 옵션은 정량화 방법 생성 또는 개별 피크 검토 도중이 아닐 때 전체 알고리즘 기본값을 설정하는 경우에만 사용 가능합니다. 이 설정을 일부 피크에만 사용하는 것은 유용하지 않기 때문입니다.

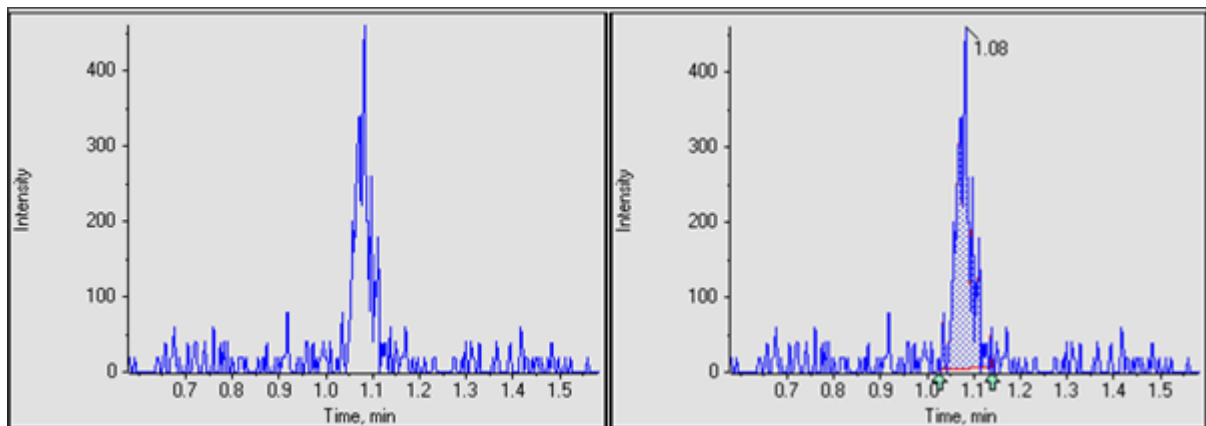
포화도 임계값

이 임계값을 초과하는 피크는 포화 상태로 간주됩니다. 이 값은 탐지기에 좌우됩니다.

S/N 임계값

[그림 14-19](#)에서 S/N Threshold가 7로 설정되면(왼쪽 그래프) 피크가 보고되지 않습니다. S/N Threshold가 2로 설정되면(오른쪽 그래프) 피크가 보고됩니다. 이 매개 변수는 통합에 영향을 주지 않습니다.

그림 14-19 S/N 임계값



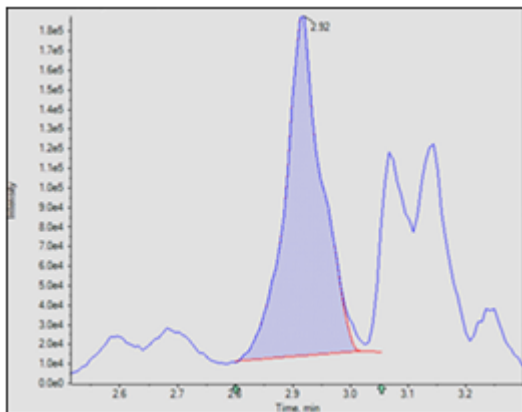
신뢰도 임계값

이 매개 변수는 가양성인 잠재적 피크를 필터링할 때 사용됩니다. 기본값은 50%이며 대개 이 값이 적합합니다. 그러나 사용자는 노이즈를 많이 포함한 데이터 또는 피크 폭이 샘플별로 크게 다른 데이터에는 더 큰 값을 사용할 수 있습니다.

그림 14-20 및 그림 14-21은 **Confidence Threshold**가 식별된 피크 수에 영향을 미치는 과정을 보여 줍니다. **Confidence Threshold**가 50%로 설정된 경우에는 솔더가 작은 피크가 하나의 피크로 식별됩니다. **Confidence Threshold**가 16%로 낮춰지면 SignalFinder™ 알고리즘이 두 개의 피크를 찾습니다. 두 피크를 보려면 두 개의 피크 영역을 드래그하십시오.

이 단일 피크에 잠재적으로 존재하는 다른 피크가 무엇인지 확인하고자 할 때 올바른 **Confidence Threshold**를 알 수 없는 경우에는 **Ctrl**을 누른 뒤 관심 피크 영역을 드래그하십시오. 이 경우 **Confidence Threshold**가 50%로 설정되었을 때 존재하지 않는 두 번째 관심 피크를 표시하도록 **Confidence Threshold**가 자동으로 낮춰집니다.

그림 14-20 50% 신뢰



16% 신뢰일 때 두 개 피크가 발견됩니다. 두 피크를 보려면 피크 영역을 드래그하십시오.

그림 14-21 16% 신뢰

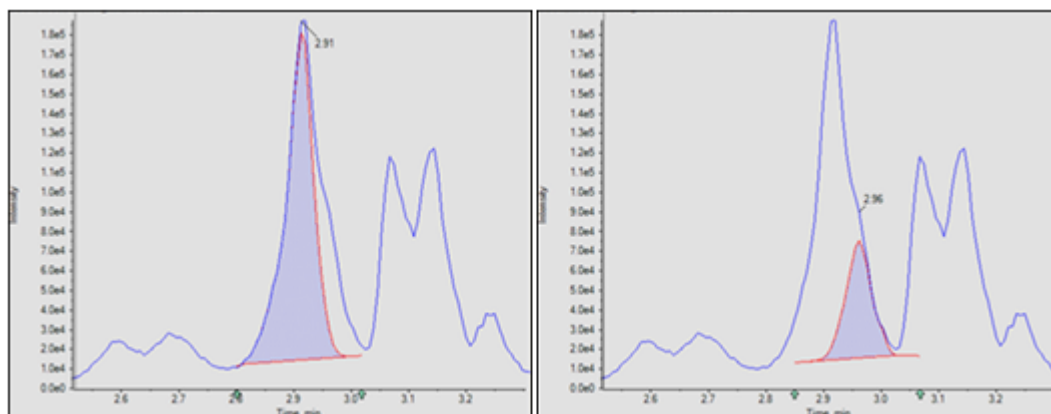
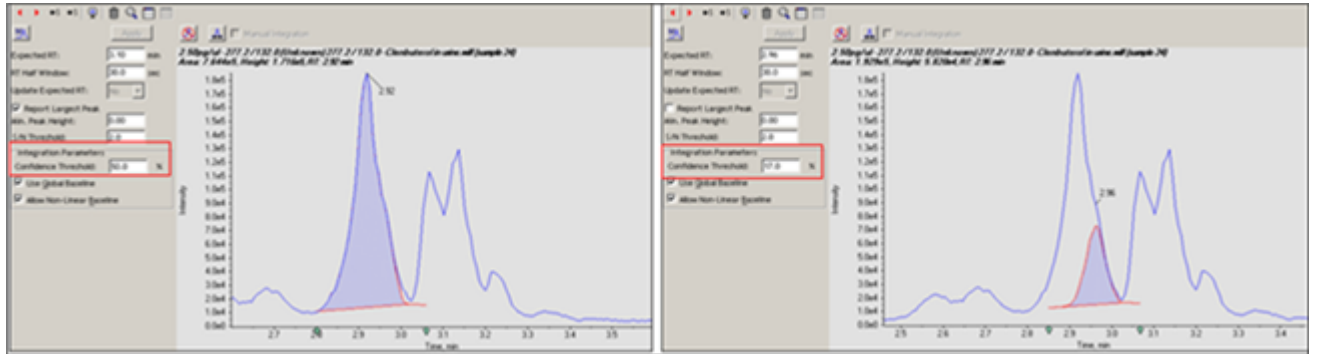


그림 14-22 신뢰 임계값 매개 변수

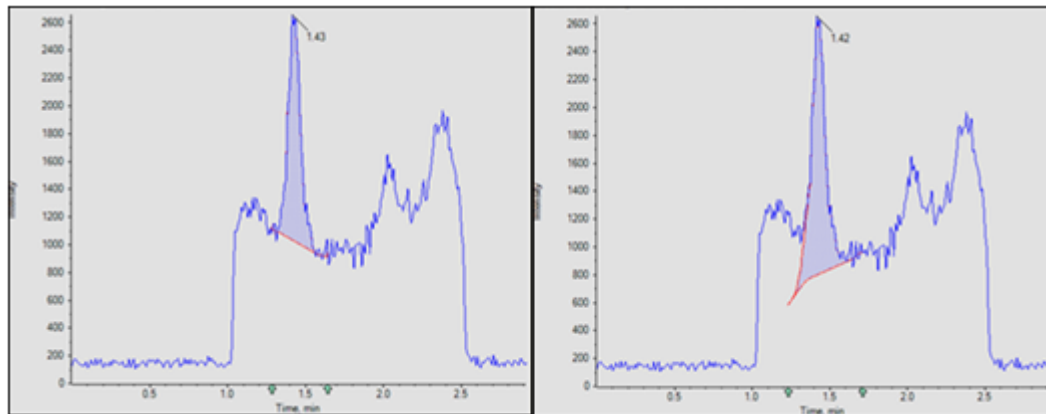


전역 기준선 사용

전체 크로마토그램을 기준선으로 사용하려면 선택하십시오. 이 옵션이 선택되지 않으면 정량화 소프트웨어가 기준선 변경 사항을 로컬에서 평가합니다. [그림 14-23](#) 로컬 기준선을 사용해야 하는 경우의 예시를 보여 줍니다.

왼쪽 그래프는 로컬 기준선을 이용하여 적절히 통합된 크로마토그램을 보여 줍니다. 오른쪽 그래프는 전역 기준선을 이용하여 적절히 통합된 크로마토그램을 보여 줍니다.

그림 14-23 전역 기준선 사용



비선형 기준선 허용

선형 기준선과 비선형 기준선 중 하나를 선택할 때 이 옵션을 사용하십시오. 비선형 기준선은 각 피크 아래의 기준선을 추정합니다. 선형 옵션은 특정 피크 그룹의 시작과 끝에 위치한 포인트 사이에 선을 맞춥니다. [그림 14-24](#) 및 [그림 14-25](#)는 동시 용리 피크의 선형 기준선과 비선형 기준선의 예시를 보여 줍니다. 항목 1 - 4는 나선형 피크입니다.

비선형 기준선은 여러 피크에 권장됩니다. 단일 피크의 경우 선형과 비선형의 차이가 크지 않습니다.

그림 14-24 선형 기준선 예시

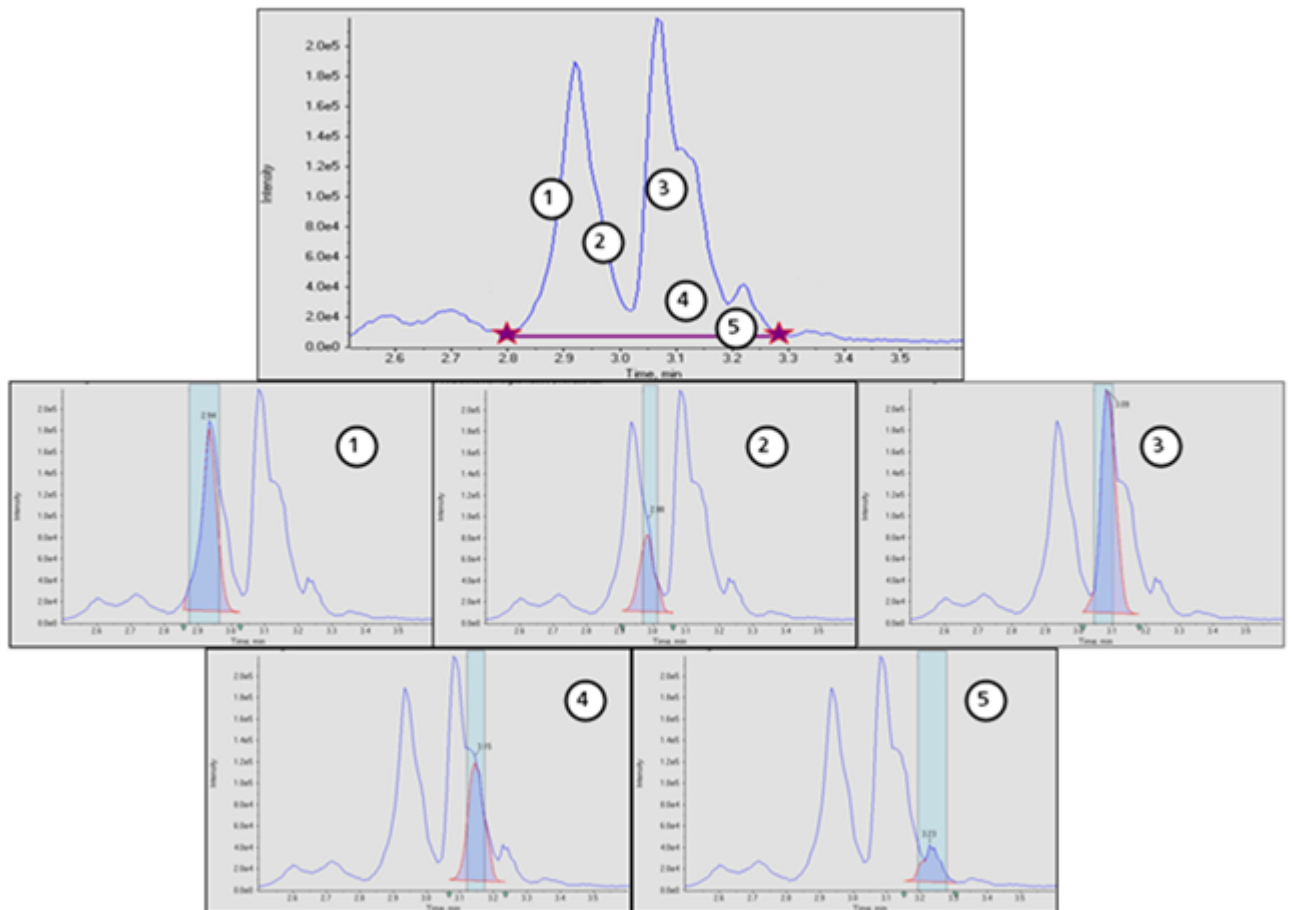
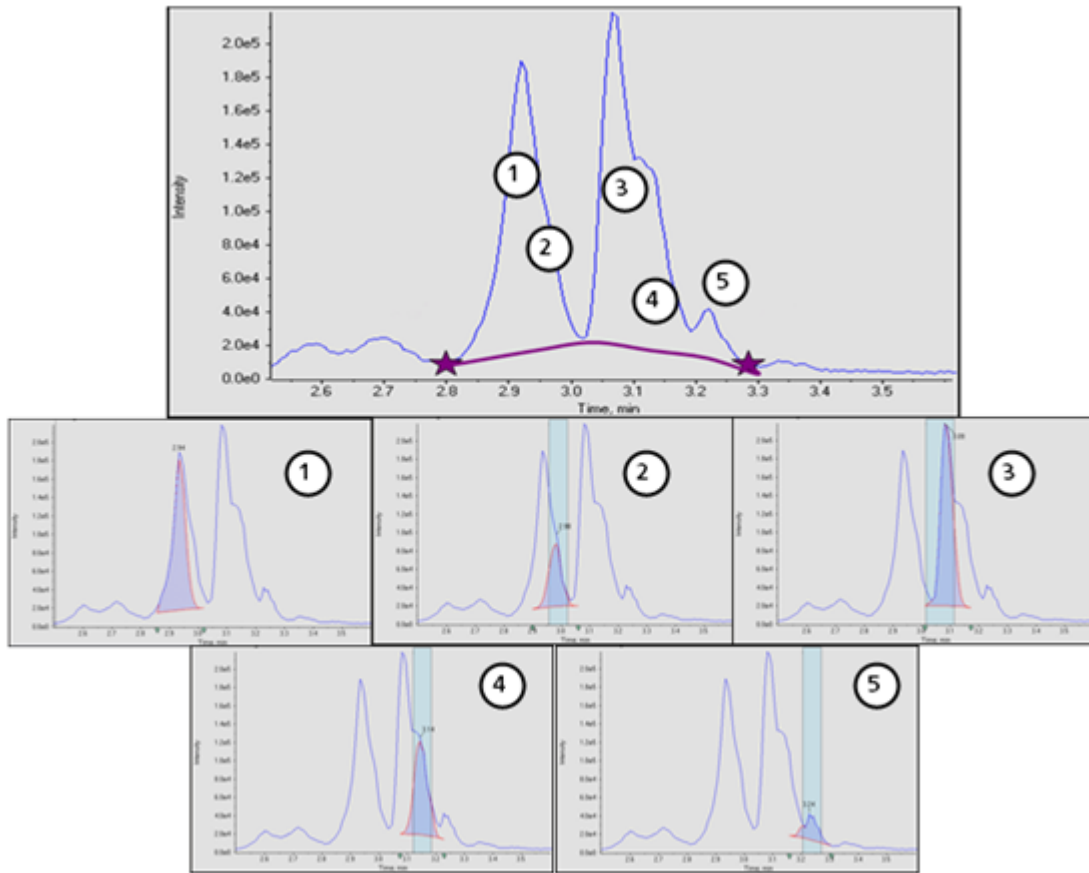


그림 14-25 비선형 기준선 예시



SignalFinder™ 통합 알고리즘 사용 팁

- 두 개 피크 병합: SignalFinder 통합 알고리즘은 종종 두 개의 피크를 검출할 때가 있습니다. 두 개의 피크를 병합하려면 **Ctrl**을 누른 뒤 두 개의 피크를 드래그하십시오. 소프트웨어는 두 개의 피크가 서로 지나치게 멀리 떨어져 있지 않은 경우에 회선 감도를 줄여 피크 병합을 시도합니다.
- 피크 시작 및 종료 시간을 변경하십시오: **Results Table** 생성 중 또는 피크 검토 중에 피크 시작 및 종료 시간을 변경하려면 피크 시작 및 종료 화살표를 드래그하십시오.

참고: 사용자는 적당한 한계 범위 내에서만 시작 및 종료 화살표를 변경할 수 있습니다.

MQ4 통합 알고리즘 매개 변수

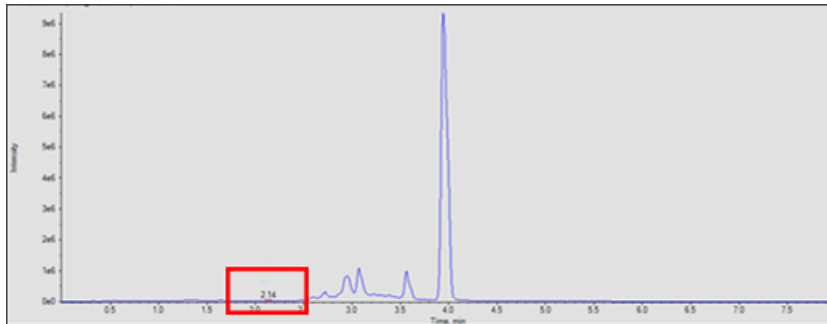
다음 매개 변수는 관심 피크를 식별하고 보고하는 데 사용됩니다. 사용 가능 매개 변수에 대한 전체 목록은 [통합 알고리즘 매개 변수 페이지의 117](#) 내용을 참조하십시오.

노이즈 백분율

이 매개 변수는 크로마토그램의 노이즈 수준을 추정하는 데 사용됩니다. 최소 강도의 데이터 포인트에 대해 지정된 백분율이 노이즈로 간주됩니다.

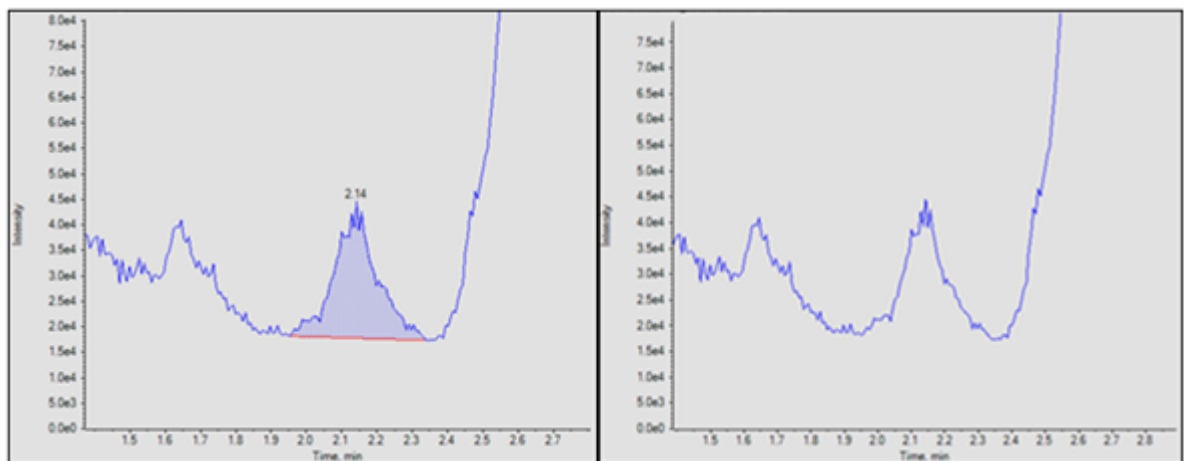
일반적인 값은 20% - 60%입니다. 더 큰 피크가 존재하는 상태에서 작은 피크가 발견되지 않는 경우에는 노이즈 백분율을 낮춰야 합니다. [그림 14-26](#)은 매우 큰 피크가 존재할 때 작은 피크의 예시입니다. 이 피크는 노이즈 백분율이 90%로 설정될 때 찾을 수 없으나 노이즈 백분율이 40%로 설정될 때 발견됩니다.

그림 14-26 관심 피크



[그림 14-27](#)에서 왼쪽 그래프는 40%로 설정된 노이즈 백분율을 보여줍니다. 오른쪽 그래프는 90%로 설정되었습니다.

그림 14-27 노이즈 수준

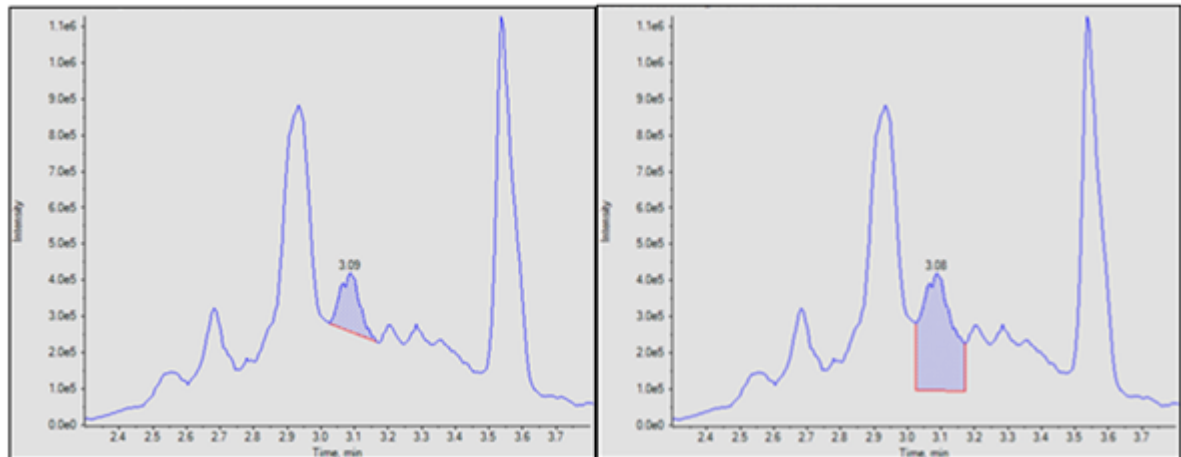


기준선 하위 창

크로마토그램은 다듬기 이후 다른 처리 작업을 시작하기 전에 데이터에서 위로 볼록한 부분(hump)을 제거할 수 있도록 감산된 기준선입니다. 각 데이터 포인트의 기준선은 최소 강도의 현재 포인트 왼쪽과 오른쪽에 있는 데이터 포인트를 모두 이용하여 계산됩니다.

이 매개 변수 값이 예상 피크 폭보다 몇 배 이상 더 크게 설정되어 있다면 정확한 값은 중요하지 않습니다.

그림 14-28 기준선 감산 범위



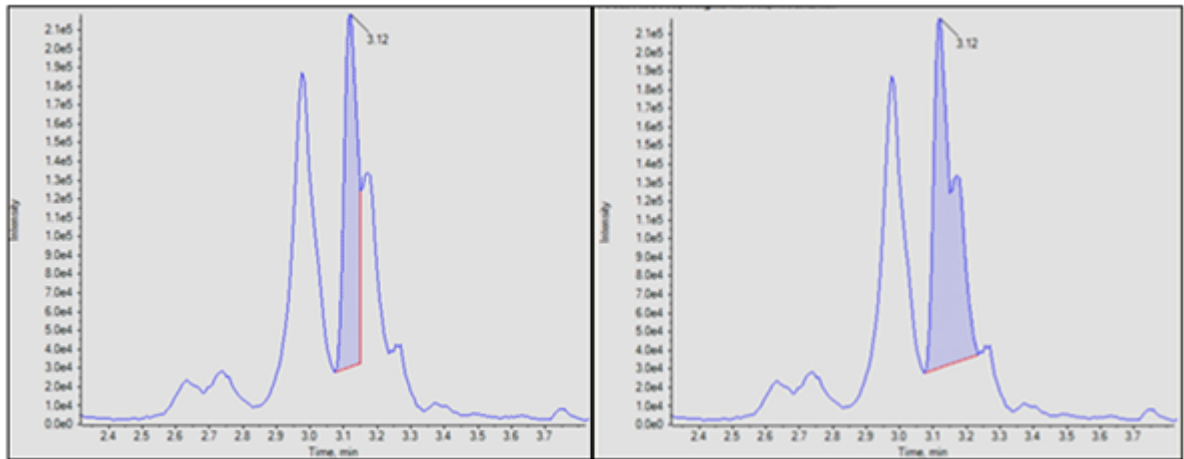
피크 분할

이 매개 변수는 잠재적으로 노이즈를 포함한 피크가 한 개의 단일 피크로 또는 두 개(또는 그 이상)의 분리된 피크로 발견되는지의 여부를 제어합니다. 두 잠재적 피크 간 차이가 지정된 값보다 작은 경우에는 한 개의 단일 피크가 발견됩니다. 그렇지 않은 경우에는 두 개의 피크가 발견됩니다.

이 매개 변수를 큰 값으로 설정하면 노이즈를 포함한 피크가 분리되어 두 개의 개별 피크로 발견되지 않습니다. 그러나 가까이 용리(겹침)되는 별개의 두 피크가 존재하는 경우에는 더 작은 값을 사용해야 합니다.

왼쪽 그래프는 두 개 포인트로 설정된 Peak Splitting을 보여 줍니다. 오른쪽 그래프는 세 개 포인트로 설정된 Peak Splitting을 보여 줍니다.

그림 14-29 피크 분할



선택적인 작업

이 섹션은 데이터 분석을 강화할 때 사용할 수 있는 선택적인 작업들을 포함합니다.

메트릭 플롯 생성

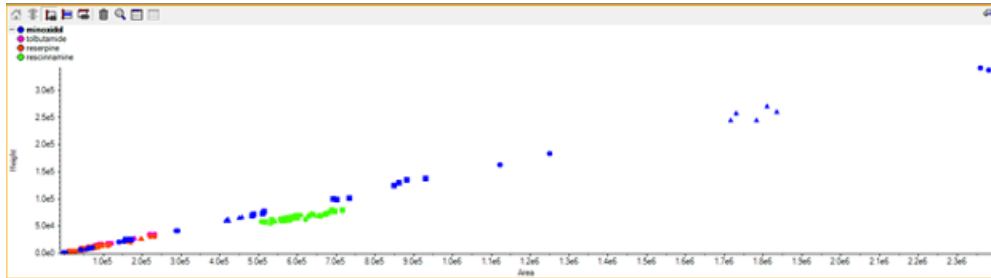
Results Table의 값을 행 번호 또는 다른 열과 비교하여 플롯으로 그리려면 **Metric Plot**을 사용하십시오. 이 플롯은 특히 모든 크로마토그램을 **Peak Review** 창에서 수동으로 검토해야 하는 경우를 비롯해 시각적 데이터 검토 시 매우 유용합니다.

참고: 메트릭 플롯은 교정 곡선과 동일한 회귀 수식을 사용합니다. 메트릭 플롯에는 두 개의 추가 수식인 평균과 중앙값이 존재합니다.

1. **Results Table**을 엽니다.
2. 하나 또는 두 개의 열을 선택한 뒤 **Metric Plot** 아이콘을 클릭합니다. 이 예시에서는 **IS Area** 열을 선택하십시오.

한 개의 열을 선택한 경우에는 결과 플롯에 열 값이 표의 행 번호 함수로 표시됩니다. 두 개의 열을 선택한 경우에는 두 열 값의 플롯이 그려집니다. 선택된 두 열 중 첫 번째는 x 값을 포함하며 두 번째는 y 값을 포함합니다.
3. 플롯에서 사용하는 기호 설명을 보려면 플롯 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Show Legend**를 클릭하십시오.

그림 14-30 Metric Plot



사용자 지정 열 생성

1. **Results Table**이 열려 활성 상태일 때 마우스 오른쪽으로 클릭한 뒤 **Add Custom Column**을 클릭합니다.

열은 표 끝에 추가됩니다.

2. **Custom Column Name** 대화 상자의 열에 이름을 입력합니다.
3. **OK**를 클릭합니다.

정량화 방법 파일 및 포함된 방법 정보

정량화 방법은 다음 중 한 가지 사항을 선택하여 생성할 수 있습니다.

- **Quantitation wizard**를 사용합니다.
- **Edit** 체크 박스가 선택된 경우 **Quantitation wizard**에서 기존 방법을 편집합니다.
- 기존 정량화 방법을 열어 편집합니다.

정량화 방법은 **Quantitation Method** 폴더에 저장됩니다.

Results Table이 생성되면 **Results Table**을 생성하는 데 사용된 정량화 방법이 **Results Table**에 포함됩니다. 포함된 정량화 방법을 편집하십시오. 단, 정량화 방법의 모든 변경 사항은 **Results Table**에 포함된 방법에만 적용되며 **Quantitation Method** 폴더에 위치한 방법에는 적용되지 않습니다.

팁! 이렇게 수정되어 포함된 방법은 이후에 사용할 수 있도록 내보낼 수 있습니다.

SignalFinder 통합 알고리즘 매개 변수

SignalFinder™는 통합 알고리즘은 새 정량화 방법을 생성할 때 선택된 샘플을 이용하여 피크 모델을 빌드합니다. 이 모델은 알고리즘을 훈련하는 데 사용되도록 선택된 피크의 모양을 설명합니다.

그림 A-1 Integration Defaults 대화 상자

The dialog box titled "Integration Defaults" contains the following settings:

- Integration Algorithm:** SignalFinder1 (dropdown menu)
- Expected RT:** 0.00 min
- RT Half Window:** 30.0 sec
- Update Expected RT:** No (dropdown menu)
- ☒ **Report Largest Peak**
- Min. Peak Height:** 0.00
- ☒ **Use Saturation Correction**
- Saturation Threshold:** 3.5E+006
- S/N Threshold:** 2.0
- Integration Parameters:**
 - Confidence Threshold:** 50.0 %
 - ☒ **Use Global Baseline**
 - ☒ **Allow Non-Linear Baseline**
- Buttons:** OK, Cancel

레이블	설명
Integration Algorithm	선택한 통합 알고리즘.
Expected RT	예상 머무름 시간(분 단위). 이 시간은 처음에 정량화 방법을 빌드하는 데 사용되는 대표 샘플의 크로마토그램에서 최대 피크 머무름 시간으로 설정됩니다. 이 필드는 편집할 수 없습니다. 이는 정량화 방법으로 구성 요소에 따라 업데이트됩니다.

레이블	설명
RT Half Window	초 단위의 총 머무름 시간 범위의 절반. 피크가 검출 및 보고되도록 설정하려면 광선과 예상 머무름 시간 간 차이가 이 값 이하여야 합니다.
Update Expected RT	<p>예상 머무름 시간이 다른 화합물을 사용하여 상황에 따라 조정되어야 하는지 여부를 나타냅니다. 샘플별 머무름 시간 변화를 보상하기 위해 추가 정보를 이용합니다. 선택 사항은 다음과 같습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • No: 예상 머무름 시간이 그대로 사용됩니다. • Group: 해당 그룹의 모든 구성 요소가 동일한 머무름 시간을 나타내는 (동일한 화합물에 상이한 전환) 그룹에 할당된 구성 요소에 해당됩니다. 예상 머무름 시간은 RT 범위 내 그룹(제공된 샘플)에 대한 개별 크로마토그램의 최대 중첩 위치를 사용하여 업데이트됩니다. 이 개념은 예상 RT를 실제 관심 구성 요소의 가능 RT로 설정하는 것입니다(피크가 각 크로마토그램 내 예상되는 경우). <p>한 개 그룹에 정의된 내부 표준 물질이 최소 두 개 이상인 경우에는 새 머무름 시간을 결정할 때 이 내부 표준 물질의 크로마토그램만 사용됩니다. 그렇지 않은 경우에는 그룹의 모든 크로마토그램이 사용됩니다. 이러한 일의 목적은 화합물이 적절한 수준에서 존재할 것 같은 이러한 크로마토그램만을 사용하는 것입니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS: 내부 표준을 사용하는 분석 물질의 내부 표준 피크 실제 머무름 시간 (해당 샘플의 경우)이 가장 먼저 결정됩니다. 분석 물질에 대한 예상 RT는 지정된 예상 RT와 내부 표준 물질에 대한 예상 RT의 실제 비율을 곱하여 측정됩니다. 이 옵션은 상대적인 머무름 시간으로 일컬어 지기도 합니다. <p>참고: 이 옵션은 내부 표준 물질이나 내부 표준 물질을 이용하지 않는 분석 물질에 적용되지 않습니다.</p>
Report Largest Peak	<p>머무름 시간 범위 내 하나의 크로마토그램에서 두 개 이상의 피크가 발견되어 최소 폭과 높이가 충족되는 경우에는 이 매개 변수가 보고될 피크를 제어합니다. 확인란이 선택되면 최대 면적을 가진 피크가 보고됩니다. 확인란이 선택 해제되면 예상 시간과 가장 근접한 머무름 시간을 갖는 피크가 보고됩니다.</p> <p>머무름 시간의 재현 가능성이 매우 높은 경우가 아니라면 이 옵션을 활성화하는 것이 좋습니다.</p>
Min. Peak Height	이 매개 변수는 통합에 영향을 주지 않습니다. 이 매개 변수는 보고용으로만 사용됩니다. 이 값보다 강도가 낮은 모든 잠재적 피크는 관심 대상이 아닌 것으로 간주되어 사용되지 않습니다.

레이블	설명
Use Saturation Correction	알고리즘이 피크가 포화 상태인 것으로 감지하면 검출기가 포화되지 않았을 때의 예상 피크 모양을 예측하는 모델을 사용합니다. 이 경우 검출기가 포화되지 않았다면 확보될 수 있었던 반응에 가까운 피크의 최고치를 초과하도록 프로필이 확장됩니다. 이는 교정 곡선의 선형 동적 범위를 확장할 수 있습니다. 이 옵션은 정량화 방법 생성 또는 개별 피크 검토 도중이 아닐 때 전체 알고리즘 기본값을 설정하는 경우에만 사용 가능합니다. 이 설정을 일부 피크에만 사용하는 것은 유용하지 않기 때문입니다.
Saturation Threshold	이 임계값을 초과하는 피크는 포화 상태로 간주됩니다. 이 값은 탐지기에 좌우됩니다.
S/N Threshold	이 매개 변수는 통합에 영향을 주지 않습니다. 이 매개 변수는 보고용으로만 사용됩니다. 임계값 미만의 피크는 보고되지 않습니다.
Confidence Threshold	가양성인 잠재적 피크를 필터링할 때 사용합니다. 기본값은 50%이며 대개 이 값이 적합합니다. 그러나 노이즈를 많이 포함한 데이터 또는 피크 폭이 샘플별로 크게 다른 데이터에는 더 큰 값을 사용합니다.
Use Global Baseline	전체 크로마토그램을 기준선으로 사용하려면 선택하십시오. 확인란이 선택되지 않으면 소프트웨어가 기준선 변경 사항을 로컬에서 평가합니다.
Allow Non-Linear Baseline	선형 기준선과 비선형 기준선 중 하나를 선택하십시오. 비선형 기준선은 각 피크 아래의 기준선을 추정합니다. 선형 기준선은 특정 피크 그룹의 시작과 끝에 위치한 포인트 사이에 선을 맞춥니다.

MQ4 통합 알고리즘 매개 변수

그림 A-2 Integration Defaults 대화 상자

The dialog box titled "Integration Defaults" contains the following settings:

- Integration Algorithm: MQ4 (selected in a dropdown)
- Gaussian Smooth Width: 0.0 points
- Expected RT: 0.00 min
- RT Half Window: 30.0 sec
- Update Expected RT: No (selected in a dropdown)
- ☒ Report Largest Peak
- Min. Peak Width: 3 points
- Min. Peak Height: 0.00
- Integration Parameters section:
 - Noise Percentage: 40.0 %
 - Baseline Sub. Window: 2.00 min
 - Peak Splitting: 2 points

Buttons at the bottom: OK, Cancel.

레이블	설명
Integration Algorithm	선택한 통합 알고리즘.
Gaussian Smoothing Width	지정된 값과 같은 절반 폭(포인트 내)의 표준 가우시안 다듬기 알고리즘이 적용됩니다. 노이즈가 있는 크로마토그램의 경우에는 실제 피크 폭(절반 높이에서)에 가까운 값이 좋습니다. 노이즈가 적은 데이터에는 더 작은 값을 사용할 수 있습니다.
Expected RT	예상 머무름 시간(분 단위). 이 시간은 처음에 정량화 방법을 빌드하는데 사용되는 대표 샘플의 크로마토그램에서 최대 피크 머무름 시간으로 설정됩니다.
RT Half Window	초 단위의 총 머무름 시간 범위의 절반. 피크가 검출 및 보고되도록 설정하려면 광선과 예상 머무름 시간 간 차이가 이 값 이하여야 합니다.

레이블	설명
Update Expected RT	<p>예상 머무름 시간이 다른 화합물을 사용하여 상황에 따라 조정되어야 하는지 여부를 나타냅니다. 샘플별 머무름 시간 변화를 보상하기 위해 추가 정보를 이용합니다. 선택 사항은 다음과 같습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • No: 예상 머무름 시간이 그대로 사용됩니다. • Group: 해당 그룹의 모든 구성 요소가 동일한 머무름 시간을 나타내는(동일한 화합물에 상이한 전환) 그룹에 할당된 구성 요소에 해당됩니다. 예상 머무름 시간은 RT 범위 내 그룹(제공된 샘플)에 대한 개별 크로마토그램의 최대 중첩 위치를 사용하여 업데이트됩니다. 이 개념은 예상 RT를 실제 관심 구성 요소의 가능 RT로 설정하는 것입니다(피크가 각 크로마토그램 내 예상되는 경우). <p>한 개 그룹에 정의된 내부 표준 물질이 최소 두 개 이상인 경우에는 새 머무름 시간을 결정할 때 이 내부 표준 물질의 크로마토그램만 사용됩니다. 그렇지 않은 경우에는 그룹의 모든 크로마토그램이 사용됩니다. 이러한 일의 목적은 화합물이 적절한 수준에서 존재할 것 같은 이러한 크로마토그램만을 사용하는 것입니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS: 내부 표준을 사용하는 분석 물질의 내부 표준 피크 실제 머무름 시간(해당 샘플의 경우)이 가장 먼저 결정됩니다. 분석 물질에 대한 예상 RT는 지정된 예상 RT와 내부 표준 물질에 대한 예상 RT의 실제 비율을 곱하여 측정됩니다. 이 옵션은 상대적인 머무름 시간으로 일컬어 지기도 합니다.
Report Largest Peak	<p>머무름 시간 범위 내 하나의 크로마토그램에서 두 개 이상의 피크가 발견되어 최소 폭과 높이가 만족되는 경우에는 이 매개 변수가 보고될 피크를 제어합니다. 확인란이 선택되면 최대 면적을 가진 피크가 보고됩니다. 확인란이 선택 해제되면 예상 시간과 가장 근접한 머무름 시간을 갖는 피크가 보고됩니다.</p> <p>머무름 시간의 재현 가능성이 매우 높은 경우가 아니라면 이 옵션을 활성화하는 것이 좋습니다.</p>
Min. Peak Height	<p>이 매개 변수는 통합에 영향을 주지 않습니다. 이 매개 변수는 보고용으로만 사용됩니다. 이 값보다 강도가 낮은 모든 잠재적 피크는 관심 대상이 아닌 것으로 간주되어 사용되지 않습니다.</p>
Min. Peak Width	<p>이 값보다 폭이 좁은 모든 잠재적 피크는 노이즈로 간주되어 사용되지 않습니다.</p>
Noise Percentage	<p>이 매개 변수는 크로마토그램의 노이즈 수준을 추정하는 데 사용됩니다. 최소 강도의 데이터 포인트에 대해 지정된 백분율이 노이즈로 간주됩니다.</p> <p>일반적인 값은 20% - 60%입니다. 더 큰 피크가 존재하는 상태에서 작은 피크가 발견되지 않는 경우에는 이 값을 낮춰야 합니다.</p>

레이블	설명
Baseline Sub. Window	<p>크로마토그램은 다듬기 이후 다른 처리 작업을 시작하기 전에 데이터에서 위로 볼록한 부분(hump)을 제거할 수 있도록 감산된 기준선입니다. 각 데이터 포인트의 기준선은 최소 강도의 현재 포인트 왼쪽과 오른쪽에 있는 데이터 포인트를 모두 이용하여 계산됩니다.</p> <p>이 매개 변수 값이 예상 피크 폭보다 몇 배 이상 더 크게 설정되어 있다면 정확한 값은 중요하지 않습니다.</p>
Peak Splitting	<p>이 매개 변수는 잠재적으로 노이즈를 포함한 피크가 한 개의 단일 피크로 또는 두 개(또는 그 이상)의 분리된 피크로 발견되는지의 여부를 제어합니다. 두 잠재적 피크 간 차이가 지정된 값보다 작은 경우에는 한 개의 단일 피크가 발견됩니다. 그렇지 않은 경우에는 두 개의 피크가 발견됩니다.</p> <p>이 매개 변수를 큰 값으로 설정하면 노이즈를 포함한 피크가 분할되어 두 개의 개별 피크로 발견되지 않습니다. 그러나 가까이 용리(겹침)되는 별개의 두 피크가 존재하는 경우에는 더 작은 값을 사용해야 합니다.</p>

이 섹션은 회귀 곡선을 계산하는 데 사용되는 수식을 설명합니다. 다음 수식에서 **x**는 **Standard** 샘플의 분석 물질 농도를 나타내며 **y**는 해당 피크 면적 또는 높이를 나타냅니다. 회귀에 사용되는 정확한 변수는 [표 B-1](#)에 제시된 바와 같이 내부 표준 물질이 사용되는지의 여부와 피크 면적 또는 피크 높이가 사용되는지의 여부에 좌우됩니다.

표 B-1 회귀 변수

내부 표준이 사용되는가?	면적이 사용되는가?	x	y
예	예	$C_a / C_{is} / DF$	A_a / A_{is}
예	아니오	$C_a / C_{is} / DF$	H_a / H_{is}
아니오	예	C_a / DF	A_a
아니오	아니오	C_a / DF	H_a

이때

- C_a = 실제 분석 물질 농도
- C_{is} = 내부 표준 물질 농도
- DF = 희석 인자
- A_a = 분석 물질 피크 면적
- A_{is} = 내부 표준 물질 피크 면적
- H_a = 분석 물질 피크 높이
- H_{is} = 내부 표준 물질 피크 높이

가중치 인자

표 B-2은 가중치 계수(방정식의 w)가 어떻게 일곱 개의 가중치 유형 각각에 대해 계산되었는지 보여줍니다.

표 B-2 가중치 인자

Weighting Type	중량(w)
없음	항상 1.0입니다.
$1/x$	$ x < 10^{-5}$ 인 경우 $w = 10^5$ 입니다. 그렇지 않은 경우 $w = 1/ x $ 입니다.
$1/x^2$	$ x < 10^{-5}$ 인 경우 $w = 10^{10}$ 입니다. 그렇지 않은 경우 $w = 1/x^2$ 입니다.
$1/y$	$ y < 10^{-8}$ 인 경우 $w = 10^8$ 입니다. 그렇지 않은 경우 $w = 1/ y $ 입니다.
$1/y^2$	$ y < 10^{-8}$ 인 경우 $w = 10^{16}$ 입니다. 그렇지 않은 경우 $w = 1/y^2$ 입니다.
$\ln x$	$x < 0$ 인 경우 오류가 발생합니다. $x < 10^{-5}$ 일 경우, $w = \ln 10^5$ 입니다. 그렇지 않은 경우 $w = \ln x $ 입니다.
$\ln y$	$y < 0$ 인 경우 오류가 발생합니다. $y < 10^{-8}$ 일 경우, $w = \ln 10^8$ 입니다. 그렇지 않은 경우 $w = \ln y $ 입니다.

회귀

이 섹션은 각 회귀 유형의 수식을 제시합니다. 다음 수식에서 x , y , w 는 사전에 정의됩니다. 모든 총합은 사용되지 않는 것으로 표시된 **Standard** 샘플 이외의 모든 **Standard** 샘플에 대해 계산됩니다.

상관 계수는 다음과 같이 계산됩니다.

$$r = (\sum w \sum w y y_c - \sum w y \sum w y_c) / \sqrt{(D_y D_{y_c})}$$

이 때

$$D_y = \sum w \sum w y^2 - (\sum w y)^2$$

y_c = 아래 해당 수식을 사용하여 계산된 y 값

$$D_{y_c} = \sum w \sum w y_c^2 - (\sum w y_c)^2$$

선형

선형 교정 방정식은 다음과 같습니다.

$$y = mx + b$$

기울기와 절편은 다음과 같이 계산됩니다.

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

이때

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

영점을 이용한 선형

영점 교정을 이용한 선형 방정식은 다음과 같습니다.

$$y = mx$$

기울기는 다음과 같이 계산됩니다.

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

평균 응답 인자

평균 감응 인자 교정은 다음과 같습니다.

$$y = mx$$

이것은 영점을 이용한 선형 방정식의 수식과 같습니다. 그러나 기울기는 다르게 계산됩니다.

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

또한 감응 인자의 표준 편차는 다음과 같습니다.

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1))} / \sum w$$

이때

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy/x)^2$$

참고: x 값이 0인 포인트는 총합에서 제외됩니다.

좌표로 이루어진 선에 일부 선형성 및 일부 곡률이 있는 경우 선형 또는 2차 회귀 분석대신에 파워 회귀 분석을 사용해 이러한 핏 사이에 선을 생성합니다.

이차

이차 교정 방정식은 다음과 같습니다.

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

다항식 계수는 다음과 같이 계산됩니다.

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wx^2 - a_1 \sum wx - a_2 \sum wx^3) / \sum w$$

이때

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

제곱

멱함수 교정 수식은 다음과 같습니다.

$$y = ax^p$$

선형 교정 수식은 위에 설명된 바와 같이 기울기(m)와 절편(b)을 계산하는 데 사용되지만 이 수식의 x가 ln x로 대체되고 y가 ln y로 대체됩니다. 이 수식이 완료되면 a와 p가 다음과 같이 계산됩니다:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

x 또는 y 값 중 음성이거나 0인 경우에는 오류가 보고됩니다.

Wagner

Wagner 교정 수식은 다음과 같습니다.

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

이차 교정 수식은 위에 설명된 바와 같이 a_0 , a_1 및 a_2 를 계산하는 데 사용되지만 이 수식의 x가 ln x로 대체되고 y가 ln y로 대체됩니다.

x 또는 y 값 중 음성이거나 0인 경우에는 오류가 보고됩니다.

Hill

Hill 교정 수식은 다음과 같습니다.

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

a, b, c, n에 해법 분석 기능을 제공하는 것은 불가능합니다. 그러나 반복 Levenberg-Marquardt 방법을 통해 계수가 결정됩니다.

최종 농도 계산

이 섹션은 원본 농도에 사용된 IS 농도와 희석 인자를 이용하여 결과 회귀 수식으로 최종 농도를 계산하는 방법에 대해 설명합니다.

선형

$$x = (y - b) / m$$

영점을 이용한 선형 및 평균 감응 인자

$$x = y / m$$

이차

$$x = (-a_1 \pm (a_1^2 - 4 \times a_2 \times (a_0 - y))^{0.5}) / (2 \times a_2)$$

- + 루트와 - 루트가 모두 표준 범위 내에 포함되는 경우에는 고유한 솔루션이 없기 때문에 오류가 생성됩니다.
- 두 루트 중 정확히 하나만 표준 농도 범위에 포함되는 경우에는 이 값이 보고됩니다.
- 두 루트가 모두 최저 농도 표준에 미달하는 경우에는 + 루트가 보고됩니다.
- 두 루트가 모두 최고 농도 표준을 초과하는 경우에는 - 루트가 보고됩니다.
- - 루트가 최저 표준에 미달하고 + 루트가 최고 표준을 초과할 때 - 루트와 최저 농도 표준 간 차이가 + 루트와 최고 농도 간 차이보다 작은 경우에 - 루트가 보고됩니다. 그 반대인 경우에는 + 루트가 보고됩니다.

제곱

$$x = (y / a)^{(1 / p)}$$

Wagner

주 계산에는 이차 방정식과 동일한 수식이 사용되며, 여기에서 x는 $\ln x$ 로 대체되고 y는 $\ln y$ 로 대체됩니다.

Hill

$$x = ((a - y \times c) / (y - b))^{(1 / n)}$$

이 섹션은 **Results Tables**에서 서식 있는 보고서를 생성하기 위해 소프트웨어 내 보고서 기능을 이용하는 방법을 설명합니다.

보고서 생성

이 소프트웨어는 Microsoft Word 문서를 사전 정의 템플릿으로 사용합니다. 보고서가 생성되면 가장 최근의 Results Table 및 연결된 파일에서 값이 추출됩니다.

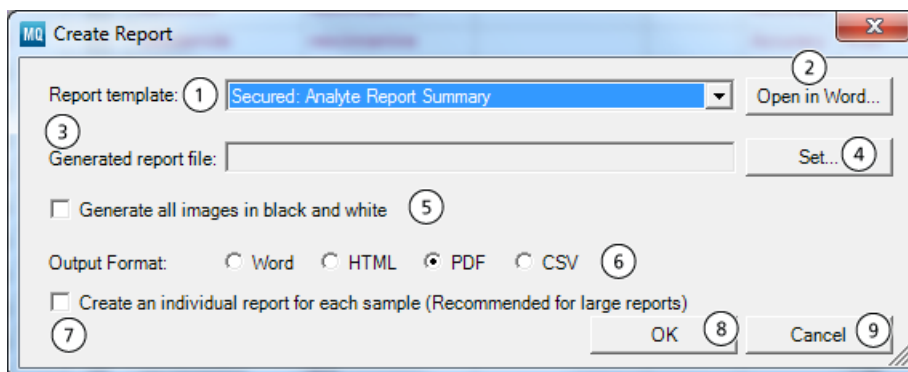
사용자는 사용자 지정 템플릿의 유효성을 검사해야 합니다. 사용자는 보고서 템플릿 편집기의 숫자 형식을 편집할 수 있습니다. 숫자 형식이 템플릿에 지정되어 있지 않은 경우에는 **Results Table Column Setting**의 형식이 보고서에 사용됩니다. 이 때 소수 자리의 수가 정확해야 합니다.

소프트웨어에서 데이터를 출력하는 제어 방식은 **Results Tables**를 내보내고 LIMS에 전송하여 보고하는 것입니다. **Results Tables**에서 복사하여 붙여넣기 등으로 생성된 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않습니다. 사용자는 규제된 목적을 위해 제어되지 않은 출력 방법을 사용해서는 안 됩니다.

액세스할 폴더를 찾아본 뒤 데이터를 저장하십시오. 기본 설정에 따라 템플릿이 열리고 보고서가 저장되었던 이전 위치가 열립니다.

1. **Results Table**을 엽니다.
2. **File > Create Report and Save Results Table**을 클릭합니다.

그림 C-1 Create Report 대화 상자



품목	설명
1	보고서 템플릿: 목록에서 템플릿을 선택하십시오..
2	Word로 열기: Microsoft Word에서 지정된 보고서 템플릿을 확인하거나 편집하기 위해 직접 열 때 클릭합니다.
3	생성된 보고서 파일: 보고서 파일 이름을 표시합니다.
4	Set: 생성할 보고서 파일 이름을 지정할 때 클릭합니다.
5	모든 이미지를 흑백으로 생성: 흑백으로 인쇄하려면 확인란을 선택하십시오.
6	Output Format: Word, HTML, PDF 또는 CSV. 보고서는 편집할 수 없기 때문에 PDF가 가장 안전한 출력 방법입니다.
7	각 샘플에 대해 개별 보고서 생성(대용량 보고서에 권장)
8	보고서를 인쇄하려면 OK 를 클릭합니다.
9	보고서를 생성하지 않고 대화 상자를 닫으려면 Cancel 을 클릭합니다.

3. Report template 목록에서 템플릿을 선택하십시오. 보고서 템플릿은 다음 위치에 저장됩니다.

- Windows 7 및 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

템플릿 설명은 [보고서 템플릿 페이지의 131](#) 내용을 참조하십시오.

4. 보고서 이름 및 위치를 생성하려면 **Set**을 클릭합니다.

5. 보고서를 생성하려면 **OK**를 클릭합니다.

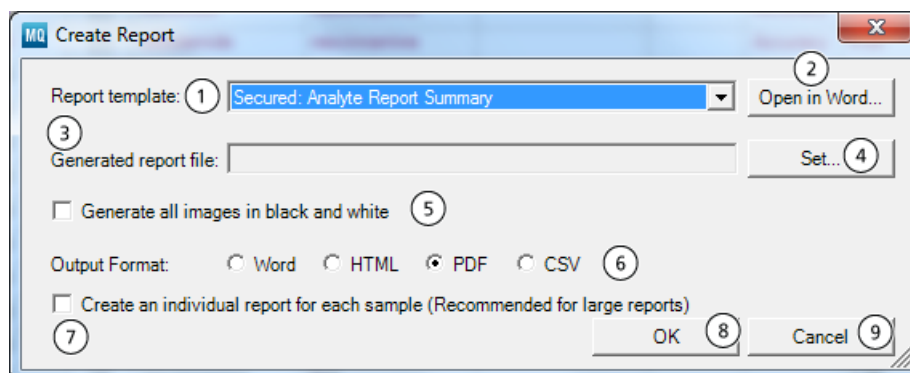
사용자 지정 보고서 템플릿 생성

소프트웨어에서 데이터를 출력하는 제어 방식은 **Results Tables**를 내보내고 LIMS에 전송하여 보고하는 것입니다. **Results Tables**에서 복사하여 붙여넣기 등으로 생성된 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않습니다. 사용자는 규제된 목적을 위해 제어되지 않은 출력 방법을 사용해서는 안 됩니다.

1. **Results Table**을 열거나 생성합니다.

2. **File > Create Report and Save Results Table**을 클릭합니다.

그림 C-2 Create Report 대화 상자



품목	설명
1	보고서 템플릿: 목록에서 템플릿을 선택하십시오..
2	Word로 열기: Microsoft Word에서 지정된 보고서 템플릿을 확인하거나 편집하기 위해 직접 열 때 클릭합니다.
3	생성된 보고서 파일: 보고서 파일 이름을 표시합니다.
4	Set: 생성할 보고서 파일 이름을 지정할 때 클릭합니다.
5	모든 이미지를 흑백으로 생성: 흑백으로 인쇄하려면 확인란을 선택하십시오.
6	Output Format: Word, HTML, PDF 또는 CSV. 보고서는 편집할 수 없기 때문에 PDF가 가장 안전한 출력 방법입니다.
7	각 샘플에 대해 개별 보고서 생성(대용량 보고서에 권장)
8	보고서를 인쇄하려면 OK 를 클릭합니다.
9	보고서를 생성하지 않고 대화 상자를 닫으려면 Cancel 을 클릭합니다.

3. **Report template** 목록에서 템플릿을 선택하십시오.

4. **Open in Word**를 클릭합니다.

docx 템플릿이 열리고 보고자 템플릿 편집기가 오른쪽에 표시됩니다. 템플릿 편집기는 태그 정보가 자동으로 입력됩니다.

5. 템플릿은 필요에 따라 편집하십시오.

6. 템플릿을 저장합니다.

보고서 템플릿

다음 표는 <drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter에서 사용 가능한 템플릿을 설명합니다.

보고서

사용자 지정 템플릿을 생성하는 경우에는 사용자가 템플릿 유효성을 검사해야 합니다. 사용자는 Report Template editor의 숫자 형식을 편집할 수 있습니다. 숫자 형식이 템플릿에 지정되어 있지 않은 경우에는 **Results Table Column Settings** 대화 상자의 형식이 보고서에 사용됩니다. 사용자 지정 보고서 템플릿은 사용자가 유효성을 검사해야 합니다.

일부 보고서 템플릿은 쿼리를 사용합니다. 사용자는 보고서의 Results Table 데이터를 평가, 조작 및 제시할 때 Microsoft Excel 기반 수식을 사용하여 쿼리를 생성할 수 있습니다. 보고서 템플릿의 Metafield 태그는 보고서가 사용해야 하는 query 파일 이름을 보고서에 제시합니다. 쿼리를 사용하려면 보고서 템플릿의 MetaField 태그에 쿼리 파일 이름을 지정해야 합니다. 쿼리는 쿼리로 인식되도록 ".query" 확장자를 포함해야 합니다. 쿼리는 보고서 템플릿이 저장되는 Reporter 폴더에 저장되어야 합니다.

사용자는 Reporter 템플릿 사용 시 특히 템플릿에 쿼리가 사용될 때 생성된 결과에 대한 유효성을 검사하는 것이 바람직합니다. 유효성 검사 후에 보고서 템플릿을 수정하는 경우에는 보고서 템플릿에 대해 다시 유효성을 검사해야 합니다. 보고서 템플릿의 변경 사항에는 보고자 태그 또는 쿼리에 적용된 모든 수정 사항이 포함됩니다.

표 C-1 보고서 템플릿 설명

템플릿	설명
Analyte Report Summary	각 분석 물질의 Samples Summary Table을 표시하는 보안 보고서. 이 보고서 템플릿은 그룹이 정의된 Results Table에 적합합니다.
Calibration Curves Template	분석 물질의 File Information, Statistics Table 및 Calibration Curve을 분석 물질당 한 페이지로 표시하는 보고서.
Metric Plot_IS Area	각 내부 표준 물질에 대한 File Information 및 IS 피크 면적 메트릭 플롯이 포함된 섹션을 표시하는 보안 보고서.
Per Analyte Ion Ratio Report	각 분석 물질에 대한 File Information, Results Table, 각 분석 물질의 Calibration Curves, IS 및 각 분석 물질을 포함한 크로마토그램이 포함된 섹션을 표시하는 보안 보고서. 이 템플릿은 그룹이 정의된 Results Table에 적합합니다.
Per Analyte Report	각 분석 물질에 대한 File Information, Results Table, 각 분석 물질의 Calibration Curves, IS 및 각 분석 물질을 포함한 크로마토그램이 포함된 섹션을 표시하는 보안 보고서. 이 템플릿은 정의된 그룹이 없는 Results Table에 적합합니다.
Per Sample Ion Ratio Report	각 샘플에 대한 각 분석 물질의 File Information, Sample Information, Analyte Results Table, Calibration Curves, IS 및 각 분석 물질을 포함한 크로마토그램이 포함된 섹션을 표시하는 보안 보고서. 이 템플릿은 그룹이 정의된 Results Table에 적합합니다.
Per Sample Report	각 샘플에 대한 각 분석 물질의 File Information, Sample Information, Analyte Results Table, Calibration Curves, IS 및 각 분석 물질을 포함한 크로마토그램이 포함된 섹션을 표시하는 보안 보고서. 이 템플릿은 정의된 그룹이 없는 Results Table에 적합합니다.

표 C-1 보고서 템플릿 설명 (계속)

템플릿	설명
Sample Report Summary	각 샘플의 Analytes Summary Table을 표시하는 보안 보고서. 이 보고서 템플릿은 그룹이 정의된 Results Table에 적합합니다.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	각 미확인 샘플의 File Information, Sample Information, Results Summary Table을 표시하는 보고서. Results Summary Table는 분석 물질별 농도 임계값을 포함합니다. 농도가 임계값을 초과하면 분석 물질이 양성으로 플래그 지정됩니다. 이 템플릿은 쿼리 파일(Sample Report With Concentration Threshold.query)을 참조합니다. 사용자는 분석 물질 이름, 분석 물질 그룹(화합물 등급 등), 분석 물질 농도 임계값을 지정하기 위해 쿼리 파일을 편집할 수 있습니다.

보고서 템플릿 태그

표 C-2 보고서 템플릿 태그

유형	필드 유형	태그 설명
Analyst® MD 소프트웨어 데이터 제공자 스키마 태그		
Analyte	ForEach	모든 분석 물질에 대해 Results Table에서 정의한 순서에 따라 반복합니다.
AnalyteGroup	ForEach	다양한 분석 물질 그룹에 대해서만 반복합니다. TextField 또는 PictureField 태그는 Quantifier 이온 값을 검색합니다. 이 유형의 태그에 Ratiolons 속성을 지정하는 추가적인 For_Each 태그가 포함되어 있는 경우에는 현재 그룹의 일부로 포함되는 Qualifier 이온에만 내부 루프가 해당됩니다.
InternalStandard	ForEach	모든 내부 표준 물질에 대해 반복됩니다.
QCStatistics	ForEach	모든 Quality Control 통계에 대해 반복됩니다.
Ratiolons	ForEach	AnalyteGroup을 참조하십시오.
Sample	ForEach	각 개별 샘플에 대해 반복됩니다. 예를 들어 Sample Name을 삽입할 때 TextField 태그 설정과 함께 사용됩니다.
Statistics	ForEach	모든 Standards 통계에 대해 반복됩니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
MQ_Group	ForEach	IS 그룹 또는 하위 그룹을 비롯한 다양한 그룹에 대해 반복됩니다. TextField 또는 PictureField 태그는 Quantifier 이온 값을 검색합니다. 이 유형의 태그에 RationIons 속성을 지정하는 추가적인 For_Each 태그가 포함되어 있는 경우에는 현재 그룹의 일부로 포함되는 Qualifier 이온에만 내부 루프가 해당됩니다.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Analyte 한정자 전용 MQ_Group을 참조하십시오.
MQ_ISRatiolons	ForEach	IS 한정자 전용 MQ_Group을 참조하십시오.
AnalyteRatio	PictureField	분석 물질 하위 그룹의 Quantifier 및 Qualifier 크로마토그램 오버레이를 표시합니다. Expected Ion Ratio를 나타내기 위해 중앙에 위치한 실선입니다. 중앙선 = Quantifier 피크 높이 x Expected Ion 비율. 점선을 사용하는 허용 가능 Ion Ratio 범위의 상한 및 하한입니다. Lower Bound = Peak Height of Quantifier x Expected Ion Ratio x ((100-오차)/100). Upper Bound = Peak Height of Quantifier x Expected Ion Ratio x ((100+오차)/100)를 표시합니다.
AnalyteRatioNoLines	PictureField	선이 없는 분석 물질 하위 그룹의 Quantifier 및 Qualifier 크로마토그램 오버레이를 표시합니다.
Calibration	PictureField	분석 물질 교정 곡선을 표시합니다.
IS_AnalyteRatio	PictureField	내부 표준 물질 하위 그룹의 Quantifier 및 Qualifier 크로마토그램 오버레이입니다. Expected Ion Ratio를 나타내기 위해 중앙에 위치한 실선입니다. 중앙선 = Quantifier 피크 높이 x Expected Ion 비율. 점선을 사용하는 허용 가능 Ion Ratio 범위의 상한 및 하한입니다. Lower Bound = Peak Height of Quantifier x Expected Ion Ratio x ((100-오차)/100) Upper Bound = Peak Height of Quantifier x Expected Ion Ratio x ((100+오차)/100)
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	선이 없는 내부 표준 물질 하위 그룹의 Quantifier 및 Qualifier 크로마토그램 오버레이를 표시합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
IS_PeakReview	PictureField	내부 표준 물질의 크로마토그램을 표시합니다.
Overlay_All_XIC	PictureField	샘플 내 모든 분석 물질의 크로마토그램 오버레이를 표시합니다.
Overlay_All_XIC_with_IntStds	PictureField	샘플 내 모든 분석 물질 및 내부 표준 크로마토그램 오버레이를 표시합니다.
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	범례가 없는 샘플 내 모든 분석 물질 및 내부 표준 물질의 크로마토그램 오버레이를 표시합니다.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	범례가 없는 샘플 내 모든 분석 물질의 크로마토그램 오버레이를 표시합니다.
PeakReview	PictureField	분석 물질의 크로마토그램을 표시합니다.
TIC	PictureField	샘플의 TIC를 표시합니다.
Acquisition_Date	TextField	샘플이 획득되는 날짜입니다. "Acquisition Date & Time"을 표시합니다.
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	샘플에서 데이터를 획득하는 기간이며 분 단위로 보고됩니다.
Acquisition_Method	TextField	샘플 데이터를 획득하는 데 사용된 획득 방법입니다. "Acq. Method Name"를 표시합니다.
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	"Component Comment"를 표시합니다.
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	회귀 R값을 표시합니다.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	R값 및 가중치 등을 포함한 회귀 방정식을 표시합니다.
Analyte_Concentration	TextField	분석 물질의 실제 농도이며 사용자가 Results Table에서 정의합니다. "Actual Concentration"를 표시합니다.
Analyte_Expected_RT	TextField	특정 분석 물질의 예상 머무름 시간(분 단위)입니다. "Expected RT"를 표시합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
Analyte_Integration_Type	TextField	특정 분석 물질 피크에 사용되는 통합 유형입니다. 피크는 수동으로 통합하거나 사용 가능 매개 변수로 통합할 수 있습니다. "Integration Type"를 표시합니다.
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	분석 물질 피크의 면적 비율 대 내부 표준 용액의 피크 면적 비율입니다. Analyte Peak Area / IS Peak Area로 계산됩니다. "Area Ratio"을 표시합니다.
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	분석 물질 피크의 높이 초당 계수(cps) 대 내부 표준 용액의 피크 높이 비율입니다. Analyte Peak Height / IS Peak Height로 계산됩니다. "Height Ratio"를 표시합니다.
Analyte_Mass_Ranges	TextField	분석 물질의 사용자 정의 MRM 전환이며 사용되는 획득 방법에서 정의됩니다. "Mass Info"를 표시합니다.
Analyte_Peak_Area	TextField	크로마토그램 내 분석 물질의 피크 면적입니다. "Area"를 표시합니다.
Analyte_Peak_Height	TextField	분석 물질 피크의 높이(초당 계수(cps) 단위)입니다. "Height"를 표시합니다.
Analyte_Peak_Name	TextField	Results Table 생성 시 특정 샘플에 할당되는 사용자 정의 이름입니다. "Component Name"을 표시합니다.
Analyte_Peak_Width	TextField	분석 물질 피크의 폭(분 단위)입니다. "Total Width"을 표시합니다.
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	분석 물질의 피크 높이가 50%일 때 폭(분 단위)입니다. "Width at 50%"을 표시합니다.
AnalyteQuantPeak_info	TextField	알고리즘 및 매개 변수 등의 통합 정보입니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
Analyte_QTY	TextField	분석 물질 계산 농도와 중량 대 용량 비율 (예를 들어 샘플 그램당 분석 물질 ng)로 계산한 Analyte Quantity입니다. "Quality"를 표시합니다.
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	그룹 내 첫 번째 분석 물질입니다.
Analyte_Processing_Algo	TextField	통합 알고리즘을 표시합니다.
Analyte_Retention_Time	TextField	Results Table 생성 시 사용되는 크로마토그램 내 분석 물질의 실제 머무름 시간입니다. "Retention Time"을 표시합니다.
Analyte_R_Squared	TextField	회귀 R^2 값을 표시합니다.
Analyte_RT_Window	TextField	분석 물질 피크가 나타날 것으로 예상되는 시간 범위(초 단위)입니다. 이 범위 중심은 분석 물질의 예상 머무름 시간입니다. 통합 매개변수의 "RT Half Window" 값을 표시합니다.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	특정 분석 물질 피크의 신호 대 노이즈 비율입니다. "Signal/Noise"를 표시합니다.
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	% Intensity/minutes와 관련하여 확보되는 분석 물질 기준선 기울기입니다. 분석 물질 "Slope of Baseline"를 표시합니다.
Analyte_Start_Scan	TextField	Analyte Start Scan 입니다..
Analyte_Start_Time	TextField	분석 물질 피크가 시작되는 시간(분 단위)입니다. "Start Time"을 표시합니다.
Analyte_Stop_Scan	TextField	Analyte Stop Scan 입니다.
Analyte_Stop_Time	TextField	분석 물질 피크가 종료되는 시간(분 단위)입니다. "End Time"을 표시합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
Analyte_Unit	TextField	분석 물질 농도를 표시하는 데 사용되는 단위입니다. Results Tables의 표준 단위는 ng/mL입니다. "Conc. Units"를 표시합니다.
Analyte_Use_Record	TextField	지정된 기록을 교정 곡선 등 이후 분석에 사용할 것인지의 여부를 결정하는 선택 상자입니다. "Used"를 표시합니다.
Analyte_Count	TextField	분석 물질의 총 수를 표시합니다.
Analyte_Index	TextField	0부터 시작하는 샘플 분석 물질의 주문 번호를 표시합니다.
Calculated_Accuracy	TextField	분석 물질 피크의 정확도이며 계산된 분석 물질 농도와 실제 분석 물질 농도를 비교하여 확보합니다. "Accuracy"를 표시합니다.
Calculated_Concentration	TextField	Analyst® MD 소프트웨어에서 피크 면적을 사용하여 수행한 분석 물질 피크의 계산 농도입니다. "Calculated Concentration"를 표시합니다.
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Results Table 내 분석 물질 또는 내부 표준 물질 특정 기록의 머무름 시간입니다. "Relative RT"를 표시합니다.
IS_Concentration	TextField	내부 표준 물질의 실제 농도이며 사용자가 Results Table에서 정의합니다. "IS Actual Concentration"를 표시합니다.
IS_Expected_RT	TextField	내부 표준 물질 피크의 예상 머무름 시간 (분 단위)입니다. "IS Expected RT"를 표시합니다.
IS_Integration_Type	TextField	특정 내부 표준 물질 피크에 사용되는 통합 유형입니다. 피크는 수동으로 통합하거나 사용 가능 매개 변수로 통합할 수 있습니다. "IS Integration Type"를 표시합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
IS_Mass_Ranges	TextField	내부 표준 물질의 사용자 정의 MRM 전환이며 사용되는 획득 방법에서 정의됩니다. "IS Mass Info"를 표시합니다.
IS_Peak_Area	TextField	크로마토그램 내 내부 표준 물질의 피크 면적입니다. "IS Area"를 표시합니다.
IS_Peak_Height	TextField	내부 표준 물질 피크의 높이(초당 계수 단위(cps))입니다. "IS Height"를 표시합니다.
IS_Peak_Name	TextField	Results Table 생성 시 특정 내부 표준 물질에 할당되는 사용자 정의 이름입니다. "IS Name"를 표시합니다.
IS_Peak_Width	TextField	분석 물질 피크의 폭(분 단위)입니다. "IS Total Width"를 표시합니다.
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	내부 표준 물질 피크가 절반 높이(초당 계수(cps) 단위)일 때 피크 폭(분 단위)입니다. "IS Width at 50%"를 표시합니다.
IS_Retention_Time	TextField	내부 표준 물질의 실제 머무름 시간입니다. "IS Retention Time"를 표시합니다.
IS_RT_Window	TextField	내부 표준 물질 피크가 나타날 것으로 예상되는 시간 범위(초 단위)입니다. 이 범위 중심은 내부 표준 물질의 예상 머무름 시간입니다. IS 통합 매개 변수의 "RT Half Window" 값을 표시합니다.
ISQuantPeak_Info	TextField	알고리즘 및 매개 변수 등의 통합 정보를 표시합니다.
IS_Signal_To_Noise	TextField	내부 표준 물질 피크의 신호 대 노이즈 비율입니다. "IS Signal/Noise"를 표시합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
IS_Slope_of_Baseline	TextField	% Intensity/minutes(강도/분)와 관련하여 확보되는 내부 표준 물질 기준선 기울기입니다. 내부 표준에 대한 "Slope of Baseline"를 표시합니다.
IS_Start_Scan	TextField	Internal Standard Start Scan(내부 표준 물질 시작 스캔)입니다.
IS_Start_Time	TextField	내부 표준 물질 피크가 시작되는 시간(분 단위)입니다. "IS Start Time"을 표시합니다.
IS_Stop_Scan	TextField	Internal Standard Stop Time(내부 표준 물질 중지 시간)입니다.
IS_Stop_Time	TextField	내부 표준 물질 피크가 종료되는 시간(분 단위)입니다. "IS End Time"을 표시합니다.
IS_Units	TextField	내부 표준 물질 농도를 나타내는 데 사용되는 단위입니다. Results Tables의 표준 단위는 ng/mL입니다. "Conc. Units"를 표시합니다.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Max 값을 표시합니다. Quantitation Method의 Outlier Setting 대화 상자 내 LLOQ의 Accuracy Tolerance입니다.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Max 값을 표시합니다. Quantitation Method의 Outlier Setting 대화 상자 내 Standards의 Accuracy Tolerance입니다.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Max 값을 표시합니다. Quantitation Method의 Outlier Setting 대화 상자 내 QCs의 Accuracy Tolerance입니다.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	분석 물질 그룹의 이름을 표시합니다.
MQ_Created_With	TextField	보고서 생성 시 사용되는 제품을 표시합니다.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	"Expected Ion Ratio"을 표시합니다.
MQ_Group_Index	TextField	1부터 시작하는 샘플 내 그룹 주문 번호를 표시합니다. ForEach MQ_Group 루프와 함께 사용합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
MQ_Group_Name	TextField	그룹의 이름을 표시합니다. ForEach MQ_Group 루프와 함께 사용합니다.
MQ_Ion_Ratio	TextField	"Ion Ratio"을 표시합니다.
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Max 값을 표시합니다. Quantitation Method의 Outlier Setting 대화 상자 내 분석 물질의 Ion Ratio Tolerance(이온 비율 오차)입니다.
MQ_IS_Group_Name	TextField	내부 표준 그룹의 이름을 표시합니다.
MQ_IsRowHidden	TextField	Results Table 내 숨겨진 행을 표시합니다.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Quantitation Method의 Outlier Setting 대화 상자 내 Lower Limit of Calculated Concentration 값을 표시합니다.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	"Outlier Reasons"를 표시합니다.
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	"Asymmetry Factor"를 표시합니다.
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	"Baseline Delta/Height"를 표시합니다.
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	"End Time at 10%"를 표시합니다.
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	"End Time at 5%"를 표시합니다.
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	"Points Across Baseline"을 표시합니다.
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	"Points Across Half Height"를 표시합니다.
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	"Start Time at 10%"을 표시합니다.
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	"Start Time at 5%"을 표시합니다.
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	"Tailing Factor"을 표시합니다.
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	"Width at 10%"을 표시합니다.
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	"Width at 5%"을 표시합니다.
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	분석 물질 그룹 내 수량자에 대한 "Mass Range"를 표시합니다.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	분석 물질 그룹 내 수량자에 대한 "Area"를 표시합니다.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	분석 물질 그룹 내 수량자에 대한 "Calculated Concentration"을 표시합니다.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	보고서 생성 날짜이며 소프트웨어의 문화권 설정 값을 반영합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Quantitation Method의 Outlier Setting 대화 상자 내 Upper Limit of Calculated Concentration 값을 표시합니다.
Query_Name	TextField	보고서 템플릿에서 참조되는 쿼리 이름입니다(해당되는 경우).
Record_Modified	TextField	"Modified"를 표시합니다.
Reporter_Template_Name	TextField	보고서 생성 시 사용되는 보고서 템플릿 이름입니다.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Results Table이 생성된 날짜를 표시합니다.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Results Table를 생성하는데 쓰인 처리 알고리즘을 표시합니다(예:,MQ4,SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Results Table의 파일 이름을 표시합니다.
ResultTbl_ProjName	TextField	Results Table가 저장하고 있는 프로젝트 이름을 표시합니다
Sample_Comment	TextField	샘플과 관련된 의견입니다. "Sample Comment"를 표시합니다.
Sample_Dilution_Factor	TextField	샘플이 용해된 단위 용량의 총 수입니다. "Dilution Factor"를 표시합니다.
Sample_File_Name	TextField	특정 샘플의 원시 데이터가 저장되는 데이터 파일의 이름입니다. "Original Filename"를 표시합니다.
Sample_ID	TextField	Results Table에서 각 샘플 또는 분석 물질의 특정 ID를 제시하는 사용자 정의 값입니다. "Sample ID"을 표시합니다.
Sample_Index	TextField	"Index"를 표시합니다.
Sample_Count	TextField	총 분석물질의 수를 표시합니다.
Sample_InjectionVolume	TextField	원본 샘플 주입 시 사용한 오토샘플러에에서 주입된 용량이며 획득 방법에서 정의됩니다. "Injection Volume"을 표시합니다.
Sample_Instrument	TextField	샘플을 획득하는 데 사용된 기기 유형을 나타내며, 이는 wiff 파일에서 추출됩니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	샘플을 획득하는 데 사용된 기기의 일련번호를 나타내며, 이는 wiff 파일에서 추출됩니다.
Sample_Name	TextField	Results Table 생성 시 특정 샘플에 할당되는 사용자 정의 이름입니다. "Sample Name"를 표시합니다.
Sample_Operator	TextField	획득 시간에 로그인한 사용자입니다. "Operator Name"을 표시합니다.
Sample_Plate_Number	TextField	샘플 획득 시 사용되는 오토샘플러의 샘플 플레이트 위치입니다. "Plate Number"를 표시합니다.
Sample_Rack_Number	TextField	샘플 획득 시 사용되는 오토샘플러의 샘플 랙 위치입니다. "Rack Number"를 표시합니다.
Sample_Type	TextField	각 특정 주입의 샘플 유형을 나타내는 사용자 정의 값입니다. 예를 들어 Blank, Standard 등이 있습니다. "Sample Type"을 표시합니다.
Sample_Vial_Position	TextField	샘플을 보관한 바이알을 파악하기 위해 오토샘플러에 사용되는 획득 배치에서 정의된 바이알 위치입니다. "Vial Number"를 표시합니다.
Sample_File_Full_Name	TextField	파일 이름과 전체 경로를 표시합니다.
Sample_Index_In_Wiff	TextField	wiff 파일 내 샘플 주문 번호를 0부터 시작하여 표시합니다.
Sta_Accuracy	TextField	분석 물질 피크의 정확도이며 계산된 분석 물질 농도와 실제 분석 물질 농도를 비교하여 확보합니다. "Accuracy"를 표시합니다.
Sta_CV	TextField	계산 농도 값이 평균 농도 값의 차이가 얼마 인지 백분율로 나타내는 조건적 변동량 백분율입니다. 표준 편차/평균으로 계산합니다.

표 C-2 보고서 템플릿 태그 (계속)

유형	필드 유형	태그 설명
Sta_ExpectedConcent	TextField	Analyst® MD 소프트웨어에서 피크 면적을 사용하여 계산한 분석 물질 예상 농도입니다. "Actual Concentration"을 표시합니다.
Sta_Mean	TextField	Analyst® MD 소프트웨어에서 정량화 방법을 생성 및 저장합니다.
Sta_NumVal	TextField	통계를 구성하는 값의 수입입니다. 평균을 수행할 때 고려되는 샘플의 수입입니다.
Sta_QCAccuracy	TextField	사용자가 샘플 유형 열에서 정의한 정도 관리 샘플의 예상 농도를 실제 농도와 비교하여 파악하는 측정 정확도입니다. "Accuracy"를 표시합니다.
Sta_QCCV	TextField	계산 농도 값이 평균 농도 값의 차이가 얼마 인지 백분율로 나타내는 조건적 변동량 백분율입니다. 표준 편차/평균으로 계산합니다. Quality Control 샘플에 적용됩니다.
Sta_QCExpectedConcent	TextField	사용자가 정의한 Quality Control 샘플의 예상 농도입니다. Quality Control 샘플의 "Actual Concentration"을 표시합니다.
Sta_QCMean	TextField	Analyst® MD 소프트웨어에 의해 계산된 Quality Control 샘플의 농도의 평균값(평균)을 표시합니다.
Sta_QCNumVal	TextField	평균을 수행할 때 고려되는 Quality control 샘플 평균 값의 수를 표시합니다.
Sta_QCStdDev	TextField	각 샘플의 농도 값에 대한 표준 편차를 표시합니다. 표준편차는 평균값의 세트 확산 측정 값을 나타냅니다.
Sta_StdDev	TextField	표준 샘플의 표준 편차를 나타냅니다. 표준편차는 평균값의 세트 확산 측정 값을 나타냅니다.
CUSTOM	TextField	Results Table 사용자 지정 열의 값을 표시합니다.

상대 노이즈 및 신호 대 노이즈 계 산

D

정량적 질량 분석 데이터 처리를 수행할 때는 해당 피크가 중요한지 또는 중요하지 않은지를 결정하는 것이 중요하며, 여기에서 '중요'한지의 여부는 일반적으로 '이 신호가 배경 노이즈를 초과하는가?'의 여부와 같습니다.

이 피크 높이는 보통 피크가 없는 영역에서 측정되는 배경 노이즈와 비교됩니다. 이 노이즈는 일반적으로 이 범위 내 데이터 포인트 표준 편차의 1배 또는 3배로 추정됩니다. 이러한 접근 방법은 다음과 같은 이유로 바람직하지 않습니다.

- 노이즈 영역이 수동으로 선택되기 때문에 주관적입니다.
- 피크가 없는 배경 영역이 존재하지 않거나 노이즈를 정확히 추정하기에는 이러한 영역이 지나치게 협소할 수 있습니다.
- 피크 위치의 노이즈는 선택된 노이즈 영역의 노이즈와 크게 다를 수 있습니다.
- '1배 또는 3배'라는 비율도 주관적이며 다양한 기관들마다 다양한 권장 사항을 제시합니다.
- 분명한 노이즈도 데이터가 사전 처리되면 변경될 수 있습니다. 예를 들어 다듬어지거나 임계화될 수 있습니다.

Relative Noise(Rn)라는 개념을 이용하면 데이터 내 어느 포인트로든 예상 노이즈를 계산하여 측정된 신호와 비교하는 간단한 방법을 쉽게 개발할 수 있습니다. 이 방법은 신호 대 노이즈(S/N)를 계산하고 기기 및 분석 성능을 평가 및 비교하는 데 사용할 수 있는 견고하고 객관적인 메트릭입니다. 상대 노이즈 개념 어플리케이션은 매우 다양한데, 그 중 한 가지가 S/N을 계산하는 것입니다.

기본 알고리즘은 다음과 같습니다.

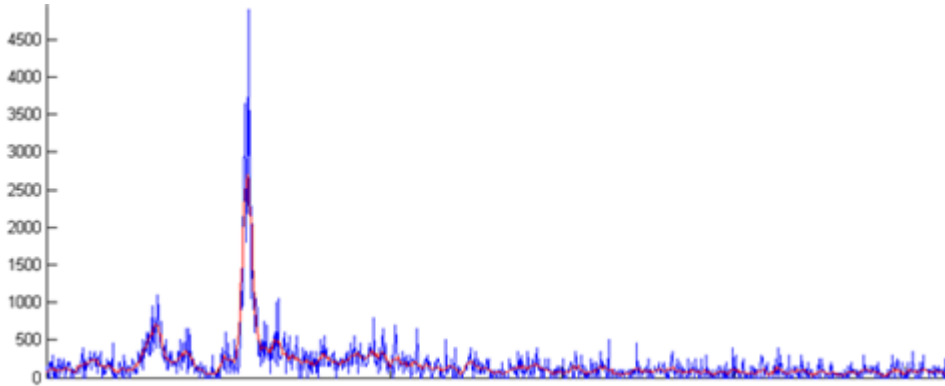
1. 사용자가 데이터 기록 내 어느 포인트로든 예상 노이즈를 계산할 수 있는 노이즈 모델을 고안합니다. 단, 이 포인트를 이용할 경우 기본 신호의 수준을 고려해야 합니다.

노이즈 모델은 이론적 고려 사항에 기반하여 결정하거나 특정 시스템의 실제 측정 값에 기반하여 모델링할 수 있습니다. 펄스 계수 검파기는 신호 표준 편차와 그에 따른 예상 노이즈가 신호 제공근에 비례하기 때문에 신호마다 다릅니다. 다른 시스템에는 강도 의존적 구성 요소와 결합할 가능성이 있는 연속적 '화이트 노이즈' 구성 요소가 존재합니다.

2. 측정된 신호에 기반하여 기본 신호를 추정합니다.

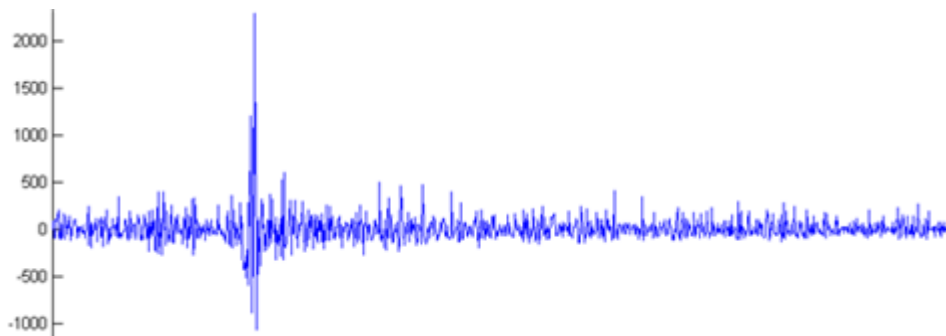
이는 여러 가지 방법으로 가능하지만 [그림 D-1](#)에 제시된 바와 같이 다듬어진 데이터 버전을 생성하는 것이 가장 쉽습니다.

그림 D-1 원시 및 다듬어진 데이터 오버레이



3. 실제 노이즈는 모든 포인트를 사용하여 데이터 전체에서 측정합니다(피크 및 배경).
이는 다듬어진 신호가 원본 신호에서 감산된 경우에 데이터 내 각 포인트에서 측정된 신호에 기반하여 기본 신호 추정치를 감산하는 방법으로 수행할 수 있습니다. 이를 델타 노이즈라고 합니다. 델타 노이즈는 신호 의존적이기 때문에 신호가 큰 경우에 더 크게 나타나므로 대형 피크가 존재하는 경우 외에 연속적인 편입입니다. [그림 D-2](#) 내용을 참조하십시오.

그림 D-2 각 데이터 포인트의 델타 노이즈 값 플롯



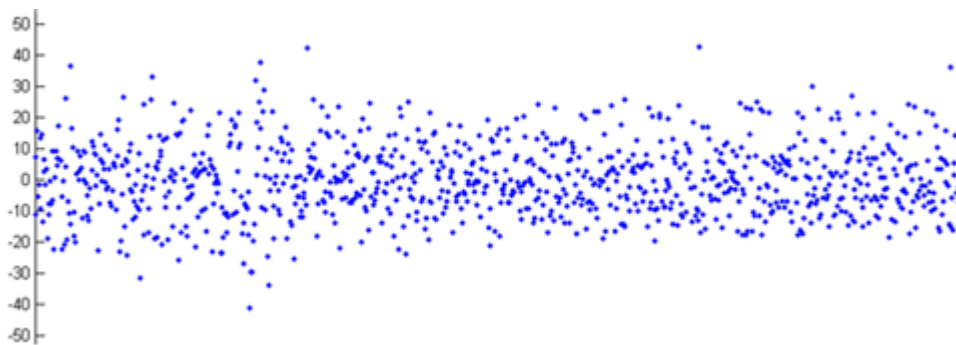
4. 각 데이터 포인트에서 측정 노이즈 대 예상 노이즈 비율을 계산합니다.

즉, 모든 데이터 포인트에서 3단계의 측정 노이즈를 노이즈 모델의 예측 값으로 나누는 것입니다(여기에서는 강도의 제곱근). 노이즈 모델이 우수하면 [그림 D-3](#)에 보이는 바와 같이 일부 한계에 의해 거의 제한된 상태로 유지되는 값을 생성합니다. [그림 D-3](#) 또한 플롯을 보여 줍니다

$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

참고: 이는 델타 노이즈가 크게 변화되는 가능성을 낮추어 제한된 값 세트를 야기합니다.

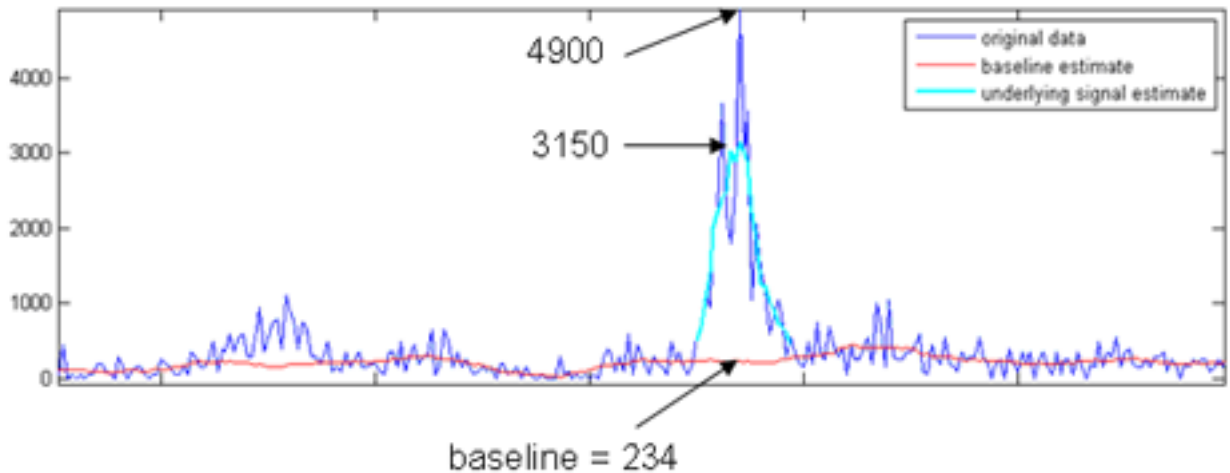
그림 D-3 노이즈 모델



- 비율 값의 표준 편차를 계산합니다. 이것은 실제 델타 노이즈와 모델이 예측한 노이즈 간에 성립될 가능성이 가장 높은 추정치 R_n 입니다. [그림 D-3](#)에서는 그 결과로 9.5라는 값이 제시되었습니다.

[그림 D-4](#) 상대 노이즈가 S/N을 계산하는 데 이용되는 방법의 예시를 보여 줍니다.

그림 D-4 원시 데이터, 기본 신호 추정치, 기준선 추정치 오버레이



앞서 설명된 바와 같이

$$noise = R_n \times \sqrt{(baseline)}$$

이 특정 예시에서는

$$noise = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

피크 광선이 신호로 사용되면 34(4900/145)의 S/N을 제시하며 다듬어진 신호의 높이가 사용되면 22(3150/145)의 S/N을 제시합니다.

MQ4 통합 알고리즘은 S/N을 보고할 때 여기에 설명된 절차와 피크 광선을 신호로 사용합니다. SignalFinder™ 통합 알고리즘이 모델을 피크에 맞추기 때문에 맞춤 프로파일 높이를 사용합니다. 그 결과 보고된 S/N이 작았습니다. 그러나 이 값은 잠재적인 노이즈 스파이크의 영향을 적게 받았기 때문에 더욱 정확합니다. SignalFinder 통합 알고리즘은 기준선 추정에 대해 더욱 정교한 접근 방식을 사용하기 때문에 이러한 두 가지 이유에 따라 두 개의 알고리즘에서 보고하는 S/N 값은 대개 유사하지만 동일하지 않습니다.

요약하자면 S/N 계산에 대한 상대 노이즈 접근 방법은 노이즈를 배경 영역의 표준 편차로 추정하는 일반적인 접근 방법에 비해 다음과 같은 이점을 제공합니다.

- 배경 영역을 수동으로 선택할 필요가 없으므로 덜 주관적입니다.
- 크로마토그램에서 피크가 없는 영역이 존재하지 않아도 정확한 S/N을 예측할 수 있습니다.

- 기준선과 그에 따른 노이즈가 관심 피크에 가깝게 추정됩니다. 일반 접근 방법에 선택된 배경 영역은 피크 근처의 배경보다 더 조용할 수 있기 때문에 이러한 이점은 보고되는 S/N 값에 큰 차이를 가져옵니다. 앞서 설명한 바와 같이 **Relative Noise** 접근 방법을 이용하여 계산한 S/N 은 일반 접근 방법보다 작은 값을 제시합니다. 그러나 이러한 값은 더욱 정확하고 유용한 값 입니다. [그림 D-4](#) 내용을 참조하십시오.

Results Table에서 **Signal / Noise**(신호 / 노이즈) 열을 표시하려면 [결과 표에 표시된 열 수정하기 페이지의 88](#) 내용을 참조하십시오.

SignalFinder 통합 알고리즘 사용 시 신호 대 노이즈 참고 사항

SignalFinder™ 통합 알고리즘은 신호 대 노이즈를 더욱 정확하게 계산하고 (또한 더욱 정확하게 CV를 예측)하기 때문에 1시그마 신호 대 노이즈 접근 방법을 사용하는 경우 실험실 경험 데이터에 기반하여 모든 표준 작업 절차(SOP)상에서 최소 허용 신호 대 노이즈 값이 감소하는 것을 고려해야 합니다.

소프트웨어 아이콘

E

한 번에 창 하나만 활성화됩니다. 활성 창에는 주황색 테두리가 표시되며 사용자는 창 내부의 아무 곳이나 클릭하여 창을 활성화할 수 있습니다. 활성 창에 대해 여러 메뉴 명령이 작동합니다.

이 섹션에 설명된 도구 모음 아이콘은 모든 창 유형의 창 관련 모음에 표시됩니다. 각 창 유형 관련 추가 아이콘도 사용할 수 있습니다.

표 E-1 도구 모음 아이콘










아이콘	이름	설명
	New Results Table	New Results Table Wizard 를 엽니다.
	Open	Results Table 를 엽니다.
	Save	열린 파일을 저장합니다.
	Select Analyst Project	프로젝트 폴더를 선택합니다.
	Screen Lock	화면을 잠급니다. 이 기능은 Analyst® MD 소프트웨어가 Mixed Mode이며 화면 잠금 기능이 활성화된 경우에만 사용할 수 있습니다.
	Show Internal Standard with Analyte	Results Table 에서 현재 선택된 분석 물질과 해당 내부 표준에 대한 행을 표시합니다. 이 옵션을 선택한 경우 분석 물질 이름을 클릭하면 해당 분석 물질과 함께 내부 표준을 볼 수 있습니다. 이 동작은 Ctrl 을 누른 상태에서(두 항목이 모두 선택됨) 분석 물질을 클릭하고 나서 내부 표준을 클릭할 때와 같습니다.
	Find Component or Group	지정한 텍스트와 일치하는 목록의 항목을 선택합니다.
	Arranging Panes	내부 창의 상대적 위치를 변경합니다. 내부 창 하나의 아이콘을 클릭하여 두 번째 내부 창의 상단, 하단, 왼쪽 또는 오른쪽 부분으로 끌어옵니다. 커서를 놓는 위치에 따라 첫 번째 내부 창의 위치가 두 번째 내부 창을 기준으로 변경됩니다. 커서를 끌 때 두 번째 내부 창의 한 면이 빨간색으로 강조 표시되어 첫 번째 내부 창이 표시될 위치를 나타냅니다.
	Delete Pane	창을 삭제합니다. Results Table 를 삭제하는 경우 다른 관련 내부 창(Peak Review 및 Calibration)도 삭제되고 전체 창이 닫힙니다.

표 E-1 도구 모음 아이콘 (계속)




아이콘	이름	설명
	Toggles tab mode	전체 창을 채우도록 내부 창을 최대화합니다(또는 그 반대). 이 기능은 창 하나에 여러 내부 창이 있는 경우 사용자가 내부 창 하나에 일시적으로 집중할 수 있도록 할 때 유용합니다. 확대/축소 모드에서는 별도의 탭이 각 내부 창마다 창 상단에 나타납니다. 해당 탭을 클릭하여 내부 창 간에 전환합니다. 확대/축소 모드일 때 Zoom Pane 를 다시 한 번 클릭하면 모든 내부 창을 표시하는 원래 보기로 복원됩니다. 아이콘을 클릭하면 두 상태 간에 전환됩니다.
	Hide Pane	창의 다른 내부 창이 사용 가능한 공간을 채우도록 내부 창을 숨깁니다.
	Show Hidden Panes	이전에 숨겨진 모든 내부 창을 표시합니다.

표 E-2 피크 검토 도구 모음 아이콘








아이콘	이름	설명
	Display Previous Page	이전의 크로마토그램 세트를 표시합니다. 이 기능은 위 또는 왼쪽 화살표 키를 누르거나 스크롤 바의 위 화살표를 클릭하는 것과 동일하게 작동합니다.
	Display Next Page	다음 크로마토그램 세트를 표시합니다. 이 기능은 아래 또는 오른쪽 화살표 키를 누르거나 스크롤 바의 아래 화살표를 클릭하는 것과 동일하게 작동합니다.
	Display Previous Sample	Peak Review 창에서 뒤로 스크롤합니다. 이 기능은 현재 첫 번째로 표시되는 크로마토그램과 다른 첫 번째 샘플이 표시될 때까지 스크롤 바의 위 화살표를 클릭하는 것과 동일하게 작동합니다.
	Display Next Sample	다음 샘플로 스크롤합니다.
	Starts Slide Show Peak Review mode	슬라이드 쇼를 시작합니다. 처음 사용할 때는 Slide Show Options 대화 상자가 열립니다. 피크 간 지연 시간은 초 단위로 설정하십시오. 이 대화 상자가 다시 열리는 것을 방지하려면 Only show this dialog again if the shift key is down 확인란을 선택하십시오. 슬라이드 쇼를 중지하려면 Peak Review 창에서 아무 곳을 클릭하십시오.
	Peak Magnifier	선택한 피크를 확대합니다.
	Peak Demagnifier	확대한 피크를 기존 크기로 되돌립니다.

표 E-2 피크 검토 도구 모음 아이콘 (계속)




아이콘	이름	설명
	Set Peak to 'Not Found'	<p>활성 크로마토그램에 존재하는 피크가 없도록 표시할 때 클릭하십시오. 때로는 중요한 피크가 실제로 존재하지 않을 때 소형 노이즈 피크가 통합되어 보고될 수도 있습니다. 이러한 작업을 재정의하려면 이 아이콘을 클릭하십시오. Results Table에서 피크 면적이 N/A로 표시됩니다.</p> <p>사용자가 피크를 Not Found(찾을 수 없음)로 표시하면 왼쪽 창의 피크 찾기 매개 변수가 사용되지 않으므로 크로마토그램에도 사용할 수 없습니다. 자동 모드로 되돌아가려면 이 아이콘을 다시 클릭하십시오.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>수동 통합 모드를 시작하려면 클릭하십시오. 소프트웨어가 수동 통합 모드인 경우 통합할 정확한 영역을 지정하려면 크로마토그램 플롯에서 드래그하십시오. 통합은 커서가 처음 클릭된 포인트(시간, 강도)부터 시작되며 커서 클릭이 해제되는 포인트까지 진행됩니다. 수동 통합 모드에서 나가려면 이 아이콘을 다시 클릭하십시오.</p> <p>사용자가 피크를 수동으로 통합하면 왼쪽 창의 피크 찾기 매개 변수가 사용되지 않으므로 크로마토그램에도 사용할 수 없습니다. 자동 모드로 되돌아가려면 이 아이콘을 다시 클릭하십시오.</p>
	Recalculate Peak Model	<p>Recalculates the 피크 모델 using the Active 크로마토그램 and applies it to that 크로마토그램 (SignalFinder™ 이용한 프로세스 데이터 해당).</p>

표 E-3 교정 도구 모음 아이콘

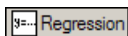
아이콘	이름	설명
	Edit Regression and Weighting	<p>교정 매개 변수를 변경할 때 사용합니다. 여기에는 회귀에 사용되는 실제 매개 변수(Area 또는 Height)와 회귀 유형 및 가중치 모두 포함됩니다. 회귀 수식 페이지의 123 내용을 참조하십시오.</p>

표 E-4 통계 도구 모음 아이콘



아이콘	이름	설명
	Remove Trailing Index from Sample Name	Statistics Table 은 샘플이 실제 농도 또는 샘플 이름을 기준으로 그룹화되도록 조정할 수 있습니다. 샘플 이름 별로 그룹화할 때는 Remove Trailing Index from Sample Name 옵션이 그룹화를 위해 샘플 이름을 정확히 일치시킬 것인지 또는 대시(-) 뒤의 트레일링 숫자 인덱스를 제거할 것인지를 여부를 제어합니다. 예를 들어 Sample 1 - 001 및 Sample 1 - 002의 이름을 갖는 두 샘플은 이 옵션을 선택하는 경우에 함께 그룹화되지만 그렇지 않은 경우에는 함께 그룹화되지 않습니다.
	Sample Grouping	이 목록의 항목은 해당 분석 물질의 샘플을 통계 계산에 그룹화하는 방식을 지정합니다. 다음 선택 사항을 사용할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards: Standard 샘플을 실제 농도 별로 그룹화합니다. • Group by Concentration for QCs: Quality Control 샘플을 실제 농도 별로 그룹화합니다. • Group by Sample Name for Standards: 반복되는 Standard 샘플들을 Sample Name 필드 별로 그룹화합니다. 앞서 설명한 바와 같이 Remove Trailing Index from Sample Name 옵션을 사용하지 않으면 샘플 이름이 정확히 일치해야 합니다. 그렇지 않은 경우에는 트레일링 번호 별로 이름이 다를 수 있습니다 (대시 뒤). • Group by Sample Name for QCs: Quality Control 샘플만 제외하고 이전 옵션과 동일하게 사용됩니다. • Group by Sample Name for All Samples: 이전 옵션과 유사하지만 모든 샘플이 사용됩니다.

표 E-4 통계 도구 모음 아이콘 (계속)


아이콘	이름	설명
	Metric	<p>이 목록의 항목들은 통계 계산에 사용할 실제 메트릭을 지정합니다. 다음 선택 사항을 사용할 수 있습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration: Results Table의 Calculated Concentration 필드가 사용됩니다. • Area: Results Table의 Area 필드가 사용됩니다. • Height: Results Table의 Height 필드가 사용됩니다. • Calibration Y-Value: 분석 물질에 대해 지정된 회귀 매개 변수가 사용됩니다. 이는 해당 내부 표준 물질이 없는 분석 물질의 Area 또는 Height이거나 내부 표준 물질을 사용하는 분석 물질의 Area Ratio 또는 Height Ratio입니다.

표 E-5 결과 표 도구 모음 아이콘









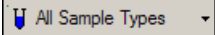





아이콘	도구 설명	설명
	Displays the peak review	Peak Review 창을 표시하여 필요에 따라 피크 통합 품질을 확인하고 수정할 수 있습니다.
	Displays the side by side sample review	두 샘플 목록을 표시하여 사용자가 전체 샘플에 대한 피크 반응을 비교하기 위해 최대 여섯 개 샘플을 선택할 수 있습니다.
	Displays the calibration curve	교정 곡선을 표시합니다(확정 농도의 Standard 샘플을 사용하는 경우에만 해당). 이 창은 사용자가 교정을 검토하고 회귀 유형 및 가중치를 조정할 수 있도록 도와줍니다.
	Creates a metric plot	현재 선택된 열의 메트릭 플롯을 표시합니다. 이 플롯은 이상값을 찾을 때 매우 유용할 수 있습니다. 버튼 바로 오른쪽의 메뉴는 저장된 모든 플롯 설정을 제시합니다.
	Displays the statistics pane	Statistics(통계) 창을 표시합니다. 이 표는 평균 계산 농도, 표준 편차, 각 농도 수준의 CV를 표시합니다.
	Sort selected column from smallest to largest	선택한 열의 값이 오름차순으로 제시되도록 Results Table 를 정렬합니다. 이 아이콘은 열 머리글을 클릭한 후에만 사용할 수 있습니다.

표 E-5 결과 표 도구 모음 아이콘 (계속)

아이콘	도구 설명	설명
	Sort selected column from largest to smallest	선택한 열의 값이 내림차순으로 제시되도록 Results Table 를 정렬합니다. 이 아이콘은 열 머리글을 클릭한 후에만 사용할 수 있습니다.
	Removes any previous sorting	표가 정렬된 경우 Results Table 를 기본 순서로 되돌립니다.
	Shows only the selected sample type(s)	특정 유형의 샘플만 표시되도록 Results Table 를 필터링합니다. 이는 확정 농도의 Standard 샘플이 존재하며 모든 샘플이 Unknowns 에 해당되지 않는 경우에만 유용합니다.
	Hide selected row(s)	Results Table 에서 선택한 행을 숨깁니다. 숨길 행을 선택한 뒤 아이콘을 클릭하십시오. Peak Review 창은 Results Table 과 동기화되기 때문에 검토할 필요가 없는 이러한 피크를 숨기면 검토 프로세스가 더 빨라집니다. 예를 들어 사용자는 Quality (품질) 열에서 표를 정렬하고 특정 값(예를 들어 0.8)을 초과하는 품질의 모든 행을 숨길 수 있습니다. 그 후에는 Region Height (영역 높이) 열과 숨겨진 행 값을 갖는 모든 행에서 표를 정렬할 수 있습니다(피크가 확실히 존재하지 않는 행 숨기기 용도). 이 경우 품질은 낮지만 실제로 존재하는 피크만 표시됩니다. 그리고 사용자는 Peak Review 창에서 모든 가능 피크를 검토할 때보다 짧은 시간을 소요하여 이 표시 행들을 검토할 수 있습니다.
	Show previously hidden row(s)	모든 행을 표시합니다. 표시된 행은 여전히 Sample Type Filter 및 Components & Groups List 선택 사항에 의해 제한될 수 있습니다.
	Show only outliers	이상값을 포함한 행을 표시합니다.
	Go to next outlier	Results Table 에서 다음 이상값으로 이동합니다.
	Lock and Save	Results Table 이 저장되면 잠급니다. 파일이 잠겨 있지 않은 경우에는 Results Table 변경 사항이 저장되지 않습니다.
	Review and Save	Results Table 을 검토한 후에 저장하려면 클릭하십시오. 이 아이콘은 Results Table 이 읽기 전용인 경우에 사용할 수 없습니다.

MultiQuant™ MD 소프트웨어 액세스

F

참고: MultiQuant™ MD 소프트웨어가 제거되는 경우, MultiQuant™ MD 소프트웨어 보안 항목들은 Analyst® MD 소프트웨어에 보관됩니다. 보안 권한은 **Security Configuration** 대화 상자의 **Roles** 탭에서 찾을 수 있습니다.

사전 설정 액세스	설명
Create session file	사용자가 Results Table 을 생성할 수 있습니다.
Create quantitation method	사용자가 정량화 방법을 생성할 수 있습니다.
Modify quantitation method files	사용자가 Analyst Data 폴더의 Quantitation Methods 폴더에 위치한 정량화 방법을 수정할 수 있습니다.
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	사용자가 잠금 해제된 Results Tables 의 보고서를 내보내거나 생성할 수 있습니다.
Replace existing Results Table when saved	사용자가 기존 Results Tables 을 업데이트할 수 있으나 기존 Results Table 이름으로 새 Results Table 을 생성할 수는 없습니다. 예를 들어 이름이 RT1인 Results Table 이 생성되면 사용자가 이를 업데이트할 수 있으나 RT1의 이름으로 새 Results Table 을 생성할 수 없습니다. 사용자는 기존 Results Table 를 사용하여 제목 없는 Results Table 의 이름을 지정할 수 없습니다.
Change default quantitation method integration algorithm	사용자가 Integration Default 대화 상자에서 알고리즘을 변경할 수 있습니다. Edit > Project Integration Defaults 를 클릭합니다.
Change default quantitation method integration parameters	사용자가 Integration Default 대화 상자에서 알고리즘 기본 매개 변수를 변경할 수 있습니다. Edit > Project Integration Defaults .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	사용자가 Edit 메뉴에서 Project Modified Peak Warning 을 활성화하는 플래그를 활성화 또는 비활성화할 수 있습니다.
Allow Project Secure Export Settings	이 기능이 활성화되면 텍스트 파일의 데이터가 내보내기 중 암호화됩니다. 비밀번호가 암호화를 활성화하도록 설정하십시오.
Add samples to Results Table	사용자가 샘플을 추가할 수 있습니다. Process > Add Samples 를 클릭합니다.
Remove samples from Results Table	사용자가 선택된 샘플을 제거할 수 있습니다. Process > Remove Selected Samples 를 클릭합니다.

사전 설정 액세스	설명
Export, import, or remove External Calibration	<p>사용자가 다음 옵션 중 하나를 사용하여 외부 교정을 내보내거나 가져오거나 제거할 수 있습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Process > Export Calibration을 클릭합니다. • Process > Import External Calibration을 클릭합니다. • Process > Remove External Calibration을 클릭합니다.
Change Audit Map settings	사용자가 프로젝트 감사 맵을 수정하고 감사 맵 정의를 수정할 수 있습니다. Audit Trail > Audit Map Manager 을 클릭합니다.
Modify Sample Name	사용자가 Results Table 에서 샘플 이름을 수정할 수 있습니다.
Modify Sample Type	사용자가 Results Table 에서 샘플 유형(Standard, QC, Unknown)을 수정할 수 있습니다.
Modify Sample ID	사용자가 Results Table 에서 샘플 ID를 수정할 수 있습니다.
Modify Actual Concentration	사용자가 Results Table 에서 Standard 및 QC 의 실제 농도를 수정할 수 있습니다.
Modify Dilution Factor	사용자가 Results Table 에서 희석 인자를 수정할 수 있습니다.
Modify Comment Fields	<p>사용자가 의견 필드를 수정할 수 있습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Component Comment • IS Comment • IS Peak Comment • Peak Comment • Sample Comments
Allow manual integration	사용자가 Peak Review 창에서 수동 통합 모드를 활성화할 수 있습니다. 이 권한이 활성화되면 Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram (단일 크로마토그램 결과 표 통합 매개변수 수정) 권한도 활성화되어야 합니다. Modify Results Table integration parameters (결과 표 통합 매개변수 수정)가 활성화되면 Allow manual integration (수동 통합 허용) 명령이 비활성화될 수 있습니다.
Allow set to Peak Not Found	사용자가 Set peak to not found (피크를 찾을 수 없음으로 설정)를 사용할 수 있습니다. 이 작업을 수행하려면 Peak Review 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭하십시오.
Include or exclude a peak from the Results Table	사용자가 Results Tables, Statistics Tables , 교정 곡선에서 피크를 포함하거나 제외할 수 있습니다.

사전 설정 액세스	설명
Modify regression settings for fit and weight	사용자가 결과 표 방법 수정 기능과 New Quantitation Method wizard (새 정량화 방법 마법사)를 사용할 때 교정 곡선 창의 회귀 설정을 수정할 수 있습니다.
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	사용자가 단일 크로마토그램을 수정할 수 있습니다.
Modify quantitation method for the Results Table component	사용자가 단일 크로마토그램의 수정 사항을 구성 요소에 적용할 수 있습니다. 사용자는 단일 수정 사항들을 업데이트하고 구성 요소에 적용하고자 할 때 이 권한과 Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram 권한을 활성화해야 합니다.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	사용자가 Results Table 에서 메트릭 플롯을 생성 및 사용하거나 (Metric Plot 버튼이 활성화된 경우) 메트릭 플롯을 내보낼 수 있습니다. File > Export 를 클릭합니다.
Set Peak Review Title Format	사용자가 Peak Review Title Format in Peak Review (피크 검토의 피크 검토 제목 형식)를 수정할 수 있습니다. 이 작업을 수행하려면 Peak Review 창에서 마우스 오른쪽으로 클릭하십시오.
Add, Rename, or Modify custom column	사용자가 사용자 지정 열을 추가하거나 이름을 바꾸거나 수정할 수 있습니다. 사용자는 이 권한이 없어도 자동으로 사용자 지정 열을 생성하는 쿼리를 실행할 수 있습니다. 이 권한을 비활성화하면 Remove custom column 권한도 비활성화해야 합니다. Add, Rename, or Modify custom column (사용자 지정 열 추가, 이름 바꾸기 또는 수정)이 활성화되면 Remove custom column (사용자 지정 열 제거) 권한이 비활성화될 수 있습니다.
Remove custom column	사용자가 Results Table 에서 사용자 지정 열을 삭제할 수 있습니다.
Modify Results Table column settings	사용자가 Results Table 내에서 Results Table 열 설정을 수정할 수 있습니다.
Save Column Settings as Project Default	사용자가 프로젝트에 열 설정을 적용할 수 있습니다.
Lock and save Results Table	사용자가 Results Table 을 잠그고 저장할 수 있습니다.
Unlock and save Results Table	사용자가 Results Table 을 잠금 해제하고 저장할 수 있습니다.
Review and save Results Table	사용자가 Results Table 을 검토하고 저장할 수 있습니다.

사전 설정 액세스	설명
Edit Report Template	사용자가 Report templates를 편집할 수 있습니다.
Transfer to LIMS	사용자가 저장되어 잠긴 Results Table 를 LIMS에 전송할 수 있습니다. 이 이벤트는 감사 트레일에 기록됩니다.

보안 설정

표 F-1 사용자 역할에 적합한 권장 보안 설정을 포함합니다.

표 F-1 사용자 역할 기반 보안 설정

보안 설정	관리자	감독자	Analyst	검토자
Create session file	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Create quantitation methods	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Modify quantitation method files	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Replace existing Results Table when saved	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스
Change default quantitation method integration algorithm	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Change default quantitation method integration parameters	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Allow Enable Project Modified Peak Warning	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Allow Project Secure Export Settings	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Add samples to Results Table	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Remove samples from Results Table	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Modify Sample Name	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음

표 F-1 사용자 역할 기반 보안 설정 (계속)

보안 설정	관리자	감독자	Analyst	검토자
Modify Sample Type	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Modify Sample ID	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Modify Actual Concentration	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Modify Dilution Factor	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Modify Comment Fields	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Allow manual integration	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Allow set to Peak Not Found	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Include or exclude a peak from the Results Table	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Modify regression settings for fit and weight	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Modify quantitation method for the Results Table component	액세스	액세스	액세스	액세스 권한 없음
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	액세스	액세스	액세스	액세스
Set Peak Review Title Format	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Add, Rename, or Modify custom column	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Remove custom column	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Modify Results Table column settings	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Save Column Settings as Project Default	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음

표 F-1 사용자 역할 기반 보안 설정 (계속)

보안 설정	관리자	감독자	Analyst	검토자
Lock and save Results Table	액세스	액세스	액세스	액세스
Unlock and save Results Table	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Review and save Results Table	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스
Modify Report Template	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스
Export, import, or remove External Calibration	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음
Change Audit Map Setting	액세스	액세스	액세스 권한 없음	액세스 권한 없음

개정 이력

개정	변경 사유	날짜
A	문서 최초 릴리스.	2013년 9월
B	파일 메뉴 섹션 업데이트. 감사 트레일 메뉴 섹션 업데이트. 결과 표 컬럼 표 업데이트. 보고서 섹션 업데이트.	2015년 1월
C	표지에 있는 AB SCIEX 로고를 SCIEX Diagnostics로 변경. 저작권 페이지를 업데이트하고 필요한 경우 AB Sciex를 SCIEX로 변경. 소프트웨어 장의 소개에 Windows 10 추가. 문의처 섹션 업데이트됨. 감사 맵 관리자 제목을 감사 맵 정보로 변경. 내부 표준 하위 메뉴 섹션에서 Set Last Component of Group as IS 메뉴 옵션에 대한 설명 업데이트됨. 업데이트 머무름 시간 대화 상자 섹션에서 "총 면적 백분율 매개 변수"를 "머무름 시간"으로 교체. SignalFinder 통합 알고리즘 매개 변수 섹션에서 예상 RT에 대한 설명 업데이트됨. 보고서 생성 섹션에 Windows 10 추가됨. 보고서 템플릿 태그 섹션에 해당 내용 업데이트됨. 그림 7-3의 스크린샷 변경. 내용에 새로운 템플릿이 적용되었으며, 이로 인해 내용의 편집이 일부 변경되었습니다. Windows XP에 대한 모든 참조자료 삭제됨.	2017년 6월