

Application News

No. 01-00281-K

Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

식품 중 잔류 농약 분석의 효율적인 피크 적분을 위한 Peakintelligence™ LCMS 소프트웨어

Efficient Peak Integration for Analyzing Residual Pesticides in Foods Using Peakintelligence™ LC/MS Peak Processing Software

■ 서론

식품 수출입이 증가함에 따라 각종 식품에 대한 규제 농약 종류와 최대잔류허용기준(MRL)도 증가하고 있다. 이에 식품안전시험 및 연구기관에서는 보다 신속하고 정확한 정보를 제공할 필요가 있다. 여러 성분 또는 여러 분석 물질에 대한 데이터 분석에는 많은 수의 피크를 육안으로 확인해야 하는데, 이는 시간이 많이 걸리고 노동 집약적인 프로세스이다. 또한 인적 오류의 위험이나 분석 결과에 영향을 미치는 개인의 습관 때문에 이러한 위험을 최소화하는 피크 적분 방법이 필요하다.

Peakintelligence는 액체 크로마토그래프 질량 분석기(LC/MS)를 위해 인공 지능(AI)을 이용하여 개발한 알고리즘이 포함되어 있는 피크 처리 소프트웨어이다. 이 뉴스레터에서는 잔류 농약 분석과 관련한 노동력을 줄이고, 효율성을 높이기 위해 peakintelligence 소프트웨어를 사용한 예를 소개한다.



참고: 이 제품의 R&D는 Shimadzu Corporation과 Fujitsu Ltd.의 협업으로 수행되었다.

■ 식품 중 잔류 농약 동시 분석에서 피크 적분

식품 중 잔류 농약 동시 분석을 위해 모니터링되는 농약의 수는 식품의 종류에 따라 크게 다를 수 있지만, 일반적으로 수백 가지 성분을 모니터링하여 지정된 기준 값을 초과하지 않는지 확인해야 한다. 검출되지 않는 농약이 많기 때문에 분석자는 크로마토그램을 육안으로 확인하여 농약이 잘못 식별되거나 잘못 검출되지 않았는지 확인해야 한다. 각 시료의 각 성분에게 이러한 과정이 여러 번 반복된다는 점을 감안할 때, 총 반복 횟수는 엄청나며 분석자에게 부담이 된다.



■ 이전 알고리즘의 문제

이전의 피크 검출 알고리즘은 각 크로마토그램에 대해 많은 수의 검출 파라미터 설정을 최적화해야 했다. 설정 최적화 후에도 피크가 여전히 제대로 검출되지 않으면 피크 검출을 수동으로 수정해야 했으며 이는 분석자에게 부담이 되고, 업무의 속련도와 표준화에도 큰 문제가 되었다.

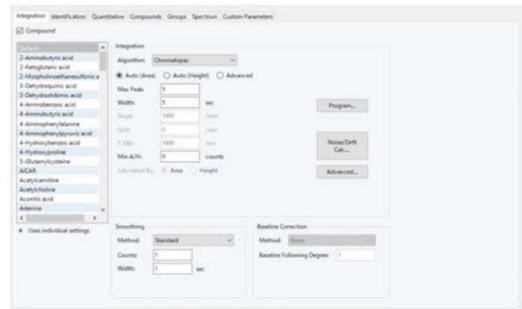


그림1. 이전 피크 적분 파라미터 설정 창

■ Peakintelligence의 피크 적분 알고리즘

Peakintelligence 소프트웨어는 인공지능(AI)의 일종인 '딥러닝'을 이용해 개발한 새로운 피크 적분 기술을 기반으로 한다. AI는 전반적인 개념과 기술을 의미하며, "머신 러닝"과 "딥러닝"은 AI에 사용되는 두 가지 유형의 기술이다.(그림 2). 머신 러닝의 경우, 분석하고 학습할 특성을 사람이 파악해야 하는 반면, 딥러닝의 경우, 기계(컴퓨터 소프트웨어)가 분석해야 할 특성을 파악한다. 이는 인간에 의한 변동성이 없는 많은 양의 데이터를 학습할 수 있음을 의미한다.

Peakintelligence의 경우, 전문가가 피크 적분을 확인한 약 13,000 개의 크로마토그램을 사용하여 크로마토그램 데이터와 피크 시작점/종료점 라벨의 데이터 세트를 준비했다. 그런 다음 그림 3과 같이 학습, 하이퍼 파라미터 튜닝 및 성능 평가 프로세스에 데이터 세트를 사용하여 사전 학습 모델을 생성하였다. 사전 학습된 모델은 데이터 분석 컴퓨터에 설치되어 자동 LC/MS 데이터 분석에 사용된다.

참고: Peakintelligence에는 고객 피크 적분으로 학습하는 기능이 포함되어 있지 않다.

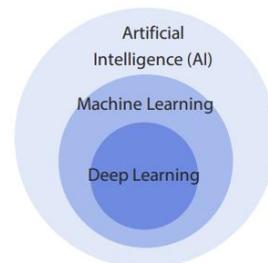


그림2. 딥러닝의 그림

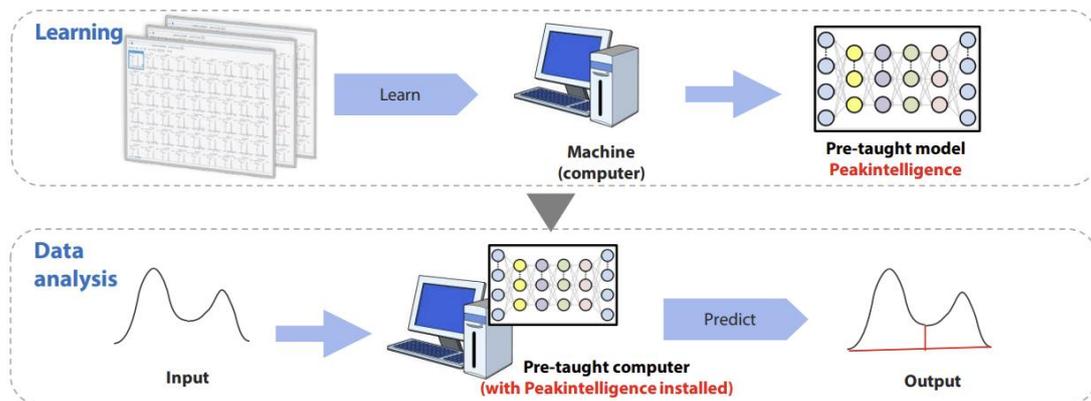


그림 3. Peakintelligence 소프트웨어의 그림

■ 파라미터 없는 피크 적분

Peakintelligence는 전문가가 수행하는 머신 러닝 피크 적분을 기반으로 하기 때문에 전문가 수준의 데이터 분석 결과를 얻을 수 있다. 이전 알고리즘과 달리 사전 파라미터 설정 조정이 필요하지 않다.

이전 알고리즘과 Peakintelligence에 대한 파라미터 설정 창은 그림 4와 같다. Peakintelligence 피크 적분은 [Integration] 창에서 알고리즘을 선택하기만 하면 적용되며, 복잡한 파라미터 설정이 없다. 이는 적분 결과에서 분석자에 의존하는 변동성을 제거한다.

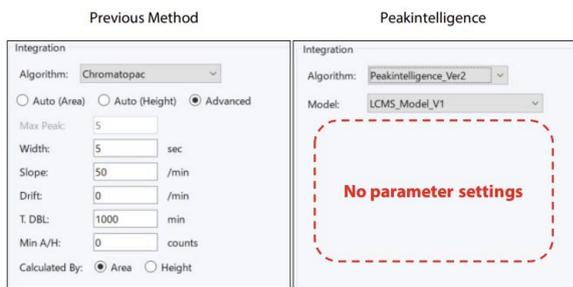


그림 4. 이전 알고리즘 및 Peakintelligence의 파라미터 설정 창

그림 5는 일부 피크 적분의 예를 보여준다. S/N 비율이 낮은 피크와 오염물질 또는 이성질체 피크가 분리되지 않은 피크가 피크 적분 결과에서 적절하게 검출되는 것을 보여준다.

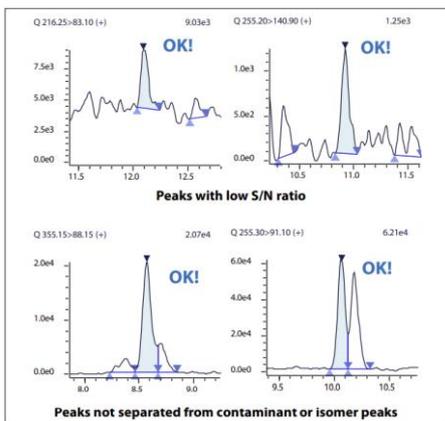


그림 5. Peakintelligence에 의한 피크 적분의 예

■ 오검출 피크의 감소로 피크 적분 시간 단축

한 예로, 이전 방법(Chromatopac)과 피크 적분 결과를 비교하기 위해 그림 6과 같이 농약을 첨가하지 않은 대두 추출액 중에서 157 개의 농약을 분석하였다. 이전 방법은 베이스라인의 노이즈 또는 기록으로 인해 85 개 성분을 잘못 검출·식별했으나, Peakintelligence는 28 개 성분만 잘못 검출·식별하여 이전 방법의 33 %로 감소하였다. 잘못 검출된 각 피크를 확인하고 수동으로 피크를 적분하는 데 10 초가 걸린다고 가정하면, Peakintelligence는 각 데이터 세트에 포함된 157 개 성분의 피크 적분에 필요한 시간을 14분에서 4.6분으로 단축할 수 있다.

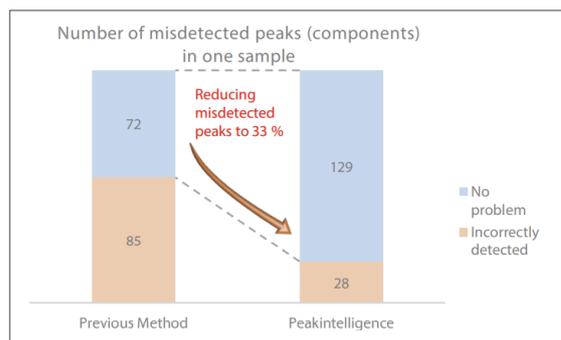


그림 6. 대두 추출액 중 157개 농약 성분에 대한 피크 적분 결과 비교

■ 결론

잔류 농약 분석의 결과 처리에 Peakintelligence를 사용하면 사전 파라미터 설정 조정이 필요하지 않고, 잘못 검출·식별된 피크(성분)의 수도 이전 방법 보다 33 %로 감소하였다.

결과적으로 Peakintelligence는 피크 적분에 필요한 시간을 단축하고, 피크를 확인하는 동안 분석자의 부담을 줄일 수 있을 것으로 기대할 수 있다.

파라미터 설정이 필요하지 않기 때문에 피크 적분 결과에서 분석자에 의존하는 변동성의 위험이 없으므로 특정 인력에 대한 의존성을 없애는 데도 도움이 된다.



Shimadzu Corporation
www.shimadzu.com/an/
Shimadzu Scientific Korea
www.shimadzu.co.kr

For Research Use Only, Not for use in diagnostic procedures. Not available in the USA, Canada, and China. This publication may contain references to products that are not available in your country. Please contact us to check the availability of these products in your country.

The content of this publication shall not be reproduced, altered or sold for any commercial purpose without the written approval of Shimadzu. Company names, products/service names and logos used in this publication are trademarks and trade names of Shimadzu Corporation, its subsidiaries or its affiliates, whether or not they are used with trademark symbol "TM" or "®". Third-party trademarks and trade names may be used in this publication to refer to either the entities or their products/services, whether or not they are used with trademark symbol "TM" or "®". Shimadzu disclaims any proprietary interest in trademarks and trade names other than its own.

The information contained herein is provided to you "as is" without warranty of any kind including without limitation warranties as to its accuracy or completeness. Shimadzu does not assume any responsibility or liability for any damage, whether direct or indirect, relating to the use of this publication. This publication is based upon the information available to Shimadzu on or before the date of publication, and subject to change without notice.

Copyright © 2022 SHIMADZU group. All rights reserved.