

使用 Compass CDS 不会计算信噪比？

三步教你轻松掌握信噪比计算

丁辰春

Compass CDS 软件功能强大，关于它的使用大家是否都掌握了呢？最近收到很多小伙伴私信使用 Compass CDS 计算信噪比的问题，本期我们介绍使用 Compass CDS 计算信噪比，一起来看看吧。

如果大家还有想了解的，欢迎后台留言啊！说不定下一期就能看到回答了呢！

● 01 什么是信噪比？为什么要计算它？

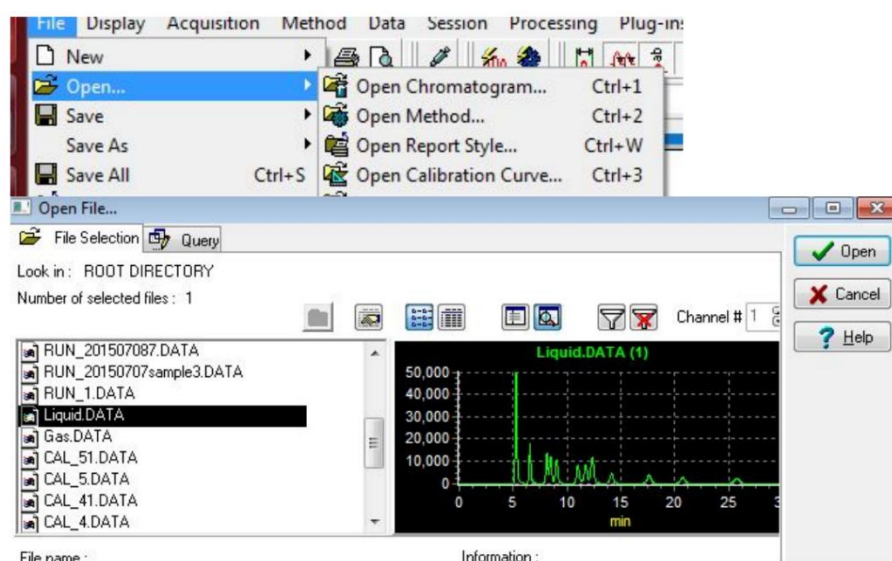
信噪比的英文名称叫做 SNR 或 S/N (SIGNAL-NOISE RATIO), 又称为讯噪比。是指一个电子设备或者电子系统中信号与噪声的比例。信噪比是一个比值，也可以认为是一种倍数，在色谱分析过程中，我们希望的是检测化合物的信噪比越高越好。

在色谱分析中我们常听到一个词就是“3 倍信噪比”。其实“3 倍信噪比”是形容我们方法或者仪器检出限的一个重要属性，简单解释就是，假如我们现在有一个待测物，如果它在色谱仪上产生的信号高出了 3 倍的基线噪声，事实上我们就有 99.7% 的把握认为这个信号与基线噪声不同，在色谱仪器分析中我们就认为这是一个异于噪声的信号，也就是我们常说的“出峰啦”。

● 02 在 Compass CDS 里可以计算信噪比吗？我该怎么操作？

答案当然是有的！只要掌握接下来的三个步骤包你轻松学会计算信噪比。

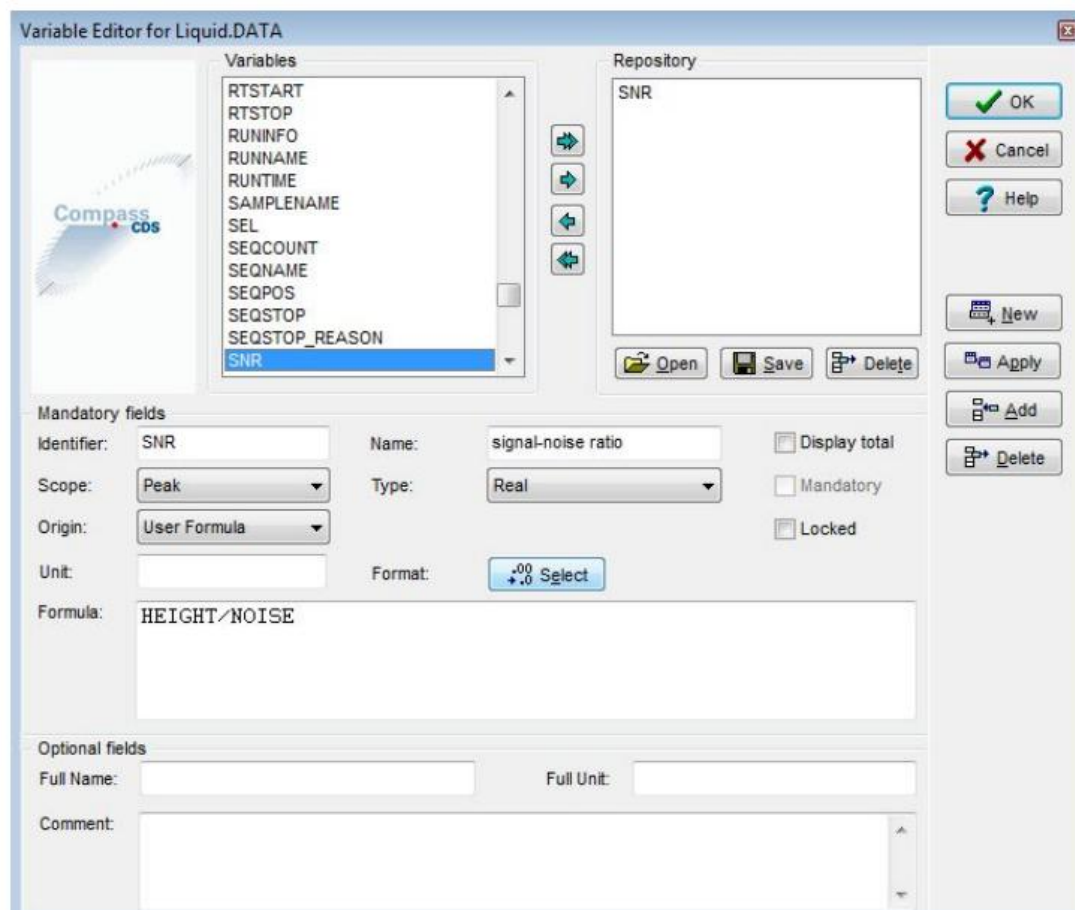
第一步-打开图谱



打开我们需要进行信噪比计算的样品图谱。

第二步-建立变量

在菜单里选择“方法” (Method) -->“变量” (Variables), 或按 F7 键, 进入变量编辑页面。按下图方式新建一个峰变量。

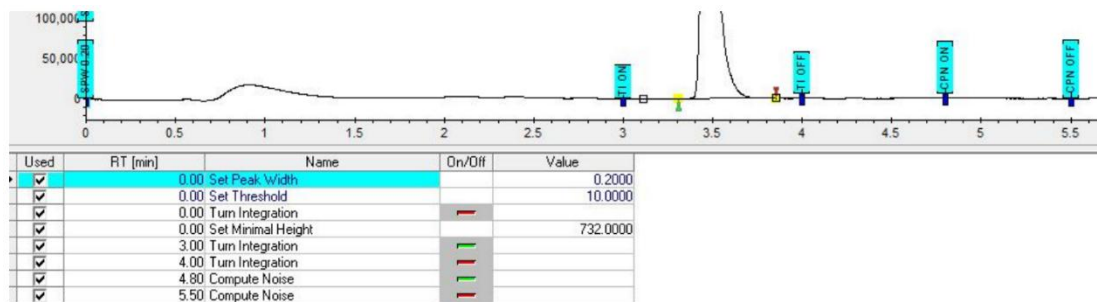


The image shows the 'Variable Editor for Liquid.DATA' dialog box. It has a 'Variables' list on the left with 'SNR' selected. A 'Repository' box on the right contains 'SNR'. Below these are 'Mandatory fields' including 'Identifier' (SNR), 'Name' (signal-noise ratio), 'Scope' (Peak), 'Type' (Real), 'Origin' (User Formula), 'Unit' (empty), and 'Formula' (HEIGHT/NOISE). There are also checkboxes for 'Display total', 'Mandatory', and 'Locked'. At the bottom are 'Optional fields' for 'Full Name', 'Full Unit', and 'Comment'. On the right side of the dialog are buttons for 'OK', 'Cancel', 'Help', 'New', 'Apply', 'Add', and 'Delete'.

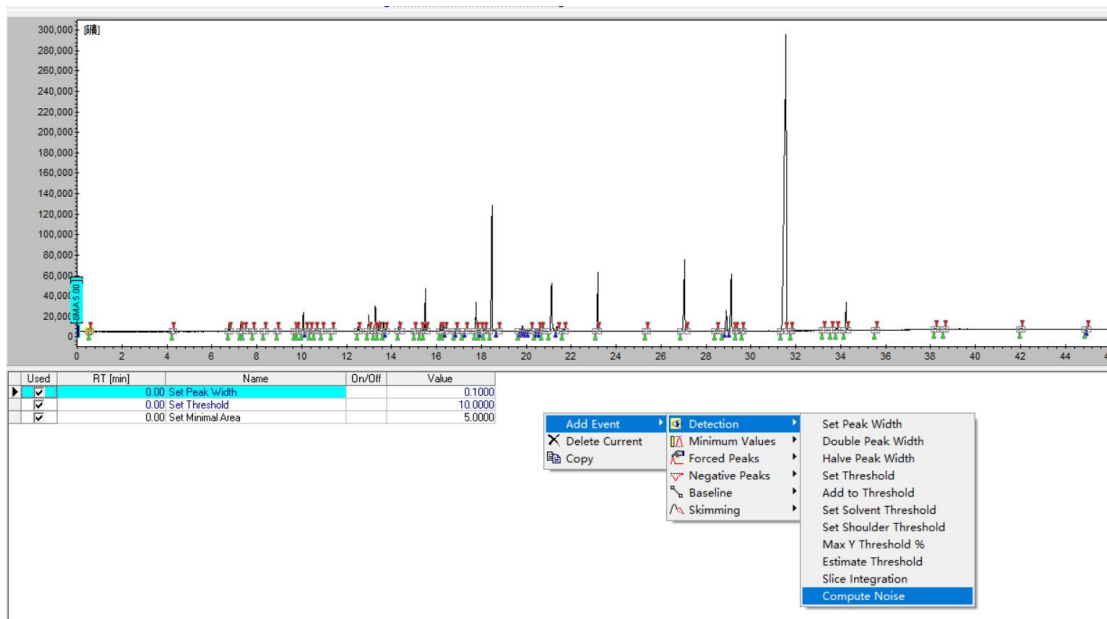
在“identifier”里填入 SNR, 这个是由于公式计算的符号, “name”里填入 signal-noise ratio, 如果在某些表格中需要额外列出这一项内容, 那么“name”里的内容可以用该变量在表格里的名字。“Scope”选择 peak, 表示增加建立的是峰变量; “type”里填入 Real, 表示这个变量具有小数点; “origin”里选择 user formula, 表示这个变量的结果来自用户自定义的公式。最后在“formula”里填入公式: HEIGHT/NOISE, 即峰高和噪音的比值; 最后点击 “apply”。

第三步-计算噪声

如下图所示, 在“integration events”里加入一个 compute noise on/off 事件对。



操作方式见下图，在图谱下方空白处右键后操作。



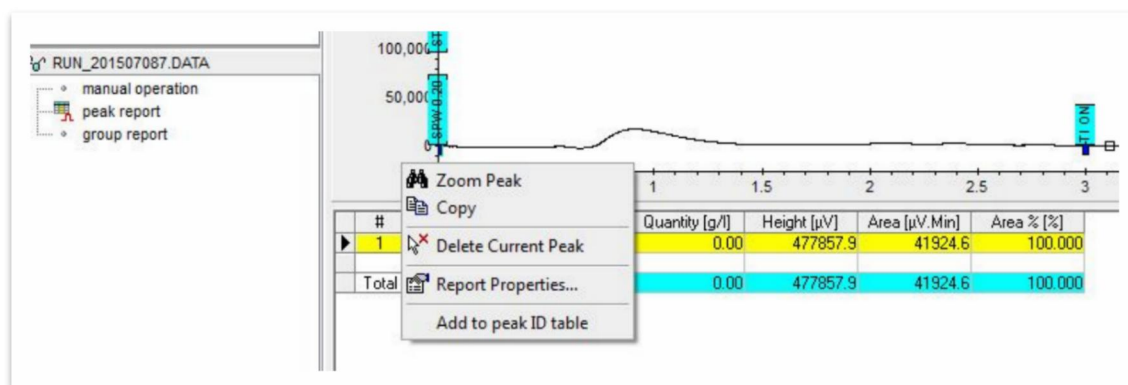
这个事件对所包含谱图的时间段应是一段比较平稳的基线。添加好后“F5”键确认。Noise 是全局变量；按“F2”在跳出的窗口中点击“Variables”，可察看到“NOISE”的值。

Chromatogram properties...			
Main Information			
Identifier	Description	Value	Origin
NGROUP	#Groups	0	System : Number of groups in the chromatogram
NOISE	Noise [µV]	244	System : The noise is calculated between limits defined by "compute noise on" and "compute noise off" events
NOISE_ST	Noise SDEV	20.86	System : Estimation of channel noise standard deviation
NPEAKS	#Peaks	1	System : Number of integrated peaks
NPOINTS	#Pts	3901	System : Total number of acquired points of the chromatogram
OPERATOR	Operator Name	User1	System : Name of the user who performed the acquisition
PROCESS	Processing date	26/06/2011	System : Date of last processing

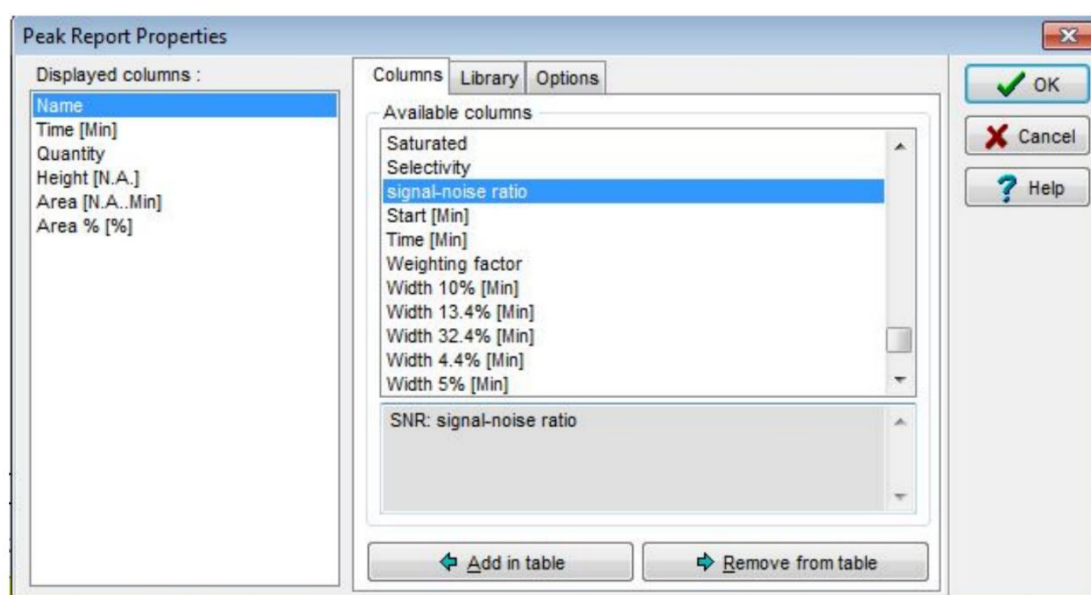
● 03 查看信噪比

完成了上述步骤后我们就可以看到目标峰的信噪比啦！

我们可以在谱图的“results”-->“peak report”里察看各个峰的信息。在右边的表格的空白处点右键



选择“report properties”, 在弹出的窗口中选择“columns”, 找到“signal-noise ratio”, 在下方点击“add in table”。



完成这些步骤后再点击“OK”，我们就可以看到目标峰峰高和噪音比啦：

#	Name	Time [Min]	Quantity [g/l]	Height [µV]	Area [µV.Min]	Area % [%]	signal-noise ratio
1	ss	3.47	0.00	477857.9	41924.6	100.000	1958.23
Total			0.00	477857.9	41924.6	100.000	

好了，以上就是今天的软件小技巧分享，小伙伴们欢迎后台留言留下感兴趣的软件功能，下期我们很快安排！