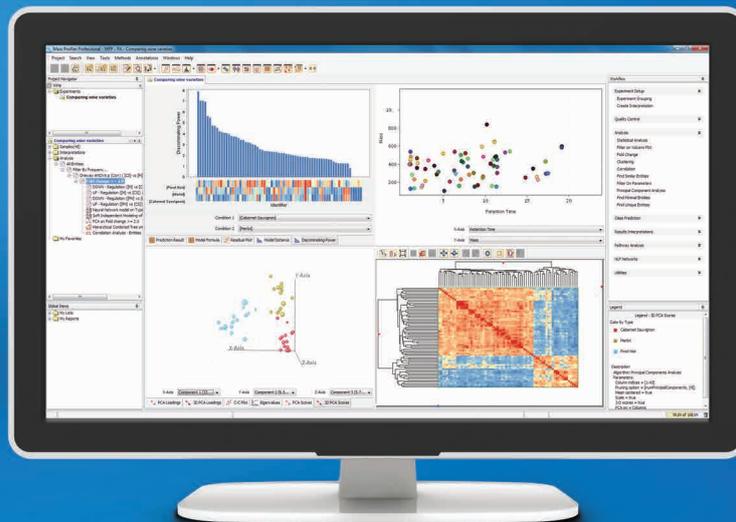


# Agilent MassHunter Mass Profiler Professional ソフトウェア

複雑なデータの関連性を探るパワフルなツール



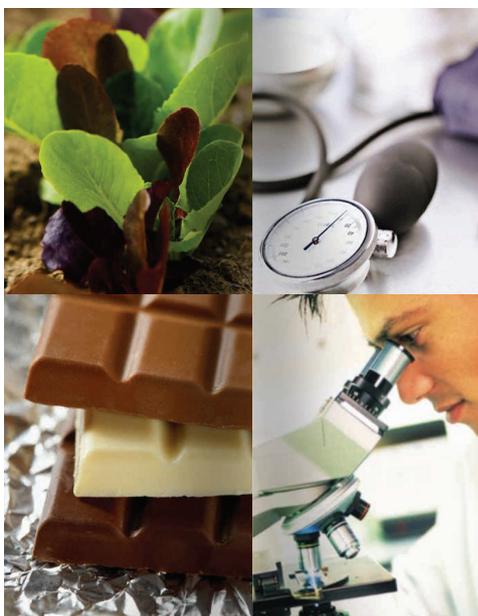


# 多様なデータに対応する 解析ソフトウェア

## Agilent Mass Profiler Professional - 質量分析データ用に設計された、 多変量解析ソフトウェアパッケージ

大量のデータから意味のある情報を選別するのは、干草の山の中から 1 本の針を見つけ出すようなものです。Mass Profiler Professional (MPP) は、高度な処理機能と強力な統計的および数学的モデルを組み合わせ、複雑な質量分析 (MS) データセットに対して、データグループの視覚化、解析、比較、分類を簡単に実行できます。針を見つけ出すだけでなく、干草の山の特徴を分析することが可能となります。

1 つの共通ユーザーインターフェースであらゆる種類のデータをサポートしており、トレーニング時間を短縮し、オペレータのミスを最小限に抑え、ラボの生産性を大幅に向上できます。ターゲット分析から得られたデータにも、探索研究のデータにも対応しています。CSV など汎用形式のデータファイルのインポート機能により、他のデータタイプやベンダーもサポートします。



### データの関連性を発見

Mass Profiler Professional は、Agilent MassHunter ソフトウェアや Agilent OpenLab ChemStation とスムーズに統合することができ、質量分析のアプリケーションにおいてサンプルグループや変数間の関係を見つけるのに最適なツールです。

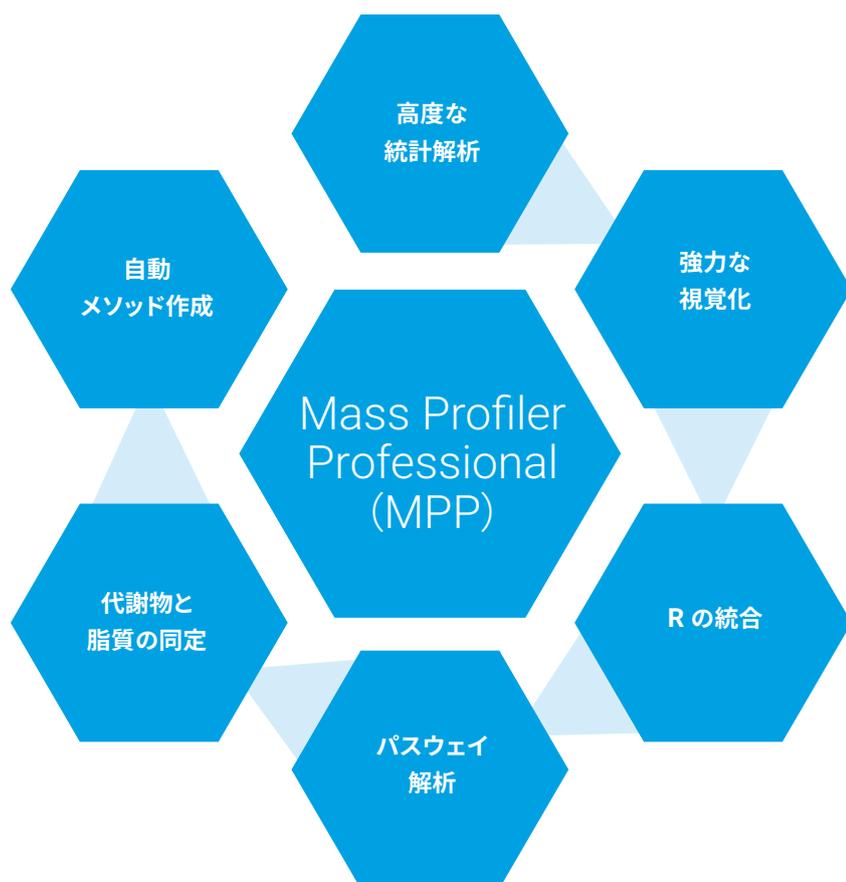
- メタボロミクス
- プロテオミクス
- 法医学
- 毒性学
- 食品安全性
- 環境分析
- 石油化学
- バイオ燃料

## データの理解を深める手段



### 統計解析を簡単に

Mass Profiler Professional は、質量分析データ用の網羅的な解析および視覚化ツールです。新規ユーザーにも熟練ユーザーにも使いやすい 2 つのワークフローを提供しています。新規ユーザーは、ワークフローガイド内で事前に定義された設定でデータを解析することができます。一方、データインポートウィザードを利用するワークフローでは、パラメータを柔軟に選択してカスタマイズし、高度な解析が行えます。Mass Profiler Professional の統計パッケージには、t 検定などのさまざまな統計検定、分散解析 (ANOVA)、モデル構築アルゴリズム、相関解析、クラスタリング解析のほか、R アルゴリズムの拡張機能が含まれています。実行する解析ステップは、自動メソッド作成機能を使用して自動化できます。



### MPP の各種機能がデータ解析作業を簡略化

これらの強力なツールがすべて 1 つのソフトウェアに搭載されており、解析ワークフローが簡単になります。

Mass Profiler Professional の強力な解析機能を利用すれば、質量分析で得られる大量の情報を余すことなく活用できます。教師なし解析（事前のグループ割り当てなしで分類）または教師あり解析（事前にグループを割り当てて分類）の機能により、以下のことが実現できます。

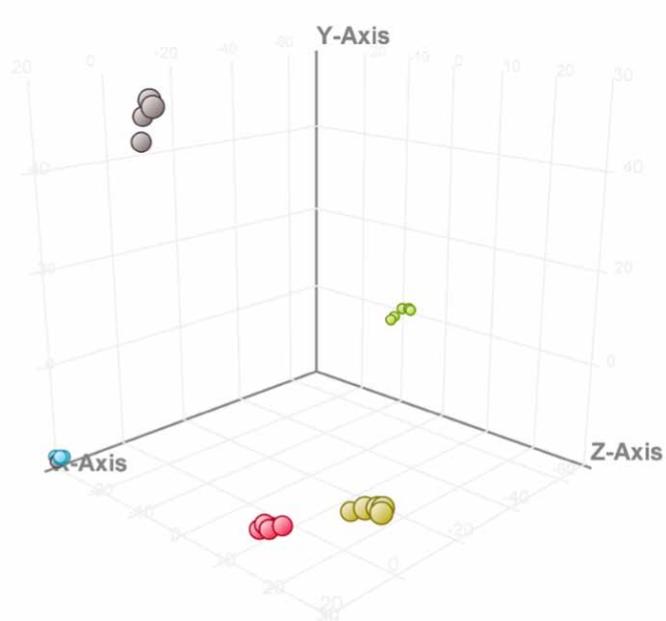
- サンプルグループ間の違いの迅速かつ簡単な発見
- 化合物のアバンダンスの経時変化パターンのプロット
- クラス予測に有用な多変量モデルの開発

高度な視覚化ツールにより、結果を新しい方法で確認してアノテーションすることができ、さらにデータを活用することができます。

## データの重要な違いを検出

複雑なサンプルの特性は、サンプル中に存在する化合物間のアバンダンス（ピーク強度）の違いに関係します。この現象は通常、主成分分析（PCA、複雑なデータを少数の変数に圧縮する数学的手法）を用いて、サンプルのアバンダンスのプロファイルと比較することにより確認することができます。

PCA は、サンプルグループ間の違いを検出して、グループの関連性を判断し、グループの分離に対する化合物の相対的寄与を評価する教師なし手法です。



繰り返し測定で得られたデータの**主成分分析（PCA）**によるスコアプロット。リングのいくつかの品種間の違いを示しています。

## グループ間の化合物のアバUNDANCEの有意な違いを検出

現在観察しているデータは統計的に有効ですか？それともサンプル間の偶然のばらつきですか？スチューデント t 検定と分散解析 (ANOVA) 検定は、2 つ以上の実験条件間でアバUNDANCEに違いがあるエンティティ (化合物ピーク) を検出することで、この質問に答えるのに役に立ちます。

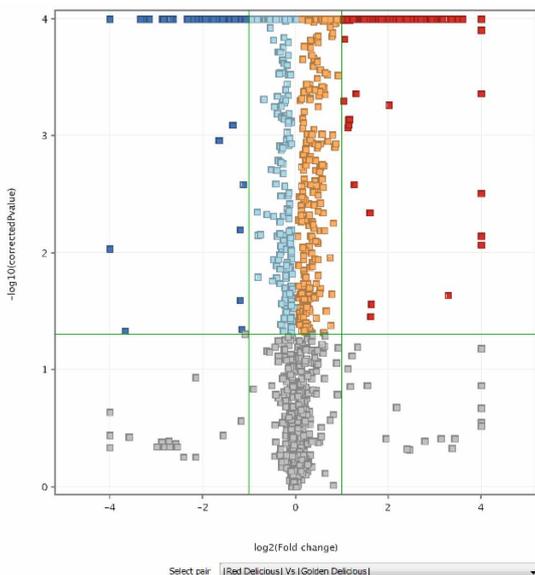
Mass Profiler Professional では、統計学的に厳密な手法により、統計的有意さのあるエンティティを検出するさまざまな検定が使用できます。

### スチューデント t 検定と分散解析 (ANOVA) 検定

- マン・ホイットニー検定 (対応あり、対応なし)
- ANOVA: 等分散および不等分散
- クラスカル・ウォリスのノンパラメトリック一元配置 ANOVA
- フリードマンのノンパラメトリック二元配置 ANOVA
- 反復測定 ANOVA

### N 元配置 ANOVA

- ファミリーワイズエラー率および偽発見率
- マルチテスト補正
- 事後検定
- テューキー検定
- スチューデント=ニューマン=コイルス法



### 倍率変化 (Fold Change) 解析による 違いの視覚化

少ないサンプルグループやサンプル数のデータセットでは、統計的妥当性に疑問のある p 値が得られる場合があります。このような場合、倍率変化をフィルタとして使用し、2 グループ間の違いを探します。データセットに関する知識に基づいて、それらの違いの有意性を評価することができます。

ボルケーノプロット機能により、エンティティごとのアバUNDANCEの倍率変化と p 値を同時に計算し、視覚化することができます。

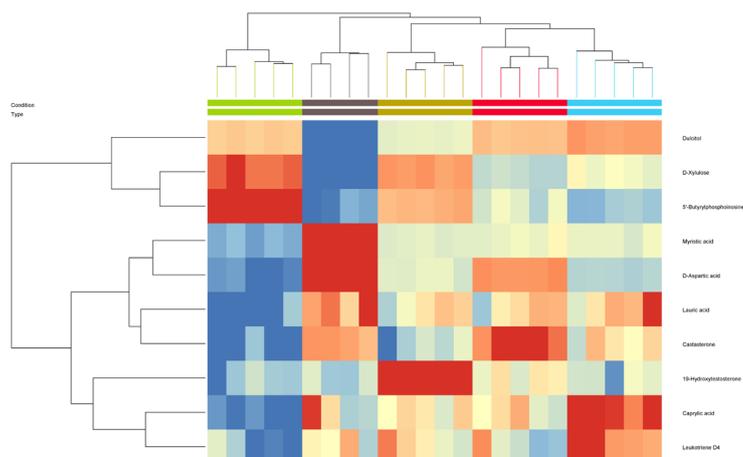
「私たちの研究では、代謝物同士の相関に関心があります。MPP の相関解析機能を使用すれば、その作業をすばやく行うことができます。代謝物間の関係を発見できるため、パスウェイに対する治療効果について迅速に結論を出すことができます。」

- Ricarda Fenske 氏、

研究責任者、植物エネルギー生物学 ARC センター、  
西オーストラリア大学

## データのクラスタリングで隠れた関係を検出

クラスタ解析では、アバンダンスプロファイルの類似性に基づいてエンティティをグループ化し、データのパターンを発見することができます。エンティティごとのクラスタ解析では、サンプル間のプロファイリングを行い、類似したアバンダンスのプロファイルを持つ化合物を分類し、類似したアバンダンスのプロファイルまたはアバンダンスのプロファイルのミラーイメージを示すエンティティを検定します。この種の解析では通常、化学反応や酵素反応の経時的モニタリングにおける基質と生成物の関係を視覚化するために使用されます。一連の異なる実験条件で類似した挙動を示すエンティティでは、反応経路が類似している場合があり、興味深い関係が判明する可能性があります。Mass Profiler Professional では、K-means クラスタリング、階層型クラスタ、自己組織化マップ (SOM) などの幅広いクラスタ手法で解析することができます。

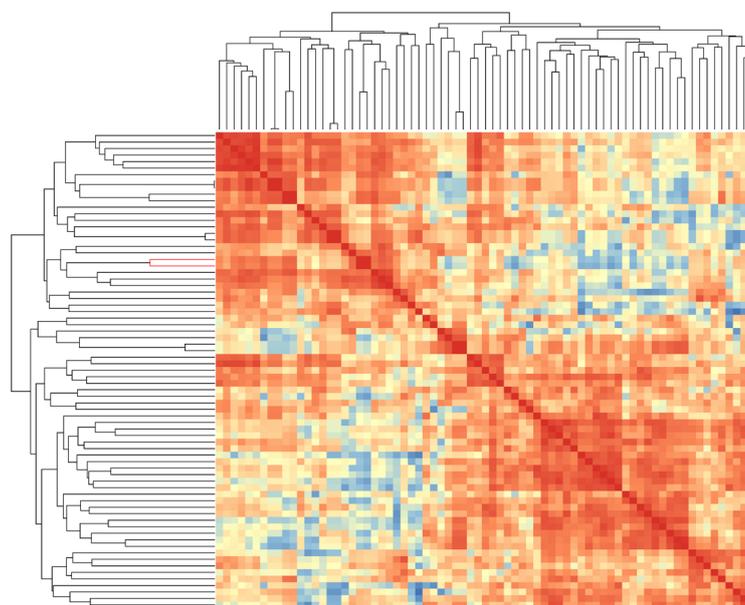


### さらなる生産性

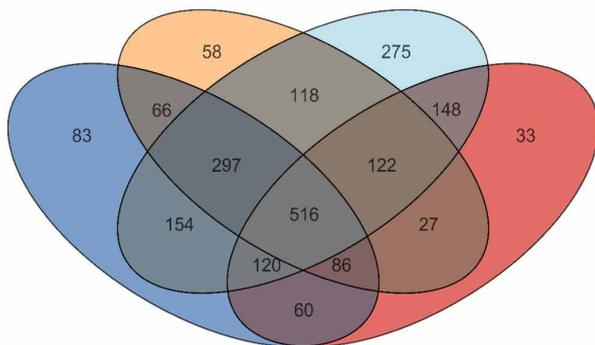
#### 相関解析を使用した 2 変数の関係の理解

研究者は、データの相関を簡単に検出したいと考えています。

- メタデータとの相関 (性別、年齢、出身国、サンプリング場所など)
- エンティティ間の相関 (実験間の相関 (タンパク質と代謝物または GC/MS と LC/MS) を含む)
- サンプル間の相関



相関プロットによる相関解析では、正の関連を示すエンティティだけでなく、負の関連を示すエンティティも視覚化できます。画像は、リングのデータのエンティティ間の相関を示しています。



### ベン図

細胞代謝活性は、異なる生物学的条件下で一意的に存在するか、または共通して存在する代謝物により説明することができます。MPP では、N 元配置ベン図を使用してこのような代謝物を迅速に同定し、以降の解析に使用する代謝物リストを作成することができます。

異なる品種のリンゴの代謝物データのベン図。この図は、特定の品種に一意的に存在する代謝物の数と、複数の品種のリンゴに共通して存在する代謝物の数を示しています。

## R スクリプトの互換性

Mass Profiler Professional 内で R スクリプトを実行することにより、統計解析および視覚化機能をさらに拡張し、カスタマイズすることができます。パッケージ済みの R スクリプトで解析を実行する機能を正規化や相関解析へ使用できます。一部のパッケージ化された R スクリプトには、バッチ効果補正用の COMBAT および相関解析用のケンドールの順位の検定が含まれています。

## Pathway Architect

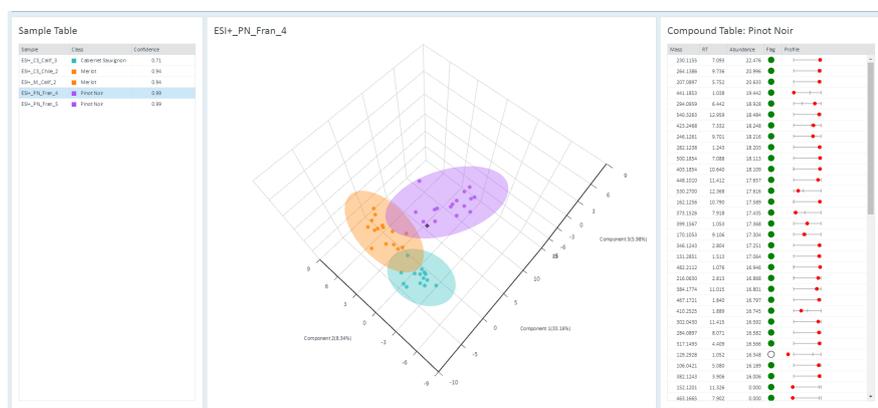
Mass Profiler Professional の Pathway Architect モジュールは、単一または複数のオミクスの解析を行います。これにより、パスウェイデータベースに照合して化合物リストを検索し、影響を受けるパスウェイを発見することができます。実験データはこれらのパスウェイに投影され、結果を表示、拡大、フィルタリング、強調表示することができます。また、パスウェイにもとづく解析用にリストをエクスポートすることもできます。Pathway Architect は、WikiPathways を介してパスウェイコンテンツをサポートしています。

さらに、BioPAX のような標準フォーマットで、独自のパスウェイをインポートすることもできます。これらのパスウェイソースにより、研究者は最先端のパスウェイ解析を実施しているという確信と、独自の見識を追加する柔軟性を得ることができます。

## 予測モデルを使用したサンプルのグループへの割り当て

クラス予測解析は、あらかじめ決定されたグループ内に、新しいサンプルをバイアスのない方法で予測することが長期的な目的である場合に有用な手法です。また、医薬品開発では化合物パイプラインに優先順位を付け、コストのかかる失敗を排除するという点で、ますます有用なツールになりつつあります。この手法は、ビールやワインといった複雑なサンプルの品質管理にも使用されています。サンプルは、すでに同定されている特定のエンティティを使用した予測モデルを用いて、グループに割り当てられます。

Mass Profiler Professional では、いくつかのクラス予測アルゴリズムが提供されていますが、の中には、SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy)、ランダムフォレスト、線形判別分析、PLS 判別分析 (PLSDA)、決定木、サポートベクターマシン、単純ベイズ、ニューラルネットワークなどがあります。分類モデルの構築には、これらのクラス予測アルゴリズムのいずれかを使用できます。MassHunter Classifier ソフトウェアは、MassHunter Profinder で開発された分析メソッドと MPP で作成された分類モデルを用いて、サンプルの分類ワークフロー全体を自動化するように構築されています。



結果画面に表示される主成分分析プロットには、モデル内のさまざまなクラスが Hotelling 楕円で示され、プロット内のテストサンプルの位置は、モデル内のサンプルクラスとの類似性を表します。

## 自動サンプル分類

MassHunter Classifier は、サンプルを簡単に分類するための Agilent MassHunter ソフトウェアポートフォリオの最新製品です。このアプリケーションにより、ボタン 1 つで未知サンプルの分類分析を実行できるようになります。結果は 2D および 3D PCA で表示されるほか、PDF 形式のレポートとしてエクスポートすることができます。

## 化合物同定ツール

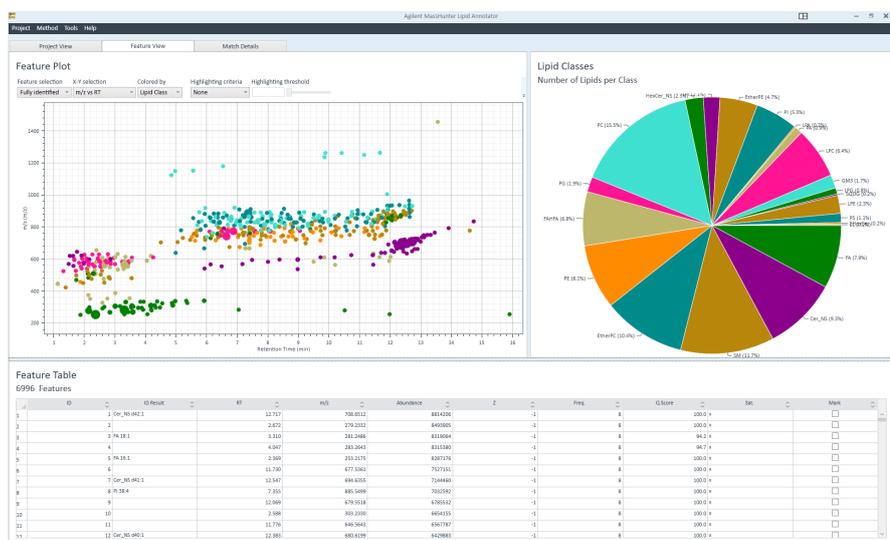
化合物のプロファイルであるエンティティを化合物名に変換することは、MPPの結果を理解するための重要なステップです。分析手法（LC/MS または GC/MS）に応じて、スペクトルパターンまたは精密質量分子イオンとオプションのリテンションタイムデータを、パブリック/プライベートのスペクトルライブラリまたはデータベースと照合することにより、同定を実施します。MPPにはID Browserが統合されており、エンティティの同定が簡単に実施できます。

- LC/MS パーソナル化合物データベースライブラリ（Agilent METLIN を含む）
- GC/MS ライブラリ（NIST および Fiehn ライブラリ）

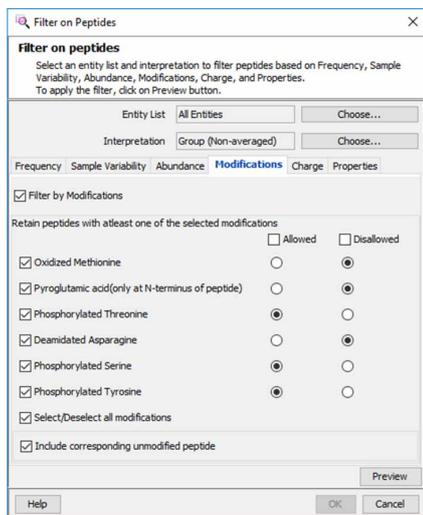
このようにして、MPP内で化合物を迅速かつ簡単に同定できます。ソフトウェアにより、エンティティの名前と化合物のIDが自動的にアノテーションされます。

## リピドミクスワークフロー

リピドミクスには特有の課題がいくつかありますが、Agilent Lipid Annotator ソフトウェアおよび MPP のリピドミクスワークフローにより解決することができます。Agilent Lipid Annotator ソフトウェアは、Agilent Q-TOF またはイオンモビリティ Q-TOF データからの脂質 MS/MS データを迅速かつ正確にアノテーションし、精密質量、リテンションタイムのデータベースを作成します。この脂質データベースは、大規模なプロジェクトからアノテーションされた MS の特徴を抽出し、結果を MPP にエクスポートするために使用されます。MPP リピドミクスワークフローは相対的な定量精度を高めるために、脂質クラスベースの内部標準の正規化をサポートし、脂質固有の視覚化が可能です。



Agilent MassHunter Lipid Annotator ソフトウェアは、バッチ MS/MS データファイルの脂質アノテーション結果を、概要の表示と詳細表示が可能です。



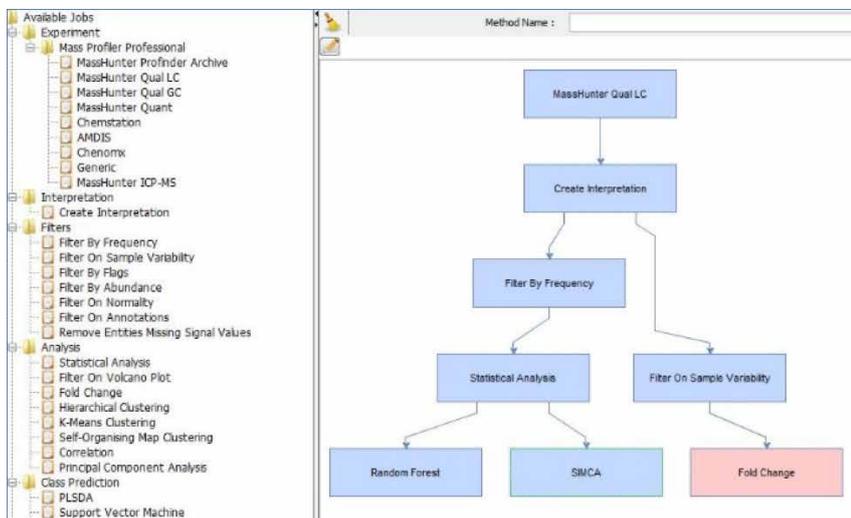
## プロテオミクスワークフロー

ボトムアッププロテオミクスでは、ペプチドを測定します。ただし、注目するのはタンパク質レベルの違いです。MPP には、Agilent Spectrum Mill ソフトウェアを使用した探索研究の結果、またはワシントン大学の MacCoss グループが開発した Skyline ソフトウェアによるターゲット分析の結果をインポートする、プロテオミクスワークフローが用意されています。プロテオミクスワークフローでは、タンパク質レベルとペプチドレベルの両方でのデータフィルタリングが可能です。タンパク質のアバンダンスは、各タンパク質について同定されたペプチドの合計として計算され、フィルタリング後に再計算されます。ペプチドレベルのフィルタリングを使用して翻訳後修飾について調査し、サンプルグループ間の違いを調べることができます。

MPP のプロテオミクスワークフローは、翻訳後修飾も含むさまざまなペプチド特性に基づいたペプチドレベルのフィルタリングをサポートしています。

## 自動メソッド作成

Method Manager を使用して、実験の作成、正規化、データフィルタリング、統計解析を含む解析ステップを選択することにより、ユーザーがメソッドを構築できます。メソッドは、解析用のパラメータを指定しなくても実行することができます。新規ユーザーは、エキスパートが事前に作成した処理メソッドを使用できるため、学習期間が短縮されます。メソッドを繰り返し使用したり、組織間で共有したりすることにより、一貫した結果が確実に得られるようになり、エラーを最小限に抑えることもできます。データ解析に必要な全体の時間と労力を大幅に削減することができます。



Mass Profiler Professional の **Method Manager**。描画エリアには、実験、データフィルタ、統計解析の各オプションを選択して作成したメソッドが表示されます。

## あらゆる Agilent プラットフォームにケモメトリックス分析の機能を追加

Mass Profiler Professional は、どの Agilent 質量分析計を使用している場合でも、機器固有の分析機能を最大限に活用できるように設計されています。LC/TOF、LC/Q-TOF、LC/TQ、GC/Q-TOF、GC/TQ、GC/MSD、ICP-MS のデータをサポートしています。ラボで分析している試料が、バイオマーカーやバイオ燃料、農薬、あるいは石油化学製品のいずれであっても、このソフトウェアを使用することにより、質量スペクトルデータ内の関係を調査することができます。

ホームページ

**[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)**

カスタムコンタクトセンター

**0120-477-111**

**[email\\_japan@agilent.com](mailto:email_japan@agilent.com)**

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っていません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

RA45201.6419097222

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2023

Printed in Japan, October 20, 2023

5990-4164JAJP

