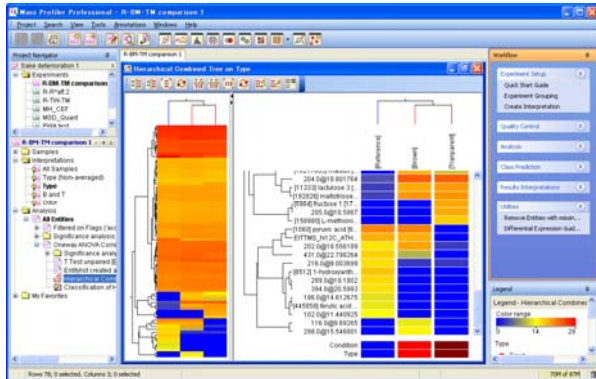


簡単・快適アジレントのGC/MS, LC/MS, ICP-MS 多変量解析ソフトウェア Mass Profiler Professional



アジレントが提供するMass Profiler Professional (MPP)ソフトウェアは、統計解析ツールとして実績のあるGeneSpring GXをベースに、効率よくGC/MS, LC/MSなどのアジレント質量分析装置の複数のデータファイルを解析する、統合統計解析ソフトウェアです。

MPPは多成分を含むサンプル間の比較のためのデータ解析の効率化、異なる試料間の意外性の発見、バイオマーカー探索などで威力を発揮します。

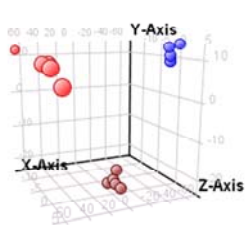
MPPはアジレントのGC/MS, LC/MS, CE/MS, ICP-MSの質量分析装置のデータに対応します。

MPPで多変量解析を行うことで、多くの情報(化合物のピーク強度など)を含む複数のクロマトグラムを俯瞰的に理解することができ、以下の効果が期待されます。

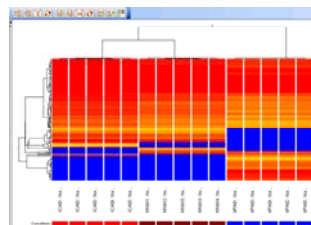
- ⇒ 統計的有意差のある変動のあるピークを効率的に探すことができ、解析の工数削減
- ⇒ 複数の試料のクロマトグラムを俯瞰することで、多数のピークの中に存在する意外性を発見

MPPの主な機能:

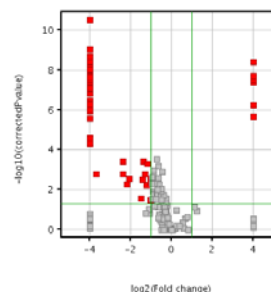
- **統計的フィルター**... t-検定やANOVAなどの統計的有意差でフィルターをかけて統計的有意差のあるピークのみを抽出。
- **様々な表示方法**... 散布図、プロファイルプロット、Venn図、マトリクスプロット、ヒートマップ、スプレッドシートなど。
- **PCA(主成分分析)**... 各サンプルの情報量(分散)が最大化するようにスコア化し、スコアに与える各ピークの影響度(ローディング)を計算。サンプル間の違いを数値化して視覚化し、その違いを特徴づけるピークを見つけることができます。
- **クラスタ分析**... サンプル間の変動パターンが似ているコンポーネント同士を近くに配置して視覚化。同様の変動をまとめることで、サンプル間に特徴的な変動をするコンポーネントが集まり、浮かび上がります。デンドログラムによって、ピークやサンプルの類似度を視覚化できます。
- **クラス予測(判別分析)**... 既知のサンプルのデータを用いて統計解析手法によって判別モデルを作成し、未知サンプルを予測します。PLS-DAや決定木、SVMなどの様々なアルゴリズムが適用できます。
- **IDBrowser(スキャンデータのみ)**... ライブラリサーチで化合物の同定。複数のピークを効率よくライブラリ検索できます。
- **パスウェイ解析(オプション)**... バイオマーカー探索をサポートする、強力なツールです。抽出したピークの情報データベースから検索し、Pathwayと呼ばれる化合物の反応経路の地図へ代謝反応を表示。代謝物のピーク変動を矢印(方向)とヒートマップ(強度)で表示。



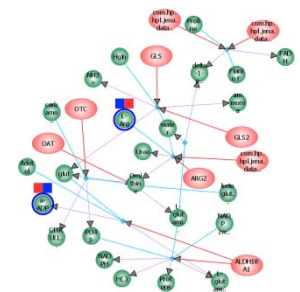
PCA(主成分分析)
スコアプロット



階層型クラスタツリー

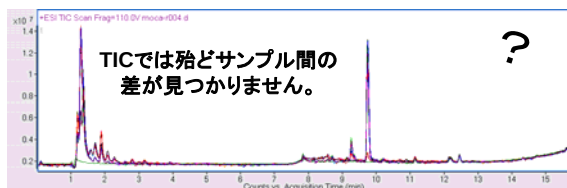


Volcano Plot



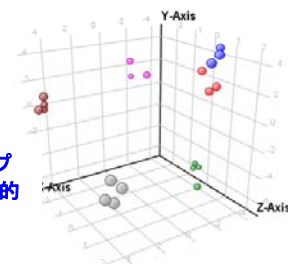
パスウェイ解析
(オプション)

LC/MSによるコーヒー品種(6種類)の変動成分の探索例

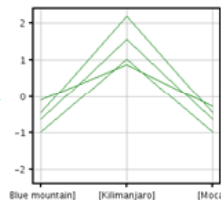


MPPのPCAで
傾向を視覚化

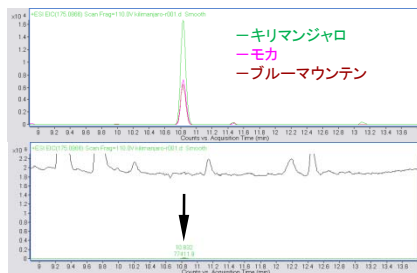
- ブレンド
- デカフェブレンド
- ダークロースト
- キリマンジャロ
- モカ
- ブルーマウンテン



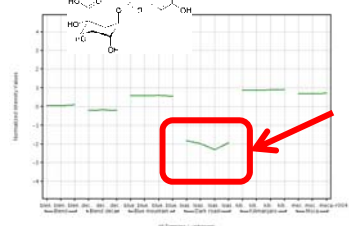
主成分分析(PCA)のスコア
プロットで、各サンプルの全体的
な傾向が分かります。



クラス分析から、
キリマンジャロに
Indole-3-acetamideが
多く含まれていることが
発見できました。

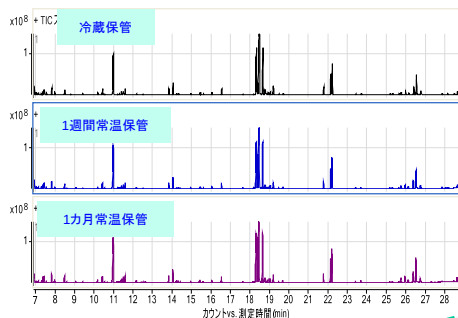


TICベースライン下に隠れた
成分の変動も見逃しません



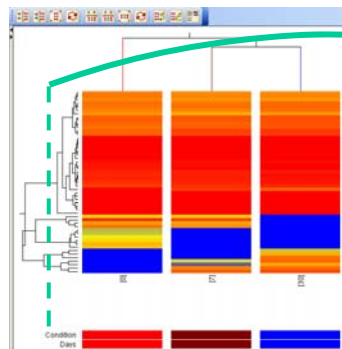
MPPによってクロロゲン
酸がダークローストの焙
煎で失われていることも
わかりました。

GC/MSによる日本酒の経時変化成分の探索例



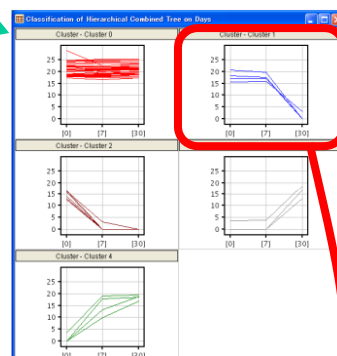
日本酒サンプルのGC/MS
トータルイオンクロマトグラム(TIC)

MPPで
クラス分析



階層型クラスタツリー

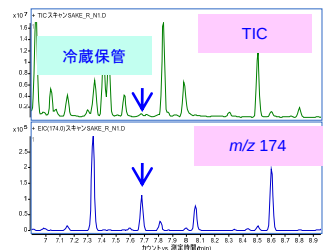
MPPを使用しない
方法では??



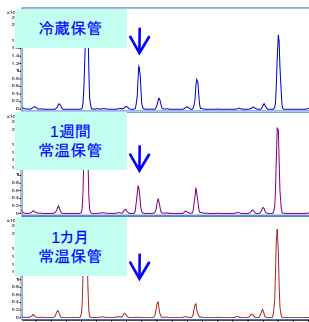
階層型クラスタツリーからサン
プル毎の変動の類似度で
Entityを分類

ピルビン酸はTICに埋もれていました。

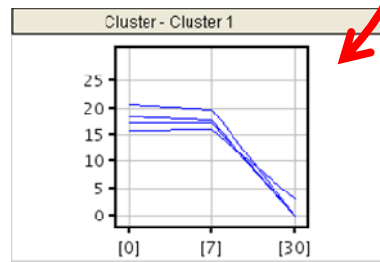
MPPを使用しない方法では、この微量成分
の変動を見つけるのは困難です。



常温保管で減少した成分の一例:ピルビン酸 ($m/z=174$)



抽出イオンクロマトグラム
(EIC)で確認



1か月に減少している
ピークのクラス

MPPはICP-MSを使用した食品中の微量無機
元素の判別分析などにも応用できます。

アジレント・テクノロジー株式会社

〒192-8510 東京都八王子市高倉町9-1

カスタムコンタクトセンター

フリーダイヤル 0120-477-111

価格は 予告なく変更する場合があります。

www.agilent.com/chem.jp



Agilent Technologies