



MassHunter Classifier で 食品の品質保証試験を容易に

食品偽装は世界中で大きな問題になっています。食品のフィンガープリンティングは、既知の問題に対する試験の開発や新たな問題の調査を行うラボで、採用が広がっています。フィンガープリンティングは、数種類の化合物だけに特化した試験を行うよりも、総合的な方法で食品や原料を調べることで効果を発揮します。このため、食品偽装者には不正利用の困難な試験を作成します。LC/MS や GC/MS のユーザーは、Agilent MassHunter スイートに追加された最新機能 Agilent MassHunter Classifier を用いることで、Agilent MassHunter Profinder と Mass Profiler Professional (MPP) で開発したフィンガープリンティング法を、自動サンプル分類レポートに変換し、実用的な結果を分析者や技術者に提示することができます。このプロセス全体を自動化するためのメソッド開発ワークフローを図 1 に示します。



図 1. メソッド開発のワークフロー

Classifier における自動サンプル分類

自動サンプル分類は、線形判別分析 (LDA)、PLS 判別分析 (PLSDA)、ランダムフォレスト、SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy) など、MPP で選択したメソッドに基づいてサンプルを処理し、結果をわかりやすいビューに表示します。ユーザーはこれを見て、サンプルが本物であるかどうかを判断できます。



図 2. Classifier における自動サンプル分類

結果のレビューとレポート作成

主成分分析 (PCA) では、既存モデルのクラスに対応するサンプルの位置を確認することができます (図 3)。この位置から、特定のクラスとサンプルの類似性がわかります。結果は、選択したテンプレートに基づき、PDF 形式のレポートとしてエクスポートされます。

このシンプルな食品品質保証ワークフローには、メソッド開発と自動サンプル分類を行うためのツールが用意されています。このため、食品の真正性や商品の原産地を試験するための機能の追加や強化がこれまでになく簡単になります。

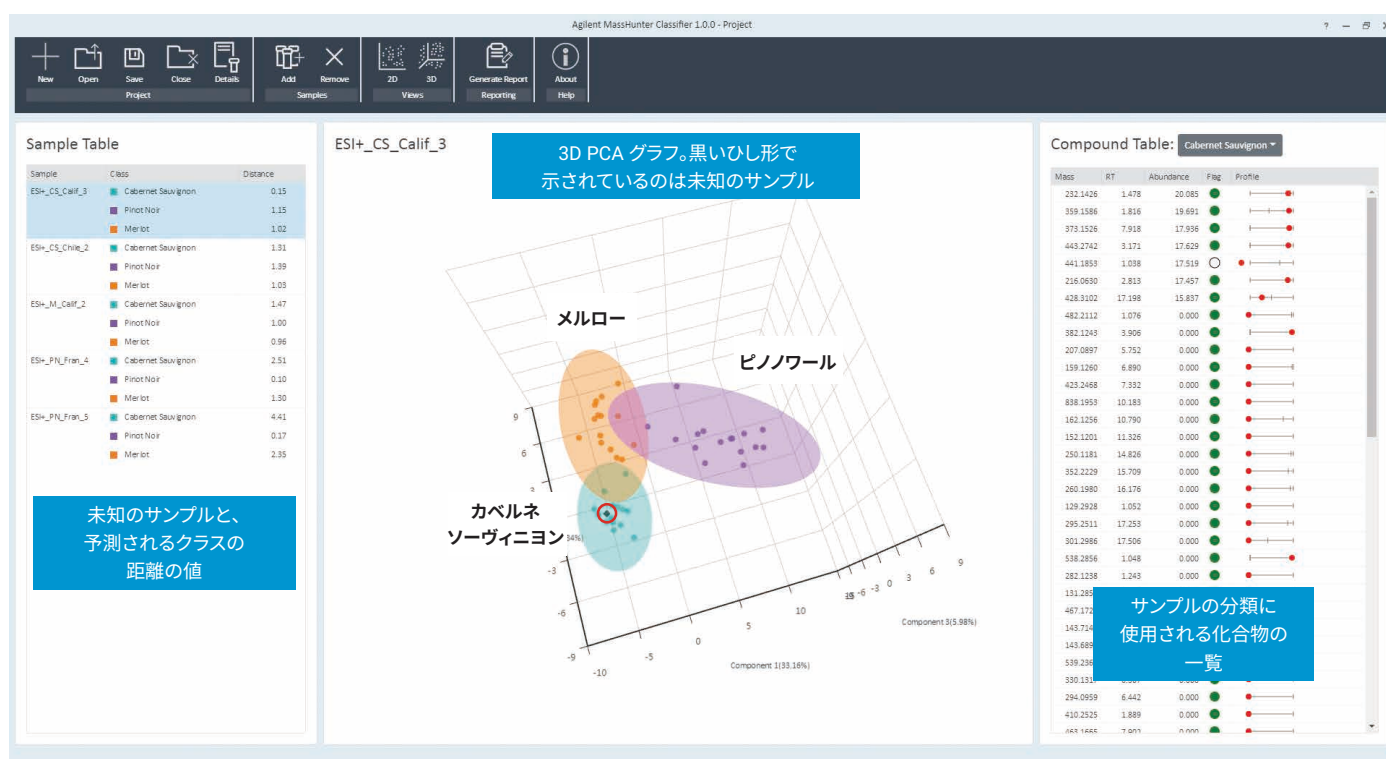


図 3. Classifier のユーザーインターフェイス。サンプルテーブル、PCA、化合物表が表示されています。この 3D-PCA に示されているのは、メルロー、ピノワール、カベルネソーヴィニヨンの 3 種類のワインサンプルです。未知のサンプルは、ひし形 (赤丸の中) で表されています。これは、モデルの中で、このサンプルに最も近いクラスを示しています。色付きのドットは、モデルの構築に使用されたトレーニングサンプルです。また、MPP で使用されるモデルトレーニングデータについては、PCA の信頼楕円が描かれています。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンタ

0120-477-111

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おりません。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。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2019
Printed in Japan, March 26, 2019
5994-0726JAJP