

Agilent MassHunter Mass Profiler Professional 소프트웨어

복잡한 데이터에서 관계를 탐색하는 강력한 방법





애질런트 질량 스펙트럼 데이터 등을 위한 설계

질량 분석 데이터용을 위한 특별히 설계된 업계 최고의 계량분석화학 소프트웨어 패키지인 Agilent Mass Profiler Professional을 소개합니다.

유익미한 것을 찾는다는 것은 마치 건초 더미에서 바늘 한 개를 찾는 것과 같이 매우 어려운 일입니다. 고급 데이터 처리 기능과 강력한 통계 및 수학적 모델이 결합된 Mass Profiler Professional(MPP)을 사용하면, 복잡한 MS 데이터 세트에서 데이터 그룹을 쉽게 시각화, 분석, 비교 및 분류할 수 있습니다. 따라서 바늘 한 개를 찾을 수 있을 뿐만 아니라 건초 더미의 특성까지도 파악할 수 있습니다.

공통된 사용자 인터페이스에서 모든 데이터 유형이 처리되므로 교육 시간이 단축되고 운영 오류가 최소화되어 실험실의 생산성이 현저하게 높아집니다. 데이터는 표적 또는 발견 실험에서 얻을 수 있습니다. 일반 가져오기 기능은 다른 데이터 유형 및 공급업체에 대한 지원을 제공합니다.



찾고 있는 관계 발견

Mass Profiler Professional은 Agilent OpenLab ChemStation 뿐만 아니라 Agilent MassHunter 제품군과 원활히 통합 운영될 수 있으며, 시료 그룹과 변수 간 관계를 이해할 필요가 있는 다음과 같은 분야의 분석에 매우 적합합니다.

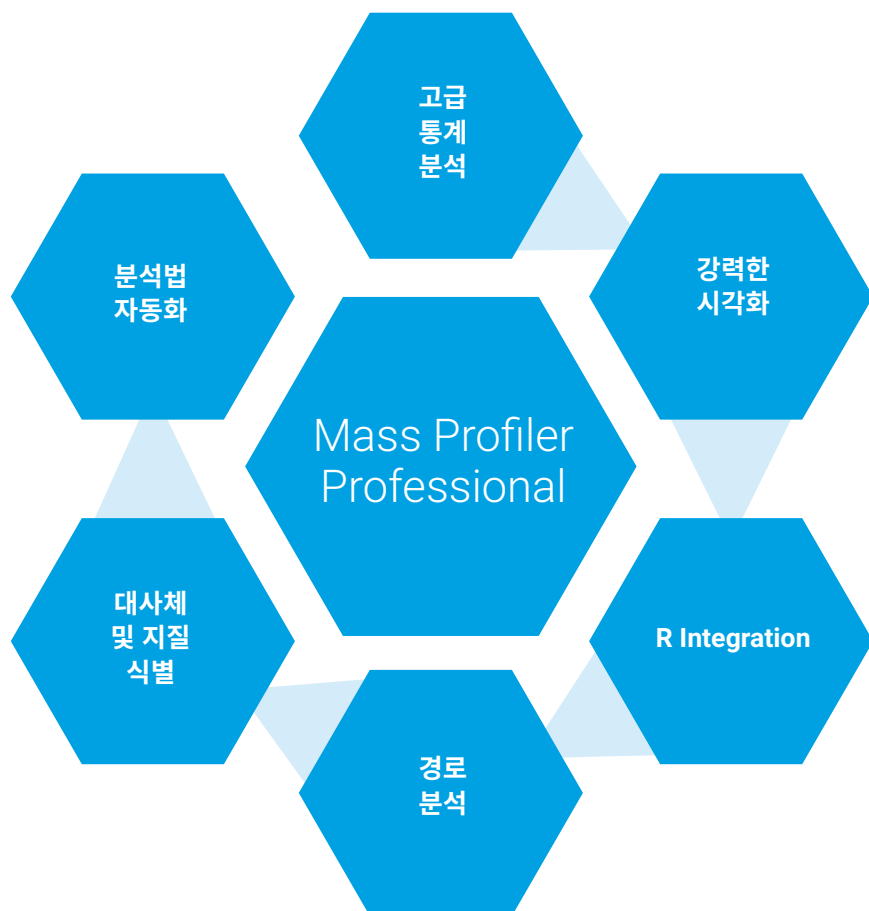
- | | |
|---------|----------|
| - 대사체학 | - 식품 안전 |
| - 단백질체학 | - 환경 |
| - 법과학 | - 석유화학 |
| - 독성학 | - 바이오 연료 |

데이터를 더욱 깊이 이해할 수 있는 방법



간편한 통계 분석

Mass Profiler Professional은 질량 분석 데이터를 위한 포괄적인 분석 및 시각화 도구입니다. 다양한 워크플로를 제공하여 신규 사용자와 고급 사용자 모두에게 적합하도록 설계되었습니다. 신규 사용자는 안내된 워크플로에서 사전 정의된 설정을 사용하여 데이터를 탐색할 수 있으며, 데이터 가져오기 마법사는 고급 분석을 위해 파라미터를 사용자 지정 선택할 수 있는 유연성을 제공합니다. Mass Profiler Professional의 통계 패키지에는 T-테스트, 분산 분석(ANOVA), 모델 구축 알고리즘, 상관 관계 및 클러스터링 분석, R 알고리즘을 위한 확장된 기능과 같은 다양한 내장형 테스트가 포함되어 있습니다. 수행할 분석 단계는 분석법 자동화 기능을 사용하여 자동화할 수 있습니다.



MPP 기능을 사용하여 데이터 분석 작업을 단순화합니다.

단일 소프트웨어에 포함된 이 모든 강력한 도구는 분석 워크플로를 쉽게 만들어 줍니다.

Mass Profiler Professional의 강력한 분석 기능을 사용하면 많은 정보를 포함하고 있는 질량 분석 데이터를 완전히 활용할 수 있습니다. 사전 조건이 없거나 (사전에 그룹 할당 없이 분류), 사전 조건이 있는(사전에 분류된 그룹 사용) 통계 분석 기능을 갖춘 MPP를 사용하면 다음과 같은 작업을 수행할 수 있습니다.

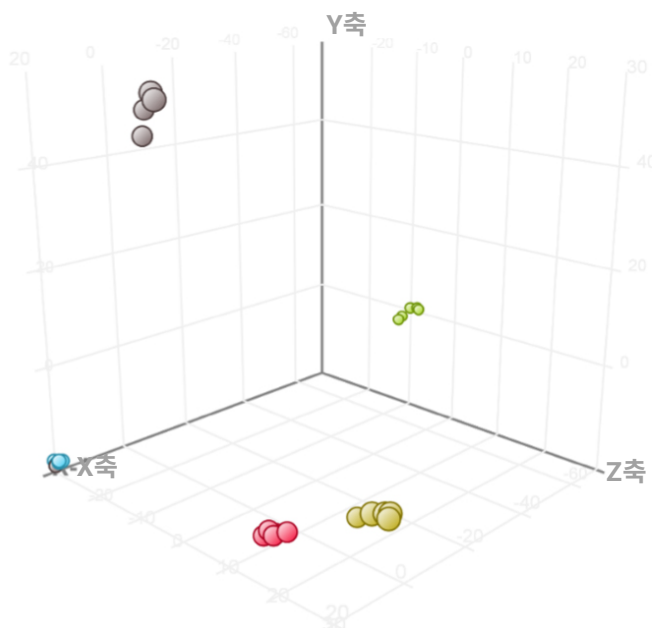
- 시료 그룹 간 차이를 신속하고 간편하게 찾을 수 있습니다
- 시간에 따라 변하는 화합물 존재비를 도표화(plot)할 수 있습니다
- 클래스 예측에 유용한 다변수 모델을 개발할 수 있습니다

고급 시각화 도구(Advanced Visualization tool)를 사용하면 새로운 방식으로 결과를 검증하고 분석하는 것이 가능합니다. 이를 통해 효율적으로 데이터를 더욱 깊이 파악할 수 있습니다.

데이터의 중요 차이 발견

복잡한 시료와 관찰 가능한 특성은 시료에 존재하는 다양한 화합물 간의 존재비 차이로 발생하는 결과입니다. 이러한 반응과 특징은 시료 중의 각 화합물의 존재비 프로파일을 비교하여 관찰할 수 있으며 일반적으로 복잡한 데이터를 적은 변수로 압축하는 수학적 방법인 주성분 분석(PCA)이 사용됩니다.

PCA는 사전 조건이 없는 분석 방법으로 시료 그룹 간 차이를 찾고, 그룹 연관성을 이해하고, 그룹 분리에 있어서 화합물의 상대적 역할의 검증에 사용됩니다.



생물학적 복제 시료의 대사물질 데이터에 대한 주성분 분석(PCA)은 여러 종류의 사과에 대한 차이를 보여줍니다.

그룹 간 각 화합물에서 유의미한 존재비 차이 확인

관찰된 데이터가 통계적으로 유의한 것인지 아니면 시료 간 일반적인 편차의 결과인지 판단할 필요가 있습니다. Student t-테스트와 분산 분석(ANOVA) 테스트를 활용하면 복수 실험 조건 세트 간 다른 존재비를 가진 물질을 찾을 수 있어 이러한 상황에 쉽게 대처할 수 있습니다.

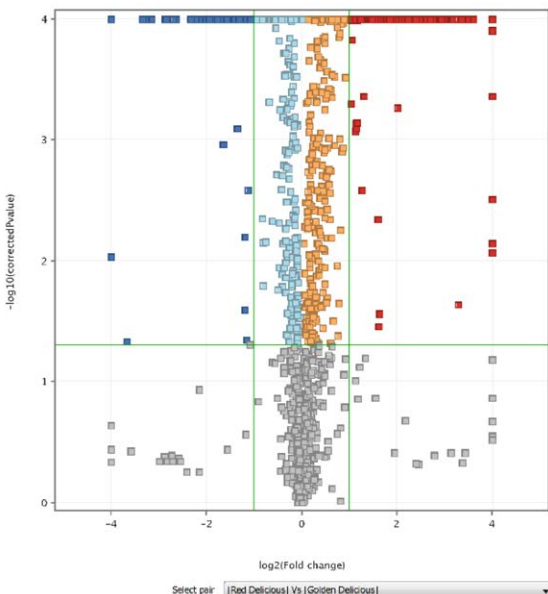
이러한 대상 물질을 통계적으로 정확한 방법으로 찾을 수 있도록 Mass Profiler Professional은 다음과 같은 광범위한 테스트 기능을 제공합니다.

Student t-테스트와 분산 분석(ANOVA) 테스트

- Paired 및 unpaired Mann-Whitney
- ANOVA: 등분산 분석(equal variance) 및 부등분산 분석(unequal variance)
- Kruskal Wallis non-parametric 1-Way ANOVA
- Friedman non-parametric 2-Way ANOVA
- 반복 측정(repeated measure) ANOVA

N-way ANOVA

- Family-wise 오차율(error rate) 및 오발견율(false discovery rate)
- 다중 테스트 보정
- 사후 비교 검정 테스트(Post-hoc test)
- Tukey
- Student-Newman-Keuls



배율 변화(fold change) 분석으로 차이점을 시각화

적은 시료 그룹과 과소표본 데이터 세트에서 만들어진 p-value로는 통계적 타당성에 문제가 제기될 수 있습니다. 이 경우 배율 변화(fold-change) 설정을 필터로 사용하면 2개의 그룹 간 차이를 찾을 수 있고, 데이터 세트에 대한 정보를 기초로 이러한 차이점이 유의한 의미를 가지는지 판단할 수 있습니다.

Volcano Plot 기능을 사용하면 각 질량 물질의 존재비와 p-value 유의성에 대한 배율 변화(fold-change)를 동시에 계산 처리할 수 있습니다.

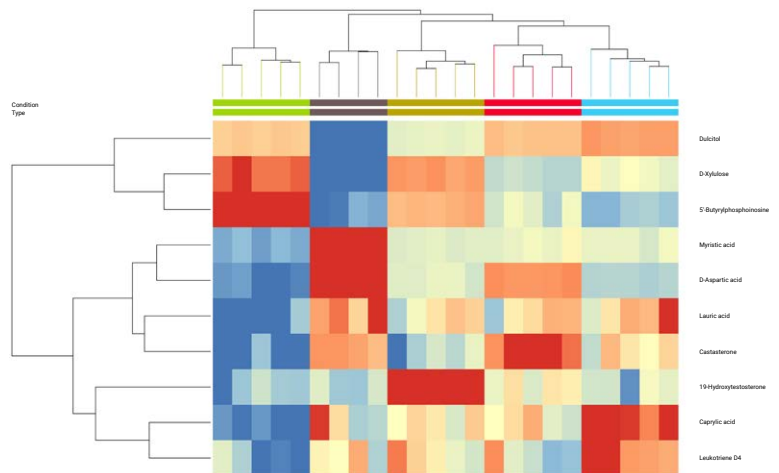
"저희 연구는 대사체 간의 상관관계 수립에 관심이 있습니다. MPP에서 사용할 수 있는 상관관계 분석 기능을 사용하면 적시에 이를 달성할 수 있습니다. 이를 통해 대사체 간의 관계를 발견할 수 있으므로 경로에서의 치료 효과에 대한 결론을 신속하게 도출할 수 있습니다."

- Ricarda Fenske,

서호주 대학교, 호주 연구 위원회 식물성 에너지 생물학 최고 기관, 연구관
(Arc Centre Of Excellence In Plant Energy Biology, University of Western Australia)

물질들 간 숨겨진 관련성을 찾기 위한 데이터 클러스터링

클러스터링 분석으로 존재비 프로파일의 유사성에 기초해 질량 물질을 그룹화하면 데이터 내에 존재하는 가장 현저한 패턴을 찾을 수 있습니다. 시료 간 물질 프로파일을 바탕으로 분석을 클러스터링하고 존재비 프로파일을 갖는 화합물을 유사성에 따라 분류하여, 유사 또는 미러 이미지(mirror image) 존재비 프로파일을 보이는 물질을 테스트할 수 있습니다. 이런 유형의 분석은 시간 경과에 따른 화학 반응이나 효소 반응 모니터링에서 기질과 생성물의 관련성을 시각화하는 데 주로 사용됩니다. 여러 실험 조건에서 비슷한 결과를 나타내는 물질은 비슷한 반응 경로를 가질 수 있으므로 흥미로운 관계가 밝혀질 수 있습니다. Mass Profiler Professional은 K-means 클러스터링, 계층적 클러스터링 및 자기 조직화 지도(Self Organizing Map, SOM)를 포함한 다양한 클러스터링 분석법을 제공합니다.

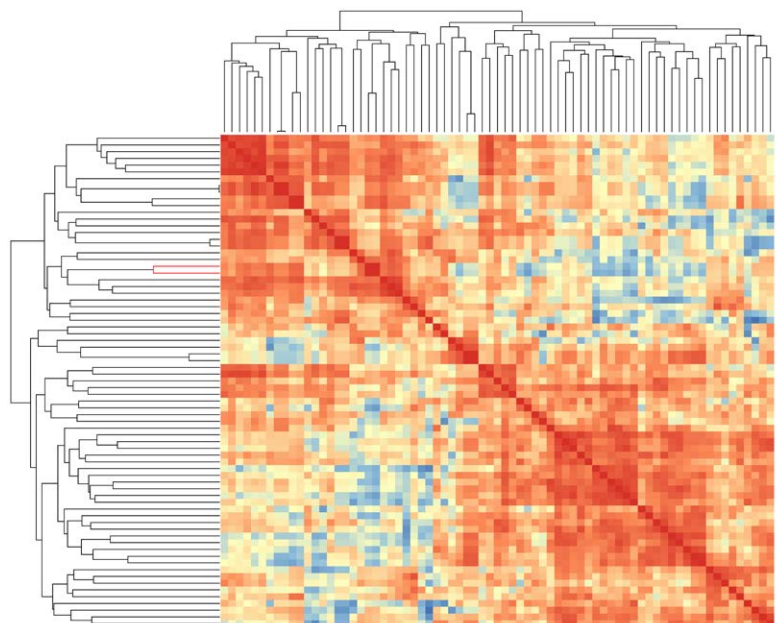


분석 효율 향상

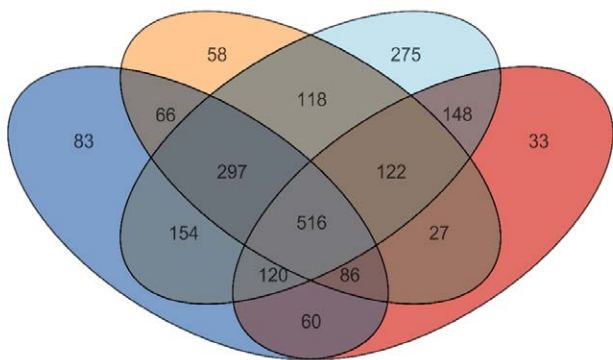
상관관계 분석을 통한 두 변수에 대한 관계의 깊이 이해

연구자들은 데이터에서 상관관계를 쉽게 찾고 싶어합니다.

- 메타데이터와의 상관관계(예: 성별, 연령, 출신 국가/지역, 샘플링 위치...)
- 교차 실험(단백질 대 대사체 또는 GC/MS 대 LC/MS)을 포함한 물질 간 상관관계
- 시료 간 상관관계



Correlation Plot Correlation 분석을 통해 긍정적으로 연관된 물질뿐만 아니라 부정적으로 연관된 물질도 식별할 수 있습니다. 이미지는 사과 데이터의 물질 간의 상관관계를 보여줍니다.



벤 다이어그램(Venn diagram)

대사 활동은 다양한 생물학적 조건에 걸쳐 고유하게 존재하거나 공유되는 대사체로 설명할 수 있습니다. MPP로 N-way 벤 다이어그램(Venn diagram)을 통해 이러한 대사체를 신속하게 식별할 수 있을 뿐만 아니라 모든 다운스트림 분석을 위해 선택한 대사체 목록을 생성할 수 있습니다.

다양한 종류의 사과의 대사체 데이터에 대한 벤 다이어그램(Venn diagram). 다이어그램은 특정 품종에 고유하게 존재하는 대사체의 수와 여러 종류의 사과에서 공유되는 대사체의 수를 보여줍니다.

R 스크립트 호환성

통계 분석 기능과 시각화 기능을 더욱 확장하고 맞춤형으로 사용하기 위해 Mass Profiler Professional에서 R 스크립트를 실행할 수 있습니다. 사전 패키징된 R 스크립트를 이용하여 분석을 실행하는 기능은 정규화 및 상관관계 분석 중에 사용할 수 있습니다. 패키징된 R 스크립트 중 일부에는 배치 효과 보정을 위한 COMBAT과 상관관계 분석을 위한 Kendall 순위 테스트가 포함되어 있습니다.

Pathway Architect

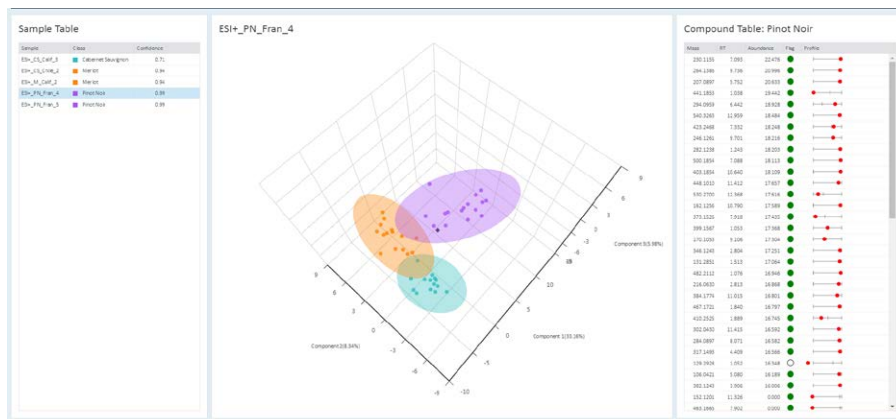
Mass Profiler Professional의 Pathway Architect 모듈은 단일 오믹스 분석 또는 다중 오믹스의 공동 분석을 수행합니다. 이를 통해 경로 데이터베이스에 대해 화합물 목록을 검색하여 영향을 받는 경로를 발견할 수 있습니다. 이러한 경로에 실험 데이터가 반영되어 결과 확인, 확대/축소, 필터링, 강조 표시를 할 수 있습니다. 그리고 이를 통해 경로의 직접 분석을 위한 목록을 내보낼 수 있습니다. Pathway Architect는 WikiPathways를 통해 경로 콘텐츠를 지원합니다.

또한 사용자는 BioPAX와 같은 표준 형식으로 자신의 경로를 가져올 수 있습니다. 이러한 경로 소스는 연구자에게 자신의 이해를 추가할 수 있는 유연성을 갖춘 최첨단 경로 분석을 수행하고 있다는 확신을 줍니다.

예측 모델을 사용하여 시료를 그룹에 할당

클래스 예측 분석은 새로운 시료를 사전에 결정된 그룹으로 분류할 경우 유용하게 사용할 수 있는 분석 방법입니다. 이 분석법은 특히 신약 개발에 있어서 화합물 파이프라인의 우선 순위를 정하고, 신약 개발 시 비용 절감을 위해 점점 중요시되고 있습니다. 또한 맥주와 와인 같은 복잡한 시료의 품질 관리에 사용됩니다. 시료는 이미 식별된 특정 물질을 사용한 예측 모델을 기반한 그룹에 할당됩니다.

Mass Profiler Professional은 SIMCA(soft independent modeling of class analogy), random forest, linear discriminant analysis, PLS-DA(partial least squares discriminant analysis), decision tree, support vector machine, naïve Bayes, neural network를 포함한 여러 분류 예측 알고리즘을 제공합니다. 분류 모델은 이러한 분류 예측 알고리즘 중 하나를 사용하여 구축됩니다. MassHunter Classifier 소프트웨어는 MassHunter Profinder에서 개발된 분석법과 MPP에 내장된 분류 모델을 사용하여 전체 시료 분류 워크플로를 자동화합니다.



Results View는 주성분 분석 플롯을 포함하며, 이 플롯에 모델 내의 서로 다른 계열에 대한 Hotelling 타원과 모델 내에서 시료 계열과의 유사성에 따른 테스트 시료의 위치가 나타납니다.

자동화된 시료 분류

MassHunter Classifier는 시료를 쉽게 분류할 수 있도록 Agilent MassHunter 소프트웨어 포트폴리오에 최근 추가된 제품입니다. 이 애플리케이션을 사용하여 사용자는 버튼 하나만 누르면 미지 시료의 분류 분석을 실행할 수 있습니다. 결과는 2D 및 3D PCA로 표시됩니다. 또한 출력을 PDF 형식의 보고서로 내보낼 수 있습니다.

내장된 화합물 식별

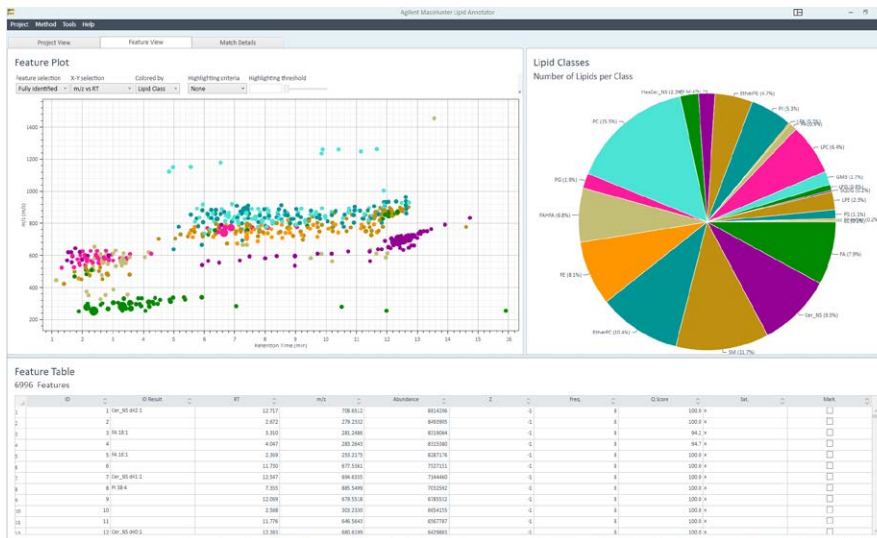
물질을 화합물로 변환하는 것은 분석 결과를 이해하는 핵심 단계입니다. LC/MS 및 GC/MS 등 사용하는 분석 기기에 따라 다르지만 화합물 식별에는 공개용 및 사설 스펙트럼 라이브러리나 데이터베이스를 검색하여 스펙트럼 패턴이나 정밀 질량 분자 이온을 최적의 머무름 시간 데이터와 매칭하여 식별 작업을 수행합니다. MPP에는 다음을 사용하여 식별을 용이하게 하는 통합 ID 브라우저가 포함되어 있습니다.

- LC/MS 개인 화합물 데이터베이스 및 라이브러리(Agilent METLIN 포함)
- GC/MS 라이브러리(NIST 및 Fiehn 라이브러리)

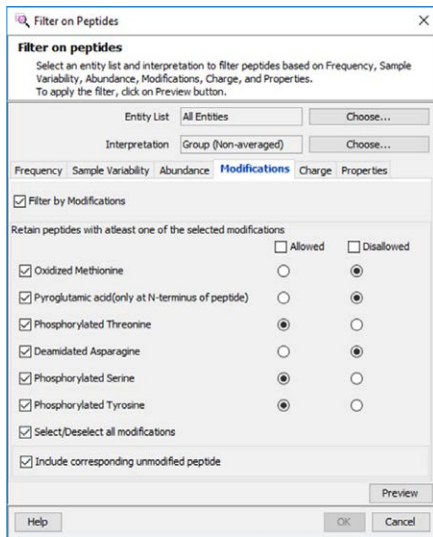
이러한 기능으로 MPP에서 화합물을 신속하고 간편하게 식별할 수 있습니다. 소프트웨어는 물질의 이름과 화합물 식별자에 자동으로 주석을 추가합니다.

지질체학 워크플로

지질체학에는 Agilent Lipid Annotator 소프트웨어와 MPP의 지질체학 실험 유형으로 해결되는 몇 가지 고유한 난제가 있습니다. Agilent Lipid Annotator 소프트웨어는 Agilent Q-TOF 또는 Ion Mobility Q-TOF 데이터에서의 지질 MS/MS 데이터에 신속하고 정확하게 주석을 추가하고 정확한 질량, 머무름 시간 데이터베이스를 생성합니다. 해당 지질 데이터베이스는 대규모 프로젝트에서 주석이 달린 MS 기능을 추출하고 결과를 MPP로 내보내는 데 사용됩니다. MPP 지질체학 실험 유형은 더 나은 상대 정량 정확도를 위해 지질 분류 기반 내부 표준물질 정규화를 지원하고 지질 특이적 시각화를 제공합니다.



Agilent MassHunter Lipid Annotator 소프트웨어는 배치 MS/MS 데이터 파일에 대한 지질 주석 결과의 높은 수준 및 세부 보기를 모두 제공합니다.



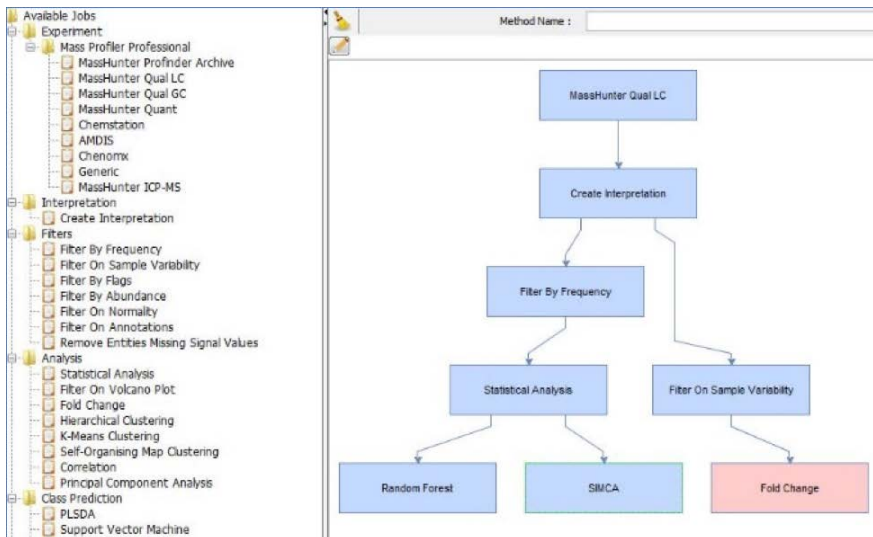
단백질체학 워크플로

상향식(bottom-up) 단백질체학에서는 펩타이드를 측정합니다. 그러나 관심의 대상이 되는 것은 단백질 수준의 차이입니다. MPP는 Agilent Spectrum Mill 소프트웨어를 사용한 발견 실험 결과 또는 워싱턴 대학교 MacCoss 그룹의 Skyline 소프트웨어를 사용한 표적 실험 결과를 가져오는 단백질체학 실험 유형을 제공합니다. 단백질체학 실험 유형을 사용하면 단백질 및 펩타이드 수준 모두에서 데이터 필터링이 가능합니다. 단백질 존재비는 각 단백질에 대해 식별된 펩타이드의 합계로 계산되며 필터링 후 다시 계산됩니다. 시료 그룹 간의 차이를 탐색하기 위해 펩타이드 수준 필터링을 이용하여 번역 후 변형을 연구할 수 있습니다.

MPP의 단백질체학 실험 유형은 번역 후 변형을 포함하여 다양한 펩타이드 특성을 기반으로 펩타이드 수준 필터링을 지원합니다.

분석법 자동화

Method Manager를 통해 사용자는 실험 생성, 정규화, 데이터 필터링, 통계 분석 등 분석 단계를 선택하여 분석법을 구축합니다. 분석을 위한 파라미터를 지정하지 않고도 분석법을 실행할 수 있습니다. 신규 사용자는 전문가가 이전에 생성한 프로세싱 method를 사용하여 교육 시간을 줄일 수 있습니다. 일관된 결과를 보장하고 오류를 최소화하기 위해 분석법을 반복적으로 사용하고 조직 전체에서 공유할 수 있으므로 데이터 분석에 필요한 전체 시간과 노력을 크게 줄일 수 있습니다.



Mass Profiler Professional에서의 **Method Manager**. 그리기 영역에는 실험, 데이터 필터, 통계 분석 옵션을 선택하여 생성된 분석법이 표시됩니다.

탁월한 계량분석화학(Chemometrics) 분석을 실현하는 애질런트 플랫폼

Mass Profiler Professional은 애질런트의 모든 질량 분석기에서 기기의 고유한 분석 기능을 최대한 활용할 수 있도록 디자인되었습니다. LC/TOF, LC/Q-TOF, LC/TQ, GC/Q-TOF, GC/TQ, GC/MSD 및 ICP-MS의 데이터를 지원합니다. 실험실에서 바이오마커, 바이오 연료, 농약 또는 석유 화학 물질을 분석 시, Mass Profiler Professional을 사용하면 질량 스펙트럼 데이터의 관련성을 완벽하게 파악할 수 있습니다.

자세한 정보

[https://www.agilent.com/ko-kr/
product/software-informatics/
mass-spectrometry-software/
data-analysis/mass-profiler-
professional-software](https://www.agilent.com/ko-kr/product/software-informatics/mass-spectrometry-software/data-analysis/mass-profiler-professional-software)

온라인 구매

www.agilent.com/chem/store

현지 애질런트 고객 센터 찾기

www.agilent.com/chem/contactus

미국 및 캐나다

1-800-227-9770

agilent_inquiries@agilent.com

유럽

info_agilent@agilent.com

아시아 태평양

inquiry_lsca@agilent.com

연구용으로만 사용하십시오. 진단 용도로는 사용하지할 수 없습니다.

RA45201.6419097222

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2019, 2023
2023년 10월 20일, 한국에서 발행
5990-4164KO

한국애질런트테크놀로지스㈜
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com

