

Agilent MassHunter Mass Profiler Professional 软件

探索复杂数据中关系的强大方法





专为安捷伦质谱数据等信息设计

欢迎使用 Agilent Mass Profiler Professional — 专为质谱数据设计的业内出众的化学计量学软件包

找出有意义的信息无异于大海捞针。Mass Profiler Professional (MPP) 结合了先进的处理功能以及强大的统计和数学模型来分析复杂的质谱数据集，让您可以轻松显示、分析、比较并分类数据组。所以，您不仅可以找到针，甚至可以描绘大海的特征。

统一的用户界面支持所有数据类型，可缩短培训时间、大大减少操作人员错误并显著提高实验室的分析效率。数据可以来自靶向实验，也可以来自发现实验。通用导入功能可为其他数据类型和供应商提供支持。



找到您要找的关系

Mass Profiler Professional 与 Agilent MassHunter 套装以及 Agilent OpenLab ChemStation 无缝集成，是需要确定样品组和变量间关系的所有质谱应用的理想选择，其中包括：

- 代谢组学
- 食品安全
- 蛋白质组学
- 环境
- 法医学
- 石油化工
- 毒理学
- 生物燃料

更深入了解数据的方法



统计分析化繁为简

Mass Profiler Professional 是用于质谱数据的综合性分析与可视化工具。该软件的设计通过提供不同的工作流程，来同时适应新用户和高级用户。新用户可以在引导式工作流程中使用预定义设置探索数据，而数据导入向导提供了为高级分析自定义选择参数的灵活性。Mass Profiler Professional 的统计工具包包括 T 检验、方差分析 (ANOVA)、模型构建算法、相关性和聚类分析等多种内置检验以及 R 算法的扩展功能。待执行的分析步骤可以使用方法自动化功能进行自动化。



MPP 功能简化了数据分析任务

一款软件中的所有这些强大工具可简化分析工作流程。

Mass Profiler Professional 强大的分析功能可充分发掘丰富的质谱数据信息。软件利用无监督（无预先组分配的分类）或监督（使用预分类组）分析的功能，让您：

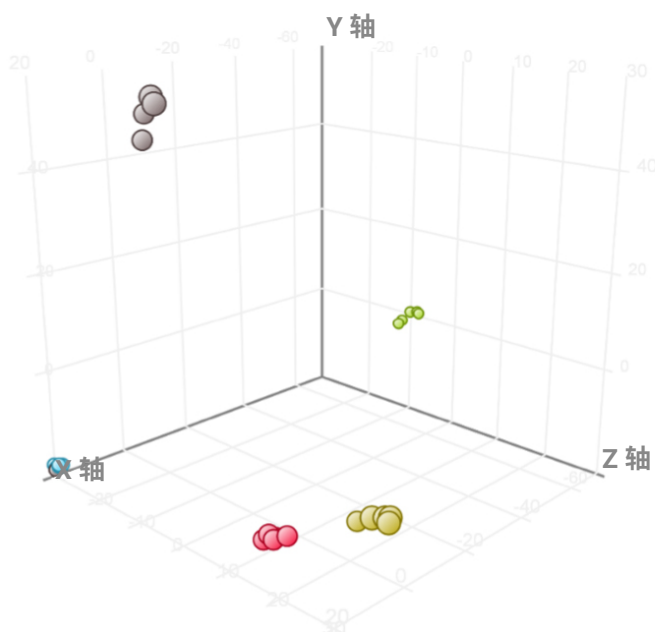
- 快速轻松地发现样品组之间的差异
- 绘制化合物丰度随时间的变化模式
- 开发用于分类预测的实用多元模型

先进的可视化工具让您以新的方式检查和注释结果 — 让您能够更高效地与数据交互。

发现数据中的重要差异

复杂样品及其显性特征是样品中存在的不同化合物之间丰度关系的结果。可以通过比较样品丰度曲线来探索这种现象，通常使用主成分分析 (PCA)，这是一种将复杂数据压缩为几个变量的数学方法。

PCA 用于以无监督的方式发现样品组之间的差异，从而确定组相关性，并衡量化合物对样品组区分的相对贡献。



生物学平行样品代谢物数据的主成分分析 (PCA) 显示几个品种苹果之间存在差异。

确定各组化合物的显著丰度差异

您观察到的数据是否具有统计学意义，或您能否观察到样品中正常偏差的结果？Student t 检验和方差分析 (ANOVA) 检验可找到两组或多组实验条件之间丰度存在差异的实体，来帮助您回答这个问题。

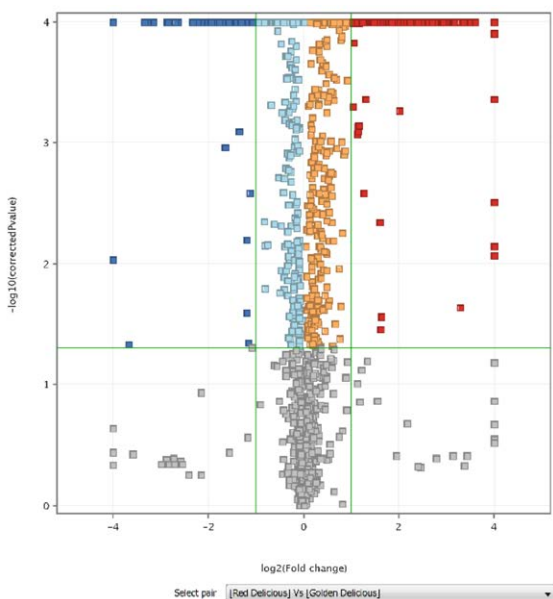
为了以有严格统计意义的方式找到这些目标实体，Mass Profiler Professional 提供了多种检验方式，包括：

Student t 检验和方差分析 (ANOVA) 检验

- 配对和非配对 Mann-Whitney 检验
- ANOVA：等方差和不等方差
- Kruskal Wallis 非参数单因素 ANOVA
- Friedman 非参数双因素 ANOVA
- 重复测量 ANOVA

多因素 ANOVA

- 总体错误率和假阳性率
- 多重检验校正
- 事后检验
- Tukey
- Student-Newman-Keuls



通过倍数变化分析展现差异

小样品组和采样不足的数据集可能导致统计 p 值的有效性存疑。在这种情况下，您可以使用倍数变化设置作为过滤器来查找两组之间的差异，并根据您对数据集的了解来评估这些差异的显著性。

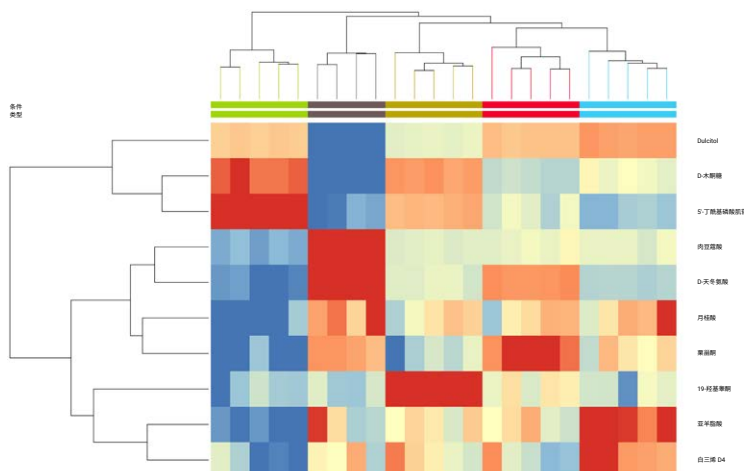
火山图功能允许您同时计算各质量实体的丰度倍数变化以及 p 值显著性。

“我们对研究代谢物之间的相关性很感兴趣。MPP 中的相关分析功能使我们能够及时实现这一目标。该功能可帮助我们发现代谢物之间的关系，从而快速确定通路上治疗效果。”

- Ricarda Fenske,
研究人员，澳大利亚研究委员会 (ARC) 植物能源生物学卓越研究中心，
西澳大利亚大学

用于查找隐藏关系的聚类数据

聚类分析根据质量实体丰度特征的相似性对其进行分组，允许您发现数据中最主要的模式。通过样品间的实体特征进行聚类分析，并对具有相似丰度特征的化合物进行分类，让您测试显示相似或镜像丰度特征的实体。这种类型的分析通常用于反映化学或酶促反应监测中底物-产物随时间变化的关系，结果可以揭示有趣的关系，因为在一组实验条件下表现出相似行为的实体可能具有相似的反应通路。Mass Profiler Professional 提供了广泛的聚类方法选择，包括 K 均值聚类、层次聚类和自组织图 (SOM)。

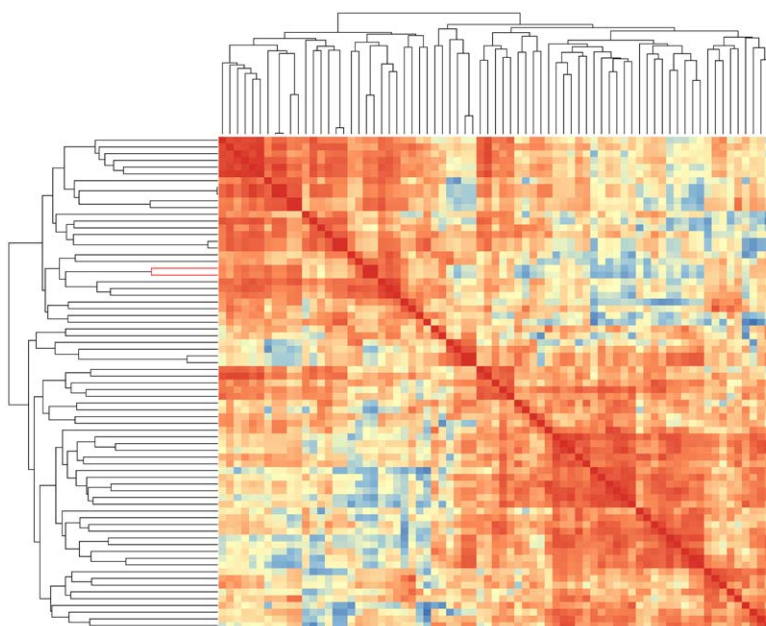


提高效率

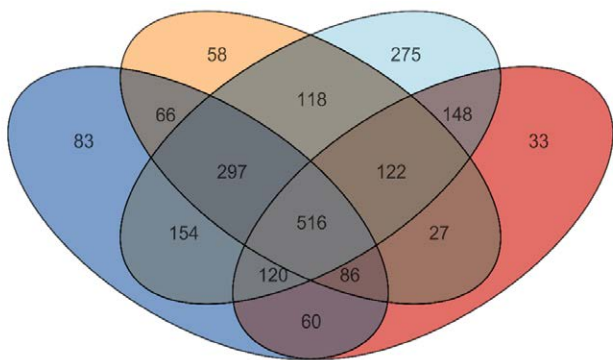
使用相关性分析了解两个变量关系的深度

研究人员希望在数据中轻松找到相关性。

- 与元数据（如性别、年龄、原产国、采样点.....）的相关性
- 实体间，包括交叉实验（蛋白-代谢物或 GC/MS vs LC/MS）
- 样品间相关性



相关性图相关性分析可识别正相关和负相关实体。该图像反映了来自苹果数据的实体之间的相关性。



文氏图

可以通过不同生物条件下唯一存在或共有的代谢物，来解释代谢活动。MPP 允许 N 路文氏图快速鉴定此类代谢物，并为所有下游分析创建首选代谢物列表。

不同品种苹果代谢物数据的文氏图。该图显示了特定品种中唯一存在的代谢物数量以及多个品种苹果中共有的代谢物数量。

R 脚本兼容性

R 脚本可以在 Mass Profiler Professional 中运行，以进一步扩展并定制统计分析和可视化功能。在标准化和相关性分析过程中，可以使用预装 R 脚本运行分析。某些预装 R 脚本中包括用于批次效应校正的 COMBAT 和用于相关性分析的 Kendall 秩检验。

Pathway Architect

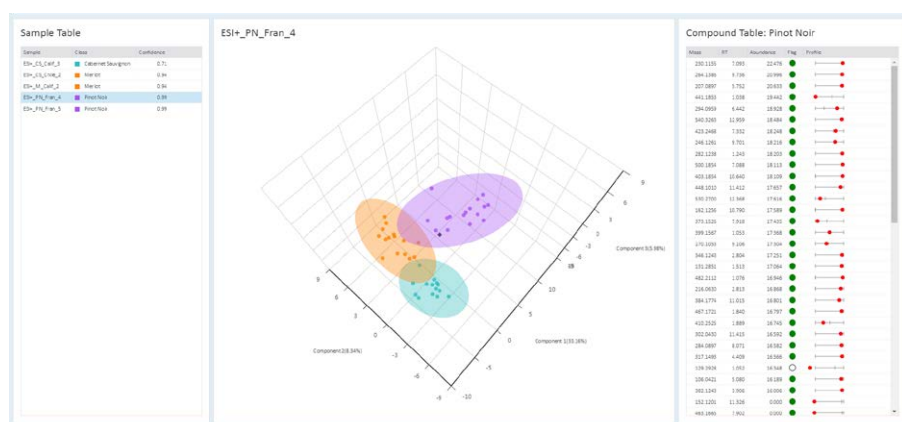
Mass Profiler Professional 的 Pathway Architect 模块可执行单组学分析或多组学联合分析。这样，您可以在通路数据库中搜索化合物列表，来发现受影响的通路。将实验数据投射到这些通路上，便于您查看、缩放、过滤并突出显示结果。您也可以导出通路导向分析的列表。Pathway Architect 通过 WikiPathways 支持通路内容。

此外，用户能够以类似 BioPAX 的标准格式导入自己的通路。这些通路来源能够确保研究人员进行的是前沿的通路分析，灵活地增进自己的理解。

使用预测模型将样品分配到组

当您的长期目的是以无干扰的方式将新样品预测到先前确定的组中时，分类预测分析是一种实用技术。在优先考虑化合物管道和避免药物开发中代价高昂的失败方面，它的价值日益突出。这项技术也可用于啤酒和葡萄酒等复杂样品的质量控制。根据使用某些已确定实体的预测模型，将样品分配到组中。

Mass Profiler Professional 提供了几种分类预测算法，包括簇类独立软模式法 (SIMCA)、随机森林法、线性判别分析、偏最小二乘判别分析 (PLSDA)、决策树、支持向量机、朴素贝叶斯和神经网络。这些分类预测算法中的任何一种都可用于构建分类模型。内置 MassHunter Classifier 软件，利用 MassHunter Profinder 中开发的分析方法和 MPP 中内置的分类模型，自动化进行整体样品分类工作流程。



结果视图包括主成分分析图，其显示了模型中不同类别的霍特林 (Hotelling) 椭圆以及测试样品的位置 (表明其与模型中样品类别的相似性)。

自动化样品分类

MassHunter Classifier 是 Agilent MassHunter 软件产品组合的最新成员，可轻松实现样品分类。该应用程序让用户只需按一个按钮即可运行未知样品进行分类分析。结果以 2D 和 3D PCA 图表示。此外，输出结果可导出为 PDF 格式的报告。

内置化合物鉴定

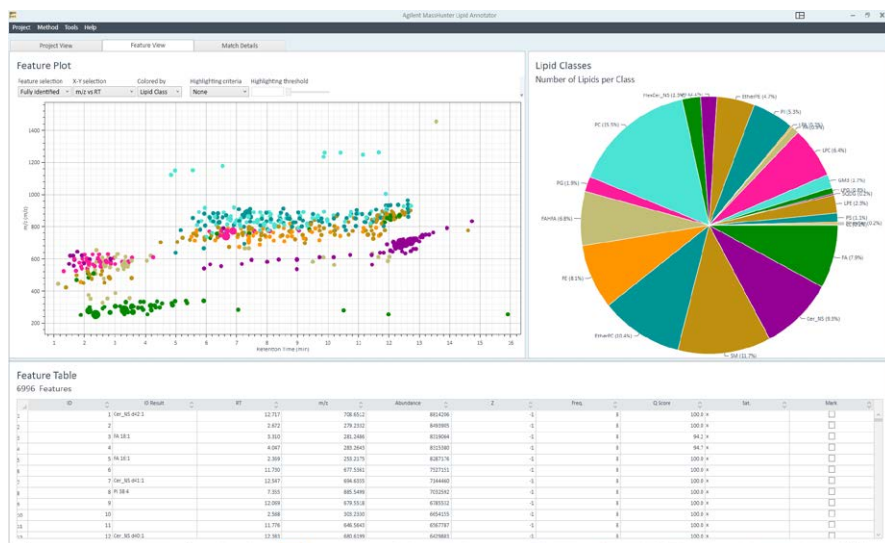
将实体转换为化合物是理解分析结果的关键步骤。根据您的分析技术（LC/MS 或 GC/MS），将光谱模式或精确质量的分子离子与公共和私人谱库或数据库中的可选保留时间数据进行匹配，来实现鉴定。MPP 包括集成的式 ID 浏览器，便于通过以下方式进行鉴定：

- LC/MS 个人化合物数据库与谱库（包括安捷伦 METLIN）
- GC/MS 谱库（NIST 和 Fiehn 谱库）

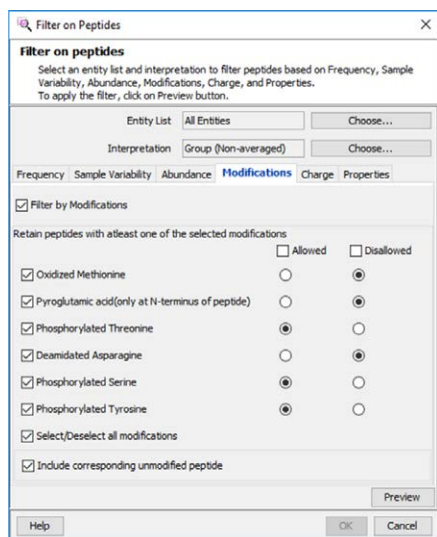
这意味着您可以在 MPP 环境中快速轻松地鉴定化合物。软件可自动标注实体的名称和化合物标识符。

脂质组学工作流程

脂质组学有一些独特的挑战，可用 Agilent Lipid Annotator 软件和 MPP 中的脂质组学实验类型来解决。Agilent Lipid Annotator 软件可从安捷伦 Q-TOF 或离子淌度 Q-TOF 数据中快速准确地标注脂质 MS/MS 数据，并创建精确质量、保留时间数据库。该脂质数据库可用于从大型项目中提取标注的 MS 特征，并将结果导出至 MPP。MPP 脂质组学实验类型支持基于脂质类别的内标归一化，以获得更好的相对定量准确度，并实现脂质特异性可视化。



Agilent MassHunter Lipid Annotator 软件为批量 MS/MS 数据文件的脂质标注结果提供了高级视图和详细视图。



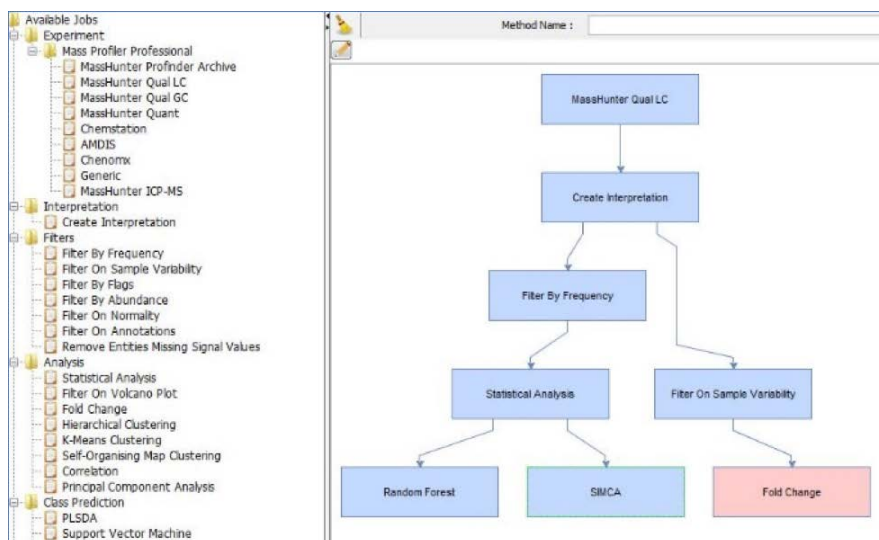
蛋白质组学工作流程

在自下而上的蛋白质组学研究中测定肽，而令人感兴趣的是蛋白质水平的差异。MPP 提供了一种蛋白质组学实验类型，从使用 Agilent Spectrum Mill 软件的发现实验或从华盛顿大学 MacCoss 团队使用 Skyline 软件的靶向实验中导入结果。蛋白质组学实验类型允许在蛋白质和肽水平进行数据过滤。蛋白质丰度以各蛋白质鉴定出肽的总和来计算，过滤后需要重新计算。可使用肽水平过滤研究翻译后修饰，以探索样品组之间的差异。

MPP 中的蛋白质组学实验类型支持基于多种肽特性的肽水平过滤，包括翻译后修饰。

方法自动化

Method Manager 允许用户通过选择分析步骤构建方法，包括实验创建、归一化、数据过滤和统计分析。方法可以在不指定分析参数的情况下运行。新用户可使用专家之前创建的处理方法，以缩短学习过程。一个方法可重复使用，也可以在组织内共享，以确保结果一致并尽可能减少误差，从而显著减少数据分析所需的总体时间和工作量。



Mass Profiler Professional 中的 **Method Manager**。

绘图区域显示了通过选择实验、数据过滤器和统计分析选项创建的方法。

增强任何安捷伦平台的化学计量学分析性能

无论您实用哪款安捷伦质谱仪，Mass Profiler Professional 的设计都可以让您充分利用仪器的独特分析能力。它支持来自 LC/TOF、LC/Q-TOF、LC/TQ、GC/Q-TOF、GC/TQ、GC/MSD 和 ICP-MS 的数据。无论您的实验室在分析生物标志物还是生物燃料、农药还是石化产品，这款软件都可以让您充分探索质谱数据内的关系。

了解更多信息：

www.agilent.com/chem/MPP

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：800-820-3278，

400-820-3278（手机用户）

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

仅供科研使用。不用于临床诊断用途。

RA45201.6419097222

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2019，2023
2023 年 10 月 20 日，中国出版
5990-4164ZHCN

