

# LC/GC/CE-MS用 多変量解析ソフトウェア Reifycs Signpost™ MS

Reifycs Signpost™ MSは、液体クロマトグラフィー (LC), ガスクロマトグラフィー (GC), キャピラリー電気泳動 (CE)により分離され質量分析装置により検出されたイオン強度をもとに、各分子の検出位置およびその抽出量を算出し、質量分析による多変量解析を実現します。

バイオマーカー探索(プロテオミクス・メタボロミクス)、薬物動態、不純物同定などで必要とされる分析サンプル間、またはサンプル群間における違いの検出をはじめとした幅広い用途にお使いいただけます。



図1) 分子スポットデータ抽出：分子スポット(分子位置、抽出量)を算出しサンプル間でアライメントを実施

## 多変量データ抽出とアライメント

本プログラムでは、質量分析装置より得られる分析結果のRawデータを直接読み込み\*1、同一分子を示すピーク群を溶出形状から推定することで分子スポットを抽出します(スポットディテクション)。次にスポットの位置より分析サンプル間をアライメントし、スポット中のピークのイオン強度(ピーク高)を積分またはピーク高の最大値で近似した各分子の抽出値を用いて、サンプル間における分子の量的差異を求める解析データを作成します。(図1参照)

アライメントでは、溶出時間(RT)を中心にサンプル間でスポット位置を補正します。アライメントされたスポットをインターフェースで確認することにより多変量解析に利用すべき有用な分子を絞り込み、より精度の高い解析結果を得ることが可能です。

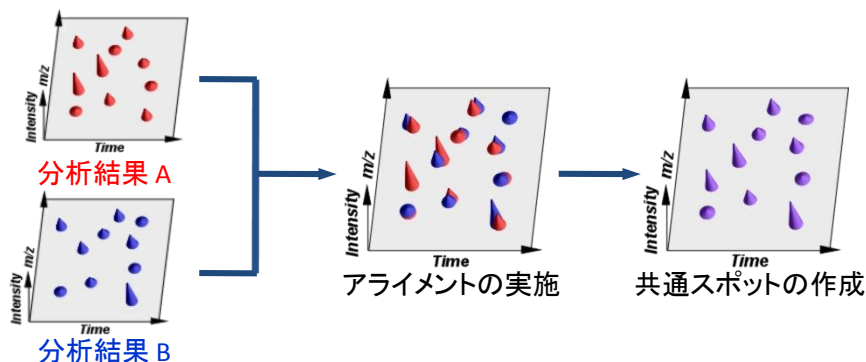


図2) 分子スポットの特定(スポットディテクション)とアライメント(概念図)

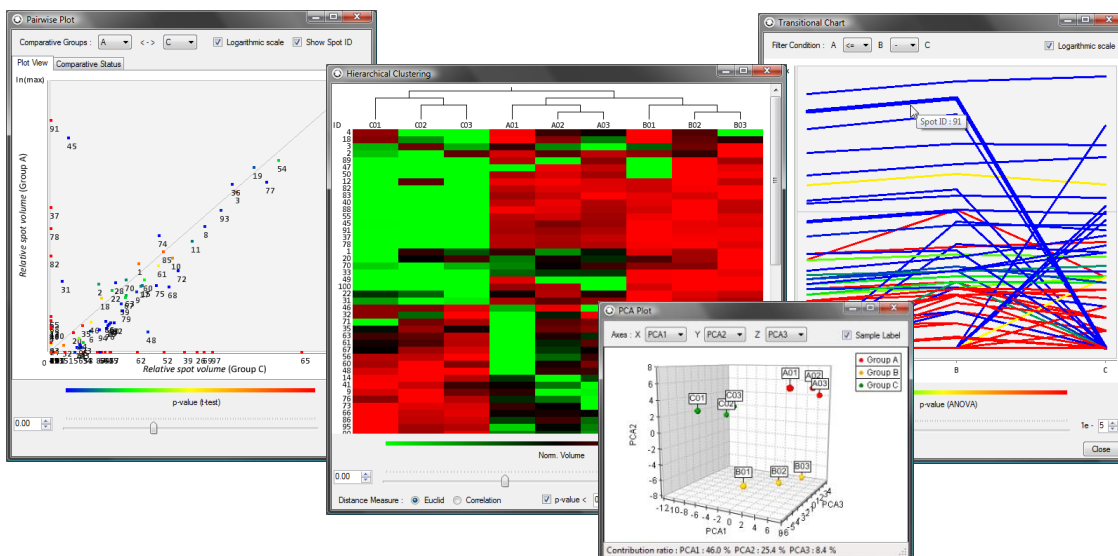


図3) 多変量解析ツール: スキャタープロット(2群比較)、階層クラスタリング、主成分分析(PCA)など標準装備

## 簡便な多変量解析ツール

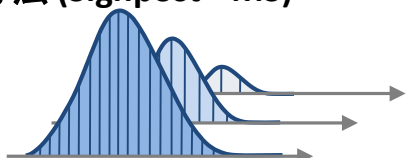
スポットディテクションおよびアライメントを行った分析データはスポットごとに位置情報ならびに抽出値を持ち、テーブルとしてまとめられます(図1参照)。このデータをもとに、スキャタープロット(2群比較)、階層クラスタリング、主成分分析(PCA)、変動チャートなどを作成可能です(図3参照)。

また、スポットごとにまとめられたテーブルデータをExcel\*2やCSV形式へ書き出すことでお使いの統計解析、またはデータマイニングなどの専用ソフトウェアにてより詳細なデータ解析が可能になります。

## 他のスポット抽出法との比較

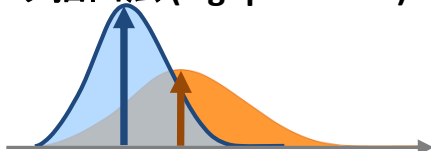
	積分法(Signpost™ MS)	ピーク抽出法(Signpost™ MS)	画像処理法
概要	分子のイオン強度を累計	分子の代表ピークを抽出	2次元画像として処理
抽出対象	体積(3次元:強度積分)	単一ピーク(1次元)	面積(2次元+色調)
抽出精度	スキャン速度, S/Nに依存	クロマトグラムの安定性に依存	色調数に依存
データ処理量	大	小	大

### 積分法 (Signpost™ MS)



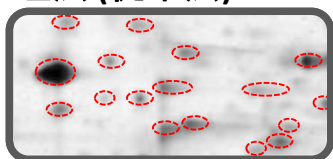
同一分子由来と考えられるピーク群を溶出形状から推測し、同一分子由来のピークのイオン強度を積分することで分子の抽出量を体積として計算する方法。抽出分子数はS/Nに影響。

### ピーク抽出法 (Signpost™ MS)



同一分子由来と考えられるピーク中の最も大きいイオン強度(ピーク高)を分子の代表値として近似する方法。データ量が少なく解析が容易だが、溶出の測定間変動が抽出精度に影響。

### 画像処理法 (従来法)



RT - m/z 平面にイオン強度に合わせた色調で分析データを射影し、分子スポットを検出する方法。イオン強度と色階調数の分解能の違いが、抽出精度に影響。

\*1 対応可能な質量分析装置については、お問い合わせください。

\*2 ExcellはMicrosoft社の商標です。また、本製品ではExcel形式(.xls)へ対応しております。

記載された情報は2011年7月現在のものであり、インターフェースおよび仕様など予告無く変更する場合があります。

開発元・販売会社

ライフィクス株式会社

〒105-0003 東京都港区西新橋1-6-12 アイオス虎ノ門 10階

TEL : 03-6268-8995 FAX : 03-6268-8996

URL : <http://www.reifycs.com> E-mail : [sales@reifycs.com](mailto:sales@reifycs.com)