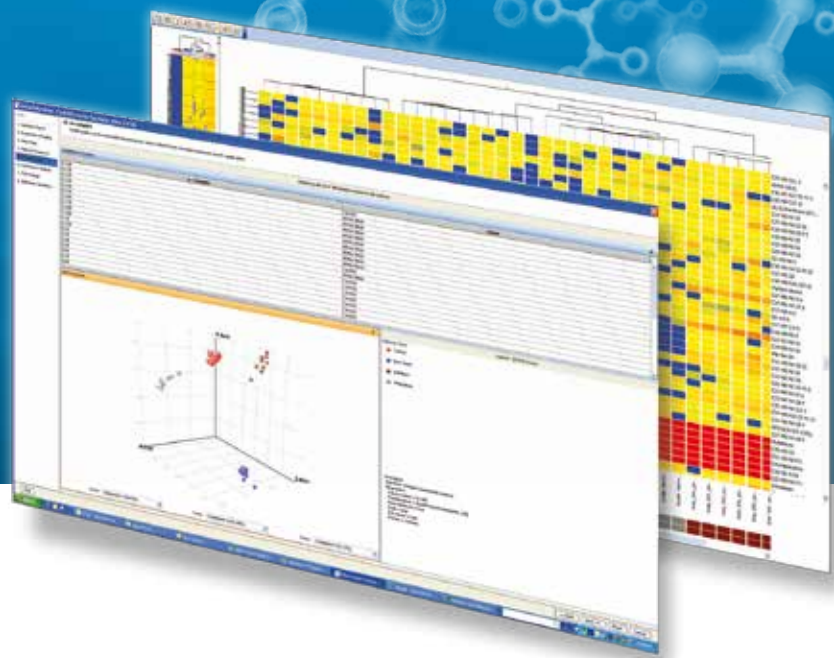


복잡한 질량 분석 데이터를 효율적으로 분석할 수 있는 강력한

Agilent Mass Profiler Professional 소프트웨어

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

서로 다른 질량 분석 스펙트럼 데이터 간의 관계를 식별하는 가장 신속하고 간편한 방법

Agilent Mass Profiler Professional 개요 – MS 데이터 전용으로 설계된 유일한 계량분석화학 (Chemometrics) 소프트웨어 패키지

단 1회의 MS 실험만으로 수백~수천 킬로바이트 단위의 데이터가 만들어집니다. 이러한 데이터에서 유의미한 결과를 찾는다는 것은 마치 건조 더미에서 바늘 한 개를 찾는 것과 같이 매우 어려운 일입니다. 고급 데이터 처리 기능과 강력한 통계 및 수학적 모델이 결합된 Mass Profiler Professional 소프트웨어를 사용하면, 복잡한 MS 데이터 세트에서 시료 그룹을 쉽게 분류, 비교 및 분석할 수 있습니다. 따라서 바늘 한 개를 찾을 수 있을 뿐만 아니라 건조 더미의 특성까지도 파악할 수 있습니다.

GC/MS, LC/MS, CE/MS 및 ICP-MS – 모든 분석 장비를 위한 하나의 소프트웨어

Mass Profiler Professional은 견고한 독립형 소프트웨어 솔루션으로 GC/MS, LC/MS, CE/MS 및 ICP-MS를 포함한 다양한 유형의 애질런트 질량 스펙트럼 데이터를 처리할 수 있습니다. 예를 들어 서로 다른 유형의 GC/MS와 LC/MS 실험을 단일 프로젝트로 분석할 수 있습니다.

공통된 사용자 인터페이스에서 모든 데이터 유형이 처리되므로 교육 시간이 단축되고 운영 오류가 최소화되어 실험실의 생산성이 현저하게 높아집니다.

실험실의 다양한 분석 요구에 부합하는 Agilent 솔루션 활용 분야

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

- 대사체학
- 식품 안전성
- 법의학
- 석유 화학
- 단백질체학
- 환경
- 독성학
- 바이오 연료

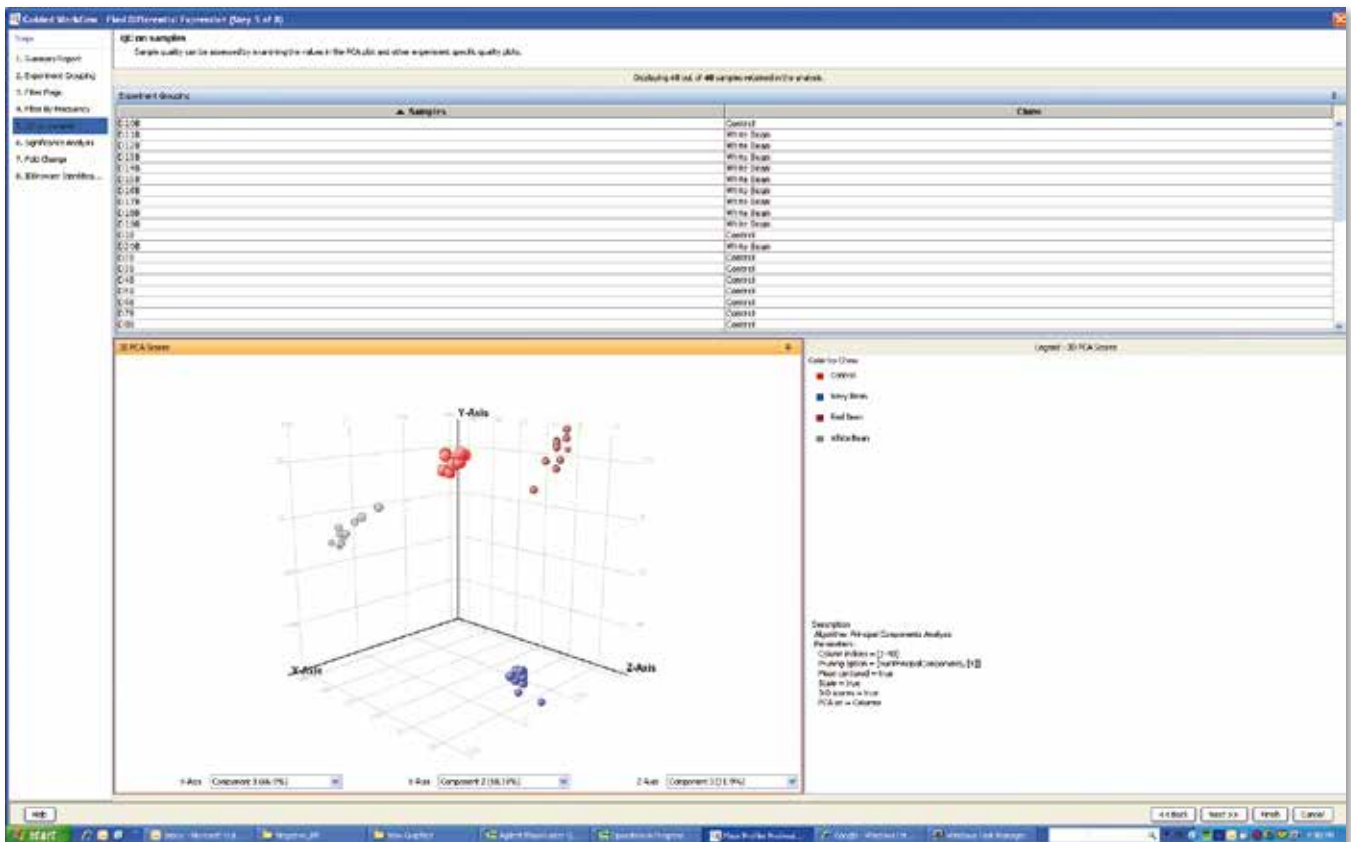


통계 전문가가 아니라도 얻을 수 있는 정확한 결과

Mass Profiler Professional은 질량 데이터 분석용으로 디자인된 소프트웨어입니다. 매우 강력한 통계 패키지가면서도 간편하고 직관적인 검색이 가능합니다. 처음 사용해 보는 사용자라도 데이터 유형 및 실험 조건에 대한 정보에 기초하여 사전에 정의된 단계로 제공되는 워크플로 가이드 기능을 사용하면 기본적인 분석을 신속하고 간편하게 수행할 수 있습니다.

또한, 전문가를 위해서는 고급 워크플로가 제공되어 데이터 불러오기 및 필터링, 표준화 및 표준 통계 방법을 기초로 하는 포괄적 분석 기능과 시각화 기능을 포함한 정확한 결과를 위해 필요한 모든 기능을 갖추고 있습니다. 모든 분석 도구는 마법사 방식으로 동작하며 기본 매개 변수(맞춤형 설정 가능)를 이용해 분석 시 최고의 유연성을 보장받을 수 있습니다.

Mass Profiler Professional의 고유한 재귀 분석(recursive analysis) 기능을 활용하면 기초 데이터에 기반하여 데이터 세트를 간편하게 재검증할 수 있어, 통계 분석 결과의 정확성을 더욱 향상시킬 수 있습니다. 또한, Q-TOF MS/MS 분석용 함유물 목록을 내보내고, 결과를 다시 Mass Profiler Professional로 쉽게 불러올 수 있습니다.



워크플로 가이드 기능을 사용하면 데이터 분석 작업을 단순화시킬 수 있습니다. 모든 분석 도구는 마법사 방식으로 동작하며 기본 매개 변수(맞춤형 설정 가능)를 이용해 분석 시 최고의 유연성을 보장받을 수 있습니다.

데이터를 더욱 깊이 이해할 수 있는 방법

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.

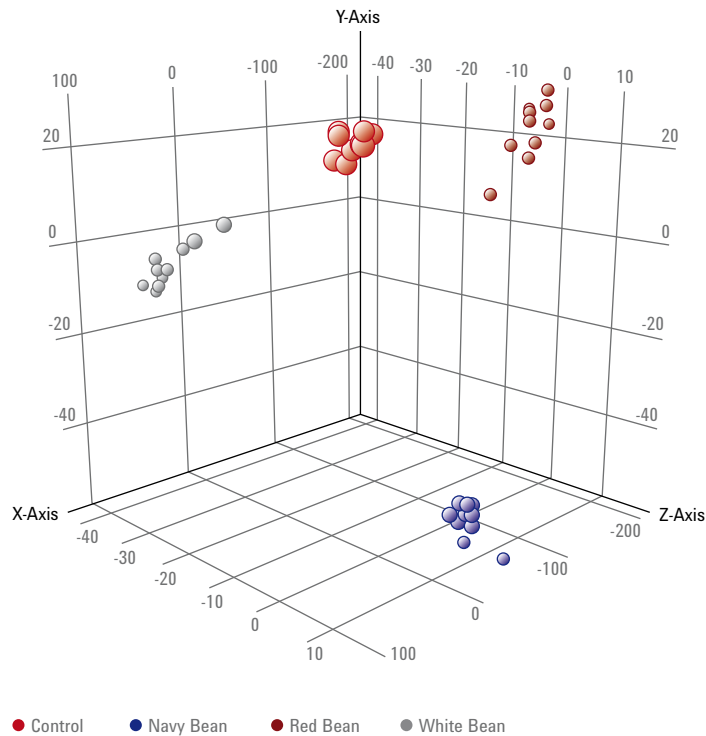
- 시료 그룹 간 차이를 신속하고 간편하게 찾을 수 있습니다.
- 시간에 따라 변하는 화합물 존재비를 도표화(plot)할 수 있습니다.
- 클래스 예측에 유용한 다변수 모델을 개발할 수 있습니다.

고급 시각화 도구(Advanced Visualization Tool)를 사용하면 새로운 방식으로 결과를 검증하고 분석하는 것이 가능합니다. 이를 통해 분석 결과에 대한 이해를 더욱 효율적으로 할 수 있을 뿐만 아니라, 데이터를 더욱 깊이 파악할 수 있습니다.

데이터의 중요한 화학적 차이를 발견

복잡한 화학 시료에서 관찰할 수 있는 반응과 특징은 다양한 화학 구성요소의 존재비 차이로 발생하는 것입니다. 이러한 반응과 특징은 시료 중의 각 화합물의 존재비 프로파일을 비교하여 관찰할 수 있으며 일반적으로 복잡한 데이터를 적은 변수로 압축하는 수학적 방법인 PCA(Principal Component Analysis)가 사용됩니다.

PCA는 사전 조건이 없는 분석 방법으로 시료 그룹 간 차이를 찾고, 그룹 연관성을 이해하고, 그룹 분리에 있어서 화합물의 상대적 역할의 검증에 사용됩니다. Mass Profiler Professional에는 시료 그룹 간 차이를 설명할 수 있는 가장 중요한 화합물을 찾도록 고안된 Find Minimal Masses 알고리즘이 포함되어 있습니다.



생물학적 복제 시료의 대사체 데이터의 PCA(Principal Component Analysis)에 의해서 쥐의 먹이로 사용한 Red Bean, White Bean 및 Navy Bean의 차이를 밝힐 수 있습니다.

물질들 간 숨겨진 관련성을 찾기 위한 데이터 클러스터링

클러스터링으로 존재비 프로파일의 유사성에 기초해 질량 물질을 그룹화하면 데이터 내에 존재하는 가장 현저한 패턴을 찾을 수 있습니다.

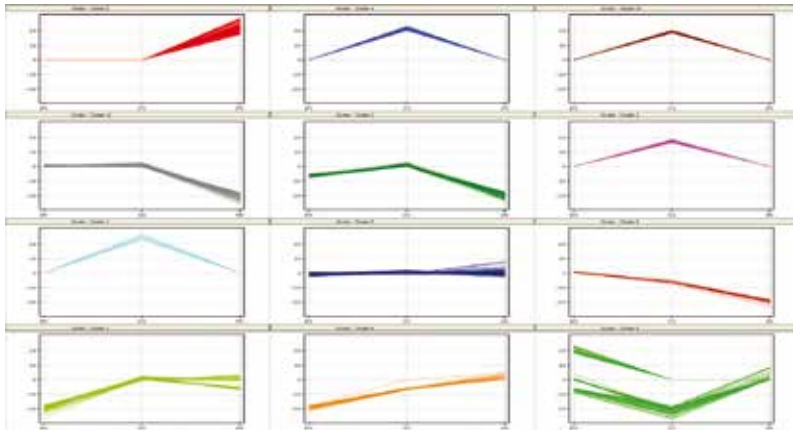
시료 간 물질 프로파일을 바탕으로 하는 클러스터링 분석에서는 존재비

프로파일을 갖는 화합물을 유사성에 따라 분류하고, 유사하거나 미러 이미지 (mirror image)식으로 존재비 프로파일을 보이는 물질을 찾을 수 있습니다. 이런 유형의 분석은 시간 경과에 따른 화학 반응이나 효소 반응 모니터링에서 기질과 생성물의 관련성을 시각화하는

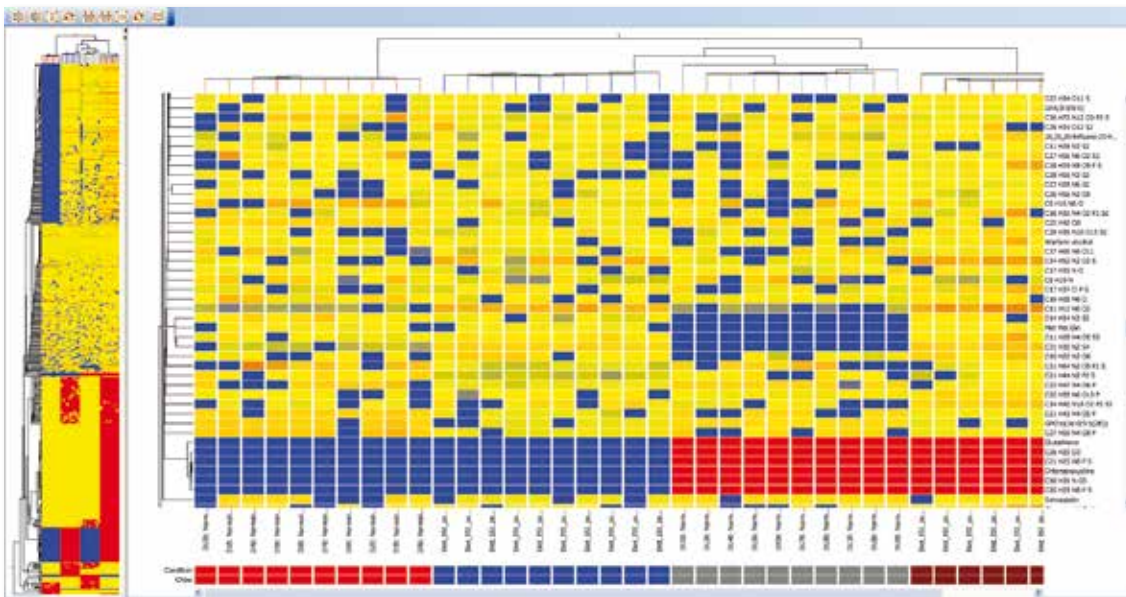
데 주로 사용합니다. 여러 실험 조건에서 비슷한 결과를 나타내는 물질은 비슷한 반응 경로를 가질 수 있으므로 흥미로운 관계가 밝혀질 수 있습니다.

Mass Profiler Professional은 다음을 포함한 광범위한 클러스터링 분석법을 제공합니다.

- K-means 클러스터링
- 계층적 클러스터링
- 자기 조직화 지도(Self Organizing Map, SOM)



K-means 클러스터링 분석에서는 물질을 임의로 할당된 클러스터에 고정 수(k)로 분류합니다. 같은 클러스터 내의 물질/조건은 비슷해지고 다른 클러스터와는 물질/조건이 달라집니다.



계층적 클러스터링은 유사한 존재비 프로파일을 하나의 트리 구조 그룹으로 연결합니다. 위 계통도의 한 축에는 대사체 간의 관련성이 다른 축에는 시료 간의 관련성이 표시됩니다. 이 예제는 서로 다른 콩 보충제를 포함한 쥐의 먹이에 대해서, 반복 분석한 시료의 존재비 프로파일이 유사성을 가진다는 것을 나타냅니다.

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.

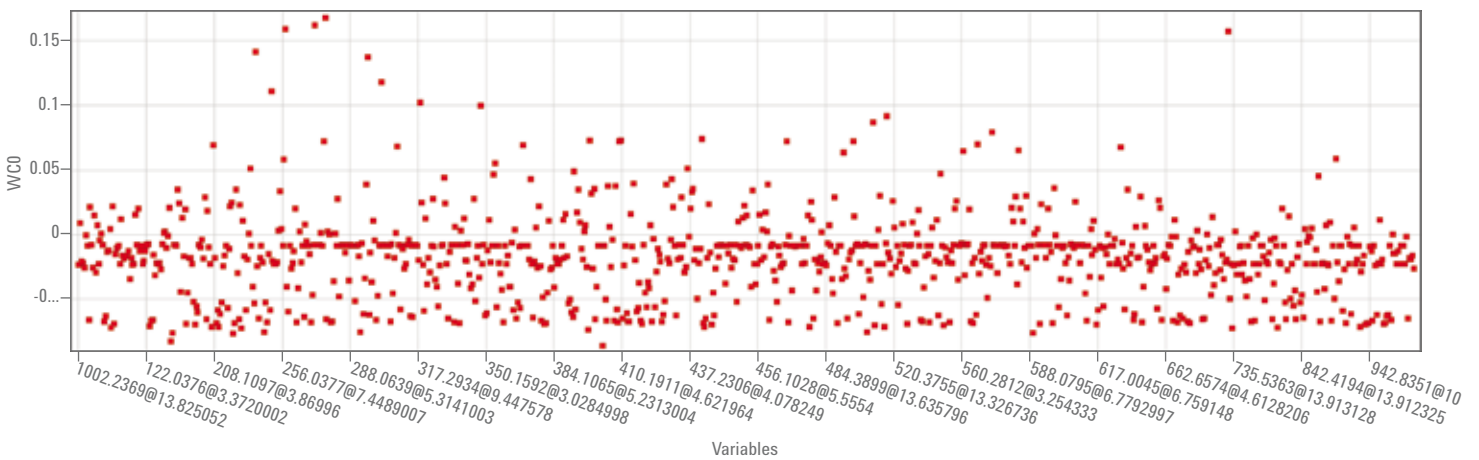
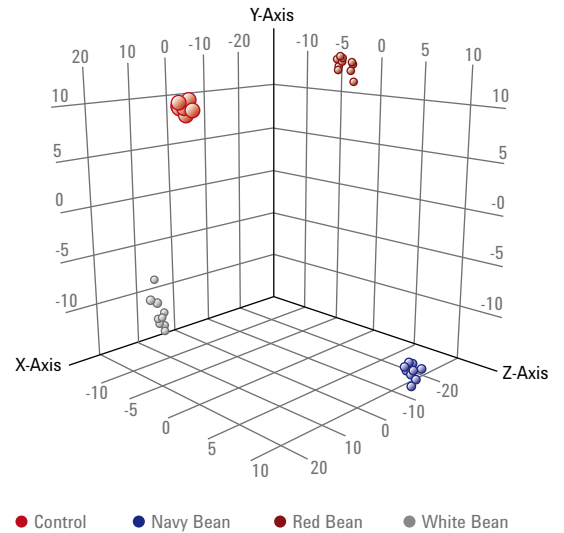
시료를 그룹화하여 나누는 것은 예측 모델에 기반합니다. 클래스 예측 분석에서는 그룹 내에 어떤 물질이 해당 그룹을 정의하는 것이 아니라 예측 모델을 사용해서 이미 식별된 특정

물질을 기반으로 분류를 결정합니다.

Mass Profiler Professional은 다음과 같은 다중 클래스 예측 알고리즘을 제공합니다.

- 부분 최소 2승법 판별 분석(Partial Least Squares Discriminant Analysis, PLSDA)
- 의사 결정 트리(Decision Tree)
- 지지 벡터 머신(Support Vector Machine)
- 단순 베이지어 곡선(Naïve Bayes)
- 신경망(Neural Network)

메뉴에서 선택 가능한 마법사 기능은 예측 모델을 구축 및 실행하고, 사용할 물질 목록, 분석 유형 및 적용할 알고리즘을 선택하는 순차적인 프로세스로 가이드합니다.



클래스 예측 분석, 클래스 예측 알고리즘(이 경우 PLSDA)을 사용한 분석 결과가 생성되고 시료의 t-스코어 도표(상단 이미지)와 물질 목록의 각 질량에 대한 로딩 도표(하단 이미지)의 형태로 분류 결과를 시각적으로 표시합니다.

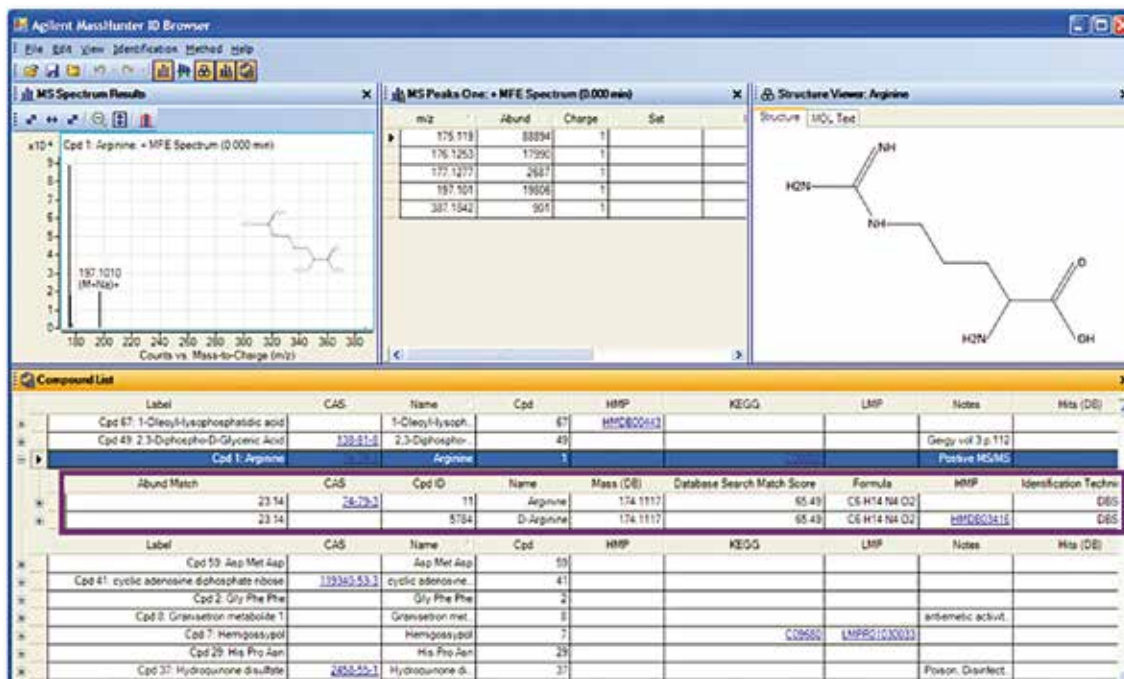
데이터베이스와 스펙트럼 라이브러리 검색을 자동화하는 내장 ID BROWSER

실험 도중에 분석 결과를 파악하기 위해 물질 목록에서 화합물을 검색하고, 관찰된 차이에 관계된 화학 물질을 식별해야 하는 경우가 생길 수 있습니다. LC/MS 및 GC/MS 등 사용하는 분석기기에 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.

Mass Profiler Professional에는 MassHunter의 정성 분석 기능을 이용한 통합 ID Browser가 포함되어있으며, 아래의 기술과 결합하여 화합물 식별을 간편하게 합니다.

- LC/MS Personal 화합물 데이터베이스 (METLIN, 농약, 법의학)
- GC/MS 라이브러리(NIST 및 Fiehn 라이브러리)
- 애질런트의 Molecular Formula Generator(MFG) 알고리즘을 사용한 조성식 계산

이러한 기능으로 Mass Profiler Professional에서 화합물을 신속하고 간편하게 식별할 수 있습니다. 이 소프트웨어는 각 물질 목록에 대한 주석을 자동으로 추가하며, 다양한 시각화 도구 및 경로 분석 도구 옵션에 화합물 이름이 표시됩니다.

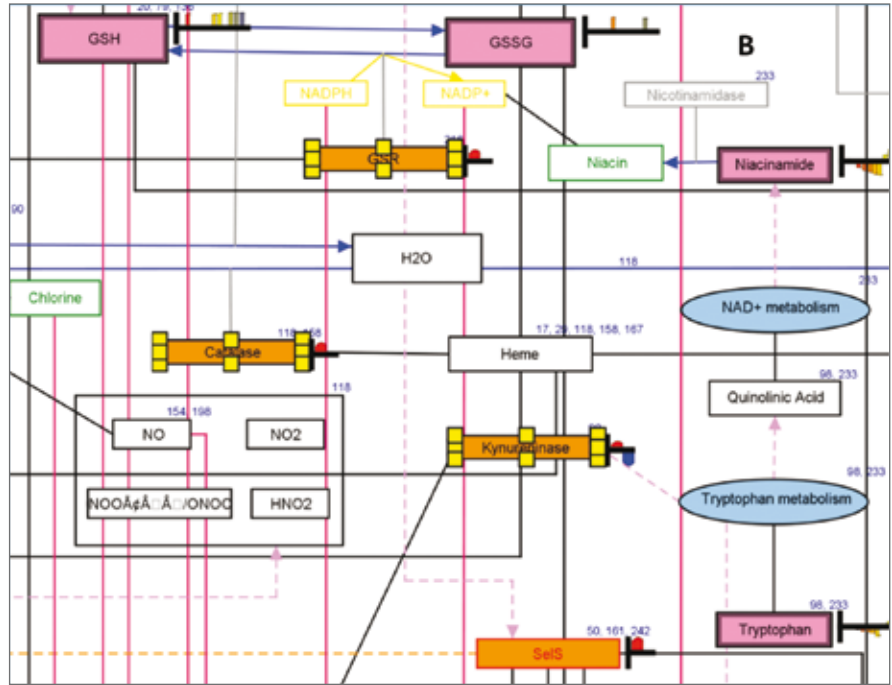


MassHunter ID Browser는 Mass Profiler Professional에서 생성된 물질 목록을 사용하여 화합물을 식별합니다. 위 예에서는 질량 174.1117을 METLIN 데이터베이스에서 검색한 결과, 이 성분은 아르기닌이라는 것이 판명되었습니다. 이 외에도 분자식, 데이터베이스 매치 스코어, 화합물 이름, KEGG 및 CAS ID도 표시됩니다.

Pathway Architect(경로 분석)

Mass Profiler Professional의 경로 분석 모듈은 단일 omics 분석 및 통합된 복합 omics의 분석 환경을 제공하며, 화합물 목록을 데이터베이스에서 검색하여 영향을 받는 경로를 찾아냅니다.

이러한 경로에 실험 데이터가 반영되어 결과 확인, 확대/축소, 필터링, 강조 표시를 할 수 있습니다. 그리고 이를 통해 경로의 직접 분석을 위한 대사체, 단백질 및 유전자 목록을 내보낼 수 있습니다.



경로에서 다르게 표현되는 일부 대사체 및 유전자(노란색 사각형)를 강조한 상세 확장도



시료 클래스 예측

Mass Profiler Professional을 사용하면 클래스 예측 모델을 생성할 수 있습니다. 이 모델은 독립형 유틸리티인 SCP(Sample Class Predictor)를 사용하여 실행할 수 있으며, Agilent MassHunter 또는 Agilent OpenLAB ChemStation Edition에서 데이터를 수집 및 처리할 수 있습니다. 예를 들어, 특정 와인이 프랑스산 인지, 이탈리아산 인지를

판단할 수 있는 시료 클래스 예측 보고서 작성도 가능합니다.

R 스크립트 호환성

통계 분석 기능과 시각화 기능을 더욱 확장하고 맞춤형으로 사용하기 위해 Mass Profiler Professional에서 R 스크립트를 실행할 수 있습니다.



탁월한 계량분석화학(CHEMOMETRICS) 분석을 실현하는 애질런트 플랫폼

다양한 응용 분야에 적용할 수 있는 질량 분석 솔루션

Mass Profiler Professional은 애질런트의 모든 질량 분석기에서 기기의 고유한 분석 기능을 최대한 활용할 수 있도록 디자인되었습니다. 실험실에서 바이오마커, 바이오 연료, 농약 또는 석유 화학 물질을 분석 시, Mass Profiler Professional을 사용하면 질량 스펙트럼 데이터의 관련성을 완벽하게 파악할 수 있습니다.

Agilent TOF 및 Q-TOF LC/MS

빠른 데이터 수집 속도, 우수한 질량 정확도 그리고 안정된 성능

Agilent TOF와 Q-TOF 시스템은 최상의 중요성을 가지는 과학 분야에서 요구되는 수준의 데이터 품질과 고급 분석 기능을 제공합니다. 혁신적인 Ultra High Definition Q-TOF 기술을 사용하는 Agilent TOF와 Q-TOF 시스템은 데이터 수집 속도, 질량 범위 및 질량 분해능을 그대로 유지하면서도 업계 최고의 질량 정확도, 측정 범위 (dynamic range) 및 감도를 실현합니다.



Agilent Triple Quadrupole LC/MS

일반 분석에서 우수한 감도와 정량 분석 결과 제공

Agilent Triple Quadrupole LC/MS 제품군에는 일반 분석에서도 sub-femtogram 수준의 감도를 제공하는 뛰어난 분석 기능과 탁월한 견고성 및 작동 편리성이 결합되어 있습니다. 단 30 ms의 속도로 양이온 모드에서 음이온 모드로 전환되기 때문에 UHPLC에서 생성되는 1초의 피크 폭에도 완벽히 적용 가능하여 복잡한 혼합물 분석 시 유연성이 향상됩니다. Dynamic MRM(dMRM)을 사용하면 타임 세그먼트 (time segment) 없이 최대 4천 종의 화합물을 정량 분석할 수 있습니다.





Agilent GC/MS

업계 최고 성능과 생산성 및 뛰어난 신뢰성

애질런트는 공전의 성공을 기록한 Agilent GC/MS를 기반으로 최신 Agilent GC/MSD를 개발하여 검출 한계를 더욱 낮추었습니다. Agilent GC/MSD의 강력한 분석 기능을 사용하면 실험실의 생산성과 실험 결과의 정확성을 높일 수 있습니다.



Agilent Triple Quadrupole GC/MS

GC 전용으로 디자인된 세계 최초의 MS/MS

Agilent Triple Quadrupole GC/MS는 첨단 고속 GC/MS/MS 정량 분석 기능을 통해 대단히 까다로운 시료의 극미량 분석을 실현합니다. Agilent Triple Quadrupole GC/MS는 사용 편리성과 일반 분석 시 고성능 작동을 중점으로 엔지니어링된 분석기기로, 업계 최고의 Agilent GC의 최첨단 분리 기능을 최대한 활용할 수 있습니다.



Agilent GC/MS Q-TOF

세계 최초로 상용화된 Accurate Mass Q-TOF

Agilent 7200 GC/MS Q-TOF는 일반적인 전자 충격(EI)과 화학 이온화(CI) 질량 분석용으로 디자인되었습니다. Agilent 7200 GC/MS Q-TOF의 고속 데이터 처리속도, Full 스펙트럼 모드에 의한 뛰어난 감도 및 선택성, 정밀 질량 MS/MS 데이터를 활용하면 분자 분석과 구조 확인 작업을 간편하게 수행할 수 있습니다.



Agilent ICP-MS

성능, 신뢰도 및 사용 편리성의 새로운 기준

Agilent ICP-MS 솔루션 제품군은 음식, 폐수 및 토양 분해물(soil digest) 같은 복잡한 시료 유형에 적합합니다. 새로운 충돌/반응 셀 기술과 애질런트의 High Matrix Introduction(HMI) 기술을 애질런트 고유의 Octopole Reaction System(ORS)과 결합하여 스펙트럼 간섭 제거 시 신뢰성 및 효율성의 극대화를 통해 복잡한 시료 및 미지 시료 유형을 정확하고 효율적으로 파악할 수 있습니다.

추가 정보

www.agilent.com/chem/mpp

국가별 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

이 발간물은 연구용으로만 사용하십시오.
이 발간물에 포함된 정보, 설명 및 제품 사양은
사전 공지 없이 변경될 수 있습니다.

애질런트 테크놀로지스는 이 발간물에 포함된
오류, 이 발간물의 제공, 이행 또는 사용과
관련하여 발생한 부수적인 또는 결과적인
손해에 대해 책임을 지지 않습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2013
2013년 6월 한국에서 발행
5990-4164K0

서울 강남구 역삼로 542 신사제2빌딩 2층 우)135-848
경기도 수원시 영통구 권광로 511 나노소자특화캡센터(KANC) 9층 우)443-270
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부
고객지원센터 080-004-5090 www.agilent.co.kr



Agilent Technologies