

メタボローム解析の必携アイテムです

Phenomenome Profiler M seriesは、さまざまな質量分析器由来のデータを解析するために先端的なメタボロミクス研究者が設計した先進機能を満載したソフトウェアです。Profiler Mの利用により、メタボローム発現プロファイルの解析やバイオマーカー候補の抽出といった複雑なデータ解析が、格段に緻密にかつ効率良くなり、研究者の方の新しい発見が促進されます。メタボローム解析で先端を走る研究者の方からこれから始めようとする研究者の方まで、必携のアイテムです。

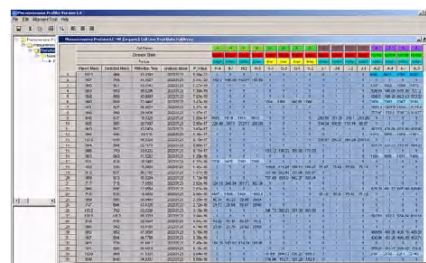
Phenomenome Profiler M は...

- 様々なマスペクトロメトリー由来のデータを、一つのユニバーサル・フォーマットに変換するため、同じサンプルに対する別々の機器による複数の分析(例えば、GC-MSやLC-MS)を簡単に一つの解析対象としてまとめることができます。
- データのファイルサイズを劇的に縮小するため、データ解析が円滑かつ快適に行えます。
- アレイ・テーブルと生データとの間でリアルタイムな相互参照が可能となり、新たな発見の妥当性を迅速に確認することができます。
- Supervised Data Analysis (目的変数を持ったデータ解析)、Unsupervised Data Analysis (目的変数を持たないデータ解析)、データマイニング等の高度なデータ解析機能を提供します。
- 複数の代謝産物あるいは遺伝子の発現パターンを比較し、発現パターンの近い要素の抽出を容易にしました。

Profiler M v2.5 の特徴的な機能

Profiler Mでは、すべてのスペクトルデータを二次元の“アレイ・テーブル”により表示します。アレイ・テーブルでは、列が各サンプルを表し、行がリテンションタイムとマスにより定義された各スペクトルを表します。このアレイ・テーブルがデータを見て、分析して、解釈するためのポータルとなります。アレイ・テーブルが劇的にデータの見せ方を単純化する一方、アレイ・テーブルから生データに戻りマス・スペクトル、クロマトグラムを確認することも自在に行うことができます。

Array Table



Raw Data Handling ~ Calibration

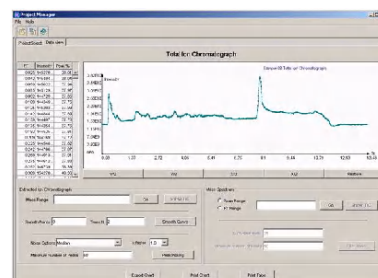
Profiler Mではアレイの作成やその後の統計解析に先立ち、独自のデータ処理により、メタボロームの発現比較を容易にし、結果の信頼性を向上させます。

まず機器由来の.ascや.cdfファイルを独自のファイル・フォーマット(.ppr)に変換します。このファイル・フォーマットによりデータは格段にダウンサイズされ、その後の複雑なデータ解析が迅速に行われます。

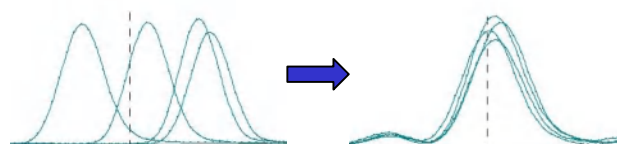
Raw Data Calibratorは、内部標準あるいはサンプル間で共通な内生の代謝産物を用い、各回の分析に対し、リテンション・タイムのキャリブレーションを行うツールです。キャリブレーションは、正確な発現比較を行うためには必須の工程です。

Raw Data Peak Picker では、すべての抽出されたイオン・クロマトグラムから検出マス値とリテンションタイムの組み合わせそのインテンシティを計算し、その後のアレイ・テーブルのもととなるピーク・リストを生成します。ユーザーがノイズ・パラメーターを設定することが可能です。

Raw Data Viewer



Calibration Before and After



Advanced Analysis Tools

高度な統計解析を容易にし、多彩なビジュアルライズにより代謝産物に関する新しい発見が促進されます。

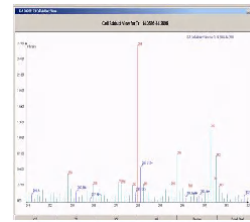
Real Time Raw Data Interaction

クロマトグラムと質量ピークの生データをサンプル横断的にリアルタイムに表示し、比較対照することを可能にします。サンプル間のスペクトルの平均化や、サブトラクションによるサンプル間でのピークの差異の識別といった、生データに戻っての緻密な分析を強力にバックアップします。

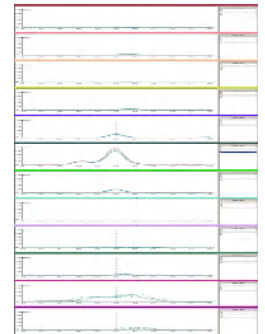
例えばEMS/Adduct Viewでは、12Cピークと同位体やアダクト由来のピークを迅速に識別することを可能にします。

Raw EIC Viewでは、すべてのサンプルのEICを重ねて全体表示することにより、各サンプルのピークの相対強度を一望することができます。

EMS/Adduct View



Raw EIC View

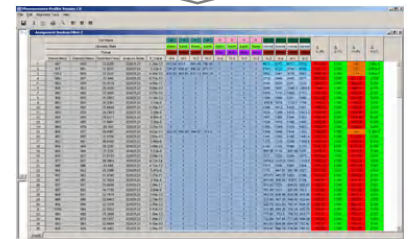
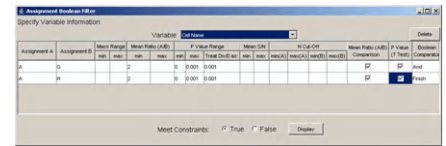


Supervised Analysis Tools

Supervised Analysis はユーザーが目的変数を指定する分析です。

Advanced Boolean Filtersは、指定したサンプル・グループ間で各代謝産物の発現量を比較し、最も重要な代謝産物の発現量の違いを認識することを可能にします。マス・レンジ、S/N比あるいはスチューデントの t検定における有意確率の範囲といったユーザーが定義する制限要因の範囲内に限定してこの機能を利用することも可能です。

Advanced Boolean Filters



Unsupervised Analysis Tools

Unsupervised Analysis Tools は目的変数を指定せず、自動生成的に要因分析をする統計解析ツールです。

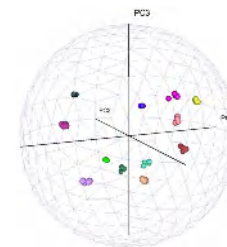
主成分分析 (PCA) では、サンプル間の代謝産物発現の全体の差異をグローバルに捉えることが可能です。PCAに関連して、要因となる代謝産物を抽出する各種機能も付加されており、解析の効率は飛躍的にアップします。

Heat Map表示におけるPCA loading では、どの代謝産物が PCAの3本の軸に対して寄与しているかを観察することが可能となります。

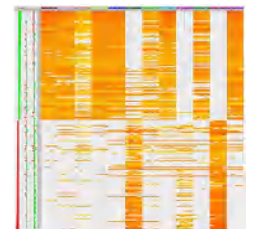
階層クラスター分析 (HCA) は、あらゆるアレイに対して行うことができ、ズーム機能により発現パターンに似通った代謝産物間のクラスター構造を仔細に解析することを可能にします。

またProfile Matching Toolでは代謝物の発現パターンを、Gene/Metabolite Coordinate Plotでは代謝物と遺伝子の発現パターンを比較し、共通の発現パターンを示す要素を瞬時に抽出しわかりやすく表示します。

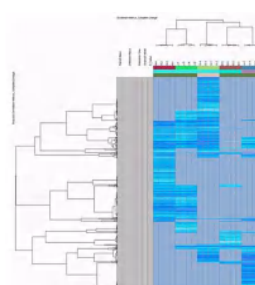
PCA (3D view)



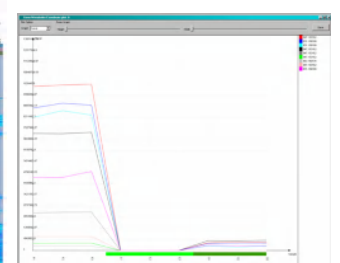
Heat Map



HCA



Gene/Metabolite Coordinate Plot



- * ご試用になりたい方のためにデモ版をご準備しております。
- * 統計解析機能のみ搭載し、トランスクリプトミクスやプロテオミクスにも適用可能なProfiler Sシリーズも合わせてご検討ください。
- * Profiler Mに精密質量からの元素組成予測機能も付加したAccurate Mass 版もご用意しております。

開発・製造

Phenomenome Discoveries Inc.

www.phenomenomeinformatics.com

お問い合わせは、日本正規販売代理店

有限会社 サイトロブ www.scitrove.co.jp

Tel: 03-3834-2525 E-mail: pdi@scitrove.co.jp