

分析データ対応 統計解析ソフトウェア  
Statistical Analysis Software for Analytical Instruments

# eMSTAT Solution



# クロマトグラフィー／直接イオン化質量分析データの統計解析を誰でも簡単に

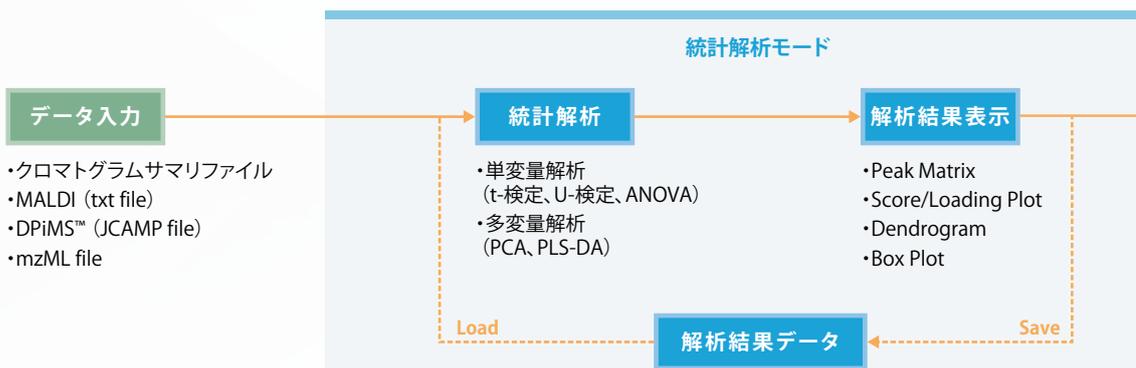


## eMSTAT Solution™ easy mass spectrometric statistical solution

製品開発におけるベンチマーク品との比較、あるいは品質管理時の良・不良の判定など、グループ間の差異を明確にすることは定性・定量という従来からの解析手法だけでは困難です。クロマトグラムやMSスペクトル上の膨大な数のデータを使った多変量解析により、グループ間の差異に寄与する識別マーカの探索や、マーカを用いた特徴の視覚化が行われています。さらに、教師データを用いてモデルを生成し、未知サンプルの劣化など状態、種別や産地を科学的に判別することが求められています。

eMSTAT Solutionは様々な統計解析機能を備え、クロマトグラム（液体クロマトグラフ質量分析計など）やMSスペクトル（直接イオン化法質量分析など）の膨大な情報量であっても、習熟度を必要としない操作性を実現し多変量解析を身近な存在にします。

### eMSTAT Solutionのワークフロー



#### データ入力

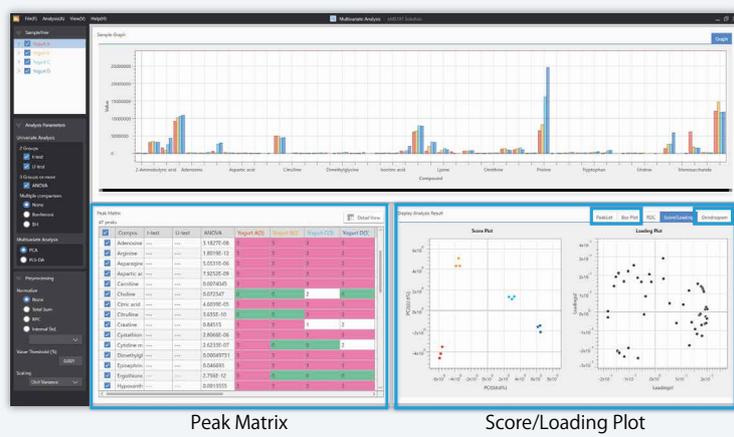
- クロマトグラムサマリファイル
- MALDI (txt file)
- DPiMS™ (JCAMP file)
- mzML file

#### 統計解析

- 単変量解析 (t-検定、U-検定、ANOVA)
- 多変量解析 (PCA、PLS-DA)

#### 解析結果表示

- Peak Matrix
- Score/Loading Plot
- Dendrogram
- Box Plot



## 特長

### ■ 直感的な操作で分析データを統計解析

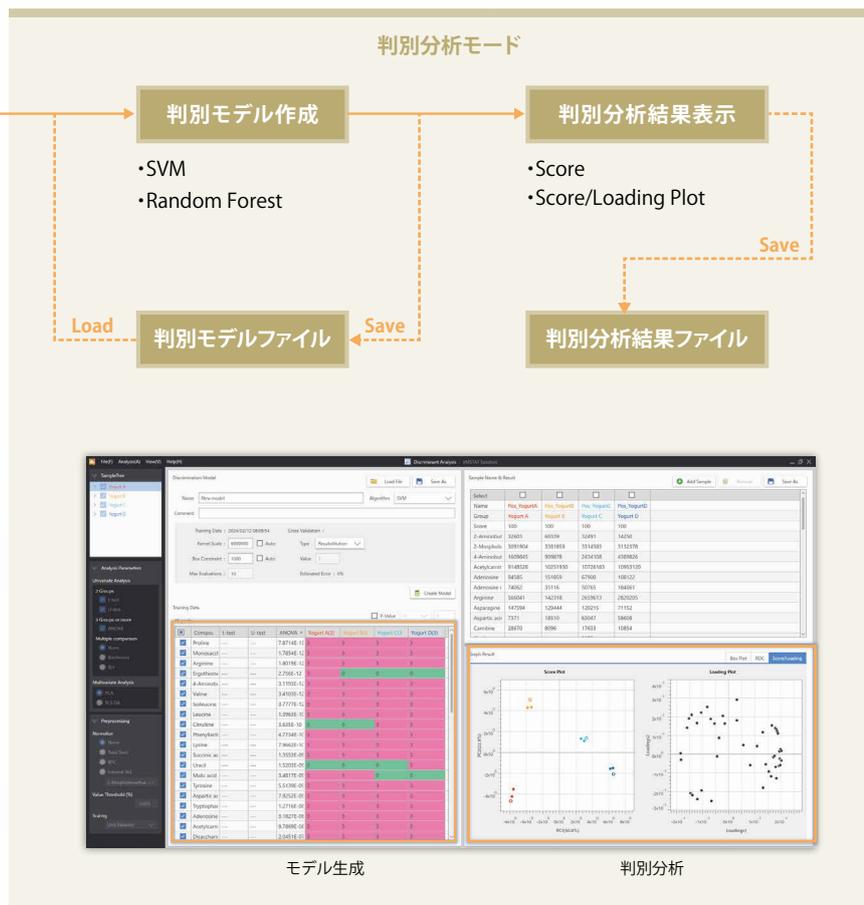
豊富でありながらも容易に使える単変量/多変量解析機能により、サンプル間の識別および識別に寄与するマーカピークの抽出が、統計解析に詳しくないユーザーでも簡単にできます。

### ■ フレキシブルなグループ分けが可能な動的グルーピング機能

マーカ探索時に行うサンプルのグループ分けを、登録した性質情報に基づき、さまざまな組み合わせでフレキシブルに行うことが可能です。

### ■ グループの識別をサポートする未知サンプルの判別分析

統計解析モードで抽出したマーカピークを用いて、未知サンプルの判別を行うための判別モデルを作成できます。1ステップでモードを切り替えて、統計解析モードで得られた統計データをそのまま判別分析モードで利用することが可能です。



# 直感的な操作で分析データを統計解析

統計解析を適切に行うためには一定の知識が必要であり、導入のハードルが高いという側面があります。この問題を解決する統計解析ソフトウェアeMSTAT Solutionは、一連の操作を直感的に行えます。統計解析モードでは多変量解析によるサンプル間の識別と識別に寄与するマーカーピークの抽出、さらに判別分析モードでは未知サンプルの識別を行う判別モデルの作成まで、多様な解析が可能です。

### 統計解析モード

Score Plot

Loading Plot

各種発酵条件のヨーグルト比較 (PCA)

m/z 3421.53

m/z 3987.96

Box Plot

各試料を特徴付けている成分を探索するために、全ての測定値を総合的に取り扱い、その中に存在する違いを引き出す解析方法、主成分分析 (PCA) を用いると、サンプル間の差を視覚化できます。

Score PlotとLoading Plotから各グループの特徴に寄与しているピークを選定し、Box Plotによりグループ間の違いを確認することが可能です。

Score Plot (上左) では、発酵の進み具合に基づいて明確に分類されています。Loading Plot (上右) はScore Plotと位置関係が対になっており、各グループの分類に寄与するピーク (クロマトグラムデータ: 化合物名、MSスペクトルデータ:  $m/z$ ) を示しています。

各グループを特徴づけている成分について、Box Plotを使って量的比較できます。Loading Plotの左下に位置するピーク  $m/z$  3421.53 は、ヨーグルトや40℃発酵サンプルで特によく検出されています。一方、右下にある  $m/z$  3987.96 は未発酵と牛乳サンプルの強度が高く、発酵が進むにつれて減少しています。 $m/z$  3421.53は発酵の進行マーカー、 $m/z$  3987.96は未発酵マーカーとして使用できることが示唆されています。

### 判別分析モード

モデルタイプなど設定し判別モデル式を作成

未知サンプルデータの読み込み

未知サンプルも表示 (白抜き丸)

既知の試料のデータ (教師データ) を用いてモデルを作成し、未知試料の判別分析を行うことができます。判別モデルを作成し、未知サンプルデータを読み込むと、データごとに属するグループが表示されます。判別モデルのアルゴリズムはSupport Vector MachineとRandom Forestから選択可能です。

# フレキシブルなグループ分けが可能な動的グルーピング機能

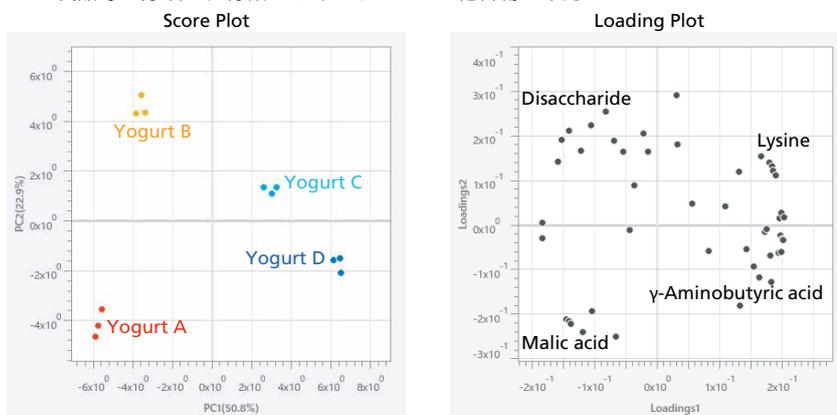
対象サンプルの属性（原料、反応条件、正常/異常、製造メーカー、種別など）に応じて分類し、それぞれのグループを特徴づけるマーカーを探索することがあります。eMSTAT Solutionの動的グルーピング機能は、これまでの分類情報を保持したまま新たな分類を作成でき有用です。



**分析条件**  
 装置: LCMS-8045/8050/8060NX  
 サンプル: 市販ヨーグルト  
 LC/MS/MSメソッドパッケージ二次代謝物 Ver. 3iに含まれるイオンペアフリーLC/MS/MS法を用い、メタボローム解析において重要となるアミノ酸、有機酸、ヌクレオシド、ヌクレオチド等の親水性代謝物に糖類を追加して全153成分を対象に一斉分析。

## 製品毎の分類

ヨーグルトサンプル製品毎に分類し、特徴づけているマーカー化合物を確認



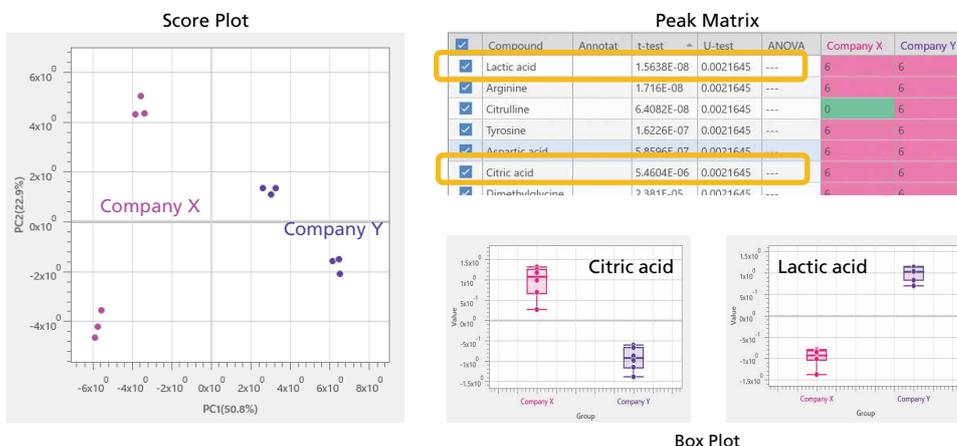
4つのサンプルに対し、2グループに分類  
 Yogurt AとYogurt BをCompany X  
 Yogurt CとYogurt DをCompany Y

## 動的グルーピング

Rearranged Groups			
Group Name	A+B	C+D	
Company X	+	-	
Company Y	-	+	

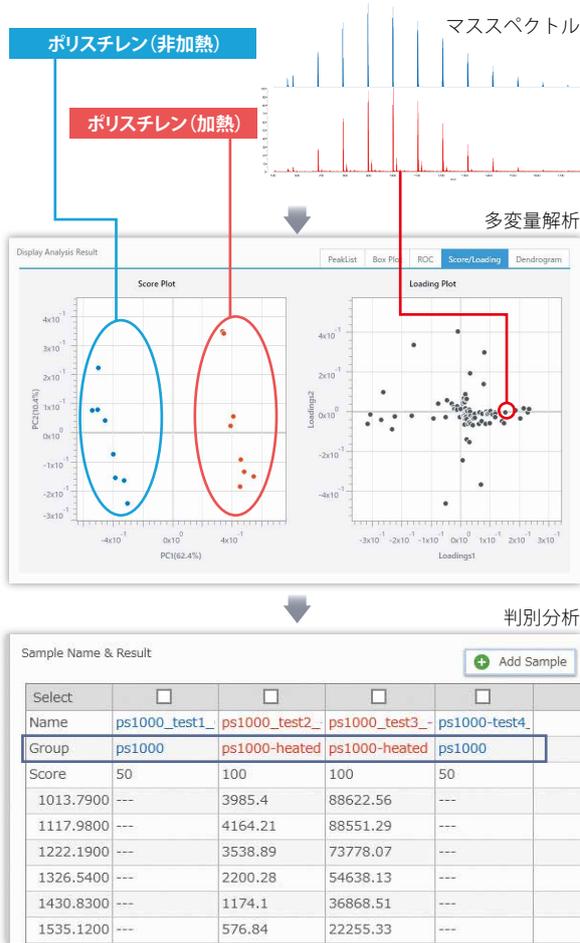
## 各グループを特徴づけるマーカーの探索

グループ毎に分類後、Peak MatrixのP-value（2グループ間はt-検定とU-検定、3グループ以上の場合ANOVA（分散分析））を使ってグループ間の差異に寄与する化合物を見つけることができます。p-value(0.05未満)の化合物 Citric acidとLactic acidに着目すると、それぞれCompany X、Company Yのサンプルにより多く含まれていることがBox Plotでわかります。



# グループの識別をサポートする未知サンプルの判別分析

## 合成高分子の劣化判別



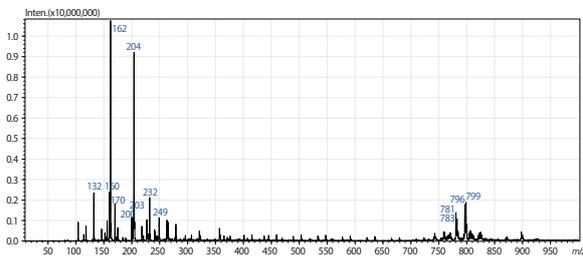
**分析条件**  
 装置: MALDI-8020  
 サンプル: ポリスチレン1,000  
 (200℃ 2時間加熱/非加熱)  
 マトリックス: Dithranol  
 カチオン化剤: AgTFA  
 サンプル調製: THFに溶解したポリスチレン (加熱/非加熱)、マトリックス溶液、カチオン化剤をサンプルプレートに滴下

ポリスチレン (加熱/非加熱) のMALDIマスペクトルを多変量解析 (PLS-DA) すると、加熱/非加熱の2群に分かれました (Score Plot)。2群の差異に影響を及ぼすピーク (マーカピーク) がどれなのかは、Loading Plotを使用することにより確認できます。

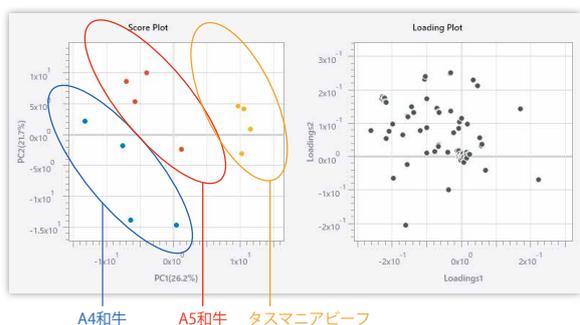
多変量解析によって抽出されたマーカピークを用いて判別モデルを作成し、別途取得したポリスチレンのマスペクトルに対して加熱/非加熱の判別を行った (SVM) と、すべて正しく判別することができました。分子量の大きい試料を簡便に測定できるMALDIとeMSTAT Solutionの組み合わせにより、合成高分子以外でも、タンパク質、脂質、糖鎖など多様な試料の識別が行えます。

## 牛肉質等級の簡易識別

Direct Probe Ionization-MSによるマスペクトル



PLS-DAによる解析結果



市販されている牛肉 (A5、A4和牛およびタスマニアビーフ) の抽出液をDPiMSシステムで分析し、得られたスペクトルに対してPLS-DAによる解析を行いました。3群間のグルーピングはScore Plotにより確認でき、どの代謝物ピークがグルーピングに影響しているかはLoading Plotにより確認できます。

**分析条件**  
 装置: DPiMSシステム  
 サンプル: 食用牛肉  
 イオン化溶液: 50%エタノール水溶液  
 サンプル調製: 50%エタノール水溶液中で食用牛肉をホモジナイズし、懸濁液10 μLをサンプルプレートに滴下

DPiMSシステムによる簡便な代謝物分析によって得られたスペクトルは、eMSTAT Solutionを用いることで簡便に食品や植物サンプルなどの違いを識別でき、識別に寄与する代謝物情報のスクリーニングが行えます。

# 牛肉の肥育農家の判別

eMSTAT Solutionは、クロマトグラムデータ、マスペクトルデータ以外の各種データ形式 (JCAMP形式、ASCII形式、mzML形式など) のデータも読み込み可能です。様々なデータを集約して解析でき多角的な評価を支援します。



**分析条件**  
 装置: GCMS-TQ8040 NX  
 サンプル: 食用牛肉  
 Smart Metabolites Database™ Ver.2を用いて有機酸、糖、核酸、脂肪酸、アミノ酸などの一次代謝物500成分を測定。  
 合わせて、Smart Aroma Databaseを用いてSPME Arrowにより香気成分約500成分を測定。

ブランド牛肉について、総計約600検査項目 (ガスクロマトグラフ質量分析計、紫外可視分光光度計、食肉脂質測定装置、マイクロ波乾燥式水分計、目視評価の各データ) に亘る既知の試料のデータ (教師データ) を使って判別モデルを作成し、未知試料 (農家2) の判別分析を行いました。香気成分としてロースト臭を付与するベンゾチアゾール、一次代謝物としてリノール酸が肥育農家2の特徴的付けに影響を与えていました。さらに、未知試料 (農家2) を適切に判別できました。

**ガスクロマトグラフ質量分析計**  
 一次代謝物488成分と香気成分476成分の測定  
 (x1,000,000,000)

**紫外可視分光光度計**  
 グリコーゲン含有量の測定

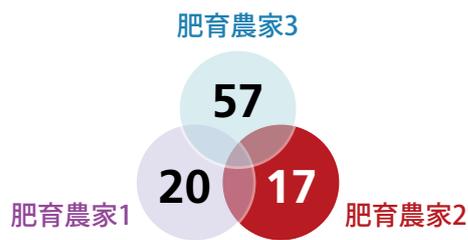
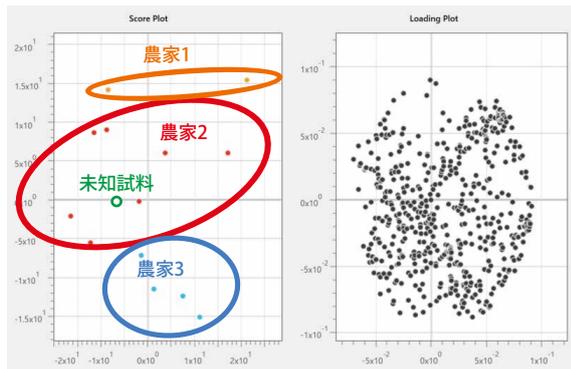
**食肉脂質測定装置**  
 オレイン酸及び一価不飽和脂肪酸の測定

**目視評価**  
 等級、バラの厚さ、BMS、BFS、BCS等の評価

**マイクロ波乾燥式水分計**  
 粗脂肪含量、粗蛋白含量、水分含量の測定

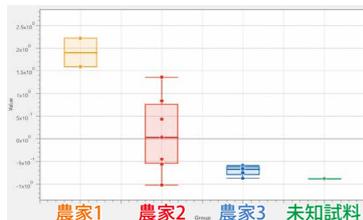
## 総計約600検査項目

判別モデル作成  
 (ランダムフォレスト)

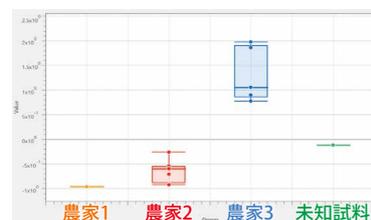


各農家に特徴的に高く検出された検査項目  
 (ANOVA p-value 0.05以下)

香気成分  
 ベンゾチアゾール (p-value 0.0018)



一次代謝物  
 リノール酸 (p-value 0.0000043)



Select	<input type="checkbox"/>
Name	未知試料 (正解は農家2)
Group	農家2
Score	70

## 仕様

項目	詳細	
解析機能	単変量解析	t-検定 Mann-WhitneyのU-検定 ANOVA (分散分析)
	多変量解析	PCA (主成分分析) PLS-DA
	判別分析	Support Vector Machine (SVM) Random Forest
	その他	動的グルーピング
表示機能	多変量解析	Peak Matrix Box Plot ROC AUC Score/Loading Plot Dendrogram
	判別分析	判別結果 (Group, Score) Score Plotへの未知サンプル点の重畳表示
入出力データ	入力	クロマトグラムサマリファイル ASCII形式ピークリスト JCAMP形式ピークリスト mzML形式ピークリスト (Centroid mode、1スキャン/ファイル、データ非圧縮のみ対応) 注: ファイル名は半角英数字のみ対応
	出力	ピークリスト (txt形式) 解析結果 (xlsm形式) グラフキャプチャー画像
動作環境	OS	Windows® 11 Professional 64bit 日本語/英語/中国語 又はWindows® 10 Professional 64bit 日本語/英語/中国語

**LC-MS**




[Product >](#)

**MALDI-TOF MS**




[Product >](#)

**GC-MS**




[Product >](#)

**DPiMS**




[Product >](#)

eMSTAT Solution, DPiMS, LCMS, Smart Metabolites DatabaseおよびGCMS-TQは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。Windowsは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標です。

本文に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。

なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。

治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。

トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正品をご採用ください。

外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

製品情報 価格お問合せ



# 株式会社 島津製作所

分析計測事業部

604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1

東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631  
(大学担当) (03) 3219-5616  
(会社担当) (03) 3219-5622

関西支社 (06) 4797-7230

札幌支社 (011) 700-6605

東北支店 (022) 221-6231

郡山営業所 (024) 939-3790

つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511  
(会社担当) (029) 851-8515

北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095  
(会社担当) (048) 646-0081

横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106  
(会社担当) (045) 311-4615

静岡支店 (054) 285-0124

名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521  
(会社担当) (052) 565-7531

京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604  
(会社担当) (075) 823-1603

神戸支店 (078) 331-9665

岡山営業所 (086) 221-2511

四国支店 (087) 823-6623

広島支店 (082) 236-9652

九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332  
(会社担当) (092) 283-3334

島津コールセンター ☎ 0120-131691  
(操作・分析に関する相談窓口) IP電話等: (075) 813-1691