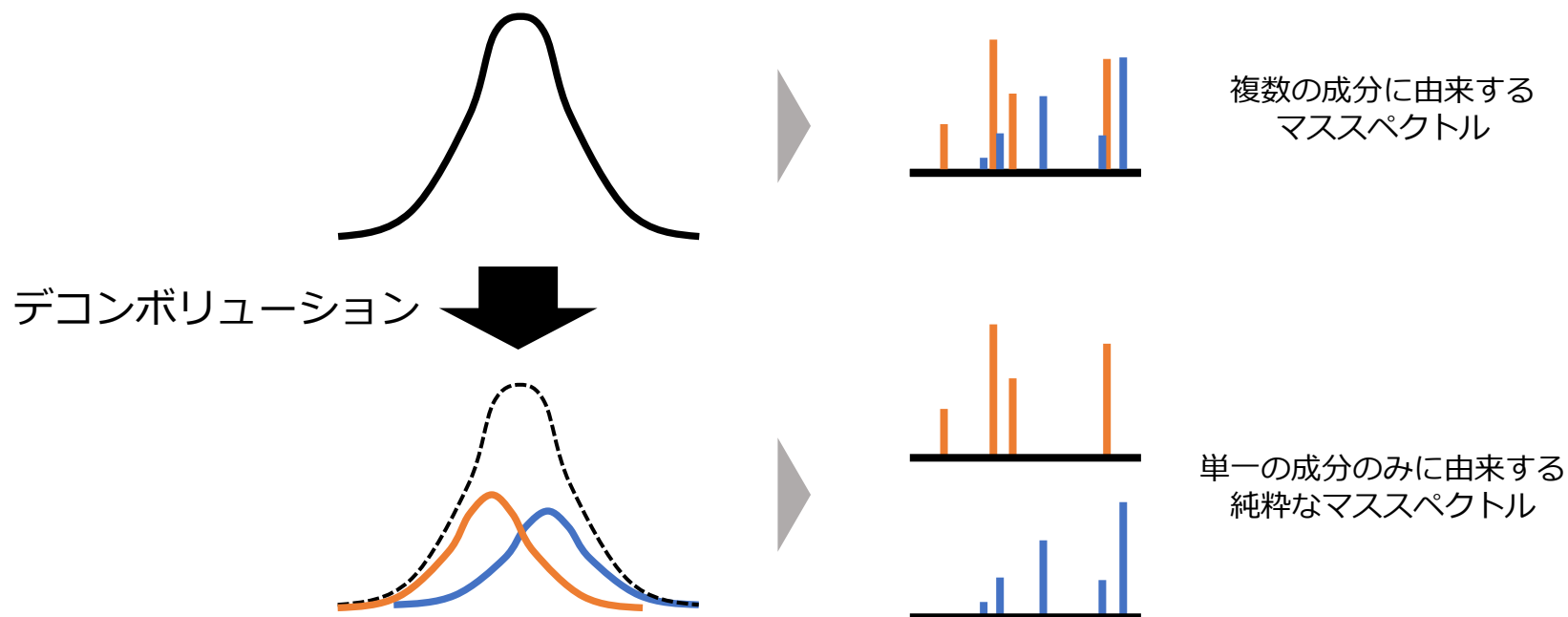


GC-MSデータのマニュアルデコンボリユーション

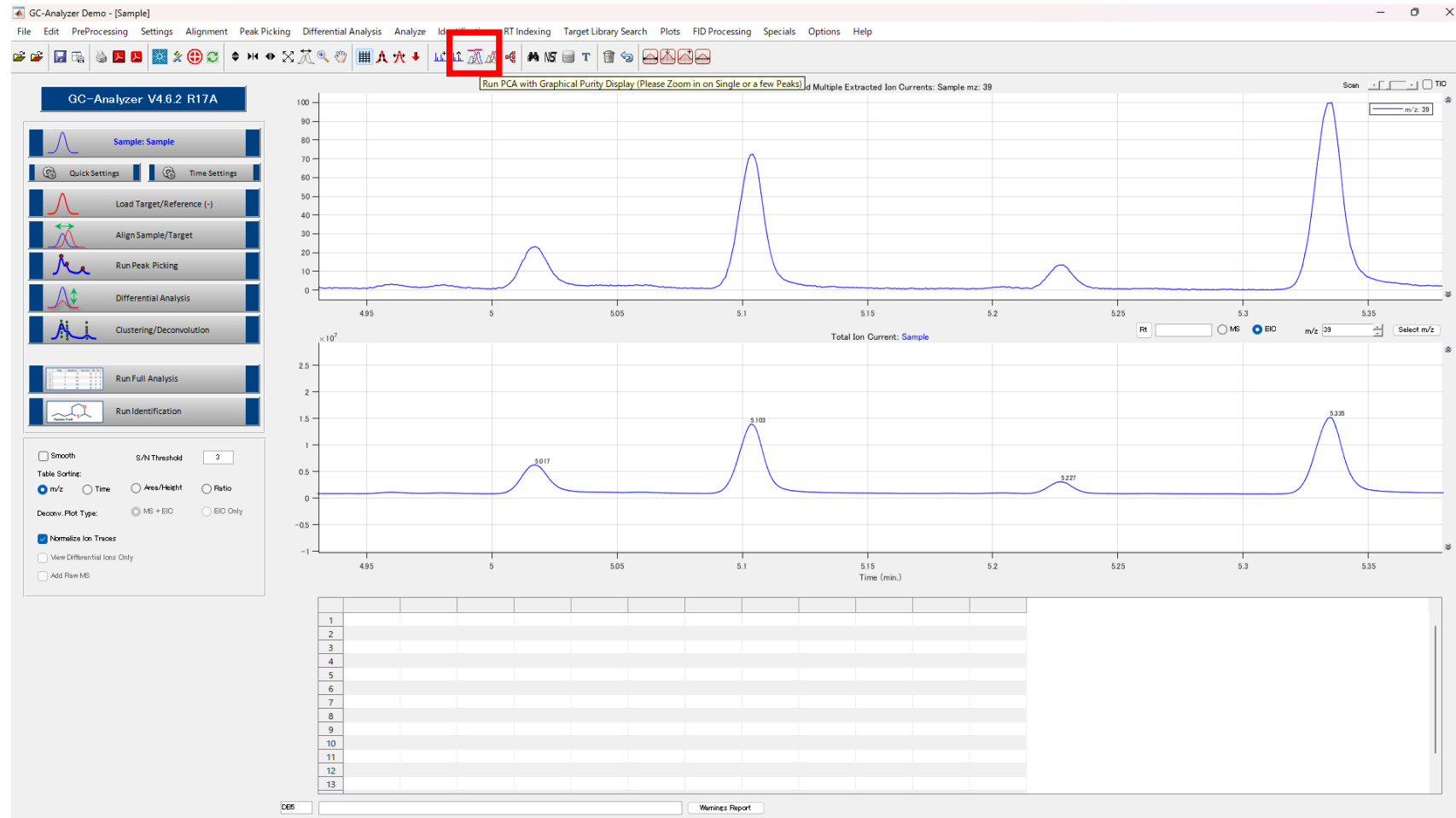
フィルジェン株式会社 バイオインフォマティクス部
(biosupport@filgen.jp)

- GC-MSデータによる成分の同定には、共溶出されたピークを分離し、純粋なマススペクトルを構築（デコンボリューション）することが不可欠



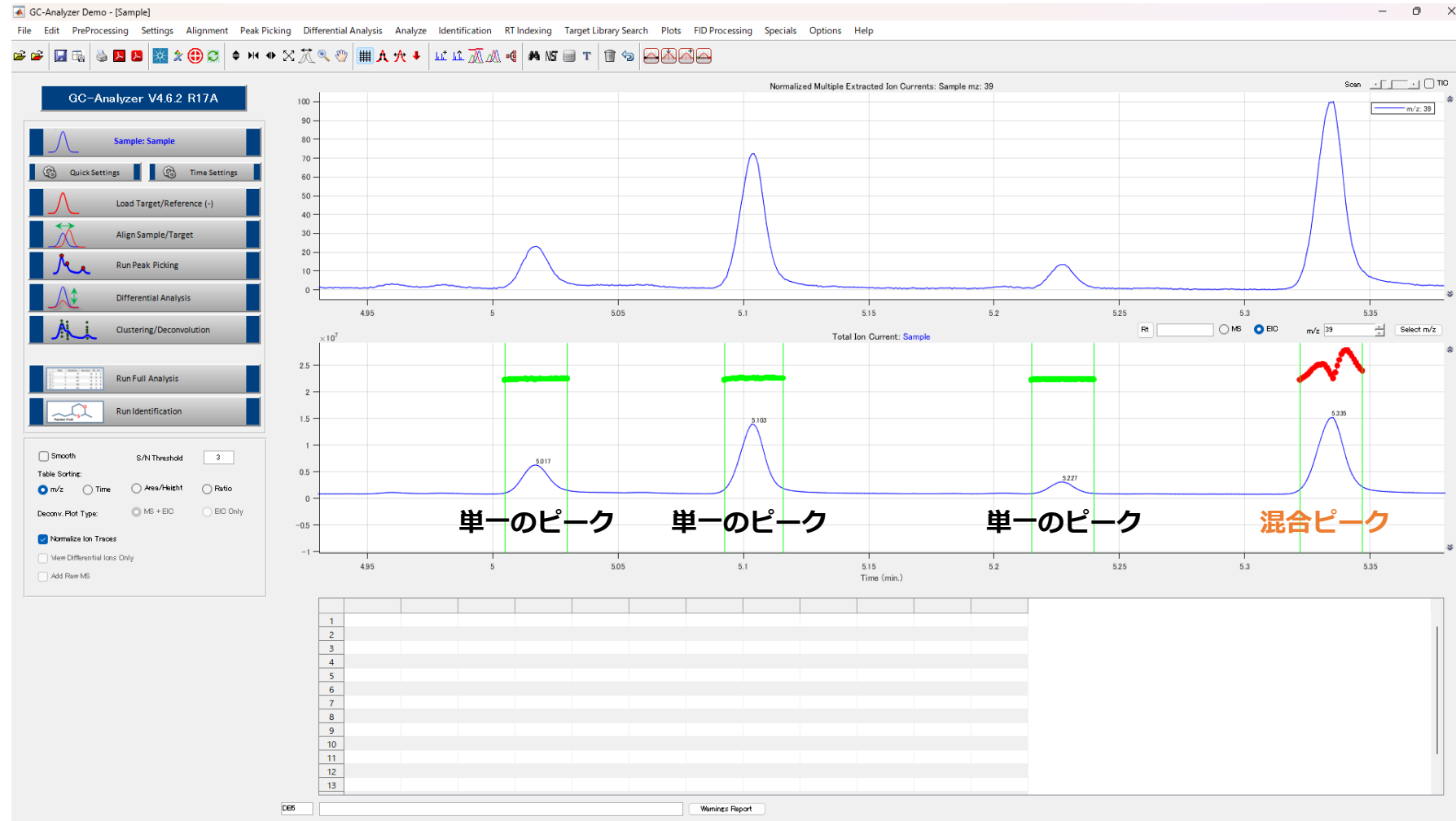
- GC-Analyzerでは、自動でデコンボリューションを行えるほか、マニュアルでデコンボリューションを行うためのツールも多数搭載

ピークの単一性の解析



Run PCA with Graphical Purity Display をクリックします。

ピークの単一性の解析



単一ピークと考えられるものは緑で、
混合ピークと考えられるものは赤でマークされます。

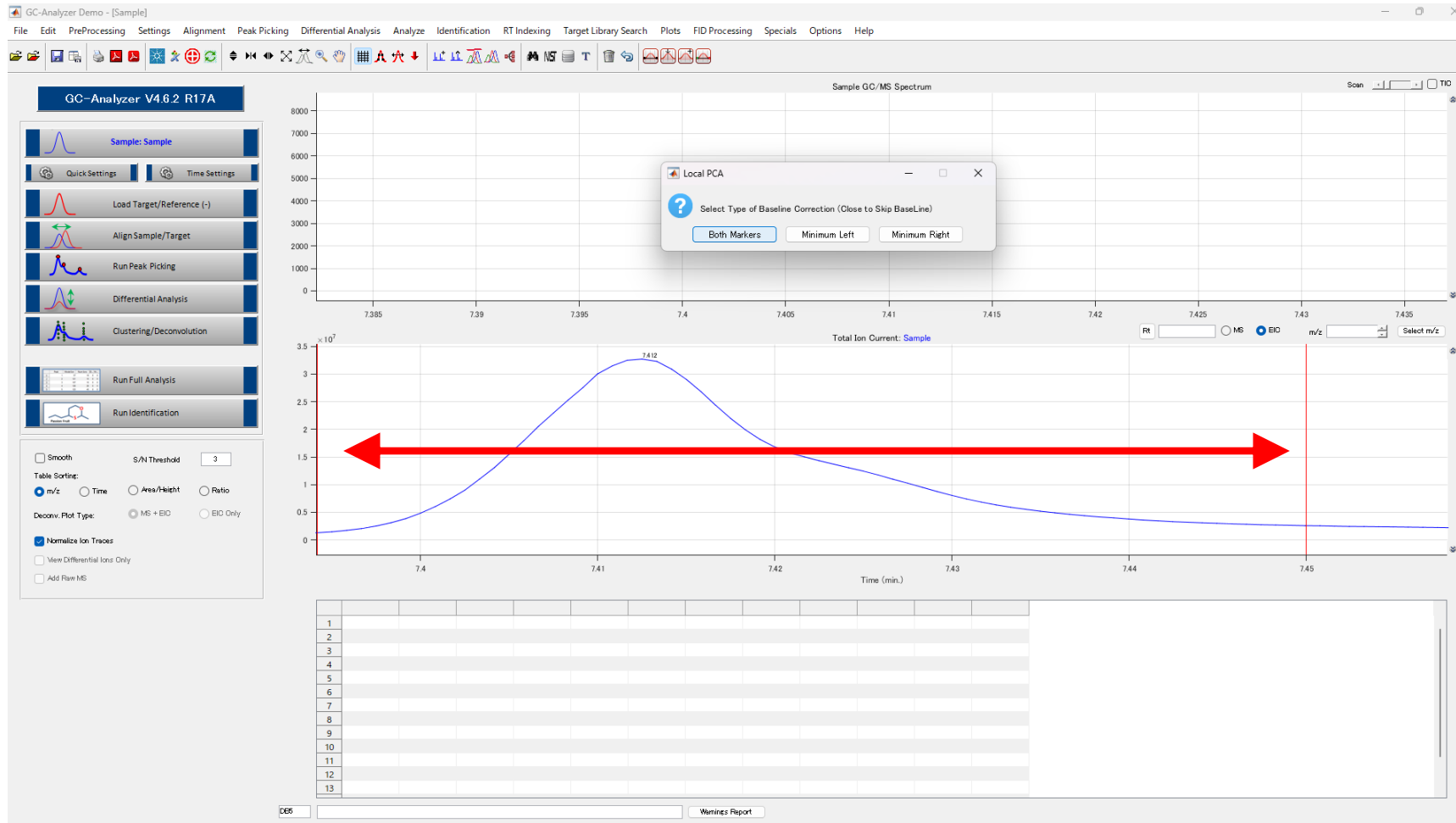
ピークの単一性の解析②

The screenshot displays the GC-Analyzer V4.6.2 R17A software interface. The main plot shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with a single peak at 7.412 minutes. The y-axis represents intensity (scaled by $\times 10^7$) and the x-axis represents Time (min.). A context menu is open over the peak, listing various analysis options. The 'Run PCA Purity Check on Labeled or Selected Peaks in TIC' option is highlighted. The left sidebar contains various analysis tools. The bottom of the window shows a table with 13 rows and a 'Warnings Report' button.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13

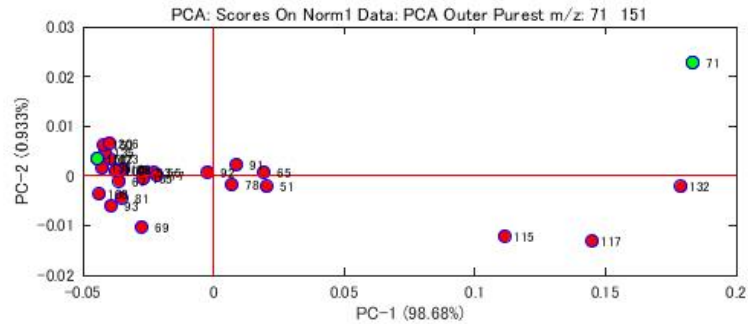
調べたいピーク付近を拡大し、
Run PCA Purity Check on Labeled or Selected Peak in TICをクリックします。

ピークの単一性の解析②



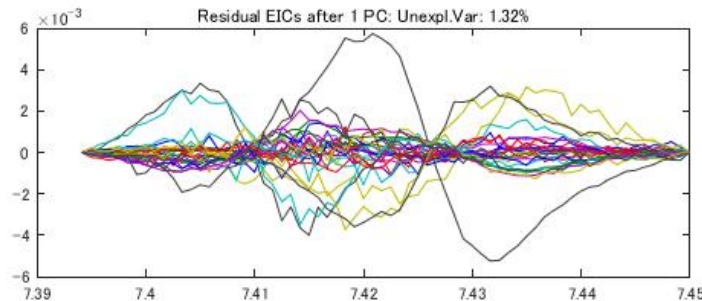
ベースライン補正のためのレンジを指定します。

解析結果



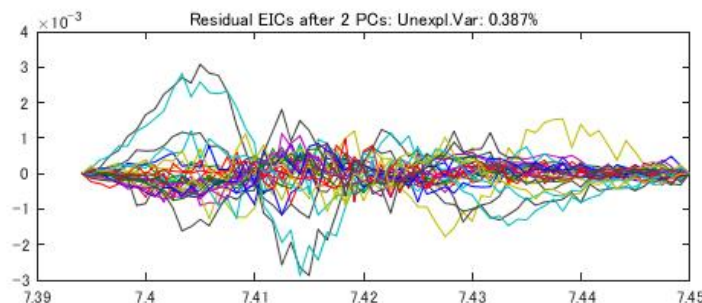
PCAプロット：

横軸は第一主成分（メインピークに関する情報）、縦軸は第二主成分を表しています。この図では、第二主成分が全変動の約0.9%を説明しており、ランダムノイズ以上の何かを含んでいることがわかります。



residual EICプロット1：

第一主成分で説明できない部分に関するプロットです。左のように、ランダムノイズとは異なる「波状」の構造が見られる場合、第一主成分で表される成分とは別の成分が存在する（2成分以上からなる）ことを示しています。



residual EICプロット2：

第一主成分、第二主成分で説明できない部分に関するプロットです。ランダムノイズとは異なる「波状」の構造が見られる場合、第一主成分および第二主成分で表される成分とは別に、さらに他の成分が存在する（3成分以上からなる）ことを示しています。

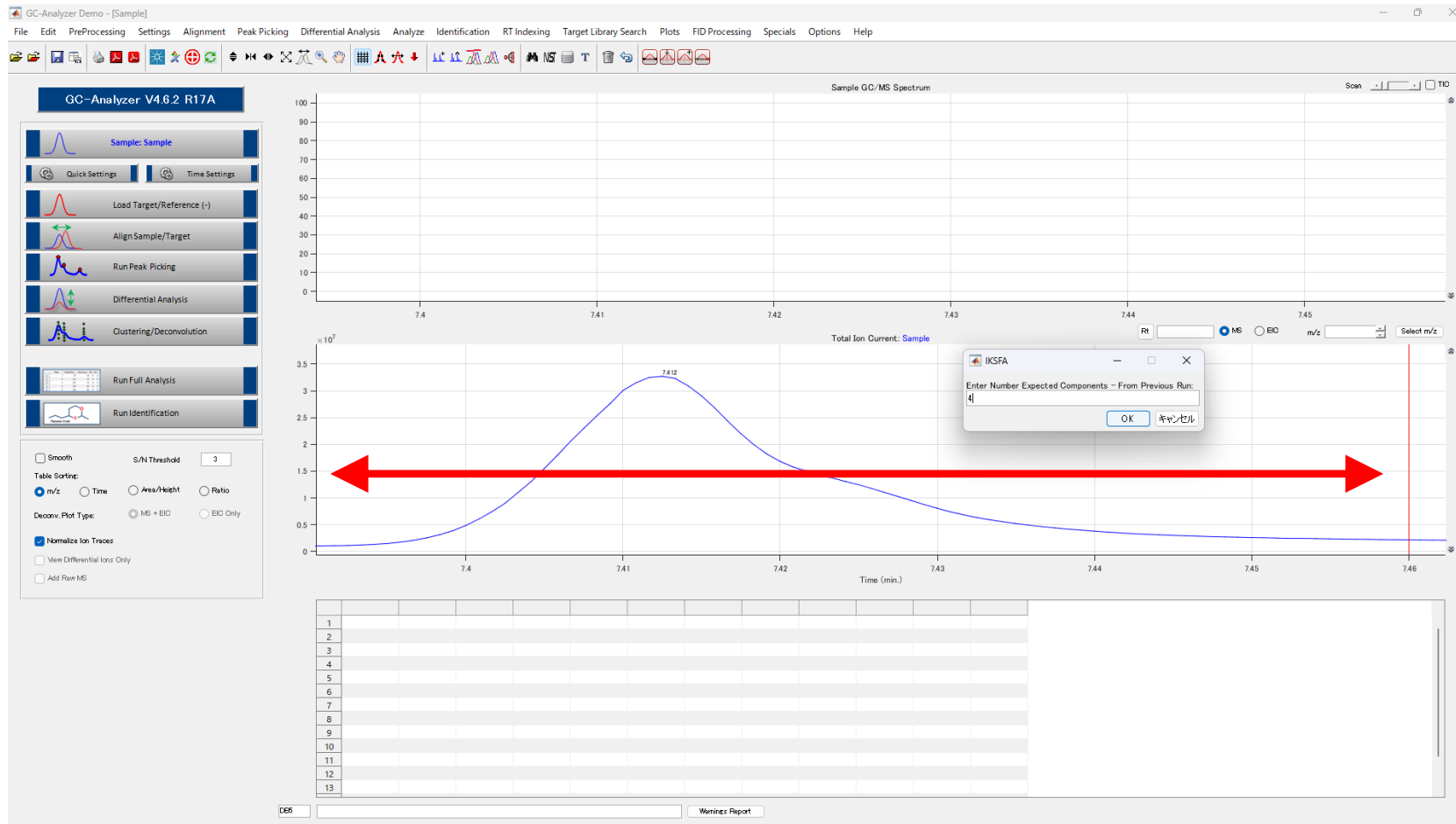
ピークのデコンボリューション

The screenshot displays the GC-Analyzer V4.6.2 R17A software interface. The main window shows a Total Ion Chromatogram (TIC) plot with a single prominent peak at 7.412 minutes. The y-axis represents intensity, scaled by $\times 10^7$, and the x-axis represents Time (min.) from 7.4 to 7.46. A context menu is open over the peak, listing various analysis options, with 'Find Most Selective Ions in Mixture Peak using IKSFA' highlighted. The interface includes a toolbar at the top, a left sidebar with workflow buttons (Sample, Quick Settings, Time Settings, Load Target/Reference, Align Sample/Target, Run Peak Picking, Differential Analysis, Clustering/Deconvolution, Run Full Analysis, Run Identification), and a bottom table for peak data.

Peak No.	Retention Time (min.)	Intensity ($\times 10^7$)
1	7.412	~3.3

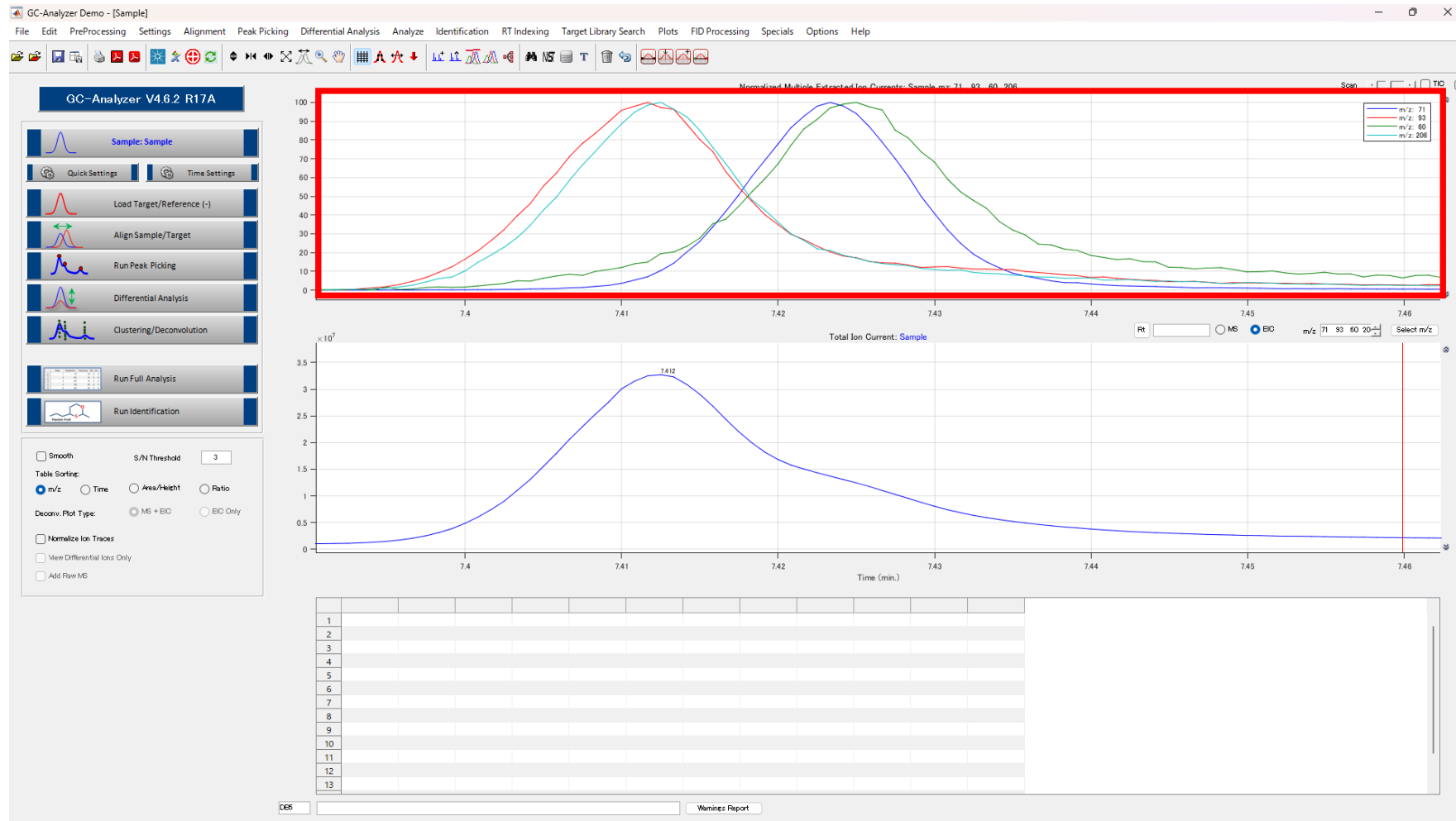
解析したいピーク付近を拡大し、例えば、
Find Most Selective Ions in Mixture Peak using IKSFAをクリックします。

ピークのデコンボリューション

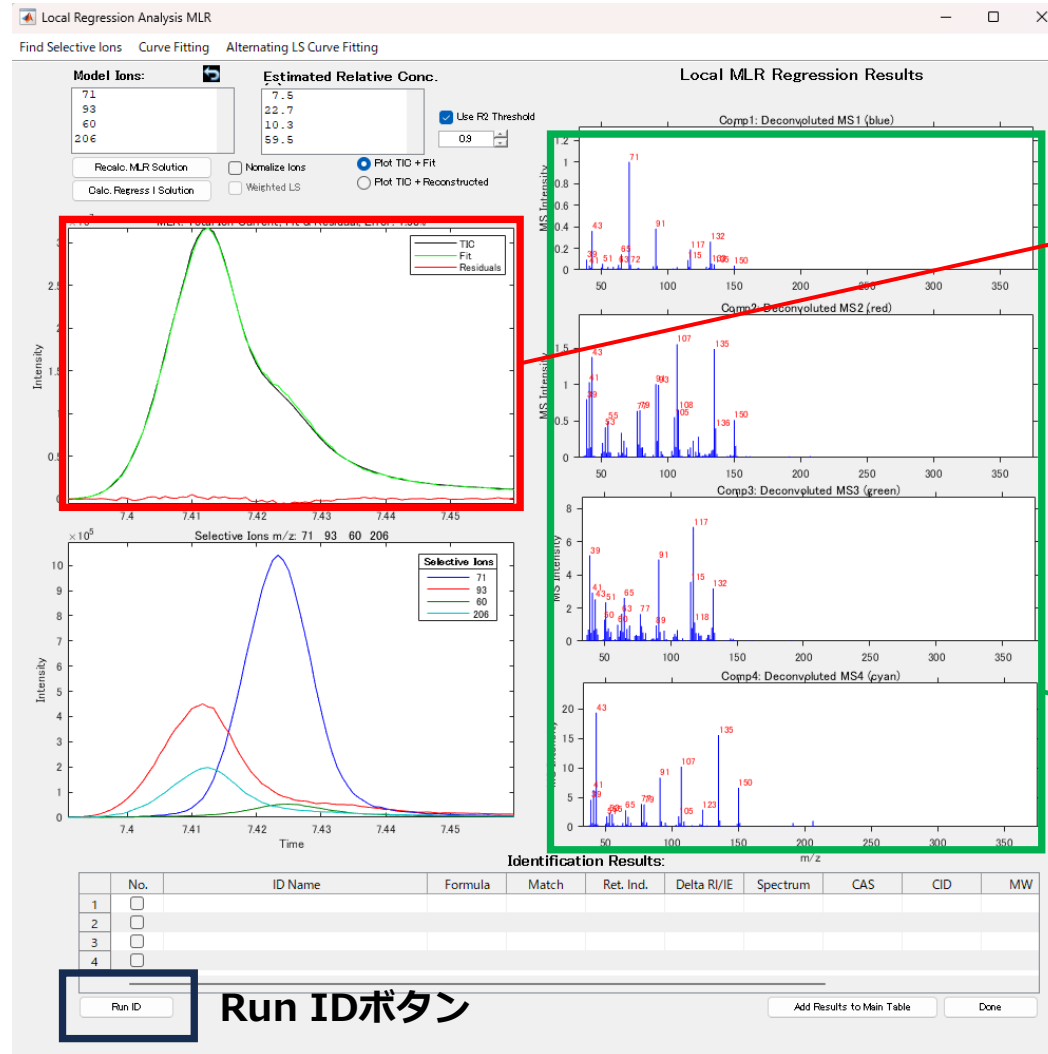


ベースライン補正のためのレンジを指定し、
予想されるコンポーネントの数（ここでは4）を入力します。

ピークのデコンボリューション



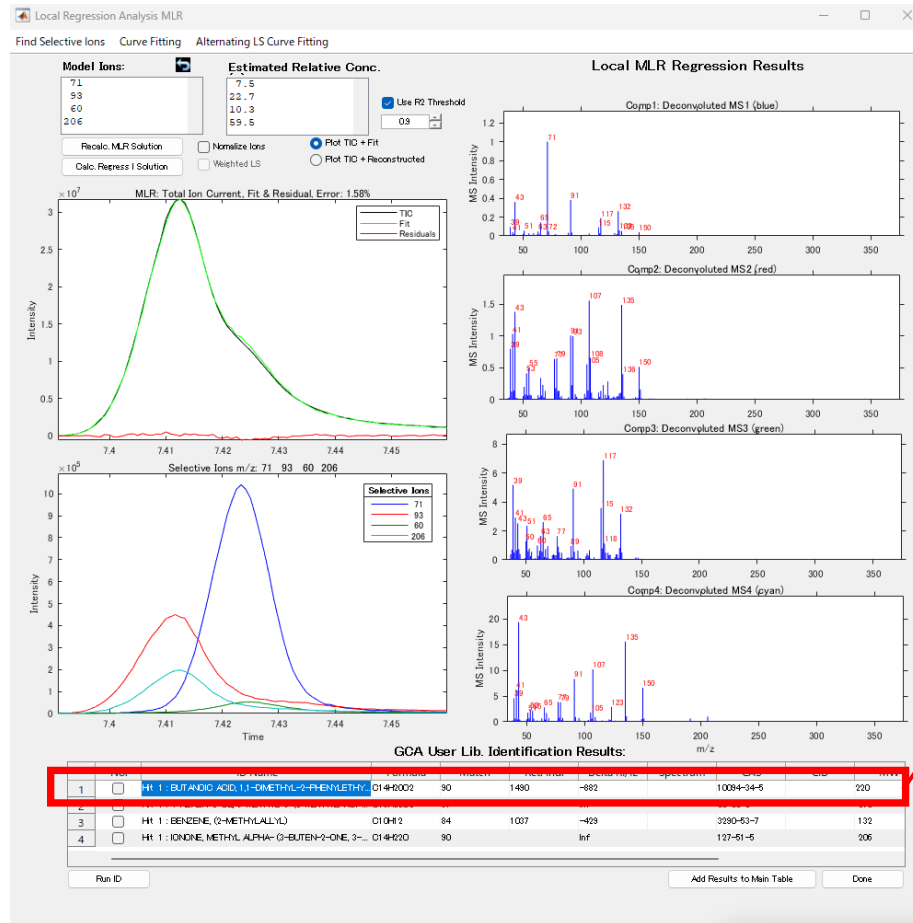
ピークが分離され、各ピークのモデルイオンのピークが表示されます。



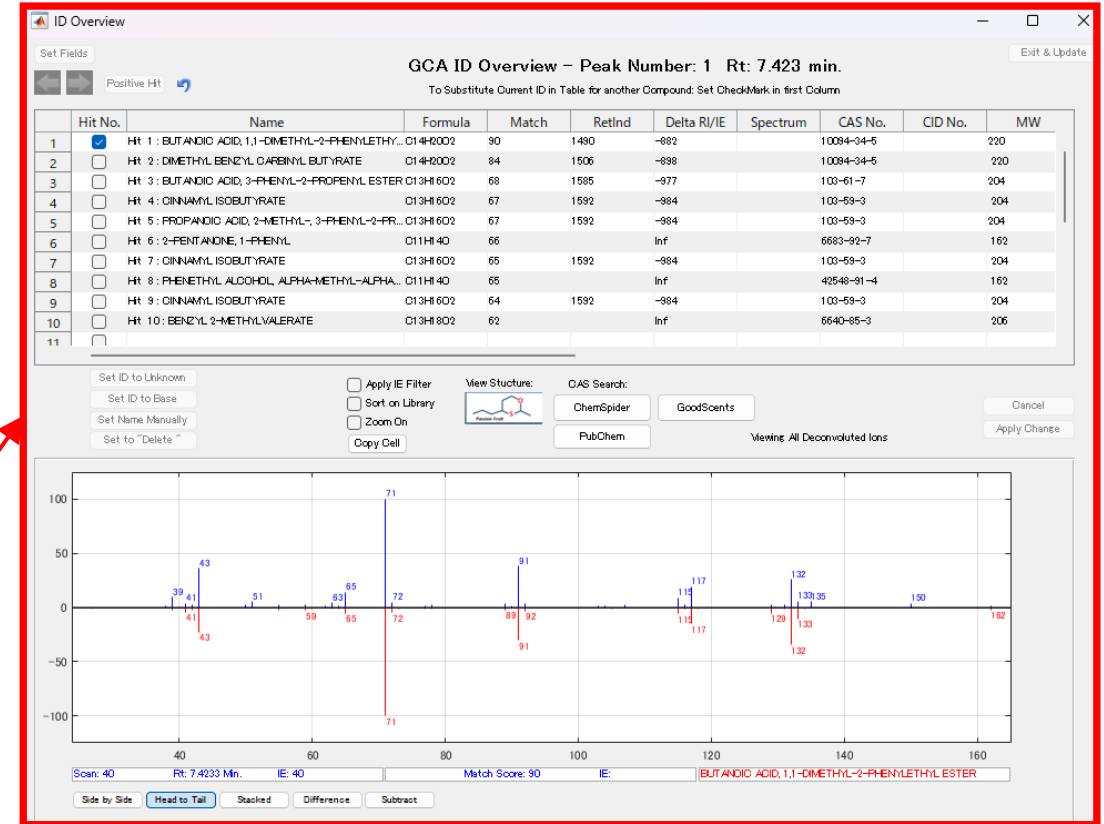
デコンボリューション後のスペクトルと TICのフィッティングを確認できます。

デコンボリューション後のそれぞれの成分の マススペクトルを確認できます。

左下のRun IDをクリックし、ライブラリーサーチを行います。



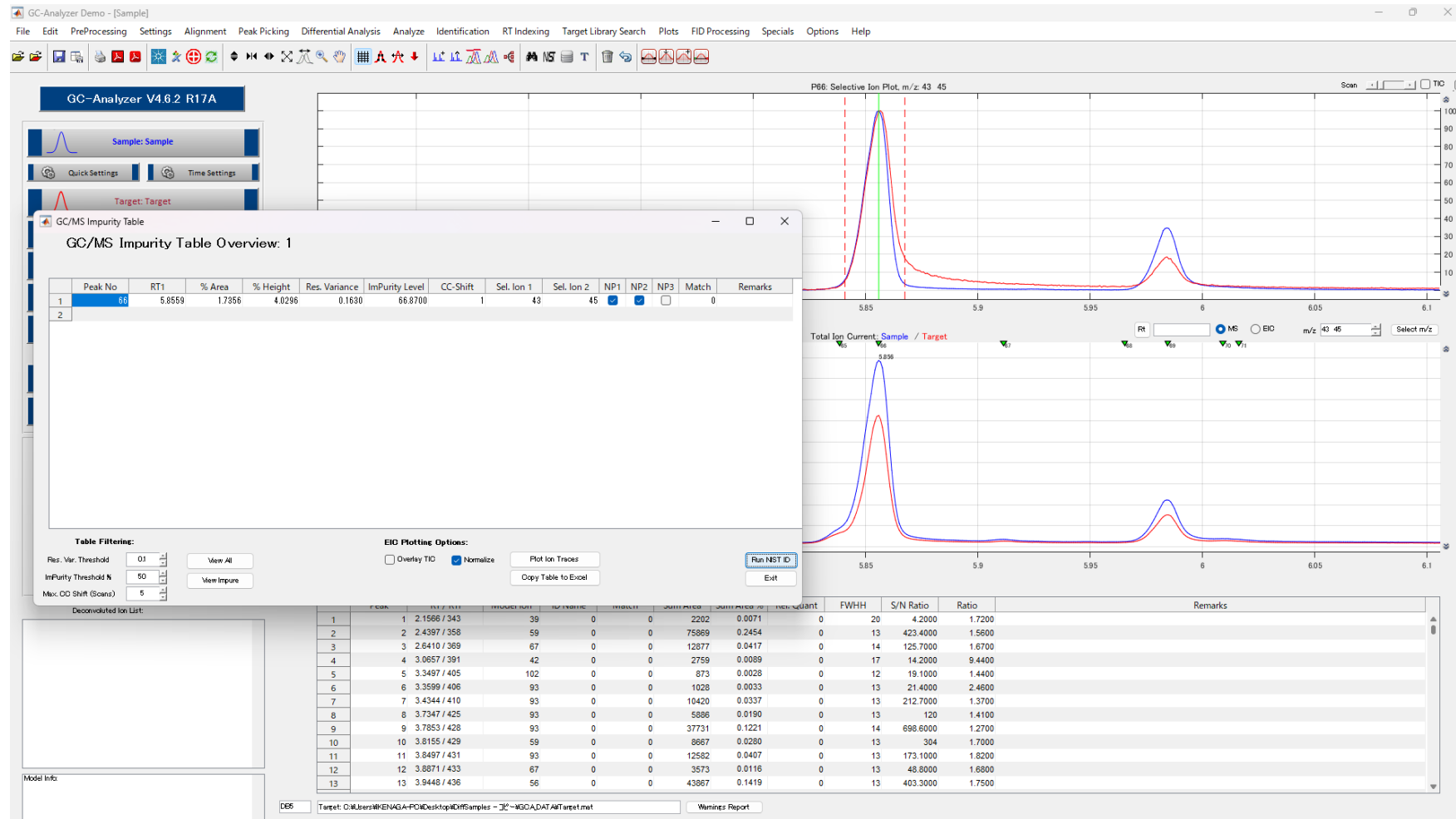
クリック



ライブラリーサーチの結果がテーブル形式で表示されます。
また、テーブルの行をクリックすると、サーチ結果の詳細が確認できます。

- GC-Analyzerの標準ワークフローでも、2～3成分のデコンボリューションが可能です。マニュアルの方法では最大8成分までのデコンボリューションが可能です。

- GC-Analyzerのワークフローで出力された結果に対しても、後からマニュアルでのピークの単一性解析およびデコンボリューションを行い、結果に反映させることが可能です。



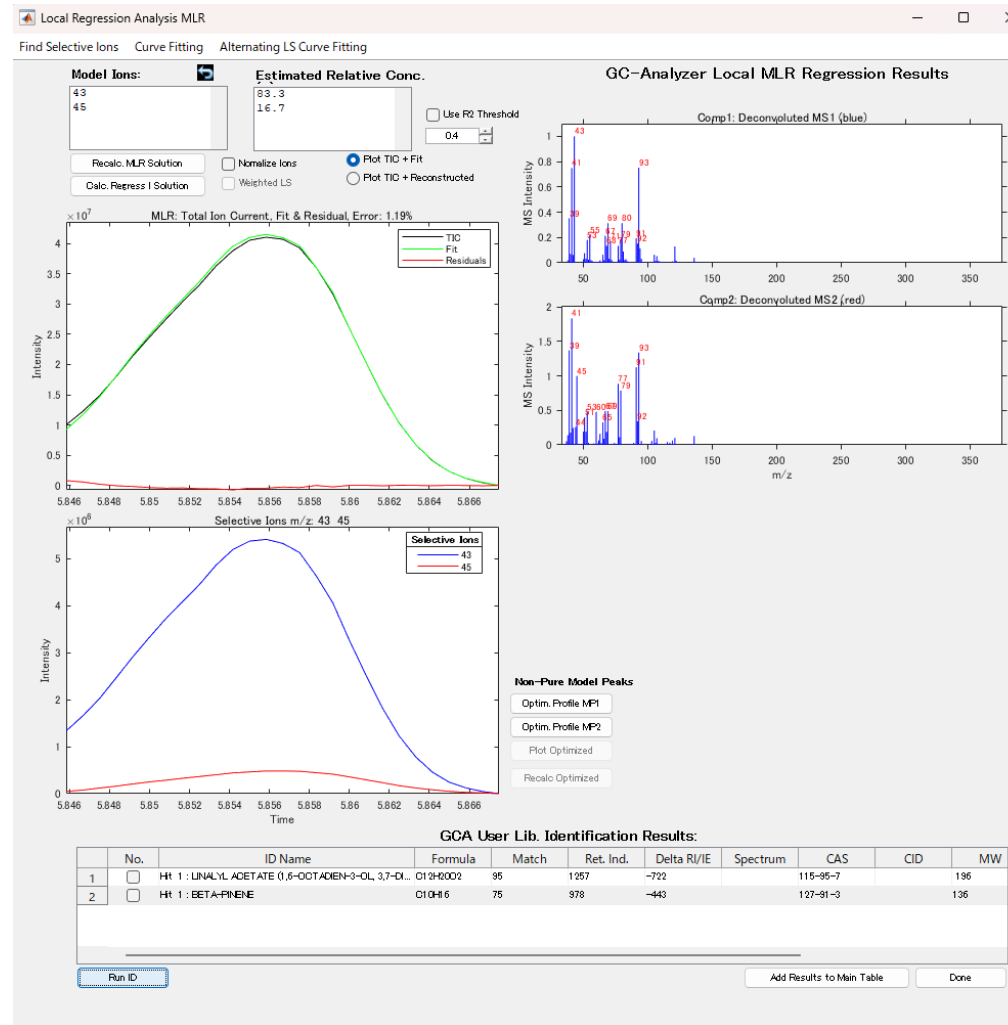
別ウィンドウで、混合ピークの可能性があるピークがリストアップされます。
リスト中の行をクリックすると、メインウィンドウで、そのピークがクローズアップされます。

ワークフローとの組み合わせ

The screenshot displays the GC-Analyzer V4.6.2 R17A software interface. The main window shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with a peak at approximately 5.85 minutes. A context menu is open over this peak, listing various analysis options. The 'Multi Component Deconvolution - MLR Regression, ALS & Curve Fitting' option is highlighted. Below the chromatogram, a table titled 'Deconvoluted Results: 220' provides detailed data for 13 peaks.

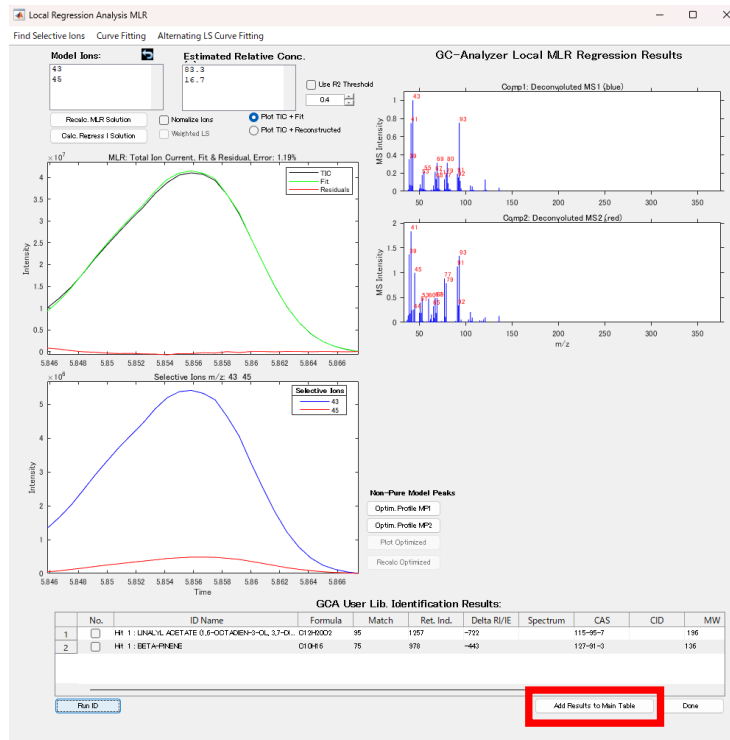
Peak	RT / RTI	Model Ion	ID Name	Match	Sum Area	Sum Area %	Rel. Quant.	FWHM	S/N Ratio	Ratio	Remarks
1	2.1566 / 343	39		0	2202	0.0071	0	20	4.2000	1.7200	
2	2.4397 / 358	59		0	75989	0.2454	0	13	423.4000	1.5600	
3	2.6410 / 369	67		0	12877	0.0417	0	14	125.7000	1.6700	
4	3.0657 / 391	42		0	2759	0.0089	0	17	14.2000	9.4400	
5	3.3497 / 405	102		0	873	0.0028	0	12	19.1000	1.4400	
6	3.3599 / 406	93		0	1028	0.0033	0	13	21.4000	2.4600	
7	3.4344 / 410	93		0	10420	0.0337	0	13	212.7000	1.3700	
8	3.7347 / 425	93		0	5886	0.0190	0	13	420	1.4100	
9	3.7853 / 428	93		0	37731	0.1221	0	14	698.6000	1.2700	
10	3.8155 / 429	59		0	8687	0.0280	0	13	304	1.7000	
11	3.8497 / 431	93		0	12562	0.0407	0	13	173.1000	1.8200	
12	3.8871 / 433	67		0	3573	0.0116	0	13	48.8000	1.6800	
13	3.9448 / 436	56		0	43867	0.1419	0	13	403.3000	1.7500	

Multi Component Deconvolution を選択し、ピーク範囲を指定します。
もしくは、直接NIST MS Search Programにリンクすることも可能です。



先ほどと同様、再構築後マススペクトルが得られ、Run IDからライブラリーサーチを行うことが可能です。

ワークフローとの組み合わせ



Deconvoluted Results: 221

Peak	RT / RTI	Model Ion	ID Name	Match	Delta R/I/E	Library	Sum Area	Sum Area %	Rel. Quant	CAS No.	FWHH	Ratio	Remarks
61	5.6981 / 527	43 HR 1: TERPINYL ACETATE, CIS-BETA- (1-CYCLO...	72 / 74	-760	FrFL_VSU_B	6105	0.0198	0.20777-47-3	17	1.7100			
62	5.7119 / 527	41 HR 1: NERAL (2,6-OCTADENAL, 3,7-DIMETHYL, Z)	88 / 91	-719	FrFL_VSU_B	7712	0.0250	0.106-26-3	19	1.5800			
63	5.7258 / 528	85 HR 1: CUMINIC ALDEHYDE (BENZALDEHYDE, P-I...	55 / 71	-721	FrFL_VSU_B	1070	0.0035	0.122-03-2	16	1.7100			
64	5.7680 / 530	91 HR 1: 3,6-OCTADIEN-1-YNE, 3,7-DIMETHYL, (Z)	82 / 87		FrFL_VSU_B	3538	0.0115	0.36602-31-0	14	1.4100			
65	5.8383 / 534	123 HR 1: NEROL (2,6-OCTADIEN-1-OL, 3,7-DIMETHY...	95 / 97	698	FrFL_VSU_B	17889	0.0580	0.106-25-2	15	1.3700			
66	5.8558 / 535	43 HR 1: LINALYL ACETATE (1,8-OCTADIEN-3-OL, ...	95 / 96	-722	FrFL_VSU_B	403689	1.3081	0.115-95-7	22	100 MLR P1			
67	5.8567 / 535	45 HR 1: BETA-PINENE	75 / 85	-443	FrFL_VSU_B	81295	0.2634	0.127-91-3	22	100 MLR P2			
68	5.9114 / 538	41 HR 1: 2,6-OCTADENAL, 3,7-DIMETHYL-, (E)-	93 / 95	-734	FrFL_VSU_B	7843	0.0254	0.141-27-5	15	1.6700			

追加されたデータ

Add Results to Main Tableボタンをクリックすると、元のテーブルに新しく情報が追加されます。

お問い合わせ先：フィルジエン株式会社

TEL: 052-624-4388 (9:00～17 : 00)

FAX: 052-624-4389

E-mail: biosupport@filgen.jp