

PLS-DA/OPLS-DA二维图

产品名称	PLS-DA/OPLS-DA二维图
公司名称	北京百泰派克生物科技有限公司
价格	.00/件
规格参数	品牌名称:百泰派克生物科技 业务范围:技术服务 经营模式:生产厂商
公司地址	北京市经济技术开发区科创六街88号院
联系电话	18244218588

产品详情

不同于主成分分析（PCA）法，Partial Least Squares Discrimination Analysis（PLS-DA）或Orthogonal PLS-DA（OPLS-DA）是一种有监督的判别分析统计方法。该方法运用PLS-DA建立代谢物表达量与样品类别之间的关系模型，来实现对样品类别的预测。分别建立两两分组比较的PLS-DA模型（图1）或OPLS-DA模型（图2），模型得到的参数评价会以表格形式提供。其中 R^2X 和 R^2Y 分别表示所建模型对X和Y矩阵的解释率， Q^2 标示模型的预测能力，理论上 R^2 、 Q^2 数值越接近1说明模型越好，越低说明模型的拟合准确性越差，通常情况下， R^2 、 Q^2 高于0.5（50%）较好，高于0.4即可接受，且两者差值不应过大。临床样本由于个体差异大，不可控，尤其大样本时， R^2 、 Q^2 大小为0.2左右亦可。图3则是对PLS-DA模型（c）的检验，直线的斜率大， Q^2 的截距为X，说明PLS-DA模型没有过拟合。同时通过计算变量投影重要度（Variable Importance for the Projection, VIP）来衡量各代谢物的表达模式对各组样本分类判别的影响强度和解释能力，从而辅助标志代谢物的筛选（通常以VIP值 >1.0 作为筛选标准）（图4）。

图1 假手术组和模型组的PLS-DA 得分图

图2 假手术组和模型组的OPLS-DA模型

图 3 PLS-DA模型的排列检验图

图 4 假手术组和模型组的PLS-DA 模型载荷图

注：红框所圈的点为VIP > 1 的代谢产物

百泰派克生物科技-您身边的生物质谱专家北京百泰派克生物科技有限公司 (Beijing Bio-Tech Pack Technology Company Ltd. 简称BTP) 从事以生物质谱为依托的生物药物表征, 大分子物质 (包括蛋白质、多肽、代谢物) 质谱分析以及小分子物质检测服务。公司采用ISO9001质量控制体系, 专业提供以质谱为基础的CRO检测分析服务, 业务范围覆盖蛋白质组学、多肽组学、代谢组学、生物药物表征、单细胞分析、单细胞质谱流式、生信云分析以及多组学生物质谱整合分析等。7大质量控制检测平台, 服务3000+企业, 10000+客户的选择, 致力于为您提供y_ _u|z_h_ i 的生物质谱分析服务!