高速液体クロマトグラフ質量分析計 LCMS™-8060NX/8060/8050/8045/8040

Application News

Peakintelligence™を用いた メタボロミクスデータの効率的な波形処理

服部考成、川嶋美帆、安田弘之、飯田 順子

ユーザーベネフィット

- ◆ 波形処理ソフトウェアPeakintelligenceを用いることで、ピーク波形処理に要する手間と時間を削減できます。
- ◆ パラメータ設定が不要で、誰が波形処理しても熟練作業者と同程度の結果が得られます。

■はじめに

メタボロミクスとは、生体機能を維持することで生じるアミノ酸や有機酸などの低分子の代謝物を網羅的に解析し、複数の試料群における差異を明らかにする学術分野です。近年、質量分析技術のめざましい発展に伴い、分析対象となる代謝物の数が増加しており、一度に百成分以上を分析することも珍しくありません。メタボロミクスのような多成分・多検体のデータの解析では、多数のピークを目視で確認する必要があるため、ピークピッキングは長時間におよび、大きな業務負担となります。さらに、人為的なミスや作業者ごとの癖は解析結果に影響するリスクとなり、これらを軽減できるピーク波形処理法が望まれています。

本稿では、AI（人工知能）を用いて開発したアルゴリズムを搭載する波形処理ソフトウェア「Peakintelligence」をメタボロミクスに適用し、波形処理を省力化・効率化した例をご紹介します。

＊Peakintelligenceは、島津製作所と富士通の共同研究開発製品です。

■従来のアルゴリズムの課題

従来のピーク検出アルゴリズムでは、クロマトグラムに応じて数多くの検出パラメータを最適化する必要がありました（図1）。それでも正しくピーク検出されない場合は手作業で修正し、作業者への大きな負担となっていました。また、これらの作業の習熟や標準化も大きな課題です。

図１　従来の波形処理パラメータの設定画面

■Peakintelligenceの波形処理アルゴリズム

Peakintelligenceは、人工知能(AI) の一種である「Deep Learning」を用いて開発された新しい波形処理技術です。AIは総合的な概念と技術のことを言い、「Machine Learning (機械学習)」や「Deep Learning」はAIを支える手法です。「Machine Learning」では解析対象の特徴を人が抽出して学習する必要があるのに対し、「Deep Learning」は解析対象の特徴の抽出を機械（PC内のソフトウェア）が行います。このため、人によるばらつき無く、大量にデータを学習させることが可能です。

Peakintelligenceでは、熟練作業者により波形処理が確認された約13,000本のクロマトグラムを使用し、クロマトグラムをデータ、ピーク開始点・終了点をラベルとしてデータセットを用意し、学習やハイパーパラメータのチューニング、性能評価を行い学習済みモデルを作成しました（図2）。この学習済みモデルを解析PCにインストールすることで、LC/MSの自動データ解析に利用しています。

＊お客様の波形処理を学習する機能は搭載しておりません。

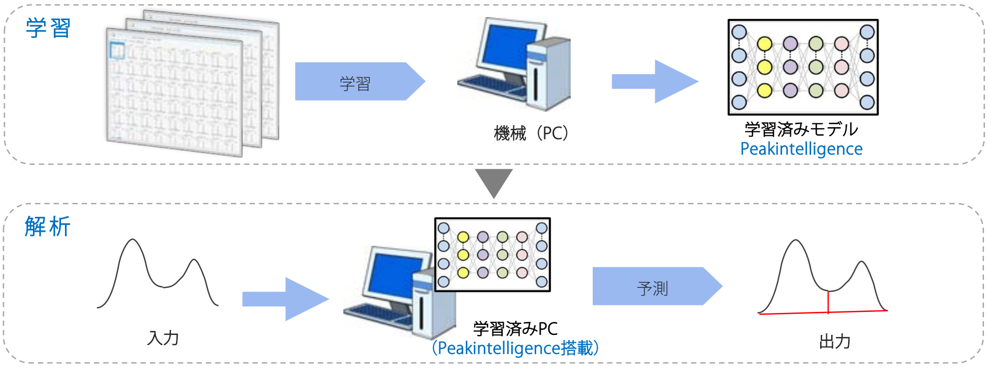

図２　Peakintelligence のイメージ図

■パラメータレスで良好な波形処理

Peakintelligenceは、熟練作業者が行った波形処理を機械学習させているため、その熟練者と同等レベルの解析を実現できます。従来のアルゴリズムとは異なり、事前のパラメータ調整は不要です。

従来のアルゴリズムとPeakintelligenceでのパラメータ設定画面を図3に示しました。波形処理の設定画面で、アルゴリズムを選択するだけでPeakintelligenceの波形処理が適用されます。複雑なパラメータ設定はありません。作業者による処理結果のばらつきが生じることはなく、属人性は排除されます。

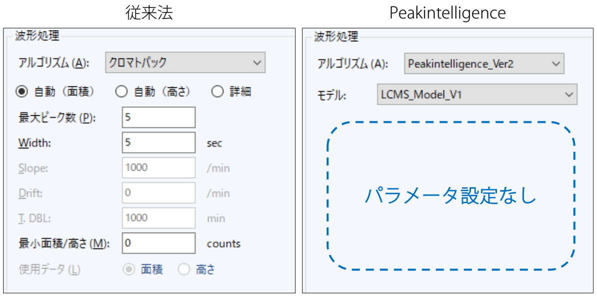

図 3　従来のアルゴリズムとPeakintelligenceのパラメータ設定画面

従来のアルゴリズム（デフォルト設定）とPeakintelligenceによる波形処理の比較例を図4, 5に示しました。従来のアルゴリズムでは、ノイズをピークと誤検出したり（図4左）、不必要な垂直分割処理をしたり（図4中央）、テーリング処理が不十分（図4右）である場合がありました。このような場合、正しくピーク検出させるために検出パラメータを適した値に変更する必要があります。一方、Peakintelligenceでは、検出パラメータを設定することなく、図5のように人の感覚に近い波形処理で正しいピーク検出が可能でした。

■波形処理時間の削減

ビール中の143成分の代謝物分析を例に、従来法(クロマトパック)との波形処理結果の比較を図6に示しました。従来法では、 ノイズを誤検出・誤同定していたものが36成分、手作業での波形処理が必要であったものが2成分でした。一方、Peakintelligence では、1成分で手作業での波形処理が必要でしたが、その他のピークは正しく検出・波形処理されました。誤検出ピークの削除作業や手動波形処理に要する時間を10秒とすると、1データ中に含まれる化合物143成分の波形処理に要する時間は、Peakintelligenceを適用することにより約6.3分→10秒となります。

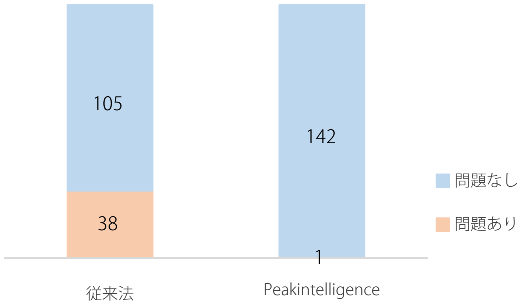

図 6　ビール中の代謝物143成分の波形処理結果の比較

■まとめ

メタボロミクスの波形処理にPeakintelligenceを適用することで、事前のパラメータ調整なしで、誤検出・誤同定するピークや手作業での波形処理が必要なピークの数を大幅に低減できました。これにより、波形処理の時間を削減し、ピークピッキングにおける作業者の負担軽減が期待できます。また、パラメータ設定が不要であることから、作業者による処理結果のバラつきのリスクがなくなり、属人性の排除に寄与します。

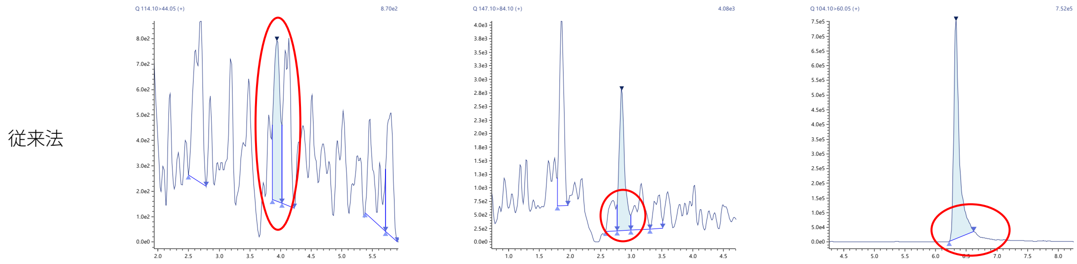

図 4　従来のアルゴリズムによる波形処理例

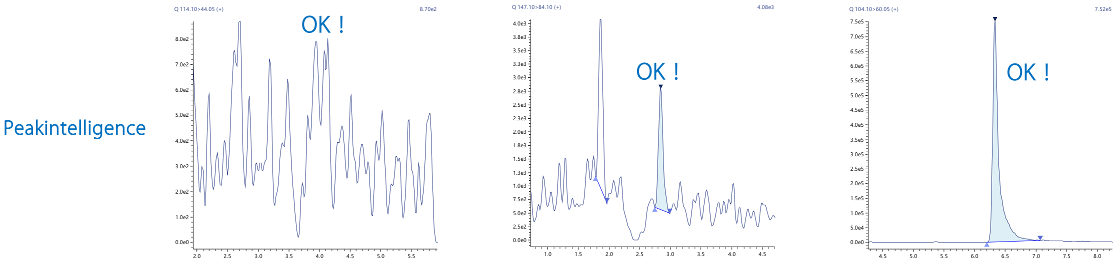

図 5　Peakintelligenceによる波形処理例

LCMSおよびPeakintelligenceは、株式会社 島津製作所の日本およびその他の国における商標です。

株式会社 島津製作所

01-00369-JP　　初版発行：2022年 4月

島津コールセンター　0120-131691

本文中に記載されている会社名および製品名は、各社の商標および登録商標です。
本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。

最新版は、島津製作所>分析計測機器の以下のサイトより閲覧できます。
https://www.an.shimadzu.co.jp/apl/index.htm
会員制情報サービス Shim-Solutions Club にご登録いただきますと、毎月の最新情報をメールでご案内します。
新規登録は、https://solutions.shimadzu.co.jp/ よりお願いします。

© Shimadzu Corporation, 2022