

PCAによるMS Imagingデータ解析ソフトの開発



(株式会社島津製作所 基盤技術研究所)

○森永浩子, 梶原茂樹, 小河潔

Development of the Software Using Principal Component Analysis for MS Imaging Data

○ H. Morinaga, S. Kajihara, K. Ogawa
(Technology Research Laboratory, Shimadzu Corporation)

Short Abstract

To confirm the effect of multivariate analysis on MS imaging, we have developed the software to apply principal component analysis (PCA). As a result of the phantom experiment, pareto scaling and varimax rotation are effective to obtain the valuable results.

はじめに

質量分析により得られた質量データは、スペクトルだけでなく空間分布として表示することで、試料中の分子のイメージング画像を得ることができる。生体組織が対象であれば、バイオマーカー探索や創薬研究に役立つと考えられる。

今回、化合物単位でのイメージングに向け、質量データに対して主成分分析(PCA:Principal Component Analysis)を適用し、その効果を調べるソフトを開発したので報告する。

方法

・サンプル 《カラー図形》

Adobe Photoshop™を用いて、インクジェットプリンタ(Calario™ PX-G5000@EPSON)固有のCyan, Magenta2色のインクのみを用いた図形をそれぞれ作成した後、シルバーラベル紙に重ね合わせて印刷した。カラー図形のサンプルに対して約980 μm四方の領域で50×50点の質量分析を行い、2色のインクが別々の特徴的なピークを持つことを確認した。

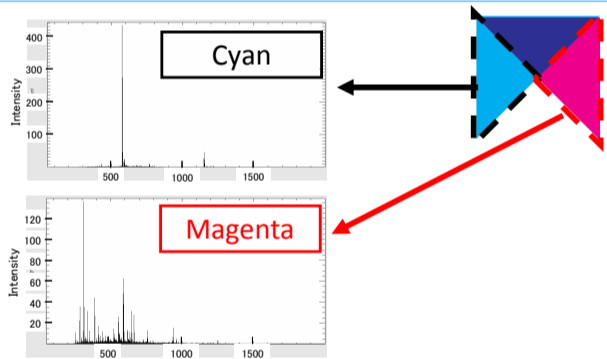
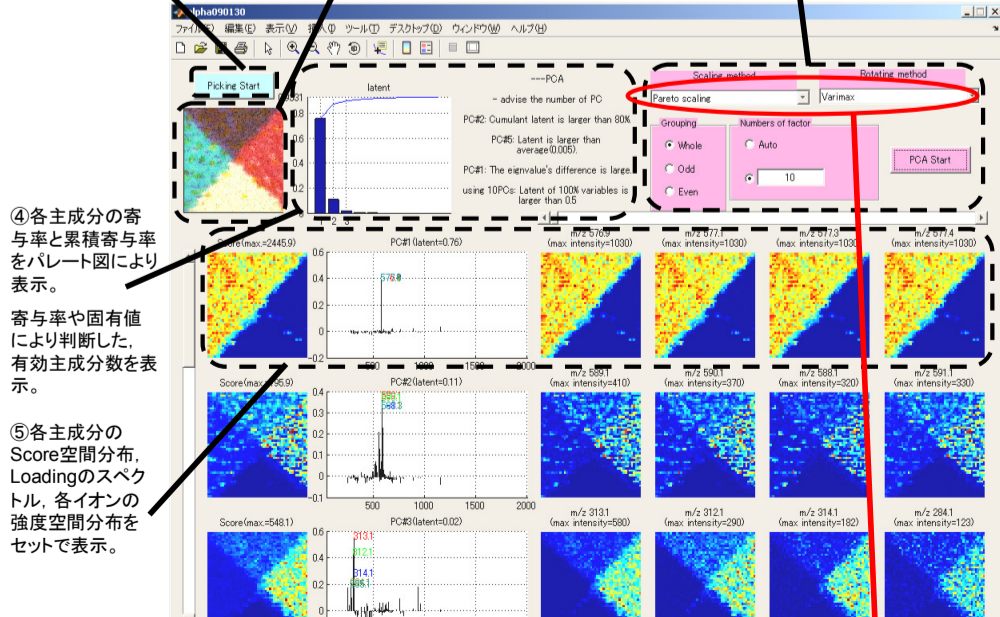


Fig.1 Color print and mass spectrum of cyan/magenta area.

・開発ソフトウェアの外観

MSイメージングデータに対して適用するscaling法、軸回転法を選択し、PCA結果を比較検討できるソフトウェアを開発した。

- ①データファイルを選択。ダイアログで質量許容誤差(0.5Da)、ピーク数(200)を入力し、ピークピッキング開始。
- ②対象領域の光学画像を表示。
- ③Scaling法、軸回転法を選択。回転因子数(主成分数)は、寄与率による自動決定あるいは入力により指定。PCA適用ピクセルのグループ分けの有無を選択。
[PCA Start]ボタンによりPCA実行。



Scaling法は「無し」、「Centering」、「Pareto scaling」、「Auto scaling」、「Range scaling」、「Vast scaling」、「Level scaling」、「Log transformation」、「Power transformation」の9種類より選択可能。

軸回転法は「無し」、「Orthomax」、「Varimax」、「Quartimax」、「Equamax」、「Parsimax」、「Promax」の7種類より選択可能。

結果

・PCA(Centering)

各インクの特徴的ピークが複数の主成分に分散してしまう結果となった。

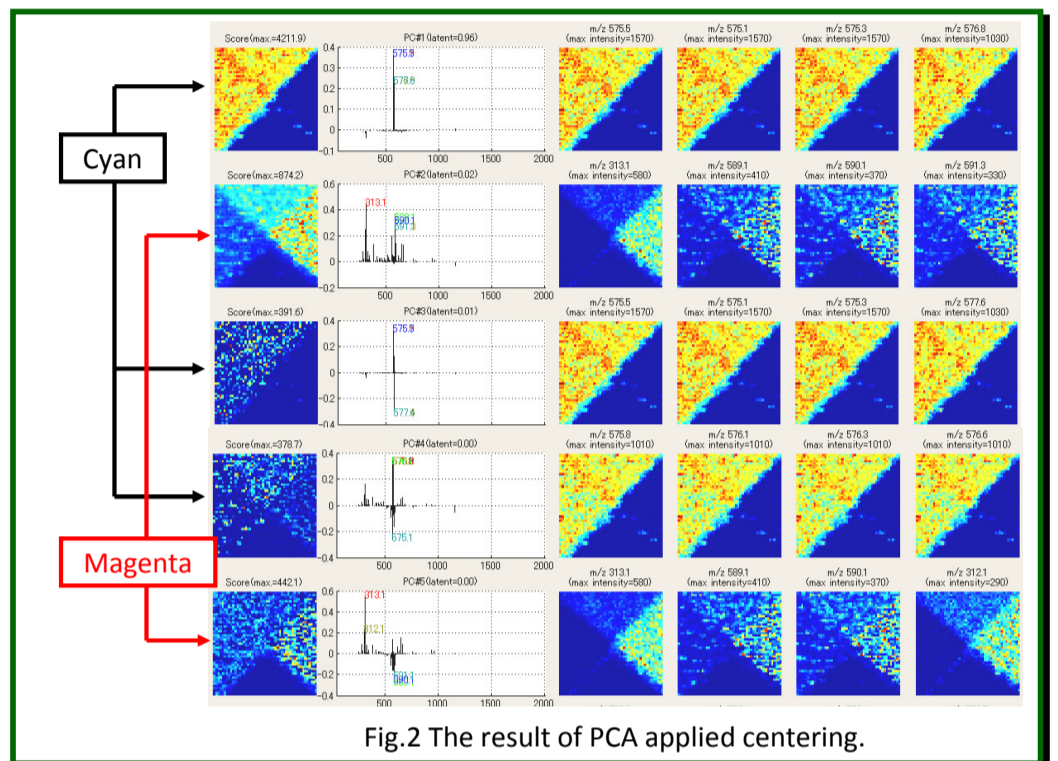


Fig.2 The result of PCA applied centering.

・PCA(Pareto Scaling) + Varimax

上位5つの主成分それぞれには、同位体ピークや類似した空間分布を示すピークが独立してまとまる結果が得られた。Score空間分布(Fig.3左部)と各イオン強度分布(Fig.3右部)が一致するため、PCA結果が妥当であることがわかった。

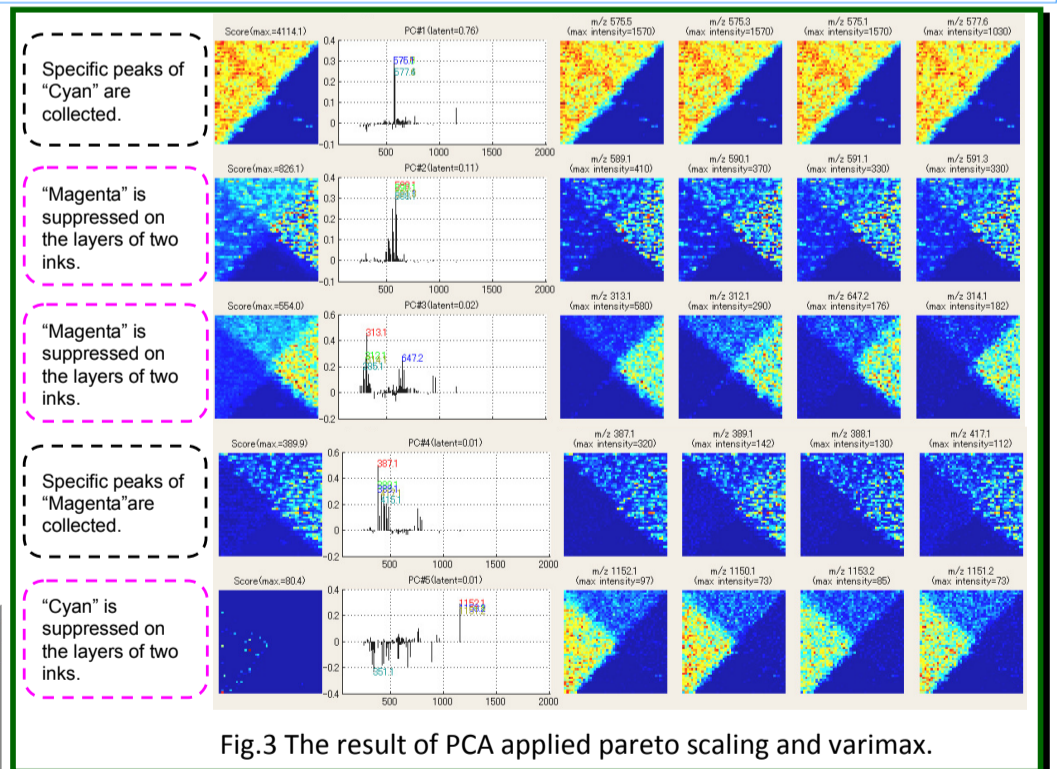


Fig.3 The result of PCA applied pareto scaling and varimax.

奇/偶数ピクセルでグループ分けを行った結果は、全ピクセルの場合と同一の結果となった。

Scaling法について

Centering: $\tilde{x}_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_i$

Pareto scaling: $\tilde{x}_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_i}{\sqrt{S_i}}$ ただし S_i は標準偏差

軸回転法について

Varimax: 各主成分のloading matrixの2乗の分散を最大にするよう、軸を直交回転させる。

結論

MSイメージングにおいて、scalingや軸回転法(回転軸の個数)を選択し、PCAによって最適な結果を検討できるソフトウェアを開発し、有効性を確認した。本例では、pareto scalingとvarimax回転が有効であると分かった。今後、同一成分を含む複数の化合物を、別々の主成分として抽出する手法も検討する予定である。