

# Кластеризация данных масс-спектрометрии

И. Чернявский  
Руководитель: С. Николенко

СПБАУ

13.12.2012

- *Изображающая масс-спектрометрия (ИМС)* – метод биохимического анализа срезов тканей
- MALDI (matrix-assisted laser desorption/ionization) ИМС – один из наиболее распространенных вариантов ИМС
- С помощью ИМС мы получаем *масс-спектры* точек на поверхности среза
- Масс-спектр – вектор интенсивностей для различных значений  $m/z$  (масса к заряду)
- Результатом является гипер-изображение с большим числом каналов для разных значений  $m/z$

- *Изображающая масс-спектрометрия (ИМС)* – метод биохимического анализа срезов тканей
- MALDI (matrix-assisted laser desorption/ionization) ИМС – один из наиболее распространенных вариантов ИМС
- С помощью ИМС мы получаем *масс-спектры* точек на поверхности среза
- Масс-спектр – вектор интенсивностей для различных значений  $m/z$  (масса к заряду)
- Результатом является гипер-изображение с большим числом каналов для разных значений  $m/z$

- *Изображающая масс-спектрометрия (ИМС)* – метод биохимического анализа срезов тканей
- MALDI (matrix-assisted laser desorption/ionization) ИМС – один из наиболее распространенных вариантов ИМС
- С помощью ИМС мы получаем *масс-спектры* точек на поверхности среза
- Масс-спектр – вектор интенсивностей для различных значений  $m/z$  (масса к заряду)
- Результатом является гипер-изображение с большим числом каналов для разных значений  $m/z$

## Данные:

- Получены путем анализа среза мозга крысы
- Разрешение: 201x120
- # $m/z$  значений: 3045 (2.5-10 kDa)
- Данные предоставлены Ф. Александровым

## Задача:

- Найти характерные паттерны на  $m/z$ -изображениях

## Предыдущие подходы:

- PCA
- Segmentation-based

Предлагаемый подход – использовать алгоритмы кластеризации для  $m/z$ -изображений

Данные:

- Получены путем анализа среза мозга крысы
- Разрешение: 201x120
- # $m/z$  значений: 3045 (2.5-10 kDa)
- Данные предоставлены Ф. Александровым

Задача:

- Найти характерные паттерны на  $m/z$ -изображениях

Предыдущие подходы:

- PCA
- Segmentation-based

Предлагаемый подход – использовать алгоритмы кластеризации для  $m/z$ -изображений

Данные:

- Получены путем анализа среза мозга крысы
- Разрешение: 201x120
- # $m/z$  значений: 3045 (2.5-10 kDa)
- Данные предоставлены Ф. Александровым

Задача:

- Найти характерные паттерны на  $m/z$ -изображениях

Предыдущие подходы:

- PCA
- Segmentation-based

Предлагаемый подход – использовать алгоритмы кластеризации для  $m/z$ -изображений

Данные:

- Получены путем анализа среза мозга крысы
- Разрешение: 201x120
- # $m/z$  значений: 3045 (2.5-10 kDa)
- Данные предоставлены Ф. Александровым

Задача:

- Найти характерные паттерны на  $m/z$ -изображениях

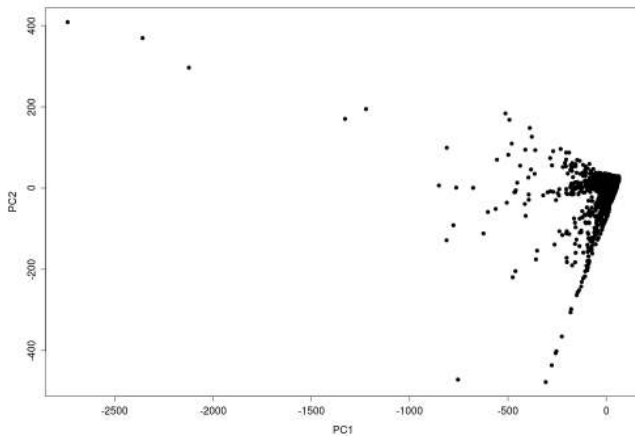
Предыдущие подходы:

- PCA
- Segmentation-based

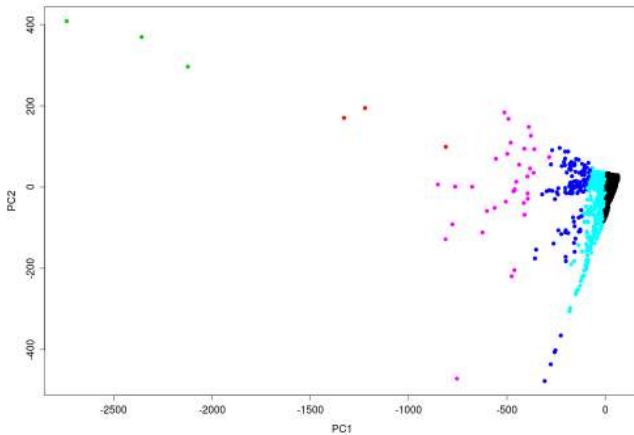
Предлагаемый подход – использовать алгоритмы кластеризации для  $m/z$ -изображений



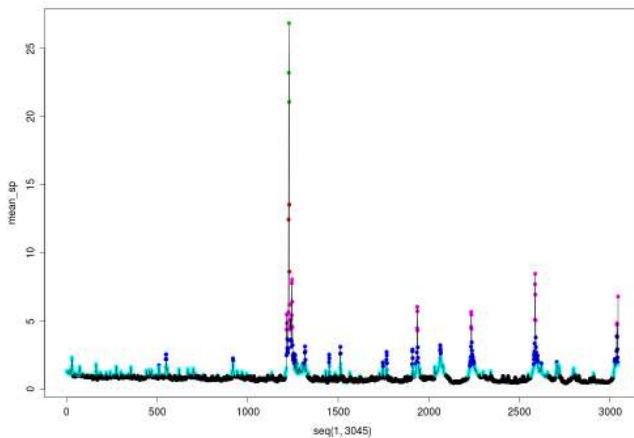
PCA:



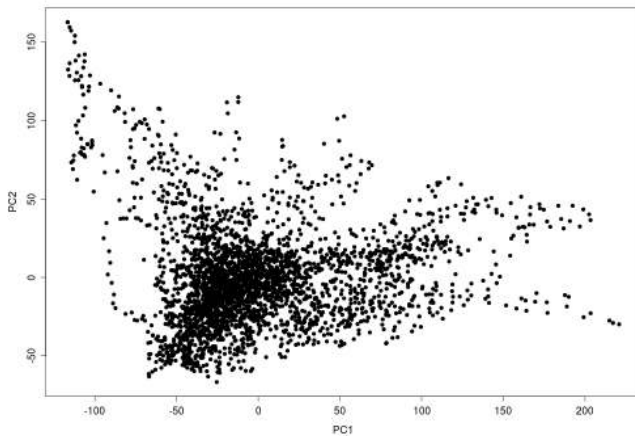
PCA + k-means:



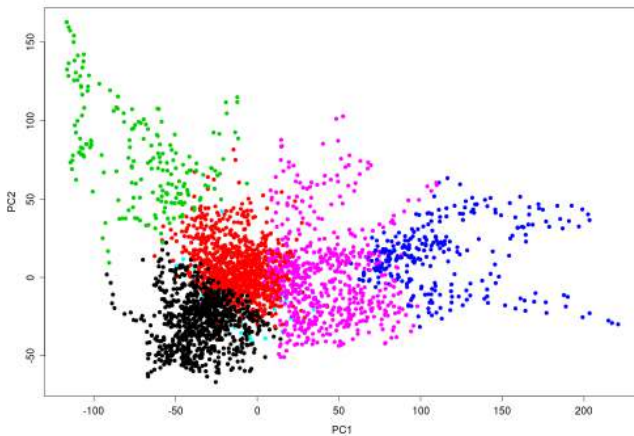
k-means + средний спектр:



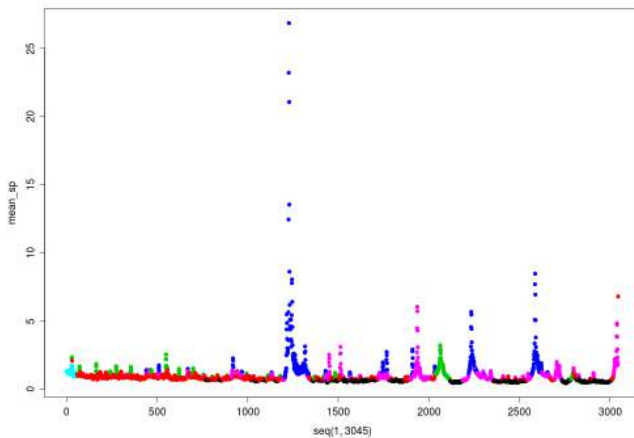
PCA, нормализация:



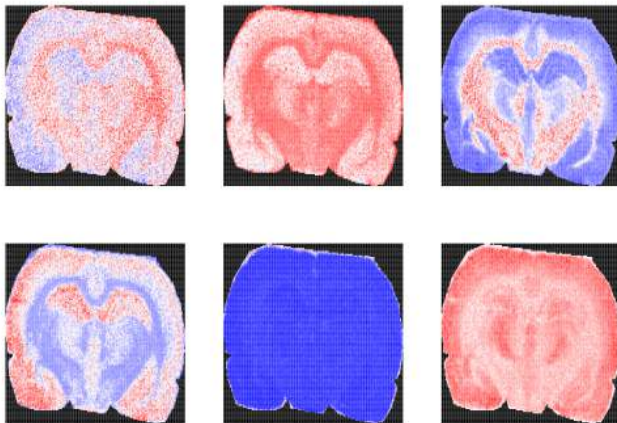
PCA + k-means, нормализация:



k-means + средний спектр, нормализация:



Центры кластеров:



Дальнейшая работа:

- Изучить поведение метода при разных параметрах
- Изучить получающиеся кластеры (representative images, outliers)
- Использовать EM-кластеризацию



Спасибо за внимание!  
Q&A