

独立成分分析による多変量ラマン信号成分分解の検討

(¹青学大) ○島田 林太郎¹

Composition analysis of multivariate Raman spectral data with independent component analysis (¹Aoyama Gakuin University) ○Rintaro Shimada¹

Independent Component Analysis (ICA) is applied to the composition analysis of a Raman spectral data set obtained from an inhomogeneous mixture of various chemical species. Systematic study of artificially prepared model Raman spectra data sets revealed that spectral preprocessing through numerical differentiation enhanced the statistical independence of components' spectra. Hence, ICA on a differentiated Raman data set yielded improved resolution. Application to experimentally obtained Raman data sets from the biological specimen are also demonstrated.

Keywords : Spectral Analysis; Multivariate Analysis; Raman Spectroscopy

細胞など非常に複雑な化学系を非侵襲 *in situ* 分析する手法の一つとしてラマン分光法は非常に強力である。しかし、多数の化学成分の混合したラマンスペクトルの解析は簡単ではなく、その定量・定性的な解析には専門的な分光学的知識が必須であった。本研究では、統計的独立性をもとに重畳した信号を複数の構成成分信号へと分離する手法である独立成分分析(ICA)を用いて、不均一混合物から得られた混合ラマンスペクトルを簡便に成分スペクトルへ分離する方法について検討した。

まず、人工的に準備したモデル成分スペクトルを用い、ラマン信号への ICA の適用可能性を調べたところ、ラマンスペクトルそのものは統計的独立性が低く、そのまま ICA の適用は困難であった。そこでスペクトルの独立性を向上させる前処理を検討したところ、スペクトル微分により成分スペクトル間の独立性は大きく向上することが明らかとなった。一方で、スペクトル中のノイズが ICA への適用性を著しく低下させる要因となることも判明した。以上の結果から、本研究では図 1 に示すスキームに基づく新たなスペクトル成分分解法を提案する。(1) 多変量混合ラマンデータ \mathbf{A} に対し、主成分分析により次元削減及びノイズの低減を行う。(2)主成分ローディングスペクトルを数値微分し(\mathbf{P}')、さらに ICA を用いて成分分解のための分離行列 \mathbf{W} を決定する。(3)微分は線形処理であるため、微分前の主成分ローディングスペクトル \mathbf{P} に直接分離行列 \mathbf{W} を適用し、独立(化学)成分スペクトル \mathbf{P}_{chem} を得る。(4)主成分スコア \mathbf{T} に分離行列の逆行列を作用させ、独立(化学)成分のスコア(定量情報) \mathbf{T}_{chem} を得る。講演では、生体試料由来の実測データへ本手法を適用した結果について報告し、その適用範囲や限界について議論する。

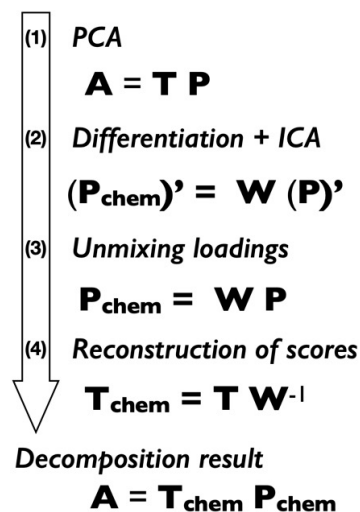


図 1 解析スキーム