

论文

核磁共振代谢组学数据预处理中的自适应分段积分方法

董继扬, 徐乐, 许晶晶, 陈忠

厦门大学物理系, 固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门 361005

摘要:

提出一种用于核磁共振代谢组学数据预处理的自适应分段积分方法. 通过计算各数据点统计特性, 并根据相邻数据点的统计差异性进行自适应积分, 克服了目前普遍采用的等间隔分段积分法可能存在的缺陷(如统计差异性相反的信号相互抵消、微弱特征信号被掩盖及谱图信噪比下降等), 从而避免了对后续统计分析所产生的负面影响. 为比较自适应分段积分和等间隔积分对数据预处理的效果, 分别采用计算机模拟数据和饮食差异人群两种模型进行分析. 研究表明, 新方法能够有效地削弱噪声和非特异信号的影响, 提高后续的主成分分析结果的可靠性, 使代谢组学数据分析更具生物学意义.

关键词: 核磁共振 代谢组学 自适应分段积分 统计差异性 数据预处理

Adaptive Binning Method for NMR Spectroscopic Metabonomics Data Preprocessing

DONG Ji-Yang*, XU Le, XU Jing-Jing, CHEN Zhong*

State Key Laboratory of Physical Chemistry of Solid Surface, Physics Department, Xiamen University, Xiamen 361005, China

Abstract:

A novel adaptive binning method was proposed for NMR metabonomic data preprocessing. The statistical discrepancy of each spectral data point is estimated, then the contiguous data points are integrated adaptively based on the statistical discrepancy. Comparing to the fixed width binning, the proposed method can overcome the following negative effects on the subsequently statistical analysis. For example, signals with opposite statistical discrepancies may be superposition in a same region. Both simulated NMR data and experimental spectra from dietary intervention individuals were employed to validate the performance of the adaptive binning. The results show that the proposed method effectively mitigates disturbance from spectral noises and signals without statistical significance. It can increase the interpretability of PCA loading results so that the metabonomics results are more biological significant.

Keywords: NMR spectroscopy Metabonomics Adaptive binning Statistical discrepancy Data preprocessing

收稿日期 2009-01-13 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家卫生部科学研究基金-福建省卫生教育联合攻关计划(批准号: WKJ2008-2-36)和国家自然科学基金(批准号: 10605019)资助.

通讯作者: 董继扬, 男, 博士, 副教授, 从事核磁共振代谢组学研究, E-mail: jydong@xmu.edu.cn; 陈忠, 男, 博士, 教授, 博士生导师, 从事核磁共振波谱学研究, E-mail: chenz@xmu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

- [1]Nicholson J. K., Lindon J. C., Holmes E.. Xenobiotica[J], 1999, 29: 1181—1189
- [2]Wang Y. L., Holmes E., Tang H. R., et al.. J. Proteome. Res.[J], 2006, 5: 1535—1542
- [3]Gao H. C., Dong B. J., Liu X., et al.. Anal. Chim. Acta[J], 2008, 624(1): 269—277
- [4]HUANG Xin(黄欣), GONG Yi-Fei(龚益飞), WANG Yi(王毅), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(813KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao}\)](#)
KB)

参考文献[PDF]

参考文献

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

核磁共振

代谢组学

自适应分段积分

统计差异性

数据预处理

本文作者相关文章

PubMed

校化学学报[J], 2008, 29(4): 714—719

[5]ZHANG Hao(张浩), YAN Li-Juan(严丽娟), LIN Lin(林琳), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2008, 29(11): 2171—2173

[6]Xu J. J., Zhang J., Dong J. Y., *et al.*. Anal. Bioanal. Chem.[J], 2009, 393: 1657—1668

[7]WU Qiao-Feng(吴巧凤), YU Shu-Guang(余曙光), YAN Xian-Zhong(颜贤忠). J. Biomed. Eng.(生物医学工程学杂志)[J], 2008, 25(1): 501—504

[8]Bobbie-Jo M. W., David F. L., Kristin H. J., *et al.*. J. Pharmaceut. Biomed.[J], 2005, 39: 830—836

[9]Davis R. A., Charlton A. J., Godward J., *et al.*. Chemometr. Intell. Lab.[J], 2007, 85: 144—154

[10]DONG Ji-Yang(董继扬), XU Le(徐乐), CAO Hong-Ting(曹红婷), *et al.*. Chin. J. Magn. Reson.(波谱学杂志)[J], 2007, 24(4): 381—393

[11]Paul E. A., Nicholas V. R., Nichols J. D., *et al.*. Metabolomics[J], 2008, 4: 261—272

[12]SONG Feng-Xi(宋枫溪), GAO Xiu-Mei(高秀梅), LIU Shu-Hai(刘树海), *et al.*. Chin. J. Comput.(计算机学报)[J], 2005, 28(11): 1915—1922

[13]Dieterle F., Ross A., Schlotterbeck G., *et al.*. Anal. Chem.[J], 2006, 78: 4281—4290

本刊中的类似文章

1. 齐剑,高秀香,赵梅仙,向俊峰,林崇熙,徐怡庄,吴瑾光. 氧氟沙星的核磁共振波谱性质研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 913-917
2. 黄欣, 龚益飞, 王毅, 瞿海斌, 程翼宇. 代谢组学方法研究水飞蓟宾对四氯化碳致小鼠肝损伤的保护作用[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 714-719
3. 李全阳,夏文水,徐德平. 一种乳酸菌胞外多糖糖链结构解析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 655-657
4. 廖沛球, 吴惠丰, 张晓宇, 李晓晶, 李中峰, 李伟生, 吴亦洁, 裴奉奎. 魔角旋转核磁共振代谢组学方法对镉、钼急性生物效应的比较研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1448-1452
5. 郝超伟, 赵莹, 周勇, 周丽娟, 徐怡庄, 王笃金, 徐端夫. PVP-LiCl-DMF溶液体系的流变学特性及相互作用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 575-579
6. 邓惠文, 范明霞, 李建奇, 余亦华. 大鼠肝脏纤维化病变的核磁共振研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2329-2333
7. 屠春来, 郑超, 陈燕, 舒谋海. 基于杯芳烃的分子容器的合成及其对有机铵的可逆识别[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1917-1919
8. 罗权, 方显扬, 邓志威, 王金凤. 突变嗜热古菌蛋白[P62A]Ssh10b主链构象影响的核磁共振研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 546-550
9. 杨春晖; 陈静文; 李勤; 彭昆; 潘鑫复; 崔育新. NMR确定手性 α -羟基酮的绝对构型[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1295-1297
10. 徐乃库, 肖长发, 封严. 甲基丙烯酸正丁酯/甲基丙烯酸 β 羟乙酯共聚吸附功能纤维的制备及表征[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1677-1683
11. 周丹, 陈雷, 于吉红, 邓风, 徐如人. 层状磷酸铝UT-4的固体核磁共振研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 991-994
12. 张洁, 严丽娟, 林琳, 陈文贵, 宋秀宇, 颜晓梅, 杭纬, 黄本立. 基于UPLC-*oa*TOF-MS的糖尿病及糖尿病肾病的代谢组学研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2171-2173
13. 杜为红, 尹国维, 李彦杰, 魏群, 李娟, 方维海. 鼠脑红蛋白突变体F106L与氰根的结合作用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1547-1551
14. 董慧茹, 陶红, 王楠楠, 毕鹏禹. 光谱法分析乙丙共聚物的序列结构及链节比[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(5): 961-965
15. 王俊美, 欧阳捷, 许美凤, 邓志威, 马丰年, 张聪. 人工合成化合物S-A的核磁共振研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 687-690
16. 李彩今, 李守贵, 肖丰收. 硅铝酸钠溶液中 ^{27}Al 和 ^{29}Si 的核磁共振研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(6): 1092-1094
17. 廖沛球, 魏来, 刘威, 吴亦洁, 李晓晶, 倪嘉缙, 裴奉奎. 给药硝酸钆后大鼠完整肝组织及肝组织提取物的NMR代谢组学研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(6): 1116-1120

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					META http-equiv=Type content=charset=ui Appreciation f star h