

Very Basic of IMAGEREVEAL MS

差異解析を例に

起動用アイコン



起動画面

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The main window is titled "差異解析 | No Title - IMAGEREVEAL". The interface is divided into several panels:

- Left Panel:** Contains a sidebar with various icons for file management (e.g., "IMDXファイルを追加"), image settings, and data processing (e.g., "前処理設定", "データ行列設定").
- Top Panel:** Includes a menu bar with options like "ファイル", "表示", "検索", "設定", "オプション", "拡張機能", and "ヘルプ".
- ROIリスト:** A table with columns for "No.", "使用", "ファイル名", "ROI名", and "属性".
- データ行列テーブル:** A table with columns for "No.", "使用", "タグ", "ラベル", "m/z", "組成式", "アダクトイオン", "マトリックス", and "極性".
- MSイメージ:** A panel for mass image processing, featuring a "表示" dropdown, "MS" and "REF" buttons, and a large dark area for the image. It also includes input fields for "m/z±許容幅", "化合物名/コメント", "アダクトイオン", "ファイル名", and "タイプ", along with an "情報のコピー" button.
- MSイメージ一覧:** A panel for listing mass images, with buttons for "MSイメージ追加", "削除", "拡大", "縮小", "ソート", "表示", "MS", "REF", "m/z検索", "重ね合わせ", and "四則演算".
- グラフ:** A panel for graph visualization, with tabs for "スペクトル" and "箱ひげ図", and buttons for "ピークピッキング".
- 解析パラメータ:** A panel for analysis parameters, with a "ノーマライズ未計算" tab and a table with columns for "No.", "Name", and "Value".

In the center, a dialog box titled "解析手法の選択" (Select Analysis Method) is open, highlighted with a green rounded rectangle. It contains the following options:

- プロジェクトファイルを開く (Open Project File)
- 新規プロジェクト (New Project)
- 差異解析 (Difference Analysis)
- 画像解析 (Image Analysis)
- 定量解析 (Quantitative Analysis)
- スクリーニング (Screening)
- スクリーニング (定量) (Quantitative Screening)

プロジェクトの選択



既存のプロジェクト
ファイルを開く

変動を知りたい

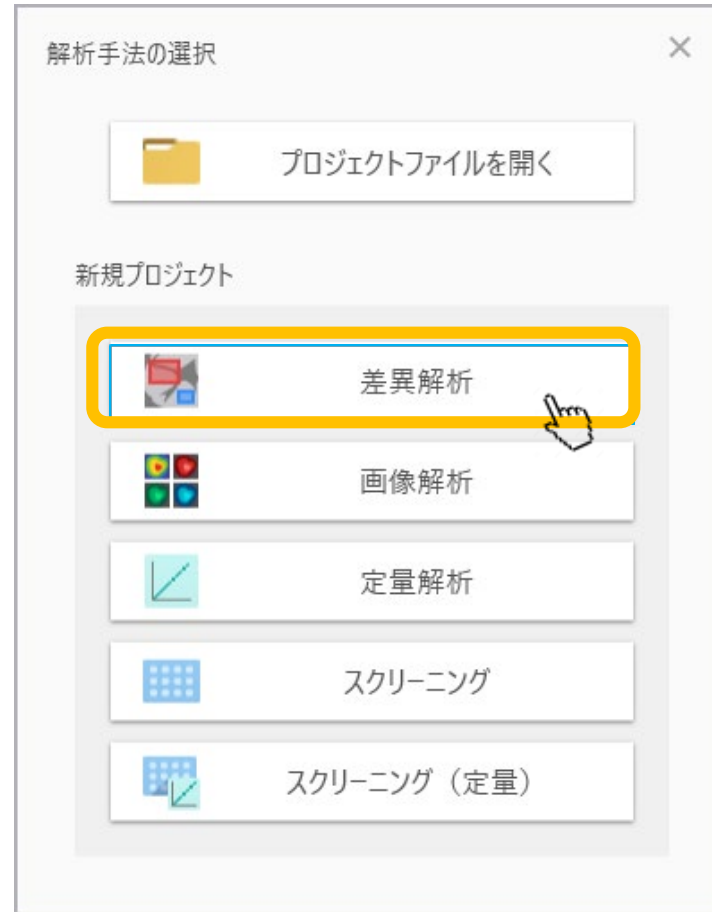
局在を知りたい

濃度でイメージングしたい

沢山の試料を処理したい

沢山の試料を定量したい

プロジェクトの選択例（差異解析）



既存のプロジェクト
ファイルを開く

変動を知りたい

局在を知りたい

濃度でイメージングしたい

沢山の試料を処理したい

沢山の試料を定量したい

基本的にアシスタントバーを上から下に進めば解析完了

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. On the left, a vertical sidebar contains various tool icons. A large green arrow points downwards along this sidebar, indicating the sequence of operations. The main workspace is divided into several panels:

- ROIリスト** (ROI List): A table with columns for No., 使用 (Use), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), and 属性 (Attribute).
- データ行列テーブル** (Data Matrix Table): A table with columns for No., 使用 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, 組成式 (Chemical Formula), アダクトイオン (Adduct Ion), マトリックス (Matrix), and 極性 (Polarity).
- MSイメージ** (MS Image): A large dark area for displaying mass spectra, with a right-hand panel for metadata including m/z許容幅 (m/z Tolerance), 化合物名/コメント (Compound Name/Comment), アダクトイオン (Adduct Ion), ファイル名 (File Name), and タイプ (Type).
- グラフ** (Graph): A section for spectral analysis with sub-tabs for 'スペクトル' (Spectrum) and '箱ひげ図' (Box Plot). It includes a 'ROI平均' (ROI Average) dropdown and a 'ピークピッキング' (Peak Picking) button.
- MSイメージ一覧** (MS Image List): A panel for managing multiple MS images, featuring buttons for 'MSイメージ追加' (Add MS Image), '削除' (Delete), '表示' (Display), 'ソート' (Sort), 'm/z検索' (m/z Search), '重ね合わせ' (Overlay), and '四則演算' (Arithmetic Operations).
- 解析パラメータ** (Analysis Parameters): A table for parameters, currently showing 'ノーマライズ未計算' (Not Normalized).

No.	Name	Value
	ノーマライズ未計算	

1. データファイル(.lmdx)を追加

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. On the left sidebar, the 'ファイル' (File) menu is expanded, and the 'IMDXファイルを追加' (Add IMDX File) button is highlighted with a blue arrow. Below it, the 'データ行列' (Data Matrix) section is visible, with the 'データ行列設定' (Data Matrix Settings) button highlighted. The main window shows the 'データ行列テーブル' (Data Matrix Table) and the 'イメージファイルインポート' (Image File Import) dialog box. The dialog box lists several files to be imported, including 'Liver_Slide9_9AA_200-600_A_2.5x_1_A...' and 'Testicle_9AA_Pi_Sl_x_1_AREA01.lmdx'. The 'MSイメージ' (MS Image) panel on the right is also visible, showing fields for 'm/z許容幅' (m/z Tolerance), '化合物名/コメント' (Compound Name/Comment), 'アダクトイオン' (Adduct Ion), 'ファイル名' (File Name), and 'タイプ' (Type).

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	組成式	アダクトイオン	マトリックス	極性

No.	Name	Matrix

No.	更新日時	種類	サイズ
<input checked="" type="checkbox"/>	2018/05/30 18:04	Imaging Data File	17,859 KB
<input checked="" type="checkbox"/>	2018/05/30 18:04	Imaging Data File	48,712 KB
<input checked="" type="checkbox"/>	2018/05/30 18:04	Imaging Data File	16,300 KB
<input checked="" type="checkbox"/>	2018/07/05 22:09	Imaging Data File	354 KB
<input checked="" type="checkbox"/>	2018/05/30 18:04	Imaging Data File	166,132 KB

データを3個読み込んだ例



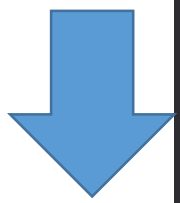
The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing three loaded files.

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Center
2		Liver_Slide...	All	Center
3		Liver_Slide...	All	Center

- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns for No., 使用, タグ, ラベル, m/z, 組成式, アダクトイオン, マトリックス, and 極性.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the data.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of three MS images, each with a TIC (Total Ion Chromatogram) plot below it. The three images are highlighted with a green box.
- グラフ (Graph):** Two mass spectra plots showing intensity vs. m/z. The top plot is labeled 'スペクトル 箱ひげ図' and the bottom plot is 'Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont.2.5x_1_AREA01.imdx Whole_Ave.'.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table for parameters like 'ノーマライズ未計算'.

2. 画像レジストレーション



画像レジストレーション

01. 参照画像の選択 02. 粗い画像レジストレーション 03. 細かい画像レジストレーション

IMDXファイルリスト

- Liver_Slide9_9AA_200-600_A_2.5x_1_AREA01.imdx
- Liver_Slide9_9AA_200-600_B_2.5x_1_AREA01.imdx
- Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2.5x_1_AREA01.imdx

参照画像

Reference Image 1 Reference Image 2

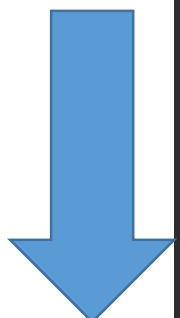
必要があれば光学像とMSイメージデータの位置を合わせます。

Intensity

m/z

m/z	Intensity
209.037	~100000
229.053	~100000
230.037	~1000000
273.039	~1500000
274.039	~100000
277.075	~100000
371.135	~100000
388.140	~1000000
385.144	~1500000
421.121	~1000000
465.300	~100000
514.282	~1000000
599.317	~100000

3. ROI設定



ROI設定

IMDXファイル: Liver_Slide9_9AA_200-600_A_2.5x_1_AREAC

参照画像: Reference Image 1

ROI設定

濃度: [Slider]
コントラスト: [Slider]
透明度: [Slider]
平滑化フィルター: なし

MSイメージ設定

ファイル: [Dropdown]
MSイメージ: TIC

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	データ
1	<input type="checkbox"/>	Liver_Slide9_9AA_200-6...	All	Center	
2	<input type="checkbox"/>	Liver_Slide9_9AA_200-6...	All	Center	
3	<input type="checkbox"/>	Liver_Slide9_9AA_200-6...	All	Center	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Liver_Slide9_9AA_200-6...	ROI001	outside	
5	<input checked="" type="checkbox"/>	Liver_Slide9_9AA_200-6...	ROI002	Center	
6	<input checked="" type="checkbox"/>	Liver_Slide9_9AA_200-6...	ROI003	Edge	

興味のある部分を指定します。

MSイメージ: [Color Scale]
ROI表示設定: 透明度 [Slider] ラベル 表示する

解析パラメータ

MS/MS

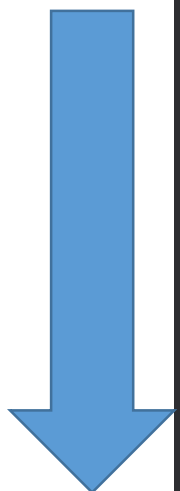
No. 1 2 3 4 5 6

209.034 274.039 306.075 371.135 421.121 465.300 514.282 599.317

0E+00 200 250 300 350 400 450 500 550 600

m/z

4. 前処理設定



前処理設定

ノーマライズ なし TIC XIC

インポート エクスポート

No.	使用	m/z	許容幅
ノーマライズの設定をします。			

基準値を設定

最小しきい値 (%)

指定方法 範囲 中心±許容誤差

OK キャンセル

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Center
2		Liver_Slide...	All	Center
3		Liver_Slide...	All	Center
4	✓	Liver_Slide...	ROI001	outside
5	✓	Liver_Slide...	ROI002	Center
6	✓	Liver_Slide...	ROI003	Edge

解析パラメータ

No.	Name	Value
ノーマライズ未計算		

グラフ

スペクトル 箱ひげ

ピークピッキング

Intensity

2E+06 1E+06 0E+00

200 250

229.03 273.07 274.07 209.03 179.03

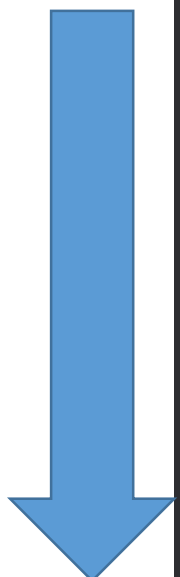
化合物名/コメント: TIC

ファイル名: Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2_5x_1_AREA01.imdx

タイプ: TIC

情報のコピー

5. 前処理



ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Center
2		Liver_Slide...	All	Center
3		Liver_Slide...	All	Center
4	✓	Liver_Slide...	ROI001	outside
5	✓	Liver_Slide...	ROI002	Center
6	✓	Liver_Slide...	ROI003	Edge

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	組成式	アダクトイオン	マトリックス	極性
-----	----	----	-----	-----	-----	---------	--------	----

データ行列を作成

ノーマライズ係数計算中...3220

キャンセル

MSイメージ

化合物名/コメント:
TIC

ファイル名:
Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2_5x_1_AREA01.imdx

タイプ:
TIC

500 μ m

情報のコピー

MSイメージ一覧

MSイメージ追加

ソート

表示

m/z検索

重ね合わせ

四別演算

Liver_Slide9_9A... TIC

Liver_Slide9_9A... TIC

Liver_Slide9_9A... TIC

解析パラメータ

ノーマライズ未計算

No.	Name	Value
-----	------	-------

グラフ

ピークピッキング

Intensity

m/z

229.053, 274.040, 370.134, 421.121, 468.111, 514.282, 599.317

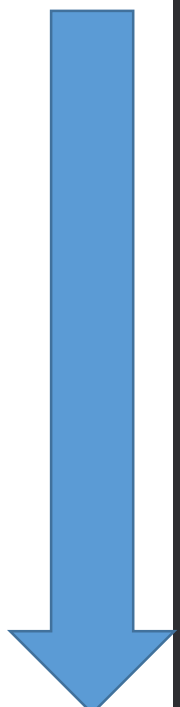
Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2.5x_1_AREA01.imdx Whole_Ave.

Intensity

m/z

230.037, 273.039, 385.144, 386.140, 421.121, 465.300, 514.282, 599.317

7. データ行列計算



ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Center
2		Liver_Slide...	All	Center
3		Liver_Slide...	All	Center
4	✓	Liver_Slide...	ROI001	outside
5	✓	Liver_Slide...	ROI002	Center
6	✓	Liver_Slide...	ROI003	Edge

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	組成式	アダクトイオン	マトリックス	極性
-----	----	----	-----	-----	-----	---------	--------	----

MSイメージ

化合物名/コメント:
TIC

ファイル名:
Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2_5x_1_AREA01.imdx

タイプ:
TIC

500 μ m

情報のコピー

MSイメージ一覧

MSイメージ追加

MSイメージ: Liver_Slide9_9A... (TIC), Liver_Slide9_9A... (TIC), Liver_Slide9_9A... (TIC)

グラフ

スペクトル

ピークピッキング

Intensity vs m/z

229.053, 274.040, 370.134, 421.121, 468.111, 514.282, 599.317

Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2.5x_1_AREA01.imdx Whole_Ave.

Intensity vs m/z

230.037, 273.039, 385.144, 388.140, 421.121, 465.300, 514.282, 599.317

データ行列計算

データ行列を作成

計算中...3392

キャンセル

解析パラメータ

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
2	ノーマライズ基準値設定	オフ
3	ノーマライズ最小しきい値(%)	0

8. 検定

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Group A
2		Liver_Slide...	All	Group A
3		Liver_Slide...	All	Group A
4	✓	Liver_Slide...	ROI001	Group A
5	✓	Liver_Slide...	ROI002	Group B
6	✓	Liver_Slide...	ROI003	Group C

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003
1	✓		273.04150	1.818e-004	697514.876	752243.993	718
2	✓		230.04050	1.771e-023	361372.476	312953.671	413
3	✓		385.14503	1.897e-013	334828.087	345055.517	405
4	✓		241.01762	1.242e-002	218826.462	232437.596	211
5	✓		229.05424	2.249e-020	149114.701	129665.013	189
6	✓		370.13479	5.993e-005	160400.847	142544.646	152
7	✓		386.14078	1.896e-006	142086.361	138218.511	161
8	✓		232.03642	8.926e-010	114532.579	102706.255	135
9	✓		274.03961	3.940e-001	125326.759	127112.316	131
10	✓		231.04678	3.840e-014	102745.658	91183.497	127
11	✓		384.13629	1.200e-003	124070.992	123130.324	137
12	✓		259.02437	3.937e-005	131055.157	136581.683	115
13	✓		421.12234	1.536e-018	54027.579	60123.540	86
14	✓		284.09077	1.262e-001	52069.013	48612.598	46
15	✓		371.13084	5.343e-001	49928.461	47886.942	50
16	✓		299.05953	6.618e-001	57345.264	57582.299	59
17	✓		239.06423	3.848e-001	45283.994	42642.415	45
18	✓		209.06285	9.275e-001	62951.695	62369.080	62

検定

検定中...

キャンセル

箱ひげ図

m/z: 230.0405

Intensity

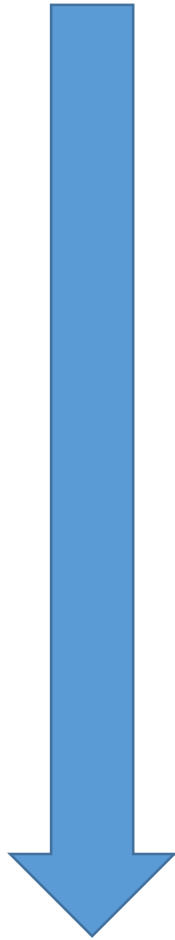
Group A Group B Group C

Count

Group A

結果はデータ行列テーブルと箱ひげ図に出ます。
※箱ひげ図はMSイメージ一覧内で選択したm/zについて表示されます。

9. PCA計算



ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Center
2		Liver_Slide...	All	Center
3		Liver_Slide...	All	Center
4	✓	Liver_Slide...	ROI001	outside
5	✓	Liver_Slide...	ROI002	Center
6	✓	Liver_Slide...	ROI003	Edge

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	比(Edge)	P値 (ANOVA)	ROI001	
1	✓		514.21096	34	1.000	8.391e-001	443.81
2	✓		465.22228	24	1.000	3.745e-001	1722.77
3	✓		515.21557	50	1.000	8.697e-001	809.92
4	✓		286.85653	65	1.000	4.604e-001	193.87
5	✓		333.22942	14	1.000	6.807e-001	511.05
6	✓		466.22532	65	1.000	5.274e-001	897.70
7	✓		284.33868	90	1.000	1.499e-001	326.68
8	✓		284.68885	26	1.000	6.889e-001	106.21
9	✓		564.94982	73	1.000	5.659e-001	46.59
10	✓		498.21575	57	1.000	7.206e-001	655.32

PCAパラメータ

主成分数 自動 手動 5

前処理 パレートスケール

実行 キャンセル

解析パラメータ

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
2	ノーマライズ基準値設定	オフ
3	ノーマライズ最小しきい値(%)	0
4	データ行列解析方法	ターゲット
5	化合物テンプレート	ピーク
6	許容幅/ピクサイズ (Da)	0.0200
7	しきい値設定	オフ

MSイメージ

化合物名/コメント: TIC

ファイル名: Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2_5x_1_AREA01.imdx

タイプ: TIC

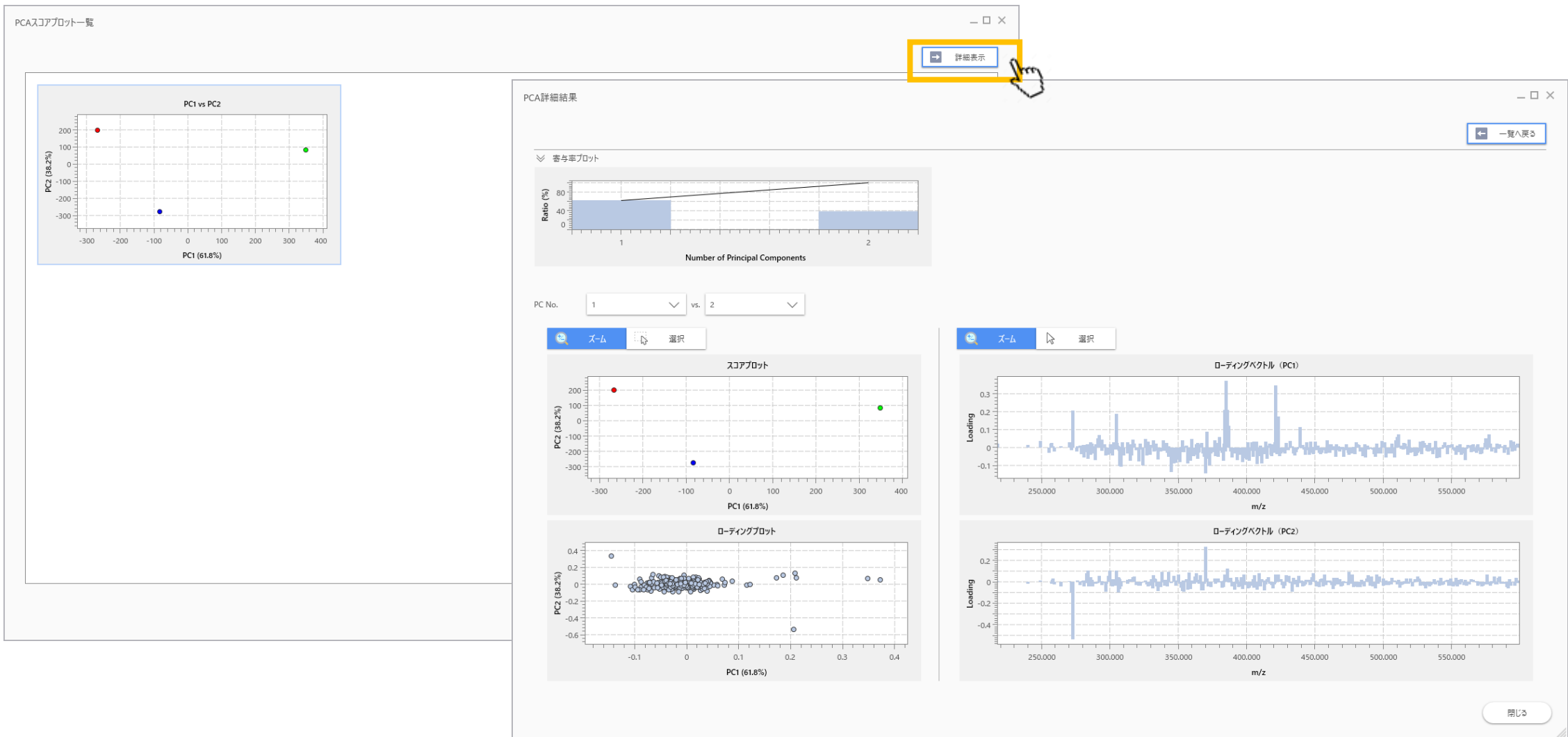
500 μ m

実行

Intensity

m/z

PCA結果



10. PLS計算

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Liver_Slide...	All	Center
2		Liver_Slide...	All	Center
3		Liver_Slide...	All	Center
4	✓	Liver_Slide...	ROI001	outside
5	✓	Liver_Slide...	ROI002	Center
6	✓	Liver_Slide...	ROI003	Edge

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	比(Edge)	P値 (ANOVA)
1	✓		PCA-水平軸	-----	-----
2			PCA-垂直軸	-----	-----
3	✓		514.21096	1.034	1.000

潜在変数の数

手動 5

前処理: パレートスケール

ROIリスト

No.	ファイル名	ROI名	属性	Y値
1	Liver_Slide9_9AA_200-6...	ROI003	Group A	1.00000
2	Liver_Slide9_9AA_200-6...	ROI002	Group B	2.00000
3	Liver_Slide9_9AA_200-6...	ROI001	Group C	0.00000

Y値を入力してください。
ROIの数が少ない場合は“手動”を選択してください。

実行

解析パラメータ

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
2	ノーマライズ基準値設定	オフ
3	ノーマライズ最小しきい値(%)	0
4	データ行列解析方法	ターゲット
5	化合物テンプレート	ピークリス
6	許容幅/パンサイズ (Da)	0.0200
7	しきい値設定	オフ

MSイメージ

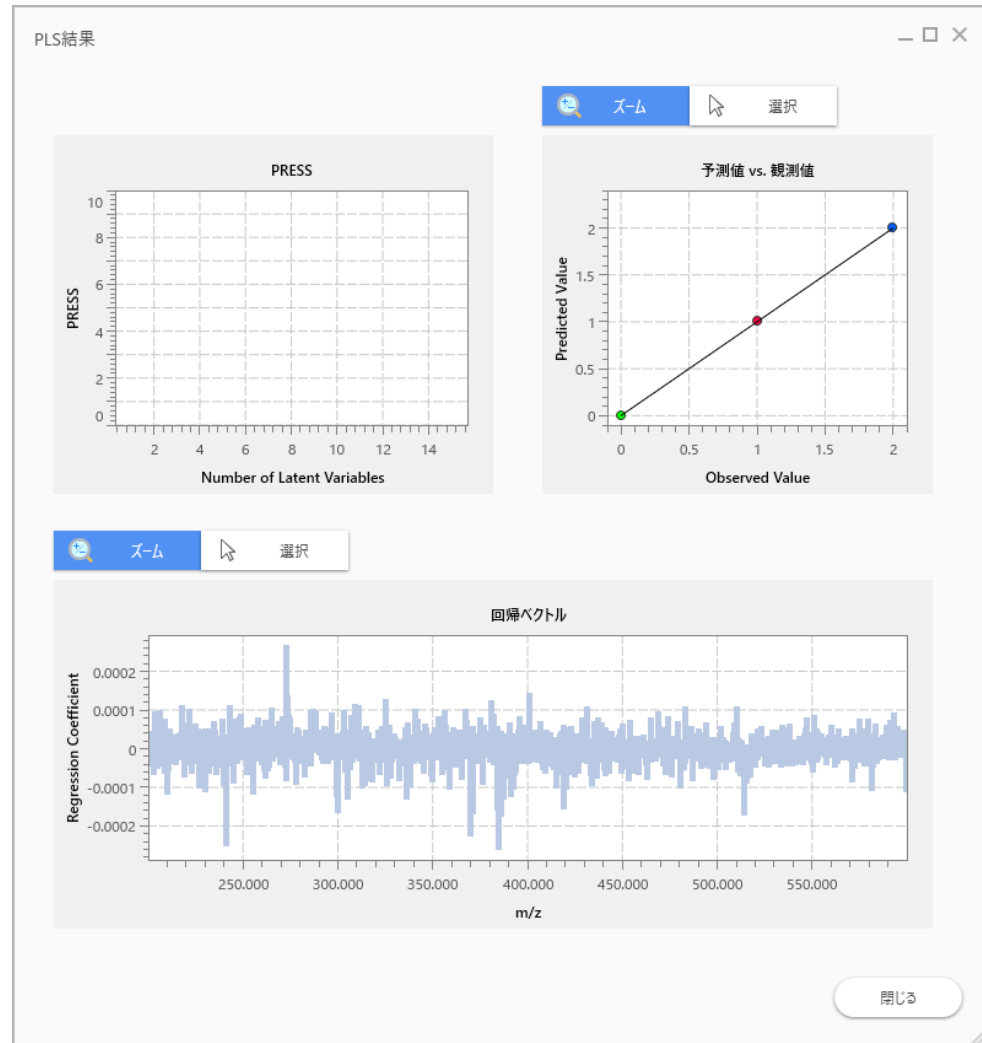
化合物名/コメント: TIC
ファイル名: Liver_Slide9_9AA_200-600_Cont_2_5x_1-AREA01.imdx
タイプ: TIC

グラフ

スペクトル

Intensity vs m/z

PLS結果



まとめ

- アシスタントバー（左側の列）を上から下まで進んでいくと一通りの解析が完了します
- この例では“差異解析”を用いましたが他の解析モードでも同様に解析できます。