

データ行列の作成

データ行列とは

- IMAGEREVEAL MSではデータ処理の前に、まずデータファイルから必要な情報を切り出します。
 - これが”データ行列”です。
 - この理由は、MSイメージングのデータファイルが大きいことが多く、直接ファイルを操作すると時間がかかるためです。
- 切り出し方は“データ行列の設定”で決めます。
 - MSピークの種類や幅です。
- データ行列の保存場所はSSDをおすすめします。HDDよりかなり処理速度が速くなるからです。

処理するピークの選び方

Non-target: m/z 範囲全体

Target: 特定の m/z 値

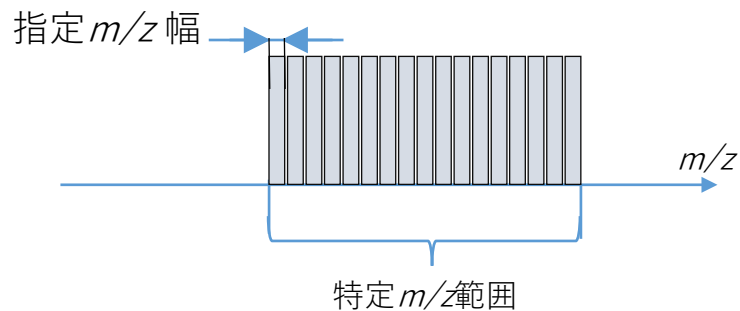
Peak picking: mass スペクトルからピークを抽出

“データ行列の設定”から設定

“ピークピッキング”から設定

Non-target

特定の m/z 範囲を、指定した m/z 幅で分割

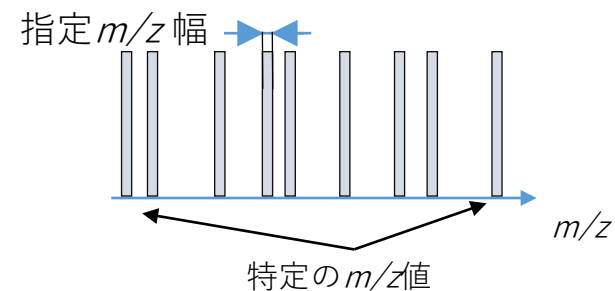


Target

化合物の表

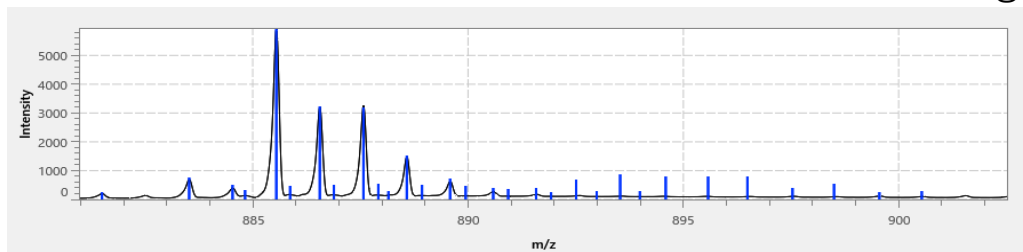
No.	m/z	化合物名	組成式	アグロ...	マトリクス	極性
1	194.08439830	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	負
2	194.08439830	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	負
3	194.08439830	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	負
4	194.08439830	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	負

特定の m/z 値を、指定した m/z 幅で切り取る



Peak picking

測定したスペクトルに基づいたtarget



データ行列の設定(target, non-target)

データ行列設定

データ行列の対象m/zの設定を行います。

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500

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:
Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i
mdx

タイプ:
TIC

MSイメージ一覧

MSイメージ追加

MSイメージ削除

ソート

表示

m/z検索

重ね合わせ

四則演算

Testicle_9AA_PL...
TIC

グラフ

ファイル

ノーマライズ計算は適用されま

表..	ファイル名	スペ
<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA...	Wh

Intensity

m/z

721,482 744,540 767,492 791,524 811,514 837,539 885,538

データ行列の設定 (target, non-targetの選択)

データ行列の設定 target

解析方法 ターゲット ノンターゲット しきい値 0.000 %

化合物リスト

使用した化合物テンプレート:
除外した化合物テンプレート:

No.	<input checked="" type="checkbox"/>	m/z	化合物名	組成式	マトリックス	極性	アダクトイオン
-----	-------------------------------------	-----	------	-----	--------	----	---------

許容幅 0.2000 Da

OK キャンセル

ターゲットは特定のm/z値と許容幅を指定します。
“リストの作成”を押すと“化合物テンプレート”からリストを作成できます。

データ行列の設定 Non-target

解析方法 ターゲット ノンターゲット しきい値 0.000 %

m/z範囲 自動 手動 10.00000 - 1000.00000 Da

ビンサイズ 1.0000 Da

ラベリング Matrix Clusters

指定ピーク除外 指定m/zを除外

OK キャンセル

ノンターゲットはスペクトルから一定のm/z幅で信号強度を切り出します。
m/z範囲 と ビンサイズ (m/zの幅) を指定します。

データ行列の設定 (targetの場合)

データ行列の設定

解析方法 **ターゲット** ノンターゲット しきい値 0.000 %

化合物リスト

使用した化合物テンプレート：
除外した化合物テンプレート：

リストの作成

No.	<input checked="" type="checkbox"/>	m/z	化合物名	組成式	マトリックス	極性	アダクトイオン
-----	-------------------------------------	-----	------	-----	--------	----	---------

“リストの作成”を押すと“化合物テンプレート”からリストを作成できます。

許容値 0.2000 Da

OK キャンセル



リストの作成

化合物テンプレート 除外する化合物テンプレート

Matrix Clusters
Lipids
Lipid Mediators
Endogenous Metabolites

許容値 0.2000 Da

使用するアダクトイオン

マトリックス 9-AA

極性 ネガティブ

選択された化合物テンプレートと使用するアダクトイオンに表示されているアダクトイオンを組み合わせることで化合物リストを作成します。化合物テンプレートに含まれる化合物のうち、アダクトイオンを計算するにチェックされているものだけアダクトイオンとの組み合わせが化合物リストに追加されます。

作成 キャンセル

データ行列の設定 (targetの場合)

データ行列の設定

解析方法 ターゲット ノンターゲット しきい値 %

化合物リスト

使用した化合物テンプレート: Lipids

除外した化合物テンプレート: なし

No.	<input checked="" type="checkbox"/>	m/z	化合物名	組成式	マトリックス	極性	アダクトイオン
1	<input checked="" type="checkbox"/>	227.20165	Free fatty acid(14:0)	C14H28O2	Any	両極性	M-H
2	<input checked="" type="checkbox"/>	225.18600	Free fatty acid(14:1)	C14H26O2	Any	両極性	M-H
3	<input checked="" type="checkbox"/>	223.17035	Free fatty acid(14:2)	C14H24O2	Any	両極性	M-H
4	<input checked="" type="checkbox"/>	221.15470	Free fatty acid(14:3)	C14H22O2	Any	両極性	M-H
5	<input checked="" type="checkbox"/>	255.23295	Free fatty acid(16:0)	C16H32O2	Any	両極性	M-H
6	<input checked="" type="checkbox"/>	253.21730	Free fatty acid(16:1)	C16H30O2	Any	両極性	M-H
7	<input checked="" type="checkbox"/>	251.20165	Free fatty acid(16:2)	C16H28O2	Any	両極性	M-H
8	<input checked="" type="checkbox"/>	249.18600	Free fatty acid(16:3)	C16H26O2	Any	両極性	M-H
9	<input checked="" type="checkbox"/>	283.26425	Free fatty acid(18:0)	C18H36O2	Any	両極性	M-H
10	<input checked="" type="checkbox"/>	281.24860	Free fatty acid(18:1)	C18H34O2	Any	両極性	M-H
11	<input checked="" type="checkbox"/>	279.23295	Free fatty acid(18:2)	C18H32O2	Any	両極性	M-H
12	<input checked="" type="checkbox"/>	277.21730	Free fatty acid(18:3)	C18H30O2	Any	両極性	M-H
13	<input checked="" type="checkbox"/>	309.27990	Free fatty acid(20:1)	C20H38O2	Any	両極性	M-H
14	<input checked="" type="checkbox"/>	307.26425	Free fatty acid(20:2)	C20H36O2	Any	両極性	M-H
15	<input checked="" type="checkbox"/>	305.24860	Free fatty acid(20:3)	C20H34O2	Any	両極性	M-H
16	<input checked="" type="checkbox"/>	303.23295	Free fatty acid(20:4)	C20H32O2	Any	両極性	M-H
17	<input checked="" type="checkbox"/>	301.21730	Free fatty acid(20:5)	C20H30O2	Any	両極性	M-H
18	<input checked="" type="checkbox"/>	339.32685	Free fatty acid(22:0)	C22H44O2	Any	両極性	M-H
19	<input checked="" type="checkbox"/>	337.31120	Free fatty acid(22:1)	C22H42O2	Any	両極性	M-H
20	<input checked="" type="checkbox"/>	333.27990	Free fatty acid(22:3)	C22H38O2	Any	両極性	M-H

許容幅

許容幅を指定します。

データ行列の設定 (non-targetの場合)

データ行列の設定

解析方法 ターゲット ノンターゲット しきい値 0.000 %

m/z範囲 自動 手動 10.00000 - 1000.00000 Da ファイル範囲を設定

ビンサイズ Da

ラベリング Matrix Clusters

指定ピーク除外 指定m/zを除外

OK キャンセル

ノンターゲットはスペクトルから一定幅で信号強度を切り出します。
m/z 範囲 と ビンサイズ (m/zの幅) を指定します。

Peak pickingからターゲットリスト作成方法

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table with columns: No., 使用 (Use), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), データ点数 (Data Points).

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	61254
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns: No., 使用 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, PLS係数 (PLS Coefficient), ROI001.

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001
1	✓		699.9849-700.1849	700.0849	6.541e-002	6341.196
2	✓		700.1849-700.3849	700.2849	-1.337e-001	16757.443
3	✓		700.3849-700.5849	700.4849	-1.112e-001	38292.827
4	✓		700.5849-700.7849	700.6849	1.812e-002	2880.231
5	✓		700.7849-700.9849	700.8849	-2.773e-002	2776.375
6	✓		700.9849-701.1849	701.0849	-6.388e-003	7521.977
7	✓		701.1849-701.3849	701.2849	-1.015e-001	20404.030
8	✓		701.3849-701.5849	701.4849	-1.763e-001	28908.854
9	✓		701.5849-701.7849	701.6849	-9.587e-002	2518.149
10	✓		701.7849-701.9849	701.8849	-1.612e-002	2329.254
11	✓		701.9849-702.1849	702.0849	-1.609e-002	5823.114
12	✓		702.1849-702.3849	702.2849	4.357e-003	15118.571
13	✓		702.3849-702.5849	702.4849	-8.371e-002	15825.690
14	✓		702.5849-702.7849	702.6849	-2.011e-002	1892.297
15	✓		702.7849-702.9849	702.8849	3.247e-002	1821.811
16	✓		702.9849-703.1849	703.0849	-8.529e-003	7263.296
17	✓		703.1849-703.3849	703.2849	1.889e-002	18872.587
18	✓		703.3849-703.5849	703.4849	-1.461e-001	23395.261
- MSイメージ (MS Image):** A heatmap visualization of the mass spectrum data.
- 質量スペクトル (Mass Spectrum):** A plot of Intensity vs. m/z. The x-axis ranges from 700 to 900 m/z, and the y-axis ranges from 0E+00 to 2E+06. Several peaks are labeled with their m/z values: 721,482, 744,540, 767,492, 791,524, 795,521, 811,514, 837,539, and 885,538. A prominent peak is visible at m/z 795.521.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A list of parameters with values:

No.	Name	Value
1	ノーマライズ (Normalize)	なし (None)
2	データ行列解析方法 (Data Matrix Analysis Method)	ノンターゲット (Non-target)
3	m/z範囲 (m/z Range)	699.9849
4	許容幅/ピンサイズ (Da) (Tolerance/Pin Size)	0.2000
5	ラベリング (Labeling)	オフ (Off)
6	除外リスト (Exclusion List)	オフ (Off)
7	しきい値設定 (Threshold Setting)	オフ (Off)
- ピークピッキング (Peak Picking):** A button highlighted with a yellow box and a hand cursor, indicating the action being performed.

質量スペクトル中のピークからターゲットリストを作成します。
“ピークピッキング”のボタンを押します。

Peak pickingからターゲットリスト作成方法

ピークピッキング

パラメータ設定

m/z範囲 699.98492 - 900.01906 Da 初期値に戻す しきい値 0.000 %

スムージング なし モノアイソトピックの検出

データポイント数 99 同位体クラスター最小ピーク本数 2

検出ピーク数 300 マッチング許容誤差(ppm) 50

指定ピーク除外 指定m/zを除外

ピークリスト 0 ピーク

No.	m/z	強度
-----	-----	----

各パラメータを設定してから“実行ボタン”を押します。

実行

スペクトルグラフ ピークを表示 ピークリストに追加

化合物テンプレートとして保存 ターゲットリストとして使用

閉じる

Peak pickingからターゲットリスト作成

ピークピッキング

パラメータ設定

m/z範囲: 699.98492 - 900.01906 Da 初期値に戻す

しきい値: 0.000 %

スムージング: なし

データポイント数: 99

検出ピーク数: 3000

モノアイソトピックの検出

同位体クラスター最小ピーク本数: 2

マッチング許容誤差(ppm): 50

指定ピーク除外: 指定m/zを除外

許容幅: 0.2000 Da

実行

ピークリスト 1016 ピーク

No.	m/z	強度
1	795.52084	2610406.78912
2	795.52084	
3	795.52084	
4	795.52084	
5	767.49182	222009.97713
6	885.53782	209515.60662
7	810.51233	161081.70626
8	798.52468	134667.84063
9	886.54171	112779.08309
10	795.76852	112315.95918
11	796.05312	100498.69080
12	768.49448	99257.37820
13	837.53900	87275.49571
14	796.35302	86106.85497
15	857.50878	84254.39123
16	796.76528	82976.12782
17	793.50771	80525.26493
18	795.93371	77177.85759
19	721.48186	72416.24142
20	823.54467	71382.65062
21	797.05848	68667.62055

抽出されたピークが表示されます。

どのピークが抽出されたか拡大して確認できます。

スペクトルグラフ

ピークを表示

ピークリストに追加

データ行列作成用のターゲットとして使用するには“ターゲットリストとして使用”のボタンを押します。

化合物テンプレートとして保存

ターゲットリストとして使用

閉じる

Peak pickingからターゲットリスト作成

データ行列の設定

解析方法 ターゲット ノンターゲット しきい値 %

化合物リスト

使用した化合物テンプレート: ピークリスト

除外した化合物テンプレート:

No.	<input checked="" type="checkbox"/>	m/z	化合物名	組成式	マトリックス	極性	アダクトイオン
1	<input checked="" type="checkbox"/>	795.52084	795.52084	Monoisotopic	Any	両極性	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	796.52363	796.52363		Any	両極性	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	797.52374	797.52374	Monoisotopic	Any	両極性	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	809.50934	809.50934	Monoisotopic	Any	両極性	
5	<input checked="" type="checkbox"/>	767.49182	767.49182	Monoisotopic	Any	両極性	
6	<input checked="" type="checkbox"/>	885.53782	885.53782	Monoisotopic	Any	両極性	
7	<input checked="" type="checkbox"/>	810.51233	810.51233		Any	両極性	
8	<input checked="" type="checkbox"/>	798.52468	798.52468	Monoisotopic	Any	両極性	
9	<input checked="" type="checkbox"/>	886.54171	886.54171		Any	両極性	
10	<input checked="" type="checkbox"/>	795.76852	795.76852	Monoisotopic	Any	両極性	
11	<input checked="" type="checkbox"/>	796.05312	796.05312	Monoisotopic	Any	両極性	
12	<input checked="" type="checkbox"/>	768.49448	768.49448		Any	両極性	
13	<input checked="" type="checkbox"/>	837.53900	837.53900	Monoisotopic	Any	両極性	
14	<input checked="" type="checkbox"/>	796.35302	796.35302	Monoisotopic	Any	両極性	
15	<input checked="" type="checkbox"/>	857.50878	857.50878	Monoisotopic	Any	両極性	
16	<input checked="" type="checkbox"/>	796.76528	796.76528	Monoisotopic	Any	両極性	
17	<input checked="" type="checkbox"/>	793.50771	793.50771	Monoisotopic	Any	両極性	
18	<input checked="" type="checkbox"/>	795.93371	795.93371	Monoisotopic	Any	両極性	
19	<input checked="" type="checkbox"/>	721.48186	721.48186	Monoisotopic	Any	両極性	
20	<input checked="" type="checkbox"/>	823.54467	823.54467	Monoisotopic	Any	両極性	

許容幅 Da

“許容幅”を入力して“OK”ボタンを押します。

Peak pickingからターゲットリスト作成

m/z 幅が重なる場合



許容幅によっては、近接したピークのm/z 幅が重なる場合があります。その場合は警告が出ます。重なっても問題ない場合は”OK”ボタンを押してください。問題がある場合は”キャンセル“を押して、許容幅を設定し直してください。

データ行列の設定が完了したらデータ行列計算に進みます。

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500

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: Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx
タイプ: TIC

グラフ

Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx Whole_Ave.

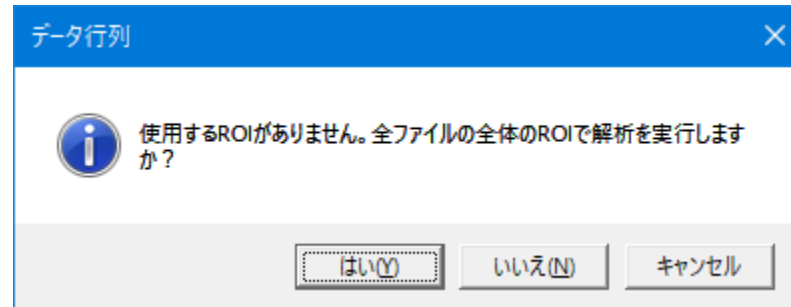
Intensity vs m/z plot showing peaks at 721.482, 744.540, 767.492, 793.521, 794.524, 795.524, 811.514, 837.539, and 885.538.

MSイメージ一覧

Testicle_9AA_PL... TIC

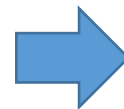
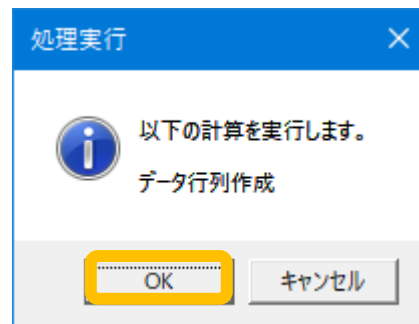
データ行列計算 (highlighted)

ROIの設定がない場合は、確認ダイアログが表示されます。



測定範囲全体を対象に処理を行う場合は“はい”を押します。

データ行列作成の計算の確認ダイアログが表示されます



“OK”を押すと計算が始まります。

データ行列計算完了

切り出されたデータの要約が“データ行列テーブル”に表示されます。

The screenshot displays a software interface with several panels:

- ROIリスト**: A table listing ROI information.
- データ行列テーブル**: A table showing peak data, highlighted with a green circle.
- MSイメージ**: A color-coded mass image showing the spatial distribution of ions.
- グラフ**: A mass spectrum plot showing intensity versus m/z.
- MSイメージ一覧**: A list of MS images.

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	2905
3	✓	Testicle_9A...	ROI002	1184
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	1123

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	ROI001	ROI002
1	✓			795.52084	795.5208		1452690.991	1235258.072
2	✓			796.52363	796.5236		685665.330	575770.247
3	✓			797.52374	797.5237	Monoisotopic	264293.982	224420.732
4	✓			809.50934	809.5093	Monoisotopic	175167.850	129942.981
5	✓			767.49182	767.4918	Monoisotopic	120853.576	96733.163
6	✓			885.53782	885.5378	Monoisotopic	113112.810	86135.930
7	✓			810.51233	810.5123		86451.090	64830.122
8	✓			798.52468	798.5247	Monoisotopic	67228.475	56377.686
9	✓			886.54171	886.5417		60963.333	46987.711
10	✓			795.76852	795.7685	Monoisotopic	43542.975	36472.616
11	✓			796.05312	796.0531	Monoisotopic	35898.491	29947.541
12	✓			768.49448	768.4945		57163.193	44497.460
13	✓			837.53900	837.5390	Monoisotopic	50051.862	52860.468
14	✓			796.35302	796.3530	Monoisotopic	25178.466	20469.794
15	✓			857.50878	857.5088	Monoisotopic	42420.696	35385.323
16	✓			796.76528	796.7653	Monoisotopic	28440.163	23079.438
17	✓			793.50771	793.5077	Monoisotopic	41322.205	34510.700
18	✓			795.93371	795.9337	Monoisotopic	25134.657	20530.000

MSイメージ

化合物名/コメント: TIC
ファイル名: Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA01.i
mdx
タイプ: TIC

グラフ

Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA01.i Whole_Ave.

MSイメージ一覧

Testicle_9AA_Pi...
TIC

データ行列のエクスポート

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. On the left, a sidebar contains various tool icons. The main window is divided into several panels. The 'ROIリスト' (ROI List) panel shows a table with columns for No., 使用 (Used), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), and データ点数 (Data Points). The 'データ行列テーブル' (Data Table) panel shows a detailed table with columns for No., 使用, タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, 組成式 (Chemical Formula), アダクトイオン (Adduct Ion), and two columns for signal intensity. A context menu is open over the data table, with the option 'データ行列をエクスポート...' (Export Data Table...) highlighted in green. The 'MSイメージ' (MS Image) panel on the right shows a color-coded mass spectrum image. The bottom of the interface features a toolbar with various icons and a status bar.

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	2905
3	✓	Testicle_9A...	ROI002	1184
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	1123

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	組成式	アダクトイオン	ROI001	ROI002
1	✓		795.52084	795.5208	Monoisotopic		1452690.991	1235258.072
2	✓		796.52363	796.5236			685665.330	575770.247
3	✓		797.52374	797.5237	Monoisotopic		264293.982	224420.732
			50934	809.5093	Monoisotopic		175167.850	129942.981
			49182	767.4918	Monoisotopic		120853.576	96733.163
			53782	885.5378	Monoisotopic		113112.810	86135.930
			51233	810.5123			86451.090	64830.122
			52468	798.5247	Monoisotopic		67228.475	56377.686
9	✓		886.54171	886.5417			60963.333	46987.711
10	✓		795.76852	795.7685	Monoisotopic		43542.975	36472.618
11	✓		796.05312	796.0531	Monoisotopic		35898.491	29947.541

データ行列をエクスポート...

データ行列そのもの（各点、各m/zと信号強度の表）をエクスポートするには“ROIリスト”で該当するデータファイルの行を選択して右クリックして表示されるサイドメニューから“データ行列のエクスポート”を選択してください。

注意： 一般的にこの表は巨大です。かなりの処理時間と保存容量が必要になります。