

領域間の変動成分を知りたい

検定

例

“A”, “B”, “C”領域間で強度に違いがある成分を抽出する

手順

1. “A”, “B”, “C”のROIを設定
2. データ行列テーブル計算
3. 検定
4. PCA
5. PLS

手順

1. “A”, “B”, “C”のROIを設定
2. データ行列テーブル計算
3. 検定
4. PCA
5. PLS

3.1 検定

検定を行います。
2群の場合はt検定、3群以上はANOVAを用いて計算します。
各ROIの中の各測定点が標本として扱われます。

The screenshot displays the software interface with several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROIs for analysis.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing m/z values for each ROI.
- MSイメージ (MS Image):** A heatmap visualization of the data.
- グラフ (Graph):** A plot area for visualization.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the analysis.

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	Group A
3	✓	Testicle_9A...	ROI002	Group B
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C
5		Testicle_9A...	ROI004	Group D

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
1	✓		699.9849-700.9849	700.4849	12654.115	10992.916	13195.851
2	✓		700.9849-701.9849	701.4849	10132.104	9749.542	20207.773
3	✓		701.9849-702.9849	702.4849	6875.912	5408.621	10541.267
4	✓		702.9849-703.9849	703.4849	9623.874	8175.758	12906.003
5	✓		703.9849-704.9849	704.4849	8598.983	6357.625	10517.781
6	✓		704.9849-705.9849	705.4849	11917.976	9338.670	13851.114
7	✓		705.9849-706.9849	706.4849	7367.519	5995.169	9259.481
8	✓		706.9849-707.9849	707.4849	7841.996	8671.765	16254.045
9	✓		707.9849-708.9849	708.4849	6609.303	6343.222	10192.927
10	✓		708.9849-709.9849	709.4849	12659.084	13006.758	17694.062
11	✓		709.9849-710.9849	710.4849	8936.845	9317.851	10369.467
12	✓		710.9849-711.9849	711.4849	8555.765	8655.481	11234.953
13	✓		711.9849-712.9849	712.4849	6515.152	5488.399	9521.748
14	✓		712.9849-713.9849	713.4849	8275.835	7723.166	22881.835
15	✓		713.9849-714.9849	714.4849	6949.865	6083.847	16639.591
16	✓		714.9849-715.9849	715.4849	6666.396	7309.580	19637.225
17	✓		715.9849-716.9849	716.4849	8706.953	7608.531	11899.940
18	✓		716.9849-717.9849	717.4849	8626.042	8915.067	13792.631

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	ノンタグ
5	m/z範囲	699.9849
6	許容幅/ピクサイズ (Da)	1.0000
7	ラベリング	オフ
8	除外リスト	オフ
9	しきい値設定	オフ

3.2 計算中ダイアログ



3.3 検定結果

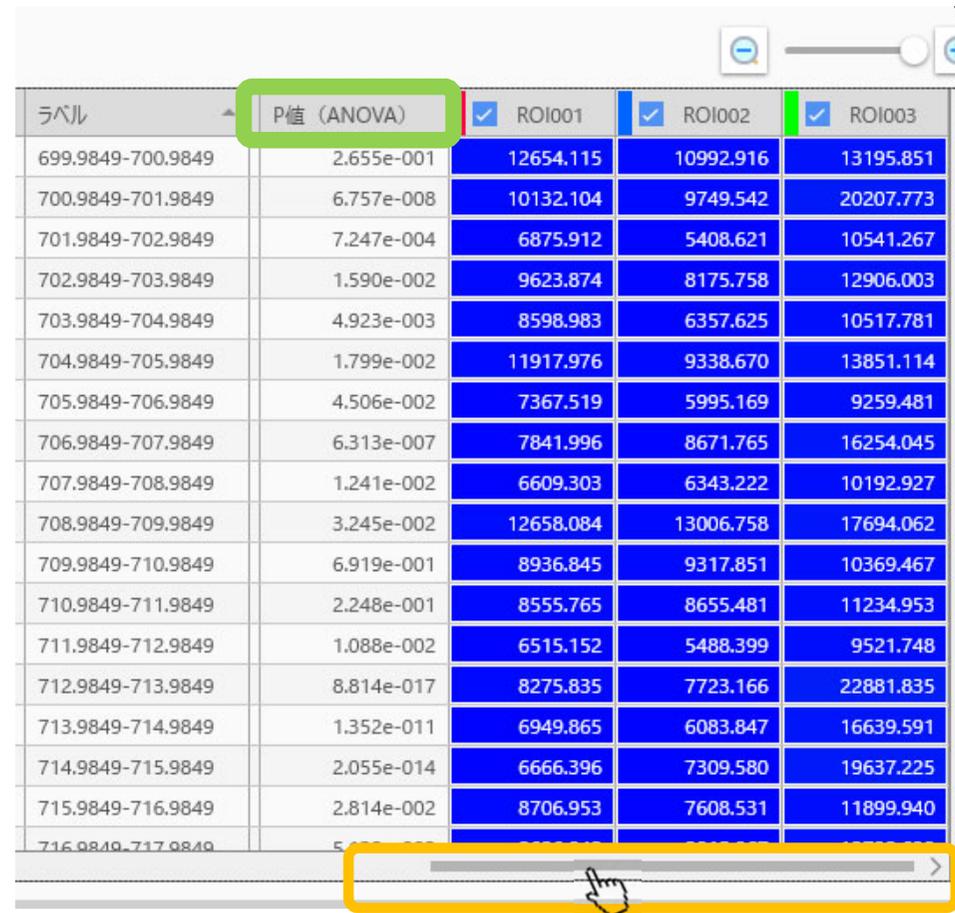
検定結果が表示されます。
P値の他に、平均、標準偏差、比等の基礎統計も一緒に計算されます。

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The central window, titled 'データ行列テーブル', shows a table of data points. A green circle highlights the P-value column. The bottom-left window shows '解析パラメータ' (Analysis Parameters) for TIC, and the bottom-right window shows 'MSイメージ' (MS Image) and 'MSイメージ一覧' (MS Image List).

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	比(Group A)	比(Group B)	比(Group C)	P値 (ANOVA)
1	<input checked="" type="checkbox"/>		699.9849-700.9849	700.4849	0.959	0.833	1.000	2.655e-0
2	<input checked="" type="checkbox"/>		700.9849-701.9849	701.4849	0.501	0.482	1.000	6.757e-0
3	<input checked="" type="checkbox"/>		701.9849-702.9849	702.4849	0.652	0.513	1.000	7.247e-0
4	<input checked="" type="checkbox"/>		702.9849-703.9849	703.4849	0.746	0.633	1.000	1.590e-0
5	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-704.9849	704.4849	0.818	0.604	1.000	4.923e-0
6	<input checked="" type="checkbox"/>		704.9849-705.9849	705.4849	0.860	0.674	1.000	1.799e-0
7	<input checked="" type="checkbox"/>		705.9849-706.9849	706.4849	0.796	0.647	1.000	4.506e-0
8	<input checked="" type="checkbox"/>		706.9849-707.9849	707.4849	0.482	0.534	1.000	6.313e-0
9	<input checked="" type="checkbox"/>		707.9849-708.9849	708.4849	0.648	0.622	1.000	1.241e-0
10	<input checked="" type="checkbox"/>		708.9849-709.9849	709.4849	0.715	0.735	1.000	3.245e-0
11	<input checked="" type="checkbox"/>		709.9849-710.9849	710.4849	0.862	0.899	1.000	6.919e-0
12	<input checked="" type="checkbox"/>		710.9849-711.9849	711.4849	0.762	0.770	1.000	2.248e-0
13	<input checked="" type="checkbox"/>		711.9849-712.9849	712.4849	0.684	0.576	1.000	1.088e-0
14	<input checked="" type="checkbox"/>		712.9849-713.9849	713.4849	0.362	0.338	1.000	8.814e-0
15	<input checked="" type="checkbox"/>		713.9849-714.9849	714.4849	0.418	0.366	1.000	1.352e-0
16	<input checked="" type="checkbox"/>		714.9849-715.9849	715.4849	0.339	0.372	1.000	2.055e-0
17	<input checked="" type="checkbox"/>		715.9849-716.9849	716.4849	0.732	0.639	1.000	2.814e-0
18	<input checked="" type="checkbox"/>		716.9849-717.9849	717.4849	0.635	0.646	1.000	6.138e-0

3.4 検定結果

スクロールバーを右に移動して検定結果中のP値を表示します。



ラベル	P値 (ANOVA)	<input checked="" type="checkbox"/> ROI001	<input checked="" type="checkbox"/> ROI002	<input checked="" type="checkbox"/> ROI003
699.9849-700.9849	2.655e-001	12654.115	10992.916	13195.851
700.9849-701.9849	6.757e-008	10132.104	9749.542	20207.773
701.9849-702.9849	7.247e-004	6875.912	5408.621	10541.267
702.9849-703.9849	1.590e-002	9623.874	8175.758	12906.003
703.9849-704.9849	4.923e-003	8598.983	6357.625	10517.781
704.9849-705.9849	1.799e-002	11917.976	9338.670	13851.114
705.9849-706.9849	4.506e-002	7367.519	5995.169	9259.481
706.9849-707.9849	6.313e-007	7841.996	8671.765	16254.045
707.9849-708.9849	1.241e-002	6609.303	6343.222	10192.927
708.9849-709.9849	3.245e-002	12658.084	13006.758	17694.062
709.9849-710.9849	6.919e-001	8936.845	9317.851	10369.467
710.9849-711.9849	2.248e-001	8555.765	8655.481	11234.953
711.9849-712.9849	1.088e-002	6515.152	5488.399	9521.748
712.9849-713.9849	8.814e-017	8275.835	7723.166	22881.835
713.9849-714.9849	1.352e-011	6949.865	6083.847	16639.591
714.9849-715.9849	2.055e-014	6666.396	7309.580	19637.225
715.9849-716.9849	2.814e-002	8706.953	7608.531	11899.940
716.9849-717.9849	5.000e-000	0.000	0.000	0.000

3.5 検定結果

ラベル行（先頭の行）をクリックするとソートされます。
もう一度クリックすると逆順にソートされます。
P値の小さなものほど群間で差があるので小さな物を選びます。

ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003
884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399	285789.467
885.9849-886.9849	6.900e-090	34271.553	51295.158	157633.888
886.9849-887.9849	3.803e-068	19271.791	25189.451	82594.137
808.9849-809.9849	6.507e-057	234383.157	181415.160	93078.101
794.9849-795.9849	2.141e-055	1029824.289	1145936.176	788355.094
809.9849-810.9849	5.591e-038	127446.486	102214.370	52094.504
795.9849-796.9849	2.261e-031	561465.069	629022.646	461295.998
836.9849-837.9849	1.042e-026	63879.104	45687.246	19515.117
796.9849-797.9849	8.475e-020	237984.460	263831.297	185697.615
887.9849-888.9849	1.575e-019	11304.263	11665.185	27921.519
880.9849-881.9849	3.825e-017	41268.920	32126.783	13705.871
712.9849-713.9849	8.814e-017	8275.835	7723.166	22881.835
837.9849-838.9849	2.571e-015	38503.050	25713.948	17213.010
724.9849-725.9849	4.194e-015	9259.066	9815.346	24166.905
714.9849-715.9849	2.055e-014	6666.396	7309.580	19637.225
713.9849-714.9849	1.352e-011	6949.865	6083.847	16639.591
881.9849-882.9849	9.534e-011	25161.434	20589.488	8770.264
797.9849-798.9849	2.163e-010	73407.900	86617.698	59309.121

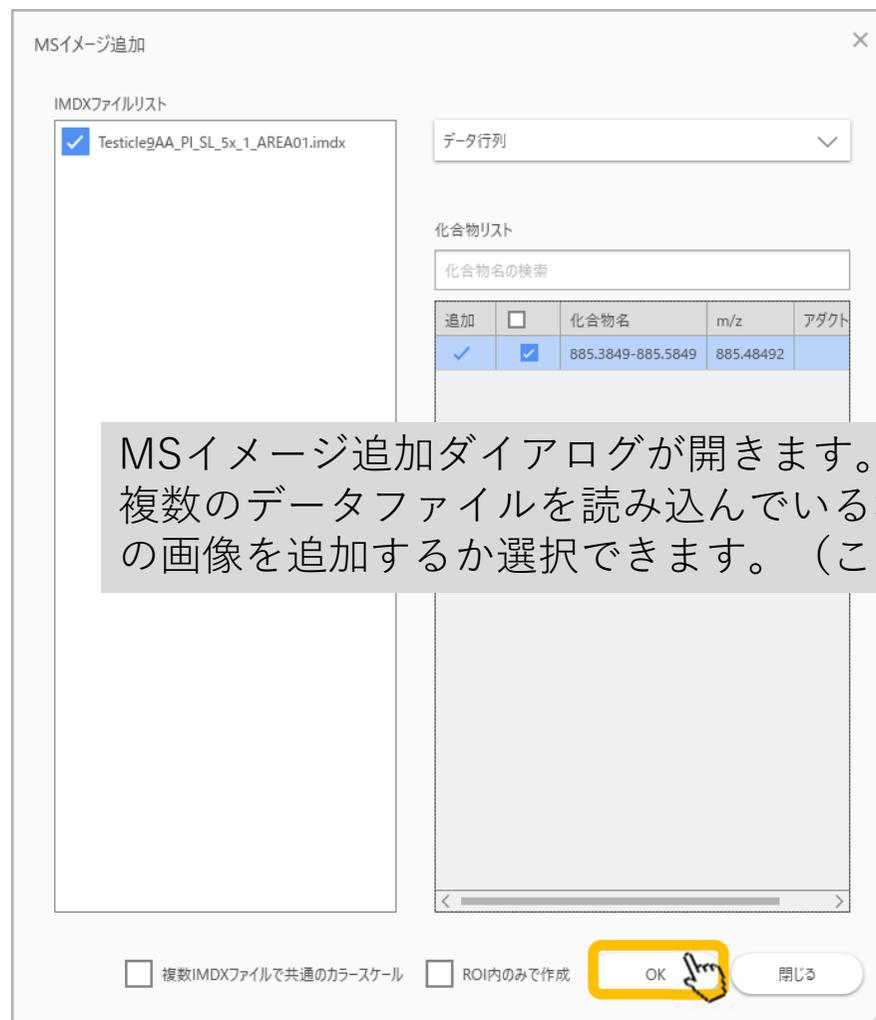
3.6 右クリック→MSイメージを追加

行を選択、右クリックしてサイドメニューを開きます。
サイドメニューから MSイメージを追加 を選択します。



ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003
884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399	285789.467
885.9849-886.9849	5.003e-05			
886.9849-887.9849	5.003e-06			
808.9849-809.9849	6.507e-05			
794.9849-795.9849	2.141e-05			
809.9849-810.9849	5.591e-03			
795.9849-796.9849	2.261e-03			
836.9849-837.9849	1.042e-02			
796.9849-797.9849	8.475e-020	237984.460	263831.297	185697.615
887.9849-888.9849	1.575e-019	11304.263	11665.185	27921.519
880.9849-881.9849	3.825e-017	41268.920	32126.783	13705.871
712.9849-713.9849	8.814e-017	8275.835	7723.166	22881.835
837.9849-838.9849	2.571e-015	38503.050	25713.948	17213.010
724.9849-725.9849	4.194e-015	9259.066	9815.346	24166.905
714.9849-715.9849	2.055e-014	6666.396	7309.580	19637.225
713.9849-714.9849	1.352e-011	6949.865	6083.847	16639.591
881.9849-882.9849	9.534e-011	25161.434	20589.488	8770.264
707.9849-708.9849	2.163e-010	73407.900	86617.698	59309.121

3.7 データファイルを選択してOK



MSイメージ追加ダイアログが開きます。
複数のデータファイルを読み込んでいる場合はここでどのデータファイルの画像を追加するか選択できます。（この例では一つしかありません）

3.8 MSイメージが追加される

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROIs for analysis.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing peak data for three ROIs.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap showing the mass spectrum for ROI001.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller view showing the addition of a new MS image.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the analysis.

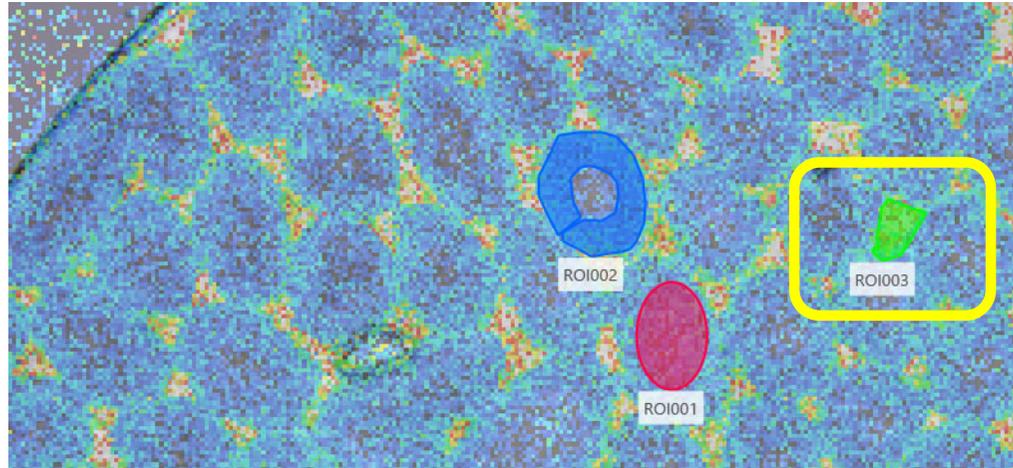
No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	Group A
3	✓	Testicle_9A...	ROI002	Group B
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C
5		Testicle_9A...	ROI004	Group D

No.	使用	タグ	ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003
186	✓		884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399	285789.467
187	✓		885.9849-886.9849	6.900e-090	34271.553	51295.158	157633.888
188	✓		886.9849-887.9849	3.803e-068	19271.791	25189.451	82594.137
110	✓		808.9849-809.9849	6.507e-057	234383.157	181415.160	93078.101
96	✓		794.9849-795.9849	2.141e-055	1029824.289	1145936.176	788355.094
111	✓		809.9849-810.9849	5.591e-038	127446.486	102214.370	52094.504
97	✓		795.9849-796.9849	2.261e-031	561465.069	629022.646	461295.998
138	✓		836.9849-837.9849	1.042e-026	63879.104	45687.246	19515.117
98	✓		796.9849-797.9849	8.475e-020	237984.460	263831.297	185697.615
189	✓		887.9849-888.9849	1.575e-019	11304.263	11665.185	27921.519
182	✓		880.9849-881.9849	3.825e-017	41268.920	32126.783	13705.871
14	✓		712.9849-713.9849	8.814e-017	8275.835	7723.166	22881.835
139	✓		837.9849-838.9849	2.571e-015	38503.050	25713.948	17213.010
26	✓		724.9849-725.9849	4.194e-015	9259.066	9815.346	24166.905
16	✓		714.9849-715.9849	2.055e-014	6666.396	7309.580	19637.225
15	✓		713.9849-714.9849	1.352e-011	6949.865	6083.847	16639.591
183	✓		881.9849-882.9849	9.534e-011	25161.434	20589.488	8770.264
99	✓		797.9849-798.9849	2.163e-010	73407.890	86517.608	66999.134

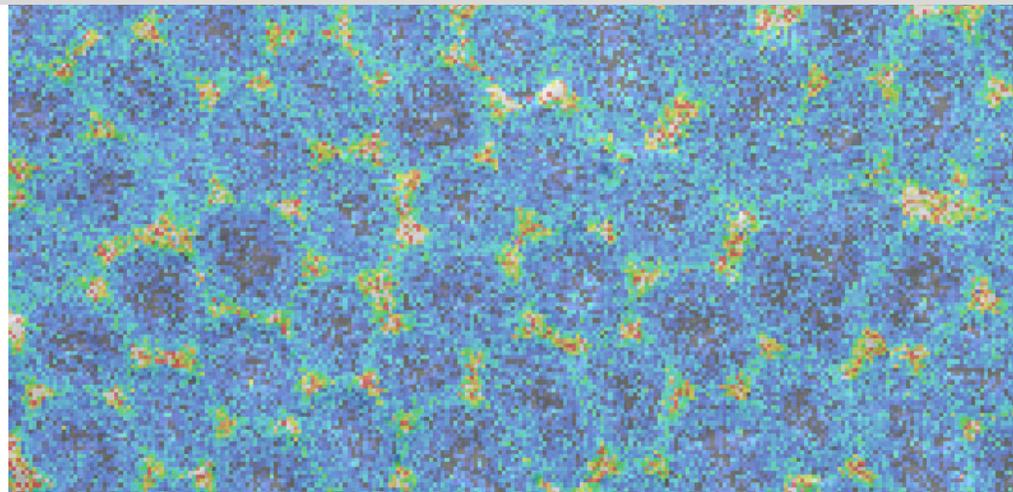
No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
2	ノーマライズ基準値設定	オフ
3	ノーマライズ最小しきい値(%)	0
4	データ行列解析方法	ノンターゲット
5	m/z範囲	699.98492-9...
6	許容幅/シフト (Da)	1.0000
7	ラベリング	オフ
8	除外リスト	オフ
9	しきい値設定	オフ

MSイメージ (m/z 885) が右下のMSイメージ一覧に追加され、その上のMSイメージ部に表示されます。

3.9 ROI 3 に特徴的



ROIを重ね書きするとROI3（緑）に特徴的であることが分かります。



3.10 箱ひげ図の表示

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several key components:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROIs for different groups.

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	データ
1		Testicle_9A...	All	Group A	
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	Group A	
3	✓	Testicle_9A...	ROI002	Group B	
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C	
5		Testicle_9A...	ROI004	Group D	
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing statistical data for selected ROIs.

No.	使用	タグ	ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003
186	✓		884.9849-885.9849	00	5.473e-127	52242.364	91789.399
187	✓		885.9849-886.9849	00	6.900e-090	34271.553	51295.158
188	✓		886.9849-887.9849	00	3.803e-068	19271.791	25189.451
110	✓		808.9849-809.9849	00	6.507e-057	234383.157	181415.160
- MSイメージ (MS Image):** A heatmap showing signal intensity distribution. A callout box provides details:
 - m/z 許容幅: 885.48492±0.5000
 - 化合物名/コメント: 884.9849-885.9849
- 箱ひげ図 (Box Plot):** A plot showing the distribution of signal intensity for m/z: 885.48492 across three groups (A, B, and C). The y-axis is labeled 'Intensity' and ranges from 0 to 800,000. A yellow box highlights the '箱ひげ図' button in the software interface.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images with a yellow box highlighting the selected image:
 - 884.9849-885.9... TIC
 - 885.48492
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the analysis.

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	ノンターゲット
5	m/z範囲	699.98492-9...
6	許容幅/ピンサイズ (Da)	1.0000
7	ラベリング	オフ
8	除外リスト	オフ
9	しきい値設定	オフ

グラフ部の 箱ひげ図 を選択すると各ROIでの信号強度の分布の箱ひげ図が表示されます。
 ※ 箱ひげ図 はMSイメージ一覧に表示されているm/zのみ表示されます。

3.11 ヒストグラムの調整

ヒストグラムの上部のツールを使用してヒストグラムの外観を変更できます。

