

領域間の変動成分を知り
たい

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

4.1 PCA (主成分分析)

主成分分析(Principal Component Analysis: PCA)を行います。
各ROIの平均スペクトルを基に計算されます。

The software interface displays the following components:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROI information.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing spectral data for each ROI.
- グラフ (Graph):** A plot showing the average spectrum for the selected ROI.
- MSイメージ (MS Image):** A visualization of the mass spectrum for the selected ROI.

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	ROI名	ROI範囲	12654.115	10992.916	13195.851
1	✓	ROI001	700.9849-700.9849	10132.104	9749.542	20207.773
2	✓	ROI002	701.4849-701.4849	6875.912	5408.621	10541.267
3	✓	ROI003	702.4849-702.4849	9623.874	8175.758	12906.003
4	✓	ROI004	703.4849-703.4849	8598.983	6357.625	10517.781
5	✓	ROI001	704.4849-704.4849	11917.976	9338.670	13851.114
6	✓	ROI002	705.4849-705.4849	7367.519	5995.169	9259.481
7	✓	ROI003	706.4849-706.4849	7841.996	8671.765	16254.045
8	✓	ROI004	707.4849-707.4849	6609.303	6343.222	10192.927
9	✓	ROI001	708.4849-708.4849	12658.084	13006.758	17694.062
10	✓	ROI002	709.4849-709.4849	8936.845	9317.851	10369.467
11	✓	ROI003	710.4849-710.4849	8555.765	8655.481	11234.953
12	✓	ROI004	711.4849-711.4849	6515.152	5488.399	9521.748
13	✓	ROI001	712.4849-712.4849	8275.835	7723.166	22881.835
14	✓	ROI002	713.4849-713.4849	6949.865	6083.847	16639.591
15	✓	ROI003	714.4849-714.4849	6666.396	7309.580	19637.225
16	✓	ROI004	715.4849-715.4849	8706.953	7608.531	11899.940
17	✓	ROI001	716.4849-716.4849	8636.042	8915.057	13793.636
18	✓	ROI002	717.4849-717.4849			

解析パラメータ (Analysis Parameters):

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	ノクターゲ
5	m/z範囲	699.9849-717.9849
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

MSイメージ (MS Image): Testicle_9AA_PL... - TIC

4.2 PCAパラメータ設定

通常この設定で大丈夫です。



The image shows a dialog box titled "PCAパラメータ" (PCA Parameters) with a close button (X) in the top right corner. It contains two main settings:

- 主成分数** (Number of principal components): This is a radio button selection. The "自動" (Automatic) option is selected with a blue dot, and the "手動" (Manual) option is unselected with a white dot. To the right of the "手動" option is a dropdown menu currently showing the value "5".
- 前処理** (Preprocessing): This is a dropdown menu currently showing the value "パレトスケール" (Pareto scale).

At the bottom of the dialog, there are two buttons: "実行" (Execute) with a green play button icon, and "キャンセル" (Cancel).

4.3 PCAパラメータ設定

PCAパラメータ

軸の数

主成分数 自動 手動 5

信号強度の扱い

前処理 パレートスケール

実行 キャンセル

信号強度の扱いを変えたいときは“前処理”から選択できます。

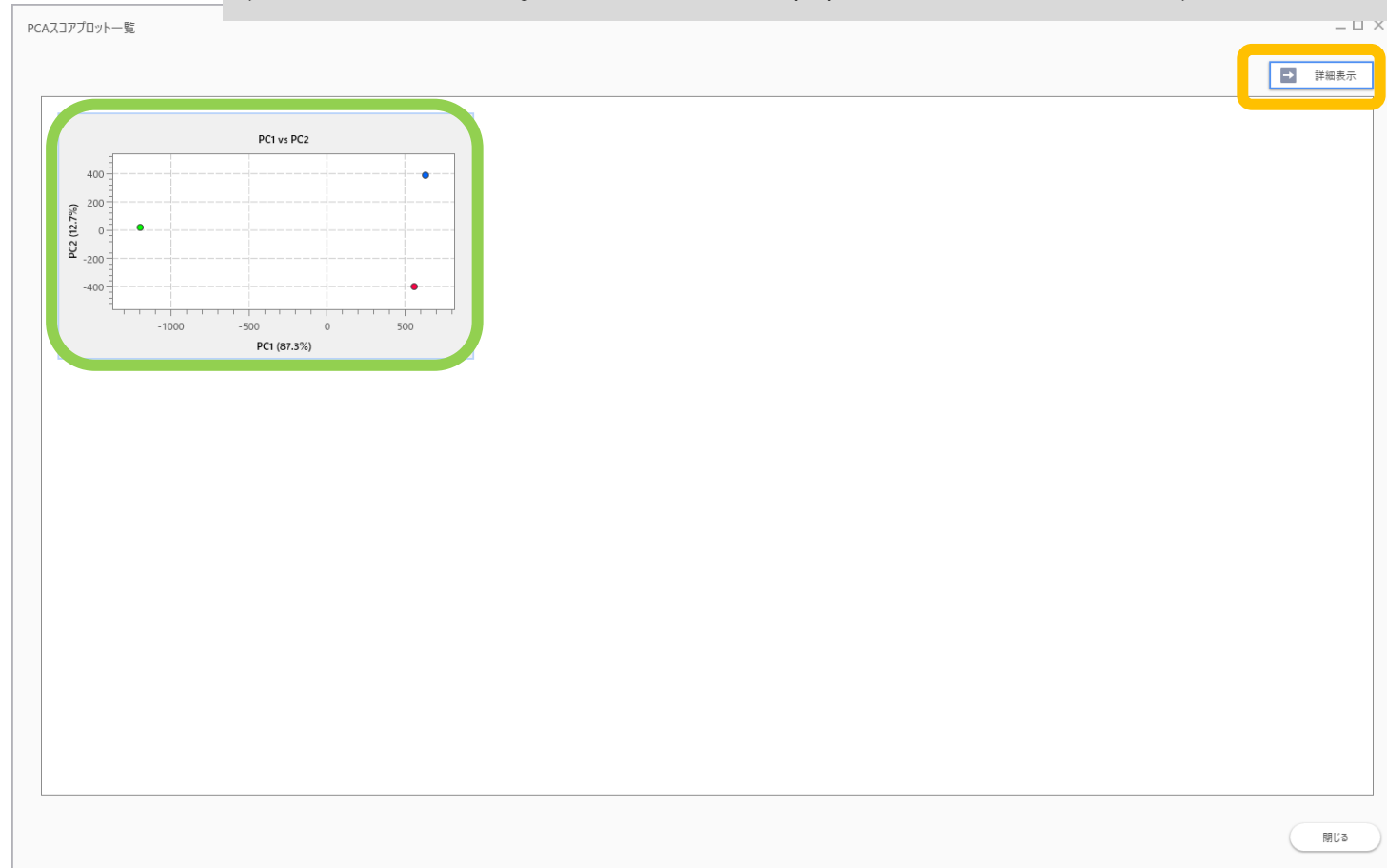
- “なし”：信号強度そのまま
- “中心化”：ROI間の各m/zの信号強度の平均を0にします。
- “オートスケール”：“中心化”に加えて、ROI間の変動の標準偏差を1にします
- “パレートスケール”：“中心化”に加えて、ROI間の変動を標準偏差の平方根で除算します。“中心化”と“オートスケール”の間になります。

4.4 PCA計算



4.5 PCA結果一覧

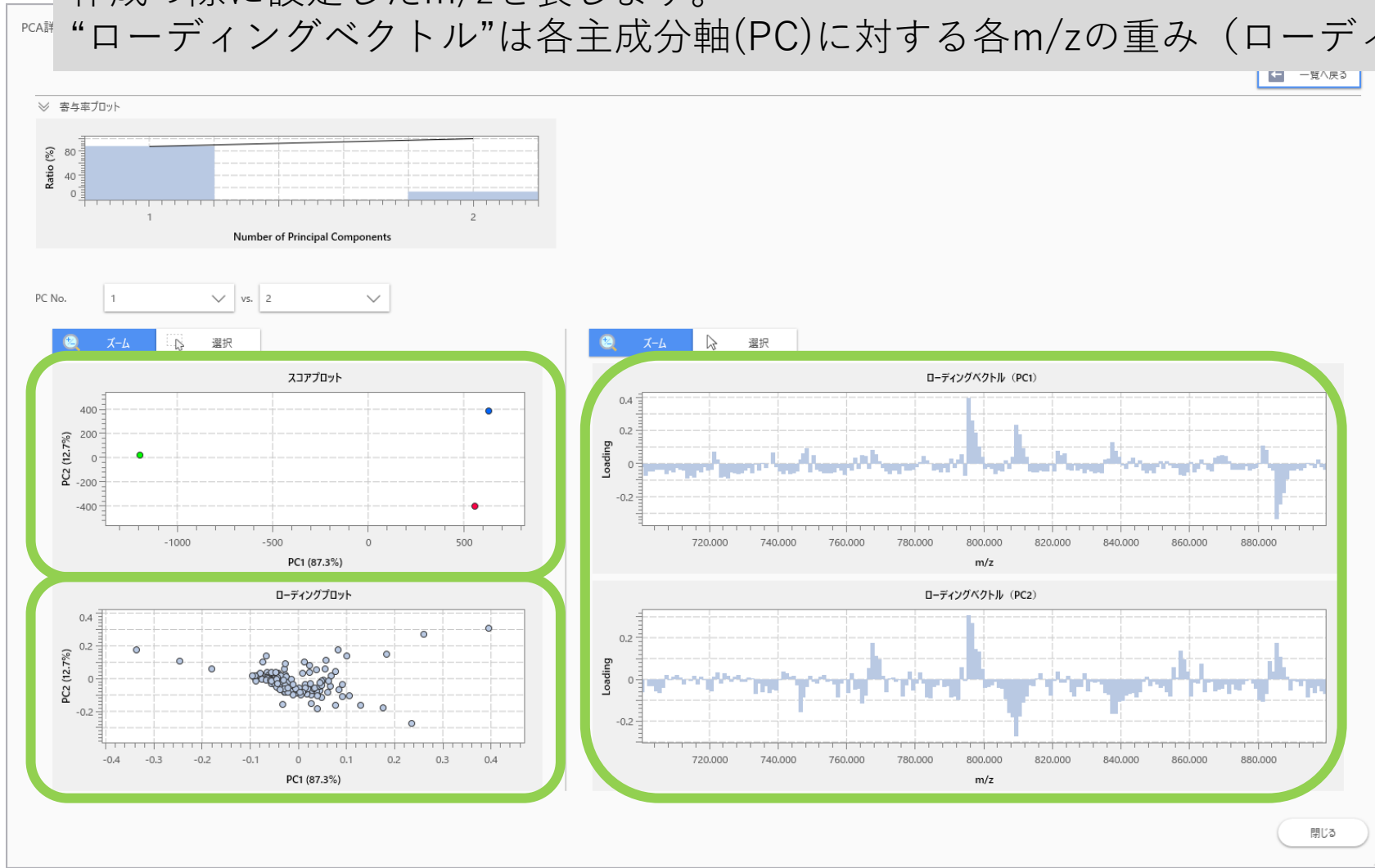
PCAの計算結果が表示されます。主成分軸が3つ以上の場合には複数の散布図が表示されます。必要な散布図を選択して“詳細表示”ボタンを押します。



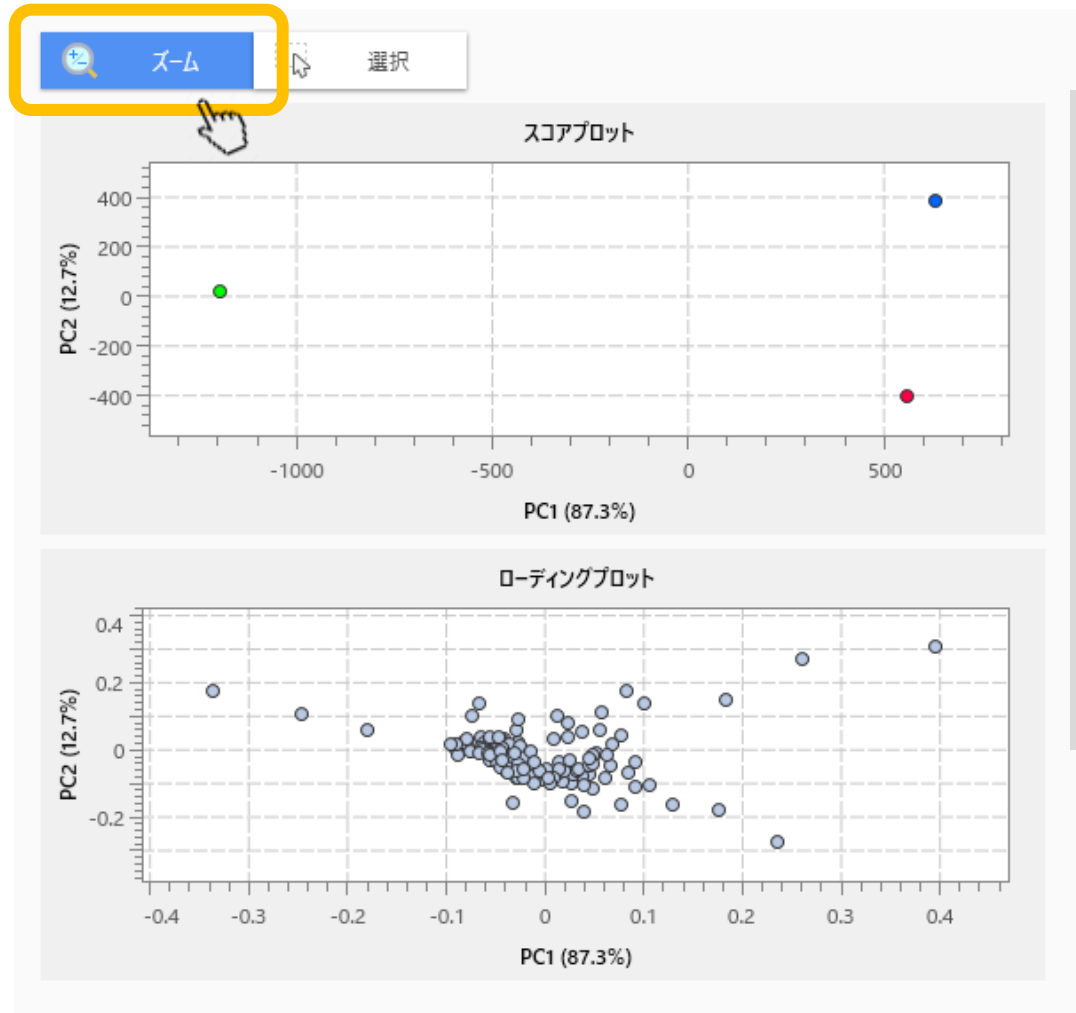
4.6 PCA結果画面

“スコアプロット”上のデータ点は各ROI、“ローディングプロット”上のデータ点はデータ行列作成の際に設定したm/zを表します。

PCA詳 “ローディングベクトル”は各主成分軸(PC)に対する各m/zの重み（ローディング）を表します。



4.7 PCA結果画面 ズーム



“スコアプロット”上のデータ点は各ROI、

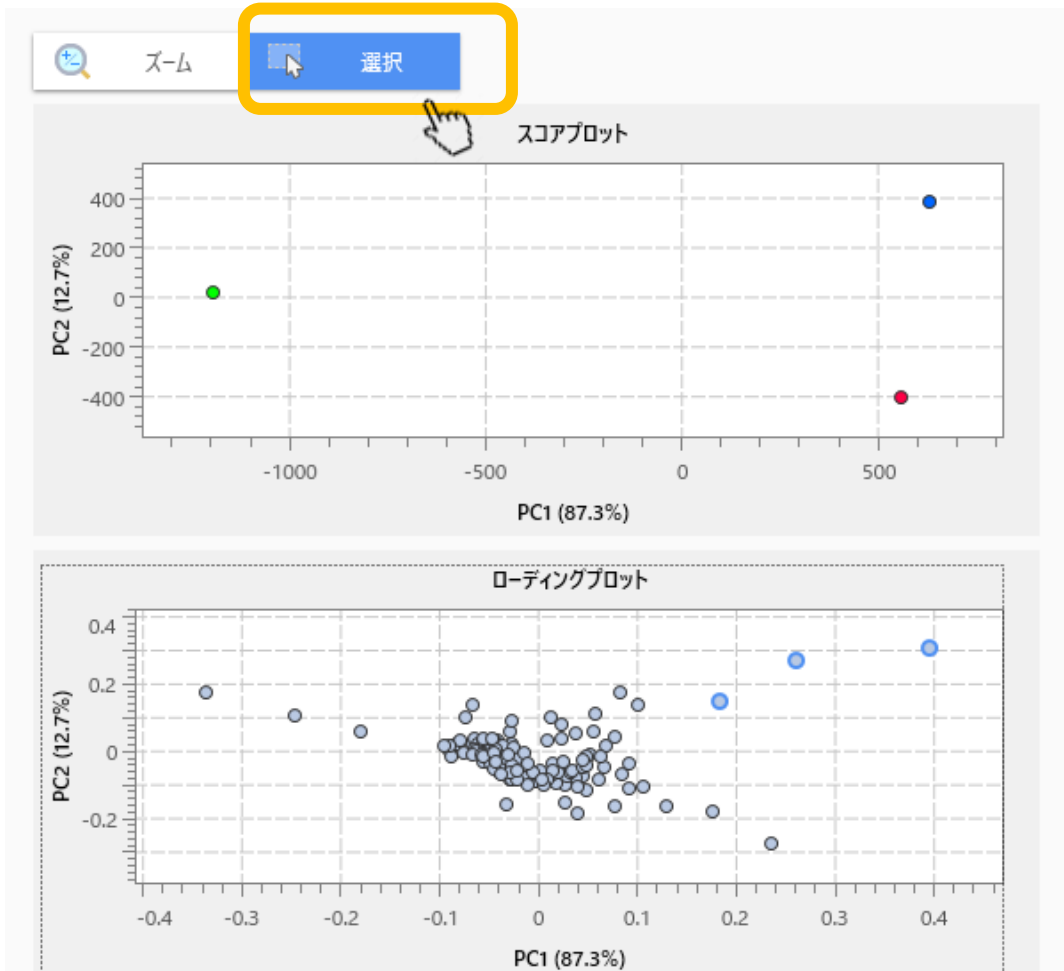
“ローディングプロット”上のデータ点はデータ行列作成の際に設定したm/zを表します。

“ローディングベクトル”は各主成分軸(PC)に対する各m/zの重み（ローディング）を表します。

“ズーム”が選択されている場合はプロット上のドラッグ操作は拡大縮小機能です。

マウスホイールでも拡大縮小ができます。

4.8 PCA結果画面データポイントを選択

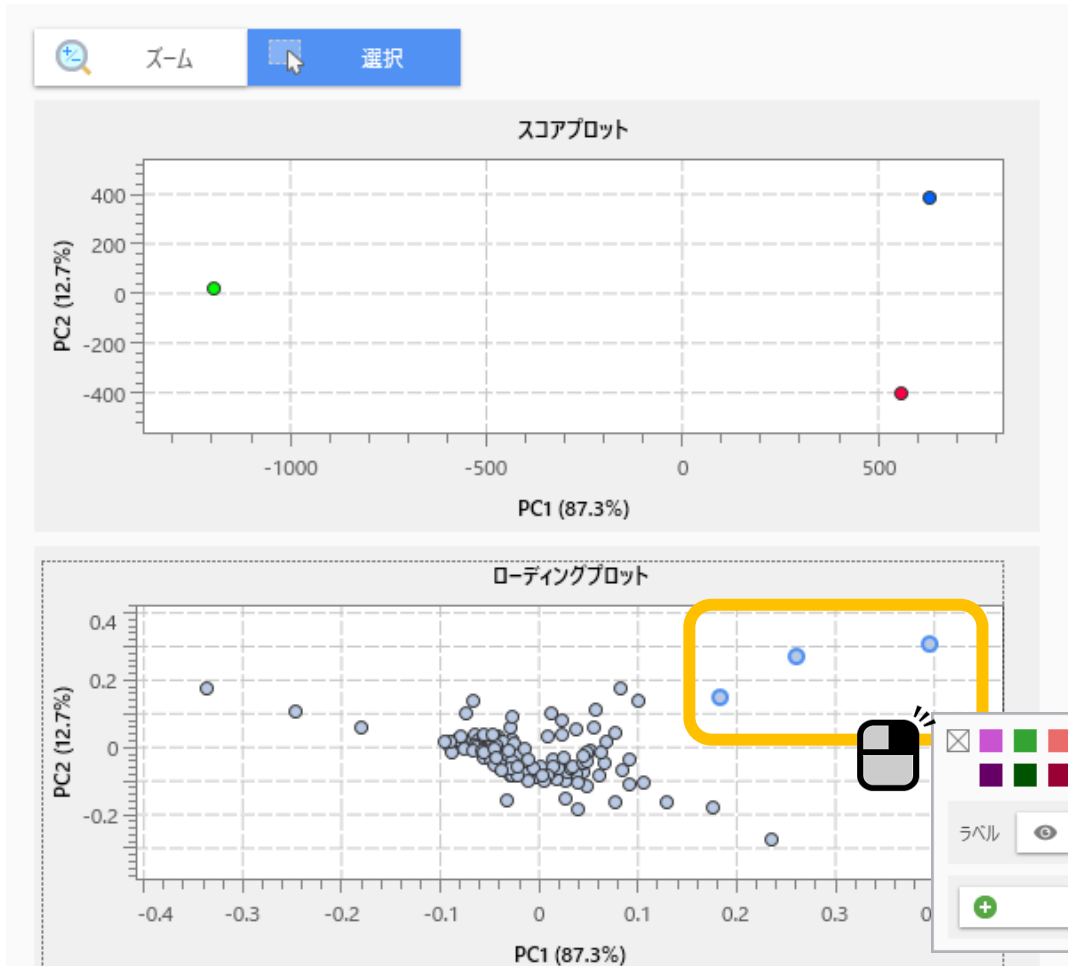


“選択”が選択されている場合は、プロット上でドラッグすると範囲内のデータポイントが選択されます。

サイドメニューから以下の操作が可能です。

- 色をつける（タグ付：この色は他のグラフやデータ行列テーブル、MSイメージリス内で共通になります。）
- ラベルの表示
- MSイメージの追加

4.9 PCA結果画面データポイントを選択

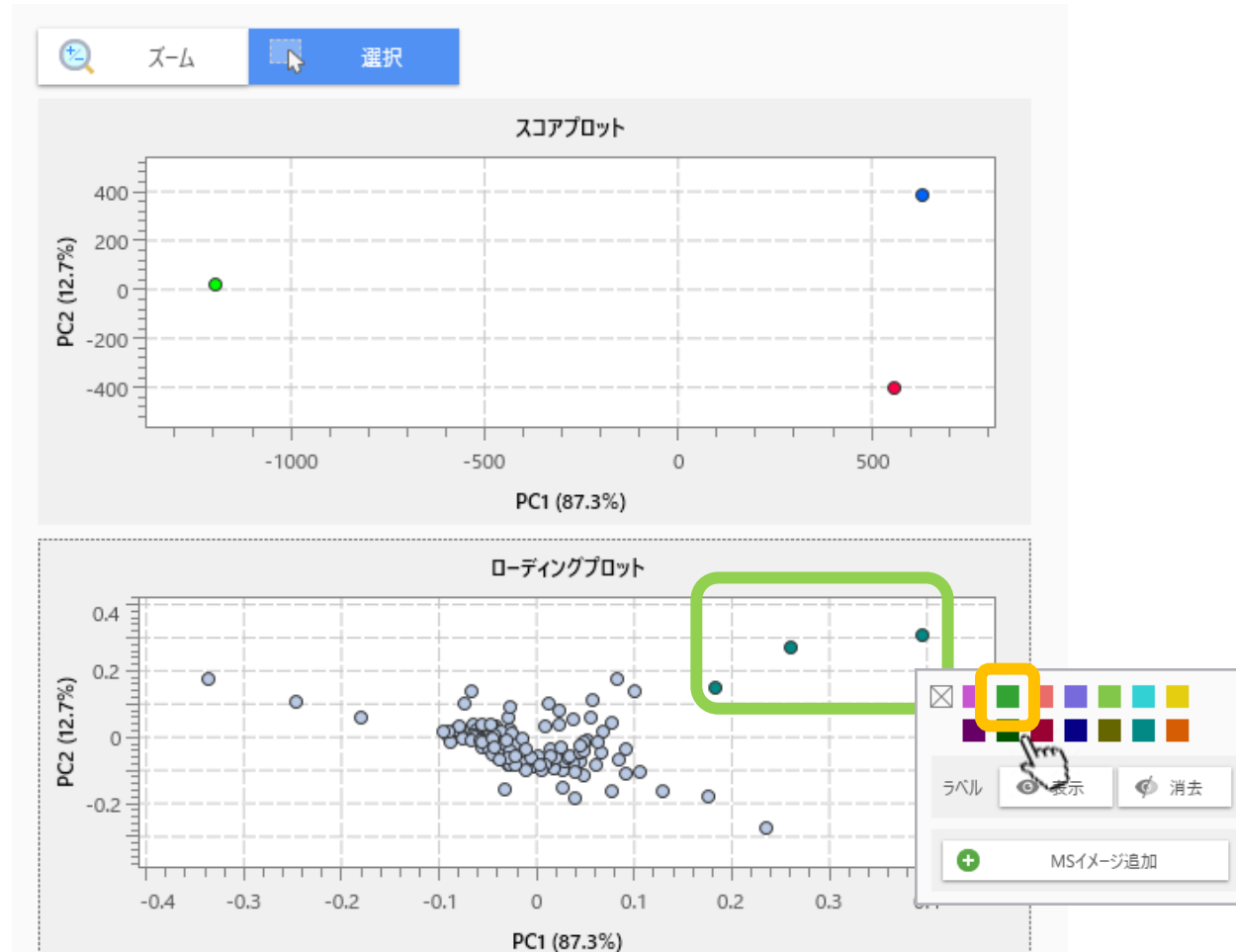


“選択”が選択されている場合は、プロット上でドラッグすると範囲内のデータポイントが選択されます。

サイドメニューから以下の操作が可能です。

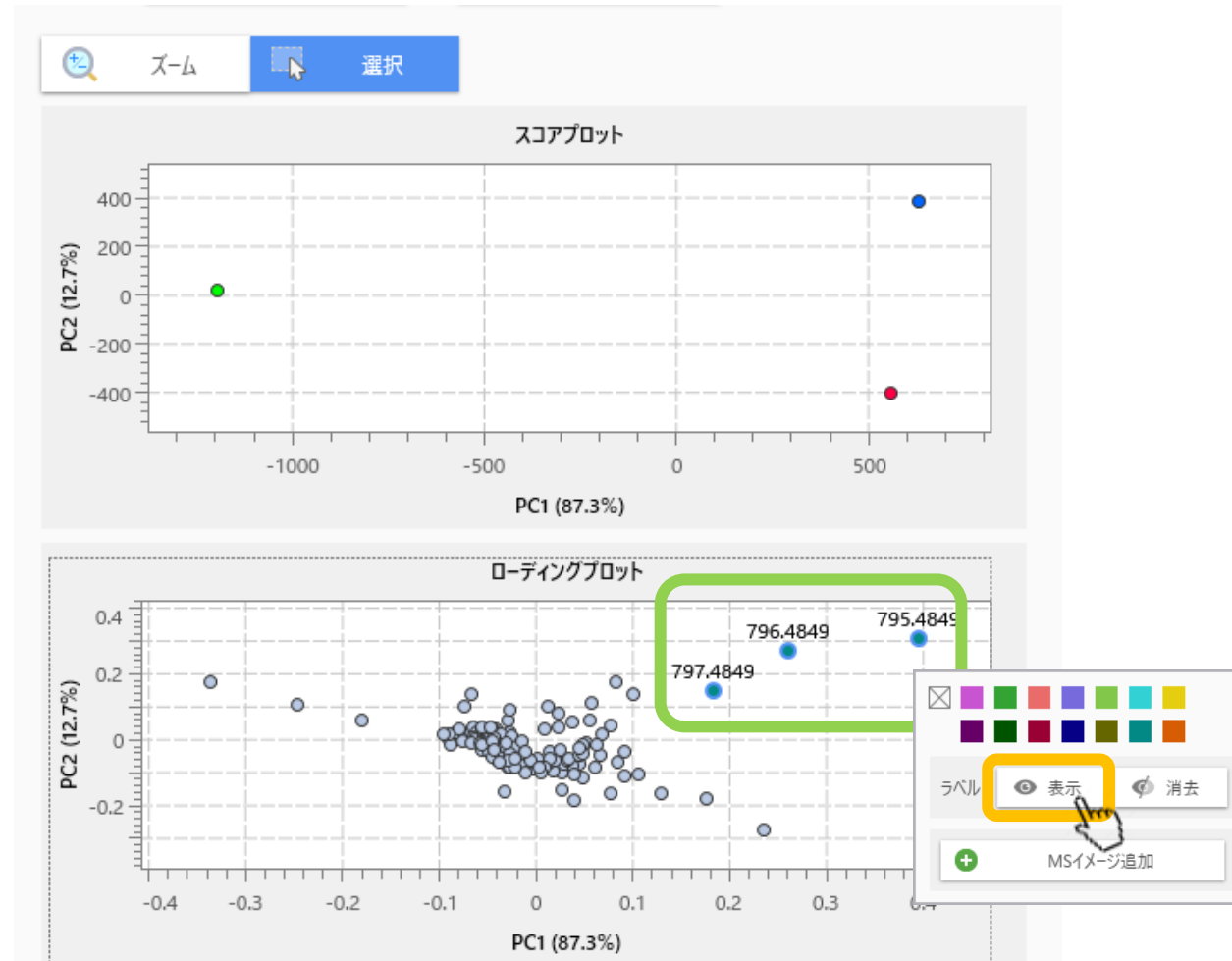
- 色をつける（タグ付：この色は他のグラフやデータ行列テーブル、MSイメージリス内で共通になります。）
- ラベルの表示
- MSイメージの追加

4.10 データポイントに色を付ける(タグ付)



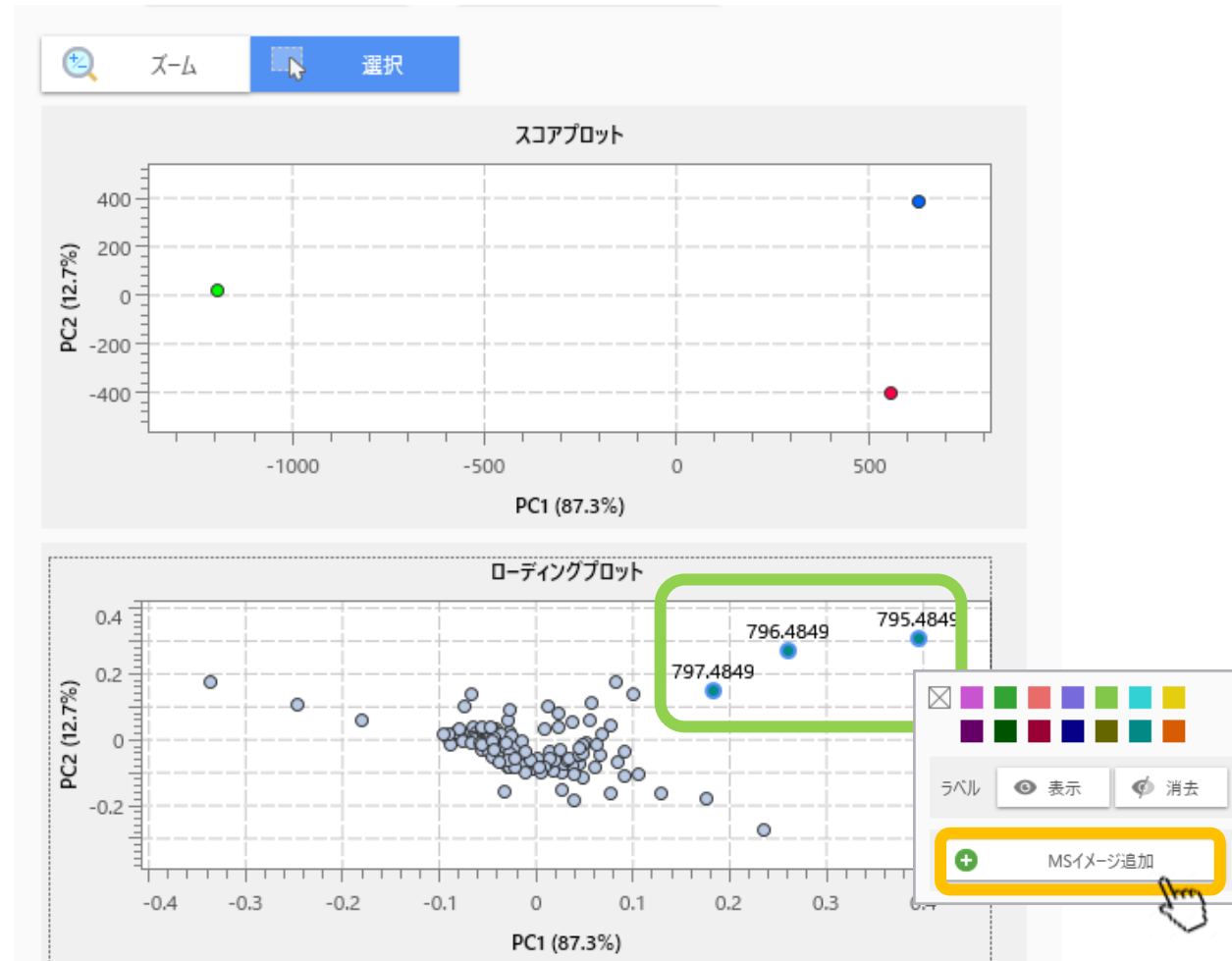
選択されたデータポイントの色が変更できます。
この色は他のグラフやデータ行列テーブル、MSイメージリスト内で共通になります。

4.11 データポイントのラベルを表示する



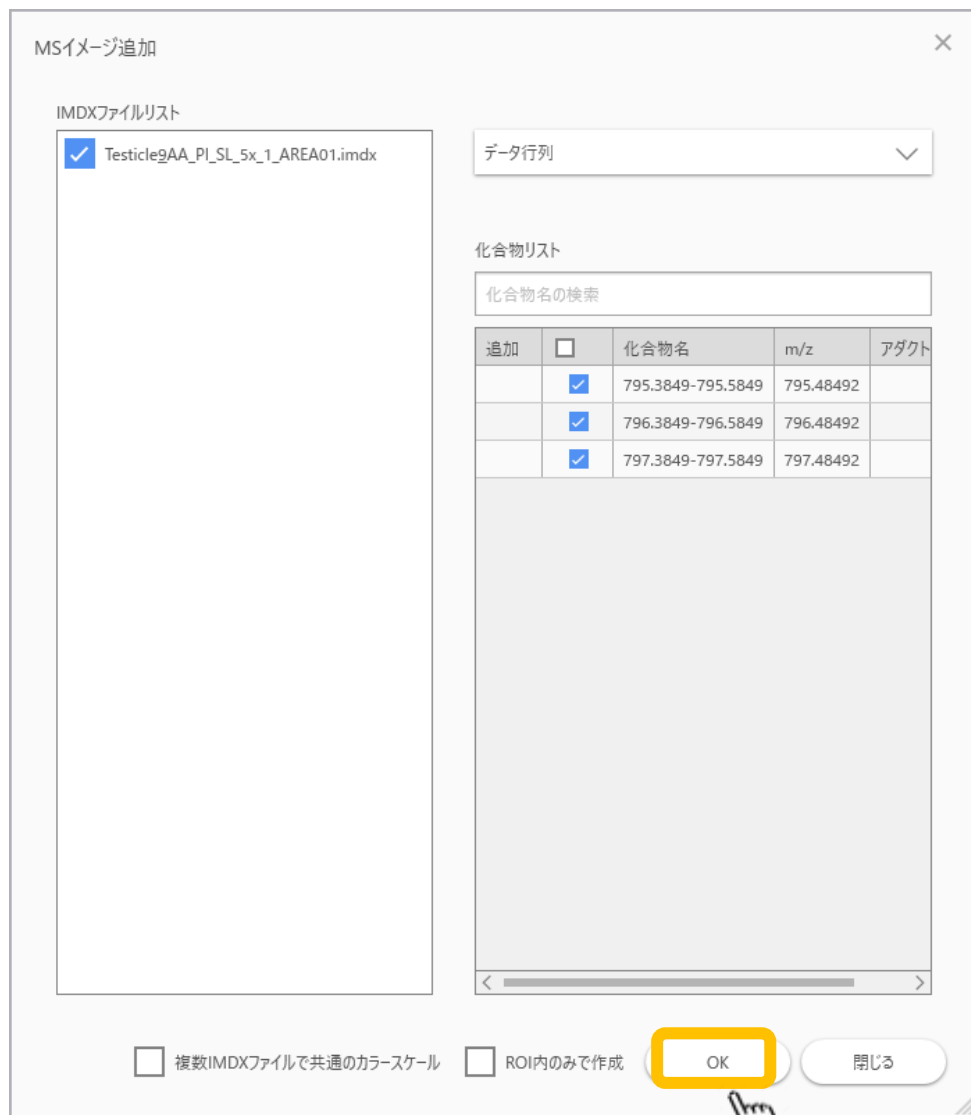
データポイントに対応するラベルが表示されます

4.12 データポイントのMSイメージを作成



選択されたデータポイントのMSイメージをメイン画面に追加します。

4.13 MSイメージ追加



4.14 結果がメイン画面に表示される

No.	使用	ファイル名	ROI名
1		Testicle_9A...	All
2	✓	Testicle_9A...	ROI001
3	✓	Testicle_9A...	ROI002
4	✓	Testicle_9A...	ROI003
5		Testicle_9A...	ROI004

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PCA-水平軸	PCA-垂直軸	ROI001	ROI002	ROI003
			PCA-水平軸				5.600e+002	6.339e+002	-1.194e+003
			PCA-垂直軸				-4.021e+002	3.859e+002	1.624e+003
186	✓						34271.553	51295.158	157633.88
187	✓			885.9849-886.9849	-2.466e-001	1.067e-001	19271.791	25189.451	82594.15
188	✓			886.9849-887.9849	-1.795e-001	5.697e-002	234383.157	181415.160	93078.10
110	✓			898.9849-809.9849	2.362e-001	-2.737e-001	1029824.289	1145936.176	788355.05
96	✓			4.9849-795.9849	3.958e-001	3.079e-001	127446.486	102214.370	52094.50
111	✓			9.9849-810.9849	1.764e-001	-1.800e-001	561465.069	629022.646	461295.95
97	✓			5.9849-796.9849	2.612e-001	2.707e-001	63879.104	45687.246	19515.11
138	✓			6.9849-837.9849	1.296e-001	-1.667e-001	237984.460	263831.297	185697.61
98	✓			6.9849-797.9849	1.845e-001	1.471e-001	11304.263	11665.185	27921.51
189	✓			7.9849-888.9849	-9.403e-002	1.351e-002	41268.920	32126.783	13705.87
182	✓			880.9849-881.9849	1.069e-001	-1.079e-001	8275.835	7723.166	22881.83
14	✓			712.9849-713.9849	-8.962e-002	8.313e-004	38503.050	25713.948	17213.07
139	✓			837.9849-838.9849	7.811e-002	-1.641e-001	9259.066	9815.346	24166.90
26	✓			724.9849-725.9849	-8.865e-002	1.598e-002	6666.396	7309.580	19637.22
16	✓			714.9849-715.9849	-8.238e-002	1.726e-002	6949.865	6083.847	16639.59
15	✓			713.9849-714.9849	-7.394e-002	-7.429e-003	25161.434	20589.488	8770.26
183	✓			881.9849-882.9849	8.468e-002	-7.102e-002	73407.900	86617.698	59309.12
99	✓			797.9849-798.9849	1.008e-001	1.340e-001	51245.991	42648.737	29264.07
112	✓			810.9849-811.9849	9.229e-002	-1.123e-001	35880.417	24057.906	23711.32
109	✓			807.9849-808.9849	3.948e-002	-1.840e-001			

メイン画面のMSイメージ一覧にMSイメージが追加されます。
タグの色がMSイメージ一覧とデータ行列テーブルに表示されています。
使用したPCAの計算結果もデータ行列テーブル内に表示されます。

No.	設定
3	ノーマライズ最小しきい値(%)
4	データ行列解析方法
5	m/z範囲
6	許容幅/ビンサイズ (Da)
7	ラベリング
8	除外リスト
9	しきい値設定