

領域間の変動成分を知り
たい

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

例

“A”にあって、
”B”, “C”にない
成分を抽出する

5.1 PLS (部分最小二乗法)

部分最小二乗法(Partial least Squares: PLS)を行います。
各ROIの平均スペクトルを基に計算されます。

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI001	Group A
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI002	Group B
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI003	Group C
5		Testicle_9A...	ROI004	Group D

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル				
1	<input checked="" type="checkbox"/>		699.9849-700.9849	700.4849	12654.115	10992.916	13195.851
2	<input checked="" type="checkbox"/>		700.9849-701.9849	701.4849	10132.104	9749.542	20207.773
3	<input checked="" type="checkbox"/>		701.9849-702.9849	702.4849	6875.912	5408.621	10541.267
4	<input checked="" type="checkbox"/>		702.9849-703.9849	703.4849	9623.874	8175.758	12906.003
5	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-704.9849	704.4849	8598.983	6357.625	10517.781
6	<input checked="" type="checkbox"/>		704.9849-705.9849	705.4849	11917.976	9338.670	13851.114
7	<input checked="" type="checkbox"/>		705.9849-706.9849	706.4849	7367.519	5995.169	9259.481
8	<input checked="" type="checkbox"/>		706.9849-707.9849	707.4849	7841.996	8671.765	16254.045
9	<input checked="" type="checkbox"/>		707.9849-708.9849	708.4849	6609.303	6343.222	10192.927
10	<input checked="" type="checkbox"/>		708.9849-709.9849	709.4849	12658.084	13006.758	17694.062
11	<input checked="" type="checkbox"/>		709.9849-710.9849	710.4849	8936.845	9317.851	10369.467
12	<input checked="" type="checkbox"/>		710.9849-711.9849	711.4849	8555.765	8655.481	11234.953
13	<input checked="" type="checkbox"/>		711.9849-712.9849	712.4849	6515.152	5488.399	9521.748
14	<input checked="" type="checkbox"/>		712.9849-713.9849	713.4849	8275.835	7723.166	22881.835
15	<input checked="" type="checkbox"/>		713.9849-714.9849	714.4849	6949.865	6083.847	16639.591
16	<input checked="" type="checkbox"/>		714.9849-715.9849	715.4849	6666.396	7309.580	19637.225
17	<input checked="" type="checkbox"/>		715.9849-716.9849	716.4849	8706.953	7608.531	11899.940
18	<input checked="" type="checkbox"/>		716.9849-717.9849	717.4849	8626.042	8015.057	13702.636

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	ノクターゲ
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

MSイメージ

Testicle_9AA_PI...
TIC

5.2 PLSパラメータ設定

PLSパラメータ

潜在変数の数 自動 手動

前処理

ROIリスト

No.	ファイル名	ROI名	属性	Y値	
1	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI001	Group A	0.00000	
2	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI002	Group B	0.00000	
3	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI003	Group C	0.00000	

5.3 PLSパラメータ設定

PLSパラメータ

潜在変数の数 自動 手動 5

前処理 パレートスケール

ROIリスト インポート エクスポート

No.	ファイル名	ROI名	属性	Y値
1	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI001	Group A	0.00000
2	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI002	Group B	0.00000
3	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI003	Group C	0.00000

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。

目的にしたい数値を“Y値”に入力します。

例えば ROI1にあってROI2,3に無いものを探す場合はそれぞれ1,0,0とします。

5.4 PLSパラメータ設定

PLSパラメータ

潜在変数の数 自動 手動 5

前処理 パレトスケール

ROIリスト

インポート エクスポート

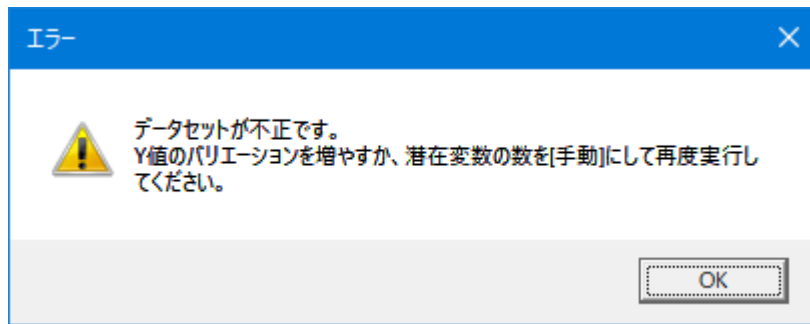
No.	ファイル名	ROI名	属性	Y値
1	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI001	Group A	1.00000
2	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI002	Group B	0.00000
3	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI003	Group C	0.00000

実行 キャンセル

5.5 PLS計算



5.6 PLS計算



“データセットが不正です。Y値のバリエーションを増やすか、潜在変数の数を手動にして再度実行してください。”

のメッセージが出た場合には、

- ・ PLSパラメータで”手動”を選択

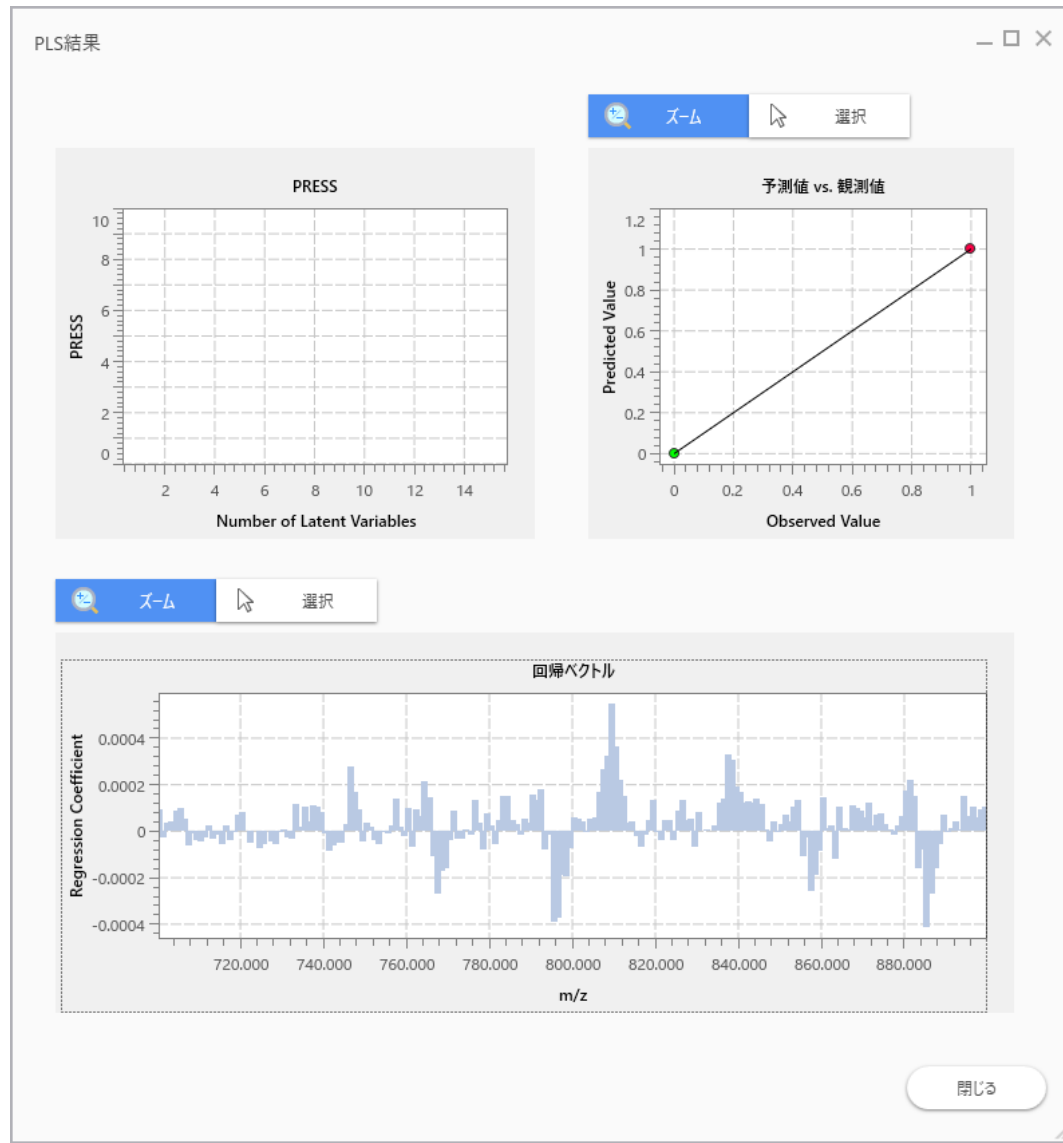
もしくは

- ・ Y値あたりのデータセット (ROI)の数を増やす

を行ってください。

クロスバリデーションのためのデータ数が足りないのが原因です。

5.7 PLS結果画面

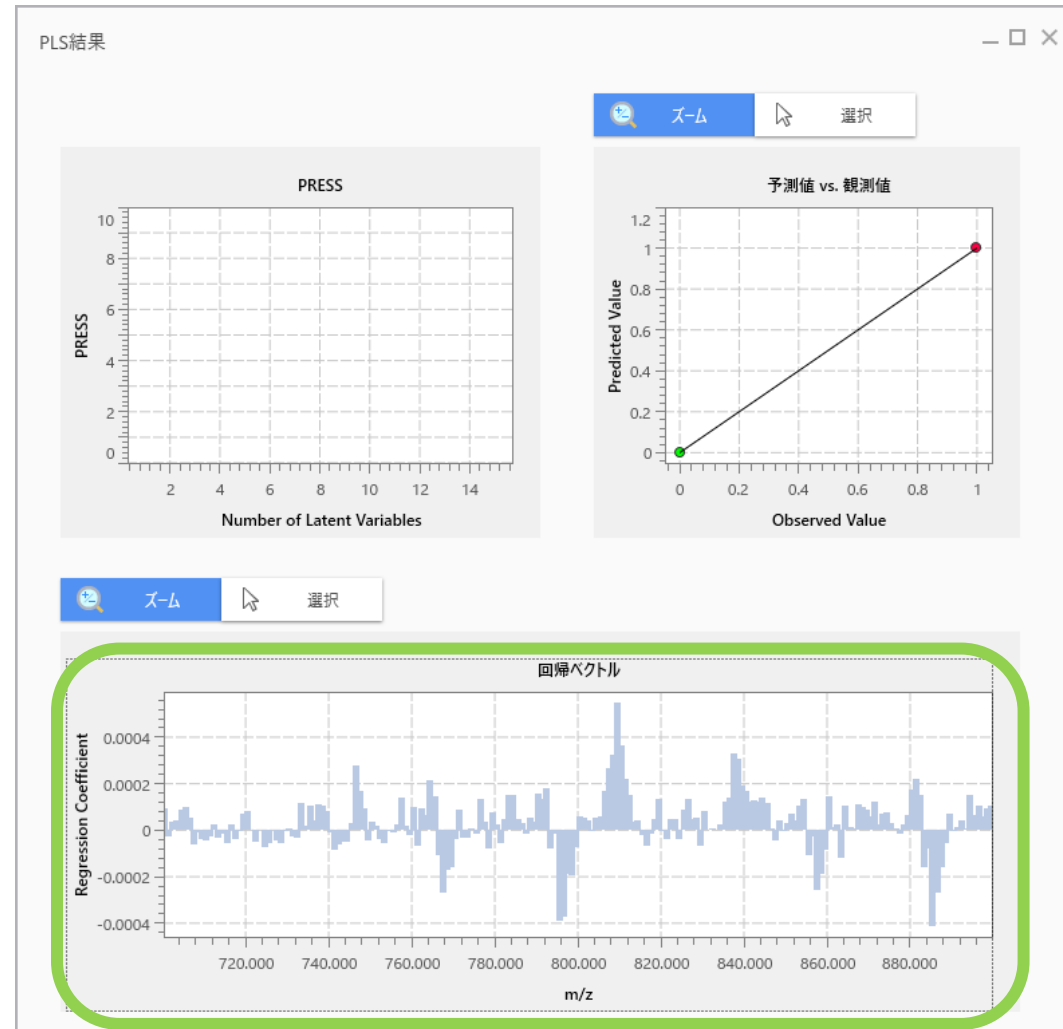


PLS結果画面には

- PRESS:軸の数 (自動の場合)
- 予測値 VS 観測値
- 回帰ベクトル

が表示されます。

5.8 PLS結果画面



回帰ベクトルのグラフから回帰係数の大きな成分を選択できますが、メイン画面のデータ行列テーブルから選択したほうが楽です。

5.9 PLS係数が表示される

メイン画面のデータ行列テーブル内にPLSの回帰係数が表示されます。

ROIリスト

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

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	ノンターゲ
5	m/z範囲	699.9849
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

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002
1	✓		699.9849-700.9849	700.48	9.412e-0	12654.115	10992.916
2	✓		700.9849-701.9849	701.48	-2.677e-0	10132.104	9749.542
3	✓		701.9849-702.9849	702.48	3.737e-0	6875.912	5408.621
4	✓		702.9849-703.9849	703.48	4.043e-0	9623.874	8175.758
5	✓		703.9849-704.9849	704.48	8.698e-0	8598.983	6357.625
6	✓		704.9849-705.9849	705.48	9.762e-0	11917.976	9338.670
7	✓		705.9849-706.9849	706.48	5.505e-0	7367.519	5995.169
8	✓		706.9849-707.9849	707.48	-5.922e-0	7841.996	8671.765
9	✓		707.9849-708.9849	708.48	-1.017e-0	6609.303	6343.222
10	✓		708.9849-709.9849	709.48	-3.990e-0	12658.084	13006.758
11	✓		709.9849-710.9849	710.48	-4.291e-0	8936.845	9317.851
12	✓		710.9849-711.9849	711.48	-2.446e-0	8555.765	8655.481
13	✓		711.9849-712.9849	712.48	2.666e-0	6515.152	5488.399
14	✓		712.9849-713.9849	713.48	-3.227e-0	8275.835	7723.166
15	✓		713.9849-714.9849	714.48	-1.281e-0	6949.865	6083.847
16	✓		714.9849-715.9849	715.48	-5.775e-0	6666.396	7309.580
17	✓		715.9849-716.9849	716.48	2.779e-0	8706.953	7608.531
18	✓		716.9849-717.9849	717.48	-3.773e-0	8626.942	8915.067

グラフ

ROI平均

計..	表..	ファイル名
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA

表示

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

情報のコピー

MSイメージ一覧

Testicle_9AA_PL...

5.10 データ行列テーブル内PLS係数

テーブルの“PLS係数”をクリックするとソートされます。

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002	ROI003
1	<input checked="" type="checkbox"/>		699.9849-700.9849	700.4849	9.411e-005	12654.115	10992.916	13195.851
2	<input checked="" type="checkbox"/>		700.9849-701.9849	701.4849	-2.677e-005	10132.104	9749.542	20207.773
3	<input checked="" type="checkbox"/>		701.9849-702.9849	702.4849	3.737e-005	6875.912	5408.621	10541.267
4	<input checked="" type="checkbox"/>		702.9849-703.9849	703.4849	4.043e-005	9623.874	8175.758	12906.003
5	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-704.9849	704.4849	8.698e-005	8598.983	6357.625	10517.781
6	<input checked="" type="checkbox"/>		704.9849-705.9849	705.4849	9.762e-005	11917.976	9338.670	13851.114
7	<input checked="" type="checkbox"/>		705.9849-706.9849	706.4849	5.505e-005	7367.519	5995.169	9259.481
8	<input checked="" type="checkbox"/>		706.9849-707.9849	707.4849	-5.922e-005	7841.996	8671.765	16254.045
9	<input checked="" type="checkbox"/>		707.9849-708.9849	708.4849	-1.017e-005	6609.303	6343.222	10192.927
10	<input checked="" type="checkbox"/>		708.9849-709.9849	709.4849	-3.990e-005	12658.084	13006.758	17694.062
11	<input checked="" type="checkbox"/>		709.9849-710.9849	710.4849	-4.291e-005	8936.845	9317.851	10369.467
12	<input checked="" type="checkbox"/>		710.9849-711.9849	711.4849	-2.446e-005	8555.765	8655.481	11234.953
13	<input checked="" type="checkbox"/>		711.9849-712.9849	712.4849	2.666e-005	6515.152	5488.399	9521.748
14	<input checked="" type="checkbox"/>		712.9849-713.9849	713.4849	-3.227e-005	8275.835	7723.166	22881.835
15	<input checked="" type="checkbox"/>		713.9849-714.9849	714.4849	-1.281e-005	6949.865	6083.847	16639.591
16	<input checked="" type="checkbox"/>		714.9849-715.9849	715.4849	-5.775e-005	6666.396	7309.580	19637.225
17	<input checked="" type="checkbox"/>		715.9849-716.9849	716.4849	2.779e-005	8706.953	7608.531	11899.940
18	<input checked="" type="checkbox"/>		716.9849-717.9849	717.4849	-3.773e-005	8626.042	8915.067	13792.639

5.11 ソートされたPLS係数

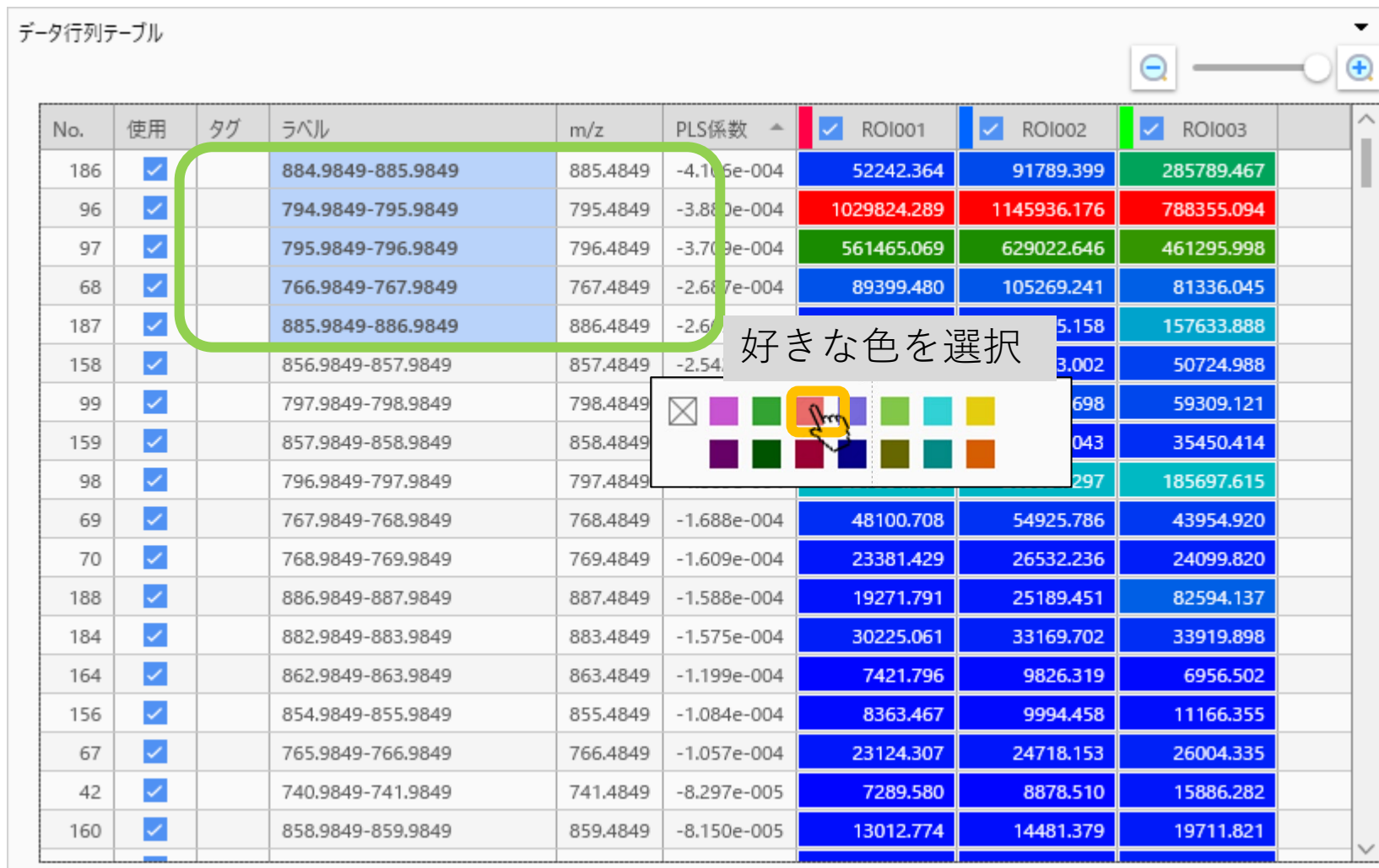
上位いくつかを選択して、右クリックして m/zタグ付け を選択

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002	ROI003
186	✓		884.9849-885.9849	885.4849	-4.105e-004	52242.364	91789.399	285789.467
96	✓		794.9849-795.9849	795.4849	-3.880e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094
97	✓		795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-004	561465.069	629022.646	461295.998
68	✓		766.9849-767.9849	767.4849	-2.687e-004	89399.480	105269.241	81336.045
187	✓		885.9849-886.9849	886.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-1.999e-004	7421.796	9826.319	6956.502
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-1.999e-004	8363.467	9994.458	11166.355
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-1.800e-004	23124.307	24718.153	26004.335
69	✓		767.9849-768.9849	768.4849	-1.600e-004	7289.580	8878.510	15886.282
70	✓		768.9849-769.9849	769.4849	-1.600e-004	13012.774	14481.379	19711.821
188	✓		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137
184	✓		882.9849-883.9849	883.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898
164	✓		862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502
156	✓		854.9849-855.9849	855.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458	11166.355
67	✓		765.9849-766.9849	766.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153	26004.335
42	✓		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282
160	✓		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821

5.12 タグ付け

データ行列テーブル



No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002	ROI003
186	✓		884.9849-885.9849	885.4849	-4.106e-004	52242.364	91789.399	285789.467
96	✓		794.9849-795.9849	795.4849	-3.880e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094
97	✓		795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-004	561465.069	629022.646	461295.998
68	✓		766.9849-767.9849	767.4849	-2.687e-004	89399.480	105269.241	81336.045
187	✓		885.9849-886.9849	886.4849	-2.600e-004	51518.158	157633.888	50724.988
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849	-2.540e-004	59309.121	35450.414	185697.615
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-1.688e-004	48100.708	54925.786	43954.920
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-1.609e-004	23381.429	26532.236	24099.820
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137
69	✓		767.9849-768.9849	768.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898
70	✓		768.9849-769.9849	769.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502
188	✓		886.9849-887.9849	887.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458	11166.355
184	✓		882.9849-883.9849	883.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153	26004.335
164	✓		862.9849-863.9849	863.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282
156	✓		854.9849-855.9849	855.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821
67	✓		765.9849-766.9849	766.4849				
42	✓		740.9849-741.9849	741.4849				
160	✓		858.9849-859.9849	859.4849				

5.13 タグ付け

データ行列テーブル 選択した行のタグに選択した色が表示されます

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002	ROI003
186	✓		884.9849-885.9849	885.4849	-4.106e-004	52242.364	91789.399	285789.467
96	✓		794.9849-795.9849	795.4849	-3.800e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094
97	✓		795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-004	561465.069	629022.646	461295.998
68	✓		766.9849-767.9849	767.4849	-2.607e-004	89399.480	105269.241	81336.045
187	✓		885.9849-886.9849	886.4849	-2.605e-004	34271.553	51295.158	157633.888
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849	-2.542e-004	35594.351	44503.002	50724.988
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-1.935e-004	73407.900	86617.698	59309.121
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-1.902e-004	21195.334	27205.043	35450.414
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-1.869e-004	237984.460	263831.297	185697.615
69	✓		767.9849-768.9849	768.4849	-1.688e-004	48100.708	54925.786	43954.920
70	✓		768.9849-769.9849	769.4849	-1.609e-004	23381.429	26532.236	24099.820
188	✓		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137
184	✓		882.9849-883.9849	883.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898
164	✓		862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502
156	✓		854.9849-855.9849	855.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458	11166.355
67	✓		765.9849-766.9849	766.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153	26004.335
42	✓		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282
160	✓		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821

5.14 MSイメージ追加

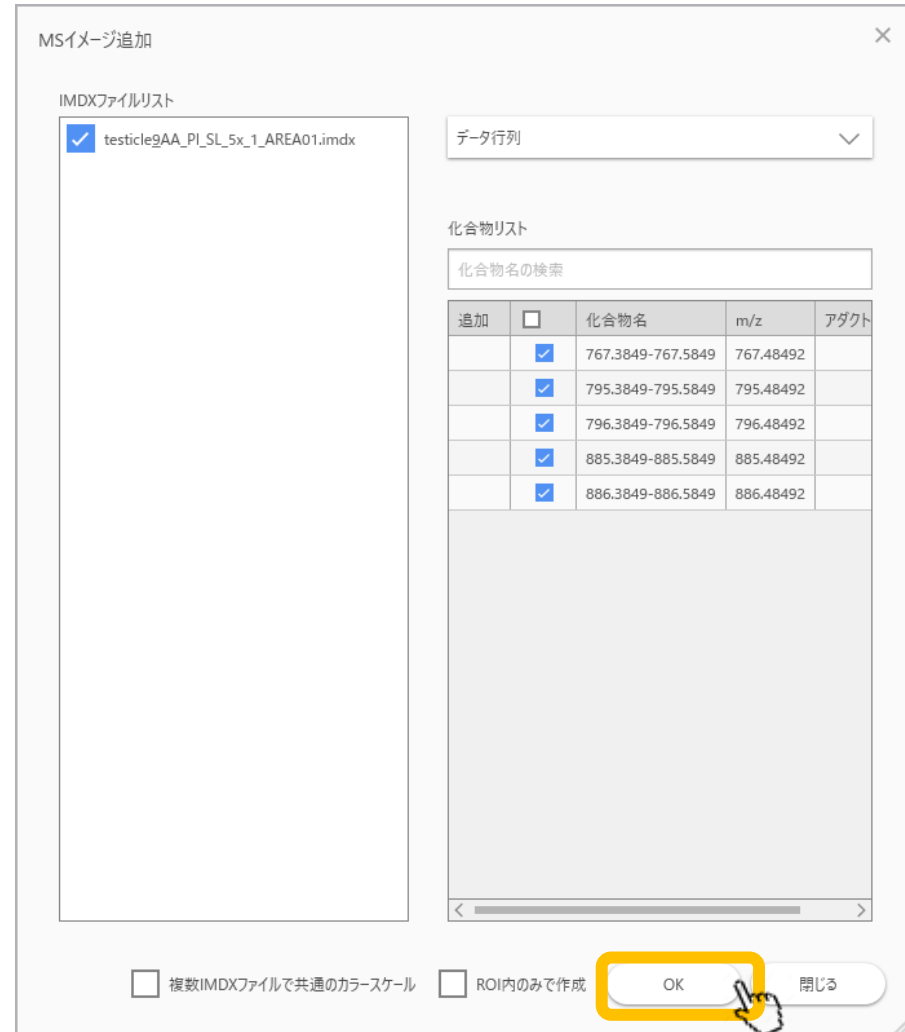
データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002	ROI003
186	✓		884.9849-885.9849	885.4849	-4.116e-004	52242.364	91789.399	285789.467
96	✓		794.9849-795.9849	795.4849	-3.800e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094
97	✓		795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-004	561465.069	629022.646	461295.998
68	✓		766.9849-767.9849	767.4849	-2.607e-004			
187	✓		885.9849-886.9849	886.4849				
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849				
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-1.930e-004			
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-1.900e-004			
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-1.800e-004			
69	✓		767.9849-768.9849	768.4849	-1.600e-004			
70	✓		768.9849-769.9849	769.4849	-1.600e-004			
188	✓		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137
184	✓		882.9849-883.9849	883.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898
164	✓		862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502
156	✓		854.9849-855.9849	855.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458	11166.355
67	✓		765.9849-766.9849	766.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153	26004.335
42	✓		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282
160	✓		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821

右クリックして、MSイメージ追加 を選択

- コピー
- すべてコピー
- m/zタグ付け
- ROIタグ付け
- MSイメージを追加**
- 比の分母/効果量の減数に設定する
- m/z検索

5.15 MSイメージ追加



5.16 PLS結果からMSイメージを作成

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

- ROIリスト (ROI List):** A table listing five ROIs (ROI001 to ROI004) with their respective file names and attributes.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A large table showing m/z values, PLS coefficients, and ROI assignments for various data points. ROI001 is highlighted in red, indicating it is the selected ROI for MS image creation.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the mass spectrum for ROI001, showing intensity across a range of m/z values.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table showing parameters for the PLS analysis, such as normalization and m/z range.
- グラフ (Graph):** A section for spectral analysis, including a spectrum plot and a peak picking tool.
- MSイメージ生成結果 (MS Image Generation Results):** A grid of smaller MS images for different m/z ranges, with the selected ROI001 image highlighted in a green box.

ROI 1 に多く見られるm/zのMSイメージが作成されました。MSイメージにも同じ色のタグが付いています。