## 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



### "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)

🔤 ファイル 表示 検索	設定 オプション 拡張機能 ヘルプ		🛃 差異解析   C:¥Users¥yamac	◎ 部分晨/	トー亜	注(Partia	al least Squares. PLS)&	行います
	ROIUZE	=	データ行列テーブル		J.— ⁄			1 0 0 90
画像レジストレーショ ン	No. 使用 ファイル名 ROI名	属性		_各ROIσ	)平均	スペクト	ルを其に計質されます	
	1 Testicle_9A All	Group A	No. 使用 タグ ラベル	ЦКОГФ				
	2 V Testicle_9A ROI001	Group A	1 699.9849	-700.9849 700.4849	12654.115	10992.916 13195.851		
ROI設定	3 V Testicle_9A ROI002	Group B	2 700.9849	701.9849 701.4849	10132.104	9749.542 20207.773	and the second	TIC
	4 V Testicle_9A RO1003	Group C	3 701.9849	-702.9849 702.4849	6875.912	5408.621 10541.267 8175 758 12906 003		ファイル名:
=とめて解析・	5 Testicle_9A RO1004	Group D	5 703.9849	-704.9849 704.4849	8598.983	6357.625 10517.781	1. S. G. S. M. L. M. LEWIS AND AND ADDRESS IN CONTRACT OF MALE	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA01.i
☆ データ行列			6 🗹 704.9849	-705.9849 705.4849	11917.976	9338.670 13851.114		mdx
\$ 7 713A			7 705.9849	-706.9849 706.4849	7367.519	5995.169 9259.481	and the second secon	タイプ:
±∕₀. I			8 706.9849	-707.9849 707.4849	7841.996	8671.765 16254.045	<ul> <li>A grad grad state state of the set</li> </ul>	TIC
前処理設定			9 2 707.9849	-708.9849 708.4849	6609.303	6343.222 10192.927		
			10 708.9849	709.9849 709.4849	12658.084	13006.758 17694.062		
<u>*/-</u>			12 709.9849	-711.9849 711.4849	8555 765	8655.481 11234.953		
			13 711.9849	-712.9849 712.4849	6515.152	5488.399 9521.748		
前処埋			14 712.9849	-713.9849 713.4849	8275.835	7723.166 22881.835	and the second state of th	
			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		
データ行列設定			17 715.9849	-716.9849 716.4849	8706.953	7608.531 11899.940	<ul> <li>Provide the second s</li></ul>	▶ 情報のコピー
			18 ./ 716.98/0	717 0940 717 4940	0000040			
			<					
		-	K				Y used to be	
データ行列計算			<i>4</i> эл				■ MS1X-ジー覧	• x
データ行列計算			く グラフ スペクトル 箱ひげ図				× MSイメ-ジー覧 ● MSイメ-ジョ油 ■ ● ■ ソート × ◆	◆ × ● 表示 ~ [5] [6] 《
データ行列計算 ※ 差異解析			グラフ スペクトル 箱ひげ図 マロール 第二の 1000000000000000000000000000000000000		5 8	- : ROI平均 > >>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>	× MSイメ-ジー覧 ≫ MSイメ-ジー覧 ● ■ ソート × ●	<ul> <li>× ×</li> <li>≪</li> <li>∞ ₹5</li> </ul>
<del>了_</del> 9行列計算 ※ 差異解析	<	>	グ57 スペクトル 箱ひげ図 図 M 3 (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	9 0	ROI平均         >	× MSfX-ジー覧 ● MSfX-ジー覧 ● ■ ソート × ◆ ● ■ オージ追加 ■ ● ■ ソート × ◆	<ul> <li>× ×</li> <li>● 表示 ∨ [½] [ef]</li> <li>● 副前篇</li> </ul>
デー9行列計算 ※ 差異解析 ● 第一の行列計算	< 解析パラメータ	> • x	グラフ スペクトル 箱ひげ図 2010日 単一の 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第 第	<ul> <li>(学 表示 ~)</li> <li>(次)</li> <li>(次)</li> <li>(次)</li> <li>(水)</li> <li>(水)</li></ul>	DC	ROI平均         ✓           面 全て計算         ×	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジ追加 ■ ○ ● ■ ソート × ●	<ul> <li>×</li> <li>● 表示 ∨ [15] [16]</li> <li>≪</li> <li>■ 四別演算</li> </ul>
デー9行列計算 ※ 差異解析 後定	< 解析/(5メータ	> • x	(く ガ5フ スペクトル 箱ひ打図 留 逸 &	<ul> <li>ダ 表示 &lt; ご</li> <li>ジ追加</li> <li>() m/2検索</li> </ul>		ROI平均         >           面 全て計算         >	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● ■ ソート × ◆ ■ ● ■ クート × ◆ ■ ● ■ クート × ◆	<ul> <li>×</li> <li>● 表示 ✓ [15] [16]</li> <li>● 副別演算</li> </ul>
デー9行列計算 ※ 差異解析 後定 民国 (1)	く 解析/(ラメーク TIC	> • x	ダラフ スペクトル 箱ひ打図 2ペクトル 箱ひ打図 2ペクトル 箱ひ打図 3000000000000000000000000000000000000	<ul> <li>ダ表示 &lt;</li> <li>ジ追加</li> <li>アルクロック</li> <li>アルクロック</li> </ul>		ROI平均     X       画 全て計算       計 表 ファイル名       回 口 Tertica 800	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	<ul> <li>×</li> <li>● 表示 ✓ [15] [16]</li> <li>● 副別演算</li> </ul>
データ行列計算 データ行列計算 ※ 差異解析 検定 評典	< 解析パラメーク TIC No. Name	> Value	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 留 M M ① 3 目 現 現 ● MSイメー 読 ビークビッキング	<ul> <li>参表示 &lt; ご</li> <li>ジ追加</li> <li>の</li> <li>m/2検索</li> </ul>	5	ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 L Testicle_9AA       回 L Testicle 9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジ追加 ■ @ ● ● ■ ソート × ● ● ■ 0 m/2換票 ● 重ね合わせ Testicle 9AA_PI	<ul> <li>×</li> <li>● 表示 ✓ [15] [16]</li> <li>● 画別演算</li> </ul>
デー9行列計算 デー9行列計算 ※ 差異解析 後定 そ アCA計算	< 解析パラメーク TIC No. Name 1 ノーマライズ	> Value TIC	< <li>オラフ     スペクトル 箱ひげ図     スペクトル 第一日 日本 日本</li>	● 表示 ~ 逆 ジ追加 ② m/2検索	5	ROI平均     ✓       圖 全て計算     ✓       計 表 ファイル名     □       □ Testicle_9AA       □ Testicle_8AA       □ Testicle 8AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジ追加 ■ @ ● ● ■ ソート × ● ● ■ 0 m/2換票 ● 重ね合わせ Testicle_9AA_Pl	<ul> <li>×</li> <li>● 表示 ✓ [15] [16]</li> <li>● 画別演算</li> </ul>
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 検定 (学業) PCA計算	< 解析パラメータ TIC No. Name 1 ノーマライズ 2 ノーマライズ基準値設定	> Value TIC 77	< <li>グラフ     スペクトル 箱ひげ図     スペクトル 名の     スペクトル 箱ひげ図     スペクトル 名の     スペク     スペクトル 名の     スペクトル 名の     スペクトル 名の     スペクトル 名の     スペク     スペクトル 名の     スペクトル 名の     スペクトル 名の     スペクトル 名の     スペク     スペ</li>	● 表示 > 逆 ジ追加 ② m/2検索	5	ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジョ油 ■ @ ● ● ■ ソート × ● ● ■ 0 m/2換票 ● 重ね合わせ Testicle 9AA,Pl	
デーク行列計算 デーク行列計算 を見解析 検定 PCA計算	タントング  メーク  メーク  メーク  メーク  メーク  メーク  メーク  メー	> Value TIC 77 0	< ガラフ スペクトル 箱ひげ図 一〇 私 一 3 1 現 現 ● MSイメー 減 ビークビッキング	● 表示 ~ 逆 ジ追加 ② m/2検索		ROI平均        画 全て計算       新 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジョニ類 ● ● ● ■ ソート × ● ■ ● ● ■ リート × ● ■ ● ● ■ リート × ● ■ ● ● ■ リート × ●	
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算 PCA計算	タンプログロングングロック	> Value TIC 77 0 JV9-4	<	● 表示 ~ 逆		ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 1 Testicle_9AA       画 1 Testicle_9AA       画 1 Testicle_9AA       画 1 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジョニ加 ● ● ■ ソート × ● ■ ● ● ■ ソート × ● ■ ● ■ ● ■ ソート × ● ■ ■ ● ■ ● ■ 10 m/2検索 ■ ■ ● ■ ● ■ 10 m/2検索 ■ ■ ■ ● ■ ■ 0 m/2検索 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 検定 配 アCA計算 PCA計算 PCA結果表示	< 繋折パラメータ TIC No. Name 1 ノーマライズ 2 ノーマライズ基準値設定 3 ノーマライズ基小しきい値(%) 4 データ行列解析方法 5 m/2範囲	> Value TIC 77 0 Jンターゲ 699.984	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 会 M (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)	● 表示 ~ 逆		ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジョ油 ■ ○ ● ■ ソート × ● ■ でのでは、「「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでは、「」」 ■ でのでのでは、「」」 ■ でのでのでは、「」」 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのです。 ■ でのでのでのでのでのでのでのです。 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのでのです。 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのです。 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのでのです。 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでの	
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算 PCA結果表示	メージングイズ (Da)	> Value TIC 77 0 <i>JY9-J</i> 699.984 1.0000	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 留 M → ● 第 目 照 照 ● MSイメー 読 ビークビッキング	● 表示 ✓ Ⅲ		ROI平均        画 全て計算       新 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジョニ版 ● ● ● ソート × ● ■ でのでは、「「」」 Testicle 9AA, Pl していたいに、9AA, Pl していたいに、9AA, Pl	
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 検定 () () () () () () () () () () () () ()	< 繋折パラメータ TIC No. Name 1 ノーマライズ 2 ノーマライズ基準値設定 3 ノーマライズ基準値設定 3 ノーマライズ基準値設定 3 ノーマライズ基準値設定 5 m/2範囲 6 許容福/どンサイズ (Da) 7 ラベリング	> Value TIC 77 0 	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 留 M → ● 第 目 照 照 ● MSイメー 読 ビークビッキング	● 表示 ✓ Ⅲ		ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジョニ版 ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 様定 検定 PCA計算 PCA結果表示 PCA結果表示	メージング (Data Strain	> Value TIC 77 0 	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 留 M → ● 第 日 四 四 ● MSイメー 読 ビークビッキング	● 表示 ✓ Ⅲ		ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● ■ ソート × ● ■ でのでは、 ■ でのでのでは、 ■ でのでは、 ■ でのでは、 ■ でのでは、 ■ でのでは、 ■ でのでは、 ■ でのでのは、 ■ でのでのは、 ■ でのでのは、 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでの	
デーク行列計算 デーク行列計算 を実解析 検定 PCA計算 PCA結果表示 PCA結果表示	メージング メンジング メーマライズ シーマライズを準備設定 コージーマライズを準備設定 コージーマライズ最小しきい値(%) イージーマライズ最小しきい値(%) イージーク「ブ気別解析方法 ちーック「⑦別解析方法 ちーック「⑦別解析方法 ちーック「⑦別解析方法 キータ「⑦別解析方法 ちーック「⑦別解析方法 キーター「⑦」 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	Value           TIC           X7           0           J29-94           699,984           1.0000           X7           X7	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 菜 ▲ ▲ ● 第 目 Ⅲ Ⅲ ● MSイメー 菜 ビークビッキング	● 表示 ✓ Ⅲ	9	ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA       画 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● ■ ソート × ● ■ でのではまました。 ■ でのではまました。 ■ でのではまました。 ■ でのではまました。 ■ でのではまました。 ■ でのではまました。 ■ でのでは、 ■ でのでのでは、 ■ でのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでのでの	
デーク行列計算         芝具解析         使定         検定         PCA計算         PCA計算         PCA計算         PCA計算         PCA計算	メージングズ (Da) マジングズ (Da) マジングズ (Da) マジンズ (Da) マジンズ (Da) マジングズ (Da) マジングズ (Da) マジングズ (Da) マジング 名 除外リスト 9 しさい値設定	> Value TIC 377 0 J29-9 699,944 1,0000 37 47 37 47 37	ズベクトル 箱ひげ図 スペクトル 箱ひげ図 菜 ▲ ▲ ● ● MSイメー 菜 ピークビッキング	★ ◆ 表示 ✓ Ⅲ	5	ROI平均        画 全て計算       計 表 ファイル名       回 二 Testicle_9AA       回 二 Testicle_9AA       回 二 Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● ■ ソート × ● ■ でのでを読録 ● 重ね合わせ Testicle_SAA_P! していてを読録 ● 重ね合わせ Tic	

#### 5.2 PLSパラメータ設定

PLSパラメー	9							×
潜在変数	の数	• • • •	ib ib	5 🗸				
前処理		パレートス	ケール	$\sim$				
ROIリスト				1۷	ポート	4	エクスポート	
No.	ファイル名		ROI名	属性	Y値			
1	Testicle_9AA_PI_S	L_5x_1	ROI001	Group A	0.00000			
2	Testicle_9AA_PI_S	L_5x_1	ROI002	Group B	0.00000			
3	Testicle_9AA_PI_S	L_5x_1	ROI003	Group C	0.00000			
				D	実行	X	キャンセル	

#### 5.3 PLSパラメータ設定

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

前処理	パレートス	マケール	$\sim$	]	
ROIリスト		Políž		インポート	┣ エクスポート
No. 1	ファイル名 Testicle 9AA PI SL 5x 1	ROI2	属性 Group A	Y值 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	

#### 5.5 PLS計算



#### 5.6 PLS計算

	PLSパラメー	-9				
	潜在変数		ih ib	5 🗸		
17- X	前処理	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	5-n	~	]	
データセットが不正です。 Y値のパ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	ROIリスト			+	インボート	+
てください。	No.	ファイル名 Tastisla QAA PL SL 5v 1	ROI名	属性 Group A	Y值	
	2	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	RO1001	Group B	0.00000	
ОК	3	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI003	Group C	0.00000	
						_
					実行 キャンセル	k

"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



#### 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

🔛 ノアイル 衣示 使案	設止 オノンヨノ 拡張機能 ペルノ	■ メイン両面のデニタ行列テニブル内にDCの同倶係粉が主テキれます
^		「メイノ画面のノータ1」がリノーノル内にFLOの回帰係数が衣小されより。
画像レジストレーショ	No. 使用 ファイル名 ROI名 属性	
2	1 Testicle_9A All Group A	No. 使用 タグ ラベル m/z PIS係数 Z ROIO01 Z ROIO02 ヘ
	2 🗸 Testicle_9A ROl001 Group A	1 🗹 699.9849-700.9849 700.48 9.412e-0 12654.115 10992.916
	3 🗸 Testicle_9A ROl002 Group B	2 Z 700.9849-701.9849 701.48 -2.677e-0 10132.104 9749.542 化会物名①メント
ROI設定	4 🗸 Testicle_9A ROl003 Group C	3 Z 701.9849-702.9849 702.48 3.737e-0 6075.912 5408.621
	5 Testicle_9A ROI004 Group D	4 Z 702.9849-703.9849 703.48 4.043e-0 9623.874 8175.753
まとめて解析: 💽 💿		5 V 703.9849-704.9849 704.48 8.698e-0 8598.983 6357.625
≫ データ行列		
<u>.</u>		7         2         70539997053999         70548         5305407         7305109         712           8         7         7668849702849         707489         507261         700109         712         712
- <b>*</b> @		9 10500000000000000000000000000000000000
前処理設定		10 708,9849-709,9849 709,984 73,990-0 12558,084 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
前机理		13 🗾 711.9849-712.9849 712.48 2.666e-0 6515.152 5488.399
H17C/±		14 Z 712,9849-713,9849 713,48 -3.227e-0 8275.835 7723.16
		15 🗹 713.9849-714.9849 714.48 -1.281e-0 <u>6949.865 6083.847</u>
		16 Z 714.9849-715.9849 715.48 -5.775e-0 6666.395 7309.580 7309.580
データ行列設定		17 d 715.9849-716.9849 716.48 2.779-0 8706.953 7608.531 4 2.779-0 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
データ行列計算		グラフ <b>× x</b> MS1X-ジー覧 <b>× x</b>
データ行列計算		グラフ     ▼ ×     MSイメ-ジー覧     ▼ ×       スペクトル 箱ひげ図     10     MSイメージ島加 10     ●
データ行列計算 ※ 差異解析		グラフ     ▼ ×     MSイメ-ジー覧     ▼ ×       スペクトル 描ひげ回     ●
データ行列計算 ※ 差異解析	<>	グラフ     ▼ ×       スペクトル 箱ひげ図     ●       風 ▲     ●       ●     ●        ●     ●
データ行列計算 ※ 差異解析 ■ ■		グラフ     ▼ ×       スペクトル 描ひげ図     ●       風 ▲     ●       ●     ●        ●     ●
<b>デー</b> ク行列計算 ※ 差異解析 検定	>       解析パラメータ     マ ×	グラフ     × ×       スペクトル 福ひげ図     ●       ●     ●    <
デーク行列計算 ※ 差異解析 検定	>       解析パラメータ     マ ×       TIC	グラフ     × X       スペクトル 福ひげ図     一       一     金       一     金       一     金       一     一       一     0       1     1 </th
<b>デーク行列計算</b> ※ 差異解析 検定	<	グラフ       ▼ ×         スペクトル 描ひげ図       ●         ●       ●
データ行列計算 データ行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算	メート・シート・シート・シート・シート・シート・シート・シート・シート・シート・シ	グラフ       ▼ ×         スペクトル 描ひげ図       ●         ●       ●      <
<i>す</i> 9行列計算 ※ 差異解析 模定 PCA計算	メーマライズ医学値設定 オフ	757       ▼ ×         XX9/h/ 瓶0/f/⊠       ● 表示 ∨ I/Y         IIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIII
<i>す</i> 9行列計算 ※ 差異解析 模定 PCA計算	メ         >           解析/「ジメータ         マ ×           TIC         >           No.         Name         Value           1         ノーマライズ         TIC           2         ノーマライズ         TIC           3         ノーマライズ最早値設定         オフ           3         ノーマライズ最小しきい値(%)         0	757       ▼ ×         XX9/h/ #0/f/⊠       ● 表示 ∨ IVI ▷ □ ●          ○ ▲ ▲ ● 表示 ∨ IVI ▷ ■ ● ●        ● I → ● ●          ○ MS1X-57820 ● m/2校束       ● ■ ● ● ●          ○ MS1X-57820 ● m/2校束       ● ■ ● ● ● ●          ○ MS1X-57820 ● m/2校束       ● ■ ● ● ● ●          ○ MS1X-57820 ● m/2校束       ● ■ ● ● ● ●          ○ MS1X-57820 ● m/2校束       ● ■ ● ● ●          ○ m/2校束       ● ■ ● ● ●
データ行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算 	メ         >           解析/「ウメータ         マ ×           TIC         >           No.         Name         Value           1         ノーマライズ         TIC           2         ノーマライズ         TIC           3         ノーマライズ景小しきい塩(%)         0           4         データ行列解析方法         ノンターゲ	757       ▼         XX9/h/ #0/f/00       ● 表示 ∨ IVI □ □ ● ● I ● / + ◇ ● 表示 ∨ IVI □ ● ● E 2 · 1 · 1 · 1 · 1 · 1 · 1 · 1 · 1 · 1 ·
データ行列計算 データ行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算 PCA計算 PCA結果表示	メ         メ           解析/「ウメータ         マ ×           TIC         ×           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ量単値設定         オフ           3         ノーマライズ量単値設定         オフ           3         ノーマライズ間小しきい値(%)         0           4         データ行列県新方法         ノンターブ           5         m/差距         699.964	グラフ       ▼ ×         スペクトル 瓶のげ図       ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●
データ行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算 PCA計算 PCA結果表示	メ         メ           解析パウメータ         マ ×           TIC         ×           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ量準値設定         オフ           3         ノーマライズ量単値設定         オフ           3         ノーマライズ量単値設定         オフ           5         n/2範囲         699.984           6         新空線パンサイズ (Da)         1.0000	757       ▼         INS/X-5/B       INS/X-5/B         INS/X-5/B       IN
データ行列計算         ※ 差異解析         使定         ●	メ           解析/「ウメータ         × ×           TIC         Name         Value           1         ノーマライズ         TIC           2         ノーマライズ         TIC           3         ノーマライズ         TIC           3         ノーマライズ         TIC           4         データ行列県祈方法         ノソターゲ           5         m/2範囲         699,984           6         許容福/ピンサイズ (Da)         1,0000           2         ニペンリイズ         キュ	757       ▼         XX701/L #001/00       ●       ●       ●       ●       ●       ●       >       ▼       ▼         ■       ●
データ行列計算 データ行列計算 後定 使定 PCA計算 PCA計算 PCA計算表示 PCA計算表示	メーク         メーク           解析/バラメーク         マメン           TIC         ママライズ           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ集単値設定         オフ           3         ノーマライズ集単値設定         オフ           3         ノーマライズ集単値設定         オフ           3         ノーマライズ集単値設定         オフ           5         m/2範囲         699,984           6         許容福/ピンサイズ (Da)         1,0000           7         ラベリング         オフ	757       ▼         XX7/h// 前D/F20       ● 表示 ∨ W ▷ □          I N I ● ● ★示 ∨ W ▷ □        NO(FH) ▼         I ● MS(X-57820) ● m/28##       ● 2048200 ● 204920 ● 204920 ● 204920 ● 2049200 ● 2049200 ● 2049200 ● 2049200 ● 204920 ●
データ行列計算 データ行列計算 差異解析 使定 使定 PCA計算 PCA結果表示 PCA結果表示 PLS計算	メ           解析/バラメータ         × ×           TC           No.         Name         Value           1         ノーマライズ         TIC           2         ノーマライズ         TIC           3         ノーマライズ         TIC           3         ノーマライズ         大口           3         ノーマライズ         マリーマライズ           5         m/z範囲         699,984           6         許容福/ピンサイズ (Da)         1,0000           7         ラベリング         オフ           8         除外リスト         オフ           6         计会福/ピンサイズ (Da)         1,0000	757       ▼         1
データ行列計算 データ行列計算 差異解析 後定 RCA計算 PCA計算 PCA結果表示 PCA結果表示 PLS計算	解析パラメータ        FIC        No.     Name       1     1-マライズ       2     1-マライズ基準値設定       3     1-マライズ基準値設定       4     データ行列解析方法       1/2     5       m/2範囲     699.384       6     許管幅形之为イズ (Da)     1.0000       7     ラバリング     オフ       8     除外リスト     オフ       9     しもい値設定     エフ	757       ▼         1
データ行列計算 学 差異解析 後定 PCA計算 PCA計算 PCA計算 PLS計算	メ           解析パラメータ         メ           FIC         ×           No.         Name         Value           1         J-マライズ         TIC           2         J-マライズ基準値設定         オフ           3         J-マライズ基準値設定         オフ           3         J-マライズ基準値設定         オフ           5         m/z範囲         699.984           6         許管福/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         Lきい値設定         オフ	757       ▼         1

#### 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。

• x

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	RO1002	Z ROI003	^
1	~		699.9849-700.9849	700.4849	9.418e-005	12654.115	10992.916	13195.851	
2			700.9849-701.9849	701.4849	-2.677e-005	10132.104	9749.542	20207.773	
3			701.9849-702.9849	702.4849	3.737e-005	6875.912	5408.621	10541.267	
4			702.9849-703.9849	703.4849	4.043e-005	9623.874	8175.758	12906.003	
5			703.9849-704.9849	704.4849	8.698e-005	8598.983	6357.625	10517.781	
6			704.9849-705.9849	705.4849	9.762e-005	11917.976	9338.670	13851.114	
7			705.9849-706.9849	706.4849	5.505e-005	7367.519	5995.169	9259.481	
8			706.9849-707.9849	707.4849	-5.922e-005	7841.996	8671.765	16254.045	
9			707.9849-708.9849	708.4849	-1.017e-005	6609.303	6343.222	10192.927	
10			708.9849-709.9849	709.4849	-3.990e-005	12658.084	13006.758	17694.062	
11	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		709.9849-710.9849	710.4849	-4.291e-005	8936.845	9317.851	10369.467	
12			710.9849-711.9849	711.4849	-2.446e-005	8555.765	8655.481	11234.953	
13			711.9849-712.9849	712.4849	2.666e-005	6515.152	5488.399	9521.748	
14			712.9849-713.9849	713.4849	-3.227e-005	8275.835	7723.166	22881.835	
15			713.9849-714.9849	714.4849	-1.281e-005	6949.865	6083.847	16639.591	
16			714.9849-715.9849	715.4849	-5.775e-005	6666.396	7309.580	19637.225	
17			715.9849-716.9849	716.4849	2.779e-005	8706.953	7608.531	11899.940	
18			716.9849-717.9849	717,4849	-3.773e-005	8626.042	8915.067	13792.639	
									V

#### 5.11 ソートされたPLS係数

データ行列テーブル

#### 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

No.	使用	9Ú	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	-3.88 De-004	1029824.289	1145936.176	788355.094	
97	Image: A start of the start		795.9849-796.9849	796.4849	-3.7(9e-004	561465.069	629022.646	461295.998	
68	Image: A start of the start		766.9849-767.9849	767.4849	-2.68 7e-004	89399.480	105269.241	81336.045	
187			885.9849-886.9849	886.4849	-אב		158	157633.888	
158	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		856.9849-857.9849	857.4849	J JACO	Ľ-	002	50724.988	
99	~		797.9849-798.9849	798.4849	-1.9 m/zタグ	付け	598	59309.121	
159	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		857.9849-858.9849	858.4849	-1.9 ROI97	TTT Am	043	35450.414	
98	~		796.9849-797.9849	797.4849	-1.8 MS1X-	ジを追加し	297	185697.615	
69	~		767.9849-768.9849	768.4849	-1.6 比の分量	母/効果量の減数に設	定する 786	43954.920	
70	~		768.9849-769.9849	769.4849	-1.6 m/z検索		236	24099.820	
188	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	Image: A start of the start		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								<b>~</b> >
								⊇ —	
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	-3.88De-004	1029824.289	1145936.176	788355.094	
97	Image: A start of the start		795.9849-796.9849	796.4849	-3.7(9e-004	561465.069	629022.646	461295.998	
68			766.9849-767.9849	767.4849	-2.68 7e-004	89399.480	105269.241	81336.045	
187			885.9849-886.9849	886.4849	-2.6 47 -	とたみちい	공급 🕂 🗖 🛛 🗖 <b>5.158</b>	157633.888	
158	Image: A start of the start		856.9849-857.9849	857.4849	-2.54, 火丁 G	さな巴を追	些力( <u>3.002</u>	50724.988	
99	<b>~</b>		797.9849-798.9849	798.4849		(here)	698	59309.121	
159	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		857.9849-858.9849	858.4849			043	35450.414	
98	<b>~</b>		796.9849-797.9849	797.4849			297	185697.615	
69	<b>~</b>		767.9849-768.9849	768.4849	-1.688e-004	48100.708	54925.786	43954.920	
70	<b>~</b>		768.9849-769.9849	769.4849	-1.609e-004	23381.429	26532.236	24099.820	
188	<b>~</b>		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137	
184	<b>~</b>		882.9849-883.9849	883.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898	
164	Image: A start of the start		862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502	
156	<b>~</b>		854.9849-855.9849	855.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458	11166.355	
67	<b>~</b>		765.9849-766.9849	766.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153	26004.335	
42	<b>~</b>		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282	
160	Image: A start of the start		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821	

#### 5.13 タグ付け

							67	⊇ —	-0
No.	使用	9 <i>1</i>	ラベル	m/z	PLS係数 🔺	Z ROl001	ROI002	ROI003	
186			884.9849-885.9849	885.4849	-4.1 6e-004	52242.364	91789.399	285789.467	
96	~		794.9849-795.9849	795.4849	-3.8 0e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094	
97	~		795.9849-796.9849	796.4849	-3.7 9e-004	561465.069	629022.646	461295.998	
68	~		766.9849-767.9849	767.4849	-2.6 7e-004	89399.480	105269.241	81336.045	
187			885.9849-886.9849	886.4849	-2.6 5e-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	-夕行列ラ	-ブル								• ×	
	No.	使用	9 <i>1</i>	ラベル	m/z	PLS係数 ≜	ROI001	ROI002	ROI003		
	186			884.9849-885.9849	885.4849	-4.1 6e-004	52242.364	91789.399	285789.467		
	96	<b>~</b>		794.9849-795.9849	795.4849	-3.8 0e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094		
	97	Image: A start of the start		795.9849-796.9849	796.4849	-3.7 9e-004	561465.069	629022.646	461295.998		
	68	Image: A start of the start		766.9849-767.9849	767.4849	-2.6 7e 右	クリック	して、	MSイメ・	ージ追加	を選択
	187			885.9849-886.9849	886.4849	Se-our	3427 1.333	001,002,000	157055.000		_,,
	158	~		856.9849-857.9849	857.4849	-אר	1	02	50724.988		
	99	~		797.9849-798.9849	798.4849	-1.93 JAZ	Ľ-	98	59309.121		
	159	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		857.9849-858.9849	858.4849	-1.90 m/z90	付け	43	35450.414		
	98	$\checkmark$		796.9849-797.9849	797.4849	-1.8 MS ( ).	Ind Instant	97	185697.615		
	69	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		767.9849-768.9849	768.4849	-1.68 比の分	日/効果量の減数に調	9定する 86	43954.920		
	70	$\checkmark$		768.9849-769.9849	769.4849	-1.60 m/z検引		36	24099.820		
	188	~		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137		
	184	$\checkmark$		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	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	~	
										· ·	

#### 5.15 MSイメージ追加

化合物名の検索         道加       化合物名       m/z       アダ         2       767.3849-767.5849       767.48492       1         2       795.3849-795.5849       795.48492       1         2       796.3849-796.5849       796.48492       1         2       885.3849-885.5849       885.48492       1         2       886.3849-886.5849       886.48492       1	テータ行列				$\sim$
北合物名の検索       m/z       アダ         追加       〇       化合物名       m/z       アダ         〇       〇       767.3849-767.5849       767.48492       0         〇       〇       795.3849-795.5849       795.48492       0         〇       〇       796.3849-796.5849       796.48492       0         〇       〇       885.3849-885.5849       885.48492       0         〇       〇       886.3849-886.5849       886.48492       0	化合物リス				
追加      化合物名     m/z     アダ       1     1     767.3849-767.5849     767.48492     1       1     1     795.3849-795.5849     795.48492     1       1     1     796.3849-796.5849     796.48492     1       1     1     885.3849-885.5849     885.48492     1       1     1     886.3849-886.5849     886.48492     1	化合物名	の検索			
Image:	追加		化合物名	m/z	アダクト
Image: Constraint of the symbol in the sy		~	767.3849-767.5849	767.48492	
Image: Constraint of the system		~	795.3849-795.5849	795.48492	
✓       885.3849-885.5849       885.48492         ✓       886.3849-886.5849       886.48492		~	796.3849-796.5849	796.48492	
▼     886.3849-886.5849     886.48492		<ul> <li>Image: A second s</li></ul>	885.3849-885.5849	885.48492	
		~	886.3849-886.5849	886.48492	

#### 5.16 PLS結果からMSイメージを作成

🚾 ファイル 表示 検索	設定 オプション 拡張機能 ヘルプ		🦉 差異解析 丨 (	C:¥Users¥yamac¥Dropbox (株式会社	:島津製作所)¥Yamaguchi_data	a¥demo_data_etc¥DemoData¥IMDX¥for_w	eb_material_001.rpf* - IMAGEREVEAL	_ @ ×
	ROIUAN	<b>▼</b> <del>,</del> <del>,</del> <del>,</del> <del>,</del>	ータ行列テーブル			<b>-</b> ×	MSイメージ	<b>▼</b> ×
画像レジストレーショ	No. 使用 ファイル名 ROI名	属性						
<u>У</u>	1 Testicle_9A All	Group A	No. 使用 夕	7グ ラベル	m/z PLS係数	🗹 ROI001 🔽 ROI002 🏠		<u>*</u>
	2 🗸 Testicle_9A ROI001	Group A	186 🔽	884.9849-885.9849	885.4849 -4.106e-004	52242.364 91789.399		»
	3 🗸 Testicle_9A ROI002	Group B	96 🔽	794.9849-795.9849	795.4849 -3.880e-004	1029824.289 1145936.176		m/z±評容幅: 886.48492+0.5000
ROI設定	4 🗸 Testicle_9A RO1003	Group C	97 🔽	795.9849-796.9849	796.4849 -3.709e-004	561465.069 629022.646		
+1.14.74747	5 Testicle_9A RO1004	Group D	68	766.9849-767.9849	767.4849 -2.687e-004	89399.480 105269.241		885,9849-886,9849
		-	158	856.9849-857.9849	857.4849 -2.542e-004	35594.351 44503.002		ファイルタ・
V 7-91199			99 🔽	797.9849-798.9849	798.4849 -1.935e-004	73407.900 86617.698		Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA01.i
± <u>↓</u>			159 🔽	857.9849-858.9849	858.4849 -1.902e-004	21195.334 27205.043	and the second	mdx
前処理設定		-	98 🔽	796.9849-797.9849	797.4849 -1.869e-004	237984.460 263831.297		91J:
		-	69 <u></u>	767.9849-768.9849	768.4849 -1.688e-004	48100.708 54925.786		データ行列
<u>₩</u>			188 🔽	886.9849-887.9849	887.4849 -1.588e-004	19271.791 25189.451		
前処理			184 🔽	882.9849-883.9849	883.4849 -1.575e-004	30225.061 33169.702		
			164 🔽	862.9849-863.9849	863.4849 -1.199e-004	7421.796 9826.319		
			156	854.9849-855.9849	855.4849 -1.084e-004	8363.467 9994.458		
- e/-==			42	740.9849-741.9849	766.4849 -1.057e-004 741.4849 -8.297e-005	7289.580 8878.510		
アーダ行列設定			160	858 08/0-850 08/0	859.4849 -8.150e-005	13012 774 14481 370 ×	250 um	情報のコピー
			<					S . S // IS
		グラ	57		ROI 1	「に多く見」	られるm/zのMSイメーシ	シが作成されま
データ行列計算			スペクトル 箱ひけ	ſØ				
≫ 差異解析					- MS1	′メーシにキ	」同じ色のタグが付いて	います。
P_ 1	<	>	<u>₩</u> <u>M</u> –			· · · · - C		
<b>1</b> 5	解析パラメータ	<b>-</b> ×			40.7	■ 全て計算		
検定				MS1 X-ジュをルロ     [0] m/z	使采	=1 = 7_/11.07	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA01.imdx	
<b>EX 53</b>			× ビークビッキング	7		訂… 表… ノア1ル名		
	No. Name	Value						
PCA計算	1 ノーマライズ	TIC						
	2 ノーマライズ基準値設定	77				E resucie_9AA		
<del>1</del> <del>1</del>	3 ノーマライズ最小しきい値(%)	0					766.9849-767.9 794.9849-795.9 795.9849-796.9 884.9849-885.9	
PCA結果表示	4 データ行列解析方法	ノンターゲ					101,40492 195,40492 196,48492 885,48492	000.40492
	5 m/z範囲	699.9849						
	6 許容幅/ビンサイズ (Da)	1.0000						
PLS計算	7 ラベリング	77						
	8 除外リスト	77					TIC	
	9 しきい値設定	77						
	<	>				$\langle $		
PLS結果表示		/						