

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

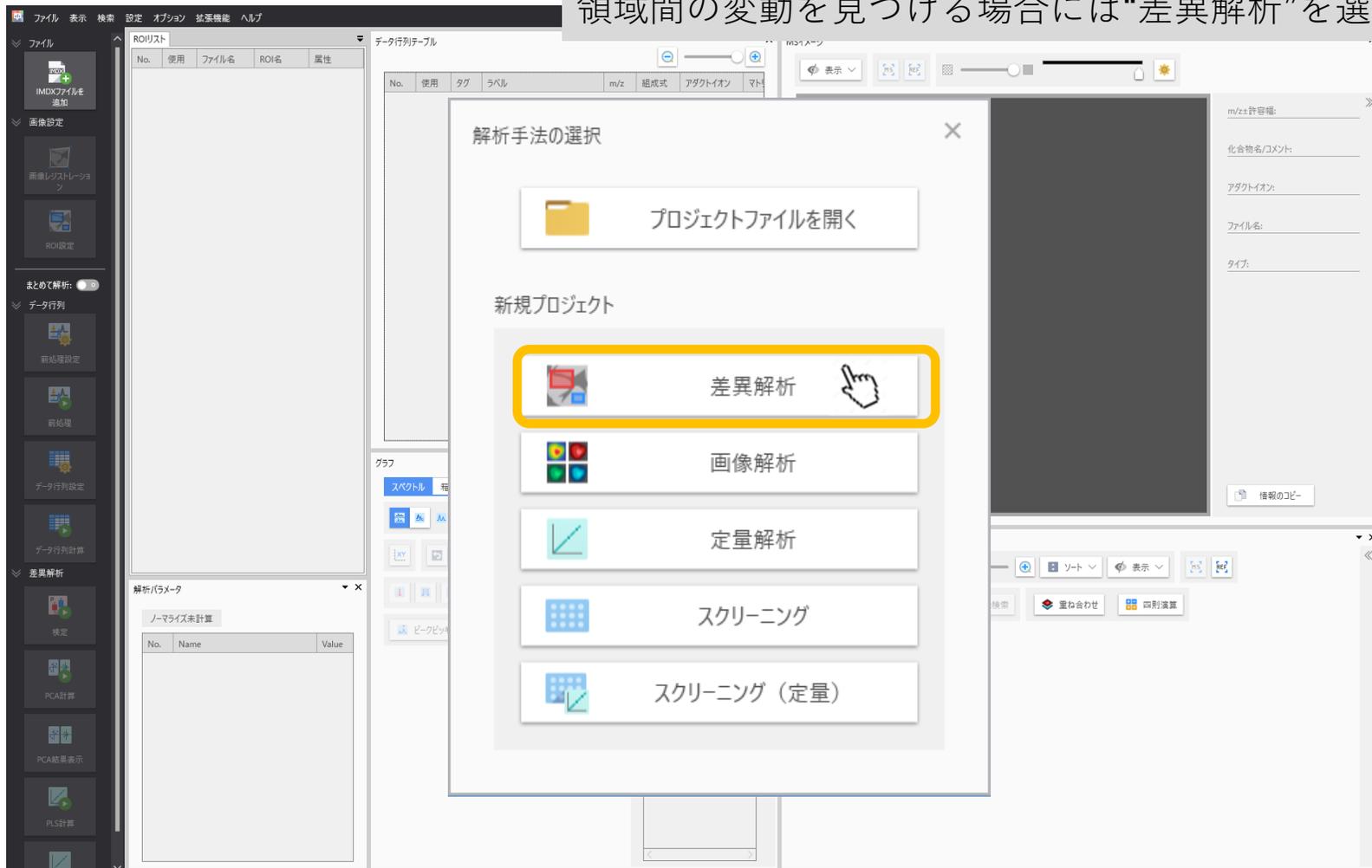
1. “A”, “B”, “C”のROIを設定
2. データ行列テーブル計算
3. 検定
4. PCA
5. PLS

## 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

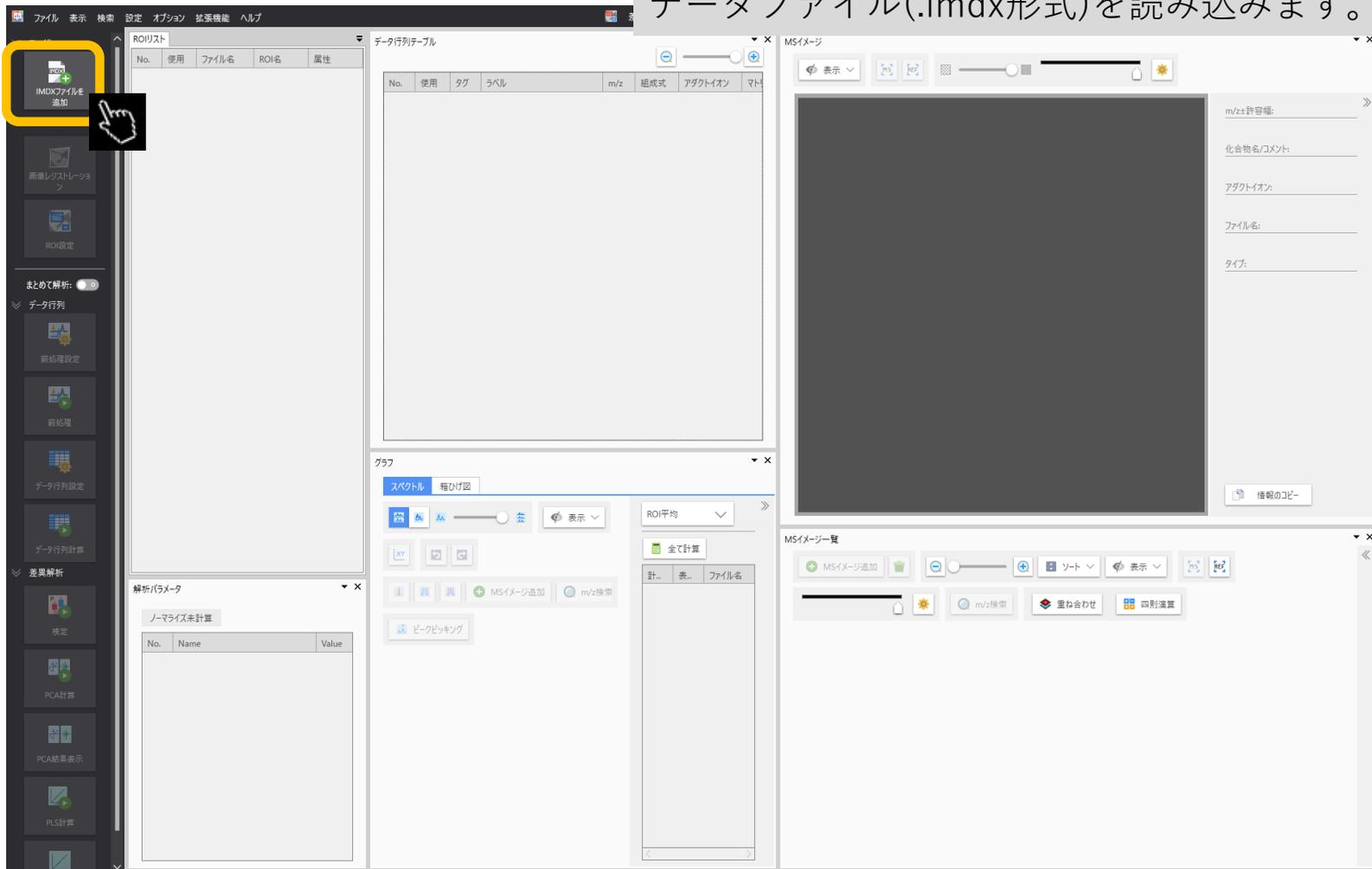
# 1.1 “差異解析”を選択

領域間の変動を見つける場合には“差異解析”を選択します。



# 1.2 データファイル (.imdx) を追加

データファイル(.imdx形式)を読み込みます。



# 1.3 ROIの設定

興味のある領域(Region of Interest : ROI)の設定を行います。

The screenshot shows a software interface with several panels. On the left is a sidebar with various icons, where the 'ROI' icon is highlighted with a yellow box and a hand cursor. The main area is divided into several sections:

- ROIリスト**: A table with columns 'No.', '使用', 'ファイル名', 'ROI名', and '属性'. It contains one row with '1', 'Testicle\_9A...', 'All', and 'Group A'.
- データ行列テーブル**: A table with columns 'No.', '使用', 'タグ', 'ラベル', 'm/z', '組成式', 'アダクトイオン', and 'マト'.
- MSイメージ**: A large heatmap showing intensity distribution. To its right is a metadata panel with fields for '化合物名/コメント', 'TIC', 'ファイル名', 'Testicle\_9AA\_PL\_SL\_5x\_1\_AREA01.i.mdx', and 'タイプ', 'TIC'.
- グラフ**: A plot titled 'Testicle\_9AA\_PL\_SL\_5x\_1\_AREA01.i.mdx Whc'. The y-axis is 'Intensity' (0E+00 to 2E+06) and the x-axis is 'm/z' (720 to 880). Several peaks are labeled with their m/z values: 795.2084, 796.2263, 797.2374, 768.4948, 832.53706, and 885.53782.
- 解析パラメータ**: A section for 'ノーマライズ未計算' with a table for 'No.', 'Name', and 'Value'.

# 1.4 ツールを選択してROIを描きます

ROI設定

IMDXファイル Testicle\_9AA\_Pl\_SL\_5x\_1\_AREA01.imdx 参照画像 Reference Image 1

インポート エクスポート

四角、丸、多角形でROIを描写できます。

MSイメージ設定

MSイメージ

ROI表示設定 透明度 ラベル  表示する

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	デー
1	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	All	Group A	

OK キャンセル

# 1.5 ROIを設定します

ROI設定

IMDXファイル Testicle\_9AA\_Pl\_SL\_5x\_1\_AREA01.imdx 参照画像 Reference Image 1

インポート エクスポート

ROI002 ROI003 ROI001

250 μm

MSイメージ

ROI表示設定 透明度 ラベル  表示する

参照画像の設定

輝度  
コントラスト  
透明度  
平滑化フィルター なし

MSイメージ設定

ファイル  
MSイメージ TIC

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	データ
1	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	All	Group A	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	ROI001	Group A	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	ROI002	Group A	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	ROI003	Group A	

属性設定

ROIを書いたあとに属性を設定します。

OK キャンセル

## 1.6 ROIを設定します

“属性”列で各ROIの属性を選択します。  
属性は編集、追加可能です。  
ROI名も変更可能です。



No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	データ
1	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	All	Group A	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI001	Group A	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI002	Group A	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI003	Group A	

## 1.7 ROIを設定します

ROIリスト

属性設定

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	デー
1	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	All	Group A	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI001	Group A	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI002	Group B	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI003	Group A	

Group A

Group A

Group B

Group A

Group B

Group C

# 1.8 ROIを設定します

属性が設定されるとROIもその属性に応じた色に変更されます。

ROI設定

IMDXファイル Testicle\_9AA\_Pl\_SL\_5x\_1\_AREA01.imdx 参照画像 Reference Image 1

インポート エクスポート



ROI002  
ROI003  
ROI001

250 μm

MSイメージ

ROI表示設定 透明度 ラベル  表示する

参照画像の設定

輝度  
コントラスト  
透明度  
平滑化フィルター なし

MSイメージ設定

ファイル  
MSイメージ TIC

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性	データ
1	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	All	Group A	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	ROI001	Group A	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	ROI002	Group B	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pl_SL_5x_1...	ROI003	Group C	

OK キャンセル

## 2.1 データ行列計算の”前処理”の設定

The screenshot shows the IMAGEREVEAL software interface. The left sidebar contains various menu items, with '前処理設定' (Pre-processing Settings) highlighted in a yellow box. The main window is divided into several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table with columns: No., 使用 (Used), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), 属性 (Attribute).

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns: No., 使用 (Used), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, 組成式 (Chemical Formula), アダクトイオン (Adduct Ion), マトリックス (Matrix). It is currently empty.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01.imdx Whc'. The y-axis is 'Intensity' (0E+00 to 2E+06) and the x-axis is 'm/z' (720 to 880). Several peaks are labeled with their m/z values: 795.22084, 796.22363, 797.22374, 768.49448, 812.53706, and 885.53782.
- MSイメージ (MS Image):** A large color-coded image showing a mass spectrum distribution. The y-axis is labeled '250 μm'. The right sidebar shows metadata: 化合物名/コメント (Compound Name/Comment): TIC; ファイル名 (File Name): Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01.imdx; タイプ (Type): TIC.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller version of the MS image with a color scale and 'TIC' label.

## 2.2 前処理（ノーマライズ）の設定

前処理設定

ノーマライズ

インポート エクスポート

No.	使用	m/z	許容幅
-----	----	-----	-----

基準値を設定

最小しきい値 (%)

指定方法  範囲  中心±許容誤差

“ノーマライズ”の基準を設定します。  
TICが一般的です。

## 2.3 データ行列の設定

対象とするm/zの設定を行います。

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The 'データ行列設定' (Data Matrix Settings) window is active, showing the following components:

- 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), 属性 (Attribute).

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
- 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, 組成式 (Chemical Formula), アダクトイオン (Adduct Ion), マトリックス (Matrix). It is currently empty.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01.imdx Whc'. The y-axis is 'Intensity' (0E+00 to 2E+06) and the x-axis is 'm/z' (720 to 880). Peaks are labeled with their m/z values: 795.22084, 796.22363, 797.22374, 768.49448, 812.53706, and 885.53782.
- MSイメージ (MS Image):** A large, colorful mass image showing intensity distribution. A scale bar indicates 250 μm. The right sidebar shows metadata: 化合物名/コメント (TIC), ファイル名 (Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01.imdx), and タイプ (TIC).
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller thumbnail of the MS image with the label 'TIC'.

The left sidebar contains various tool icons, with 'データ行列設定' (Data Matrix Settings) highlighted by a yellow box and a mouse cursor.

## 2.4 データ行列の設定

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  %

m/z範囲  自動  手動  -  Da

ピンサイズ  Da

ラベリング  ▼

指定ピーク除外

OK キャンセル

対象とするピークを選択します。

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。  
ターゲットは特定のm/z値と許容幅を指定します。

## 2.5 データ行列の計算

データ行列の計算を行います。

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface during the data matrix calculation process. A central dialog box titled "処理実行" (Processing Execution) prompts the user to confirm the calculation of the data matrix. The background shows the "ROIリスト" (ROI List) panel with one ROI selected, the "データ行列テーブル" (Data Matrix Table) panel, the "MSイメージ" (MS Image) panel showing a color-coded mass spectrum image, and the "グラフ" (Graph) panel displaying a mass spectrum plot with peaks labeled at m/z 795.22084, 796.22363, 797.22374, 768.49448, 812.53706, and 885.53782.

処理実行

以下の計算を実行します。  
データ行列作成

OK キャンセル

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A

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
-----	----	----	-----	-----	-----	---------	----

MSイメージ

化合物名/コメント: TIC  
ファイル名: Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01.mdx  
タイプ: TIC

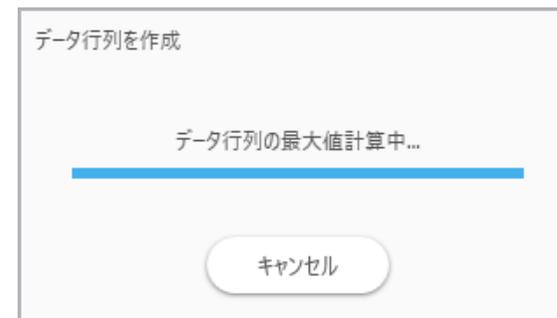
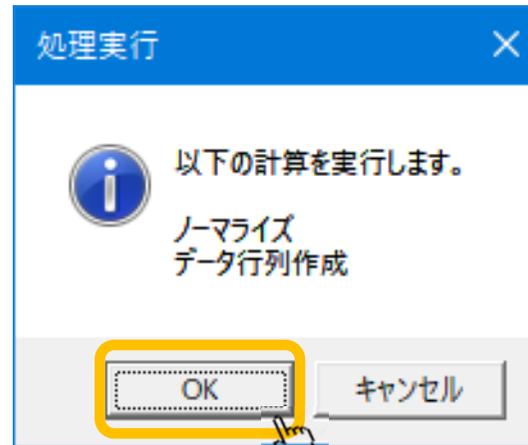
グラフ

Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01.mdx Whc

m/z	Intensity
795.22084	2E+06
796.22363	1E+06
797.22374	1E+06
768.49448	1E+06
812.53706	1E+06
885.53782	1E+06

## 2.6 計算の実行

前処理の計算を行っていない場合はここで一緒に計算されます。  
対象とする成分が多くなると時間がかかります。



# 2.7 データ行列計算完了

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

- ROIリスト (ROI List):** A table listing four ROIs (ROI001, ROI002, ROI003) used for data extraction.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with 20 rows and 4 columns (ROI001, ROI002, ROI003). The table is highlighted with a green border, indicating that data matrix calculations are complete.
- MSイメージ (MS Image):** A 2D mass spectrometry image showing intensity distribution across the sample area.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot showing intensity versus m/z, with several peaks labeled.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A list of parameters for the analysis, including TIC, normalization, and resolution.

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
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	20207.775
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	8998.983	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	9239.481
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	10368.467
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	19837.225
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	8915.067	13792.639
19	<input checked="" type="checkbox"/>		717.9849-718.9849	718.4849	6802.469	6703.797	7675.408
20	<input checked="" type="checkbox"/>		718.9849-719.9849	719.4849	14004.276	11982.252	16615.396

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	699.9849
6	許容種/分子量 (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

m/z	Intensity
721.48106	
767.49182	
796.2363	
797.2374	
798.2385	
837.53900	
885.53782	
795.2004	

# 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。

**ROIリスト**

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1	<input checked="" type="checkbox"/>	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

**データ行列テーブル**

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
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	20207.775
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	8998.983	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	9239.481
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	10368.467
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	8915.067	13792.639
19	<input checked="" type="checkbox"/>		717.9849-718.9849	718.4849	6802.469	6703.797	7675.408
20	<input checked="" type="checkbox"/>		718.9849-719.9849	719.4849	14004.276	11982.252	16615.396

**検定パラメータ**

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	ノンターゲット
5	m/z範囲	699.9849
6	許容種/分子量(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**

Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA02.imdx Whole\_Ave.

## 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 with several key components:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing four ROIs (ROI001 to ROI003) under Group A, B, and C.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns for No., 使用 (checked), タグ, ラベル, m/z, 比(Group A), and 比(Group B). A green circle highlights this table. The data includes m/z values ranging from 699.9849 to 703.8849 and corresponding ratios.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the data, with a color scale on the right. The title is 'Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA02j.mdx'.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA02j Whole\_Ave.' showing intensity vs. m/z. The x-axis ranges from 700 to 900 m/z. Several peaks are labeled with their m/z values: 721.48186, 767.49182, 795.52084, 796.42363, 797.42374, 837.53900, and 885.53782.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller thumbnail of the MS image with the title 'Testicle\_9AA\_PL...'.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the TIC (Total Ion Chromatogram) analysis, including 'ノーマライズ' (Normalized), 'ノーマライズ基準値設定' (Normalized Reference Value Setting), and 'm/z範囲' (m/z Range).

## 3.4 検定結果

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			

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。

## 3.5 検定結果

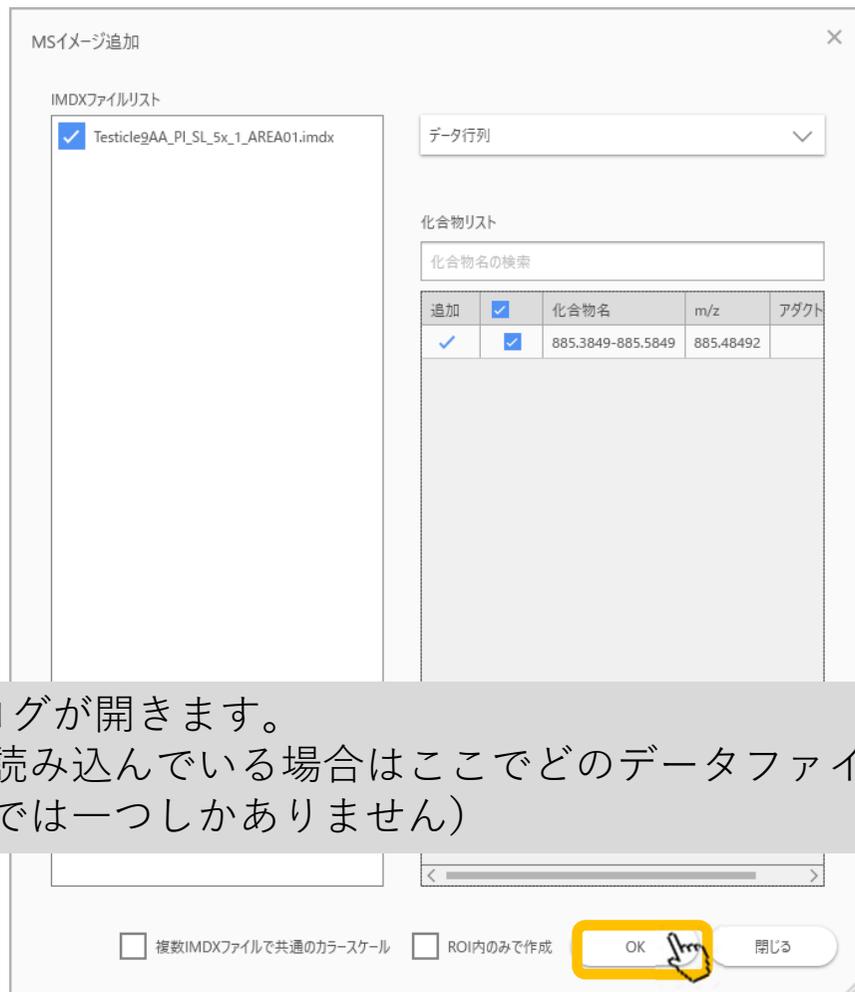
ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003
884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399	285789.467
885.9849-886.9849	6.900e-090	34271.553	51295.158	157633.888
886.9849-887.9849	3.803e-068	19271.791	25189.451	82594.137
808.9849-809.9849	6.507e-057	234383.157	181415.160	93078.101
794.9849-795.9849	2.141e-055	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)	<input checked="" type="checkbox"/> ROI001	<input checked="" type="checkbox"/> ROI002	<input checked="" type="checkbox"/> ROI003
884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399	285789.467
885.9849-886.9849	3.803e-06			3.888
886.9849-887.9849				4.137
808.9849-809.9849	6.507e-05			3.101
794.9849-795.9849	2.141e-05			3.094
809.9849-810.9849	5.591e-03			4.504
795.9849-796.9849	2.261e-03			3.998
836.9849-837.9849	1.042e-02			3.117
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

## 3.7 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 key components:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROI parameters for different groups.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing peak data with columns for No., 使用 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), P値 (ANOVA), and ROI values.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the mass spectrum data, with a green box highlighting a specific region.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller view at the bottom right showing a list of MS images, with a green box highlighting the added image.
- グラフ (Graph):** A chromatogram plot showing Intensity vs. Time (min) with peaks labeled at 721.48196, 767.49182, 797.2374, 796.2363, 837.53900, and 885.53782.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the TIC (Total Ion Chromatogram) analysis.

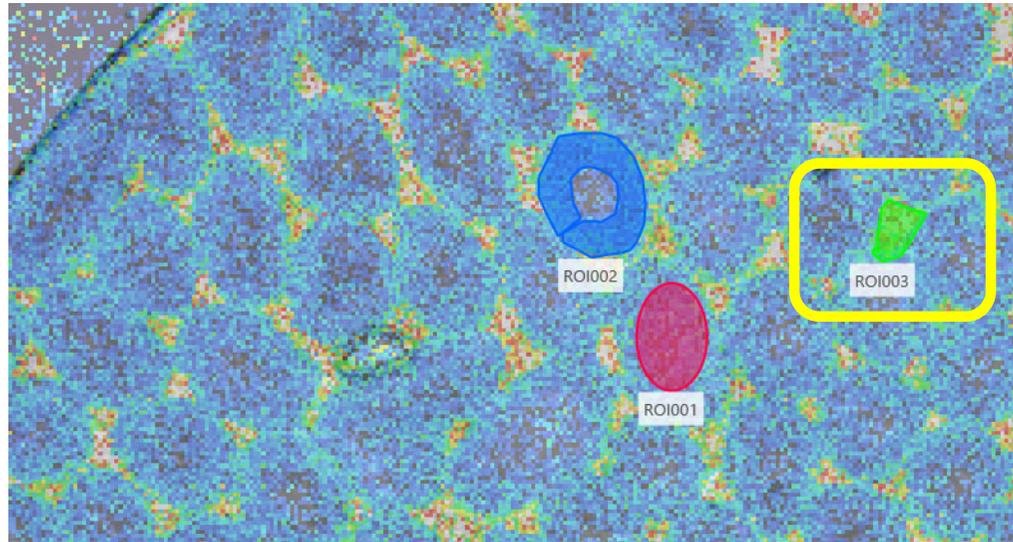
No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	Group A
3	✓	Testicle_9A...	ROI002	Group B
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C

No.	使用	タグ	ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	ROI002
186	✓		884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399
187	✓		885.9849-886.9849	6.900e-090	34271.553	51295.158
188	✓		886.9849-887.9849	3.803e-068	19271.791	25189.451
110	✓		808.9849-809.9849	6.507e-057	234383.157	181415.160
96	✓		794.9849-795.9849	2.141e-055	1029824.289	1145936.176
111	✓		809.9849-810.9849	5.591e-038	127446.486	102214.370
97	✓		795.9849-796.9849	2.261e-031	561465.069	629022.646
138	✓		836.9849-837.9849	1.042e-026	63879.104	45687.246
98	✓		796.9849-797.9849	8.475e-020	237984.460	263831.297
189	✓		887.9849-888.9849	1.575e-019	11304.263	11665.185
182	✓		880.9849-881.9849	3.825e-017	41268.920	32126.783
14	✓		712.9849-713.9849	8.814e-017	8275.835	7723.166
139	✓		837.9849-838.9849	2.571e-015	38503.050	25713.948
26	✓		724.9849-725.9849	4.194e-015	9259.066	9815.346
16	✓		714.9849-715.9849	2.055e-014	6666.396	7309.580
15	✓		713.9849-714.9849	1.352e-011	6949.865	6083.847
183	✓		881.9849-882.9849	9.534e-011	25161.434	20589.488
99	✓		797.9849-798.9849	2.163e-010	73407.900	86617.698
112	✓		810.9849-811.9849	4.967e-010	51245.991	42648.737
109	✓		807.9849-808.9849	1.790e-009	35880.417	24057.906

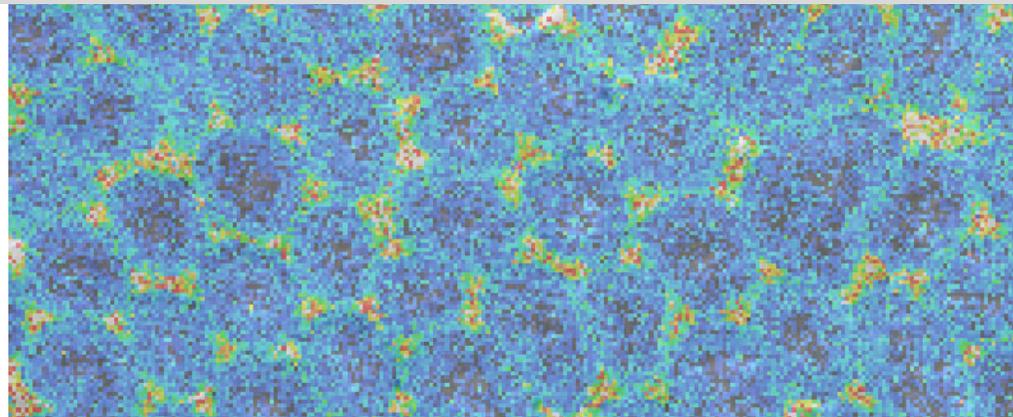
No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
2	ノーマライズ基準値設定	オフ
3	ノーマライズ最小しきい値(%)	0

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

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。

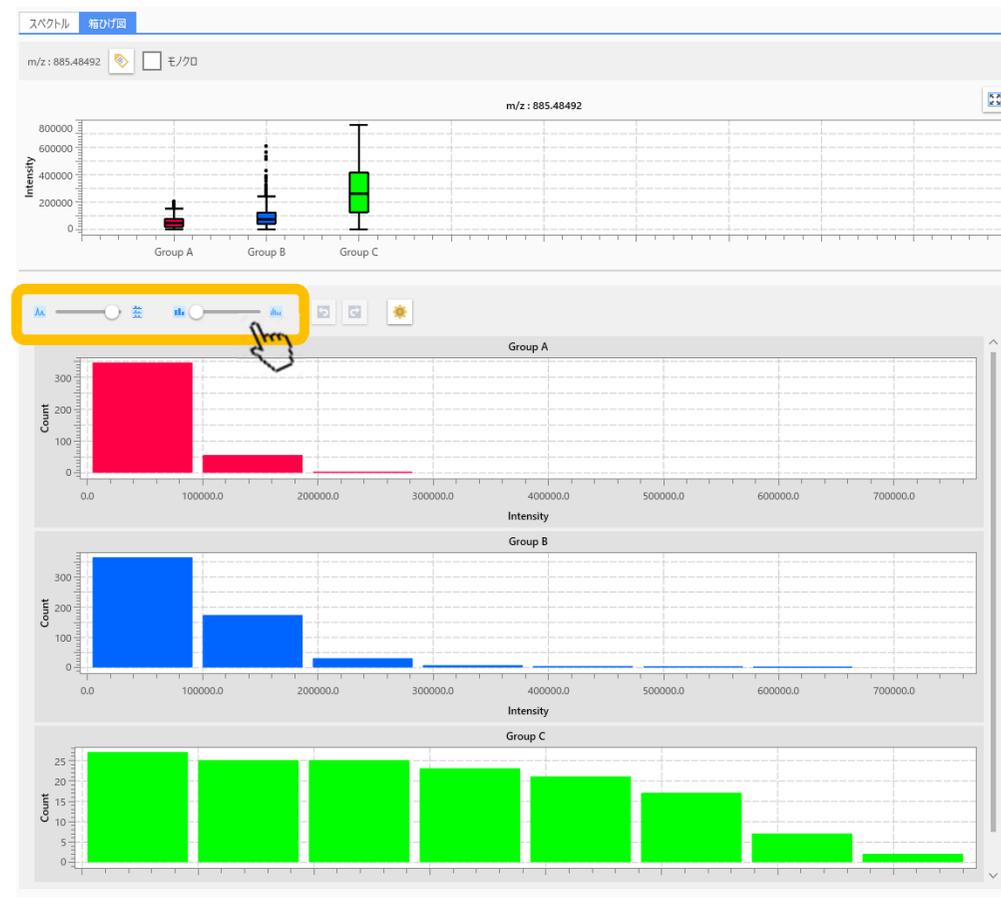
The screenshot displays a software interface with several key components:

- Table:** A table with columns for ROI, m/z, and intensity values. The selected row is m/z: 885.48492.
- Box Plot:** A plot titled "m/z: 885.48492" showing the distribution of intensity for Group A, Group B, and Group C. The y-axis is labeled "Intensity" and ranges from 0 to 800,000.
- MS Image List:** A list of MS images with a thumbnail for "884.9849-885.9849... 885.48492" highlighted.
- Parameters:** A "解析パラメータ" (Analysis Parameters) section with settings for TIC, normalization, and m/z range.

ROI	m/z	Intensity
ROI001	884.9849-885.9849	5.473e-127
ROI002	885.9849-886.9849	6.900e-090
ROI003	886.9849-887.9849	3.803e-068
ROI002	888.9849-889.9849	6.507e-057
ROI003	889.9849-890.9849	2.141e-055
ROI002	890.9849-891.9849	5.591e-038
ROI003	891.9849-892.9849	2.261e-031
ROI002	892.9849-893.9849	1.042e-026
ROI003	893.9849-894.9849	8.475e-020
ROI002	894.9849-895.9849	1.575e-019
ROI003	895.9849-896.9849	3.825e-017
ROI002	896.9849-897.9849	8.814e-017
ROI003	897.9849-898.9849	2.571e-015
ROI002	898.9849-899.9849	4.194e-015
ROI003	899.9849-900.9849	2.055e-014

# 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。



# 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。

**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	範囲	平均	標準偏差	最大値	
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	11899.946
18	<input checked="" type="checkbox"/>	716.9849-717.9849	717.4849	8636.042	8815.067	13392.638

**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	ノンタグ
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

**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  
タイプ: TIC

250 μm

情報のコピー

グラフ: スペクトル 縮小/拡大

MSイメージ追加, 表示, ソート, m/z検索, 重ね合わせ, 四則演算

PCA計算

## 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 setting has two radio button options: "自動" (Automatic), which is selected, and "手動" (Manual). To the right of the "手動" option is a dropdown menu currently displaying the number "5".
- 前処理** (Preprocessing): This setting is a dropdown menu currently displaying "パレートスケール" (Pareto scale).

At the bottom of the dialog box, there are two buttons: "実行" (Execute) with a green play 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。

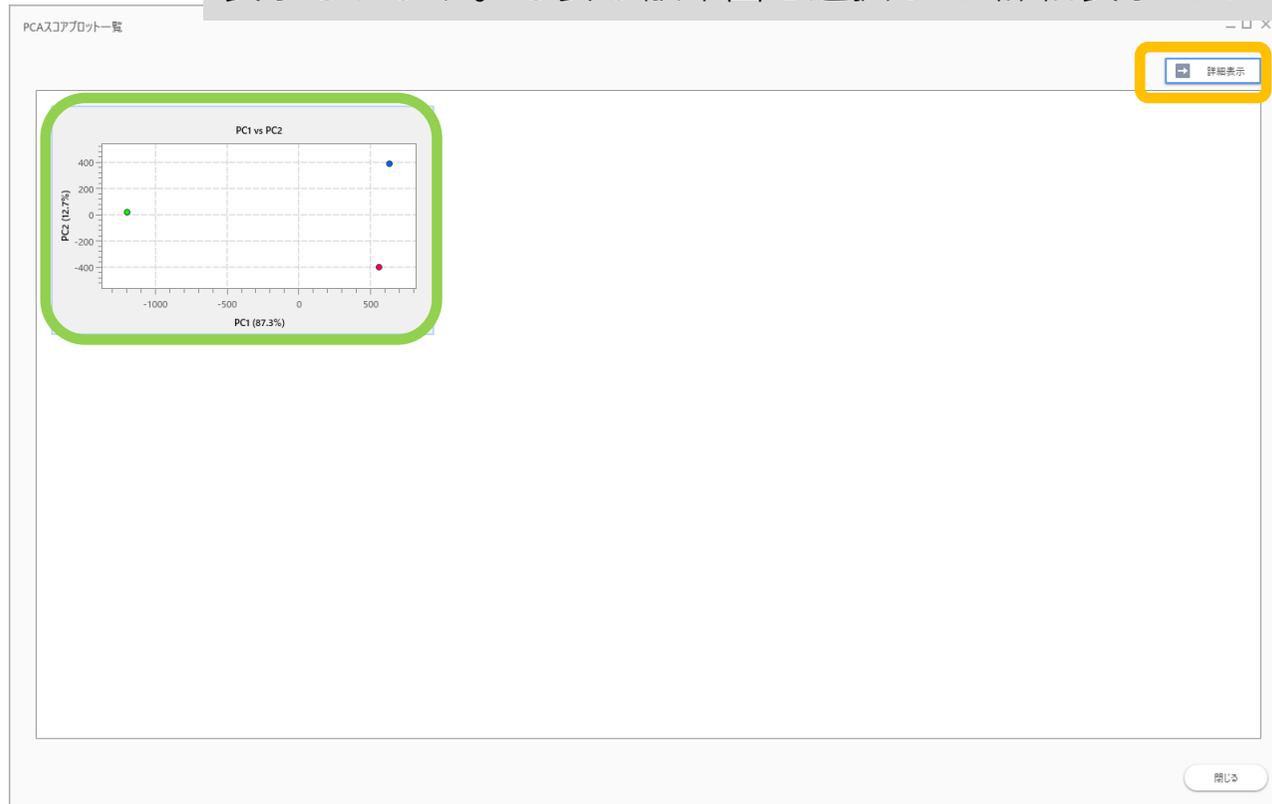
- “なし”：信号強度そのまま
- “中心化”：ROI間の各m/zの信号強度の平均を0にします。
- “オートスケール”：“中心化”に加えて、ROI間の変動の標準偏差を1にします
- “パレートスケール”：“中心化”に加えて、ROI間の変動を標準偏差の平方根で除算します。“中心化”と“オートスケール”の間になります。

## 4.4 PCA計算



## 4.5 PCA結果一覧

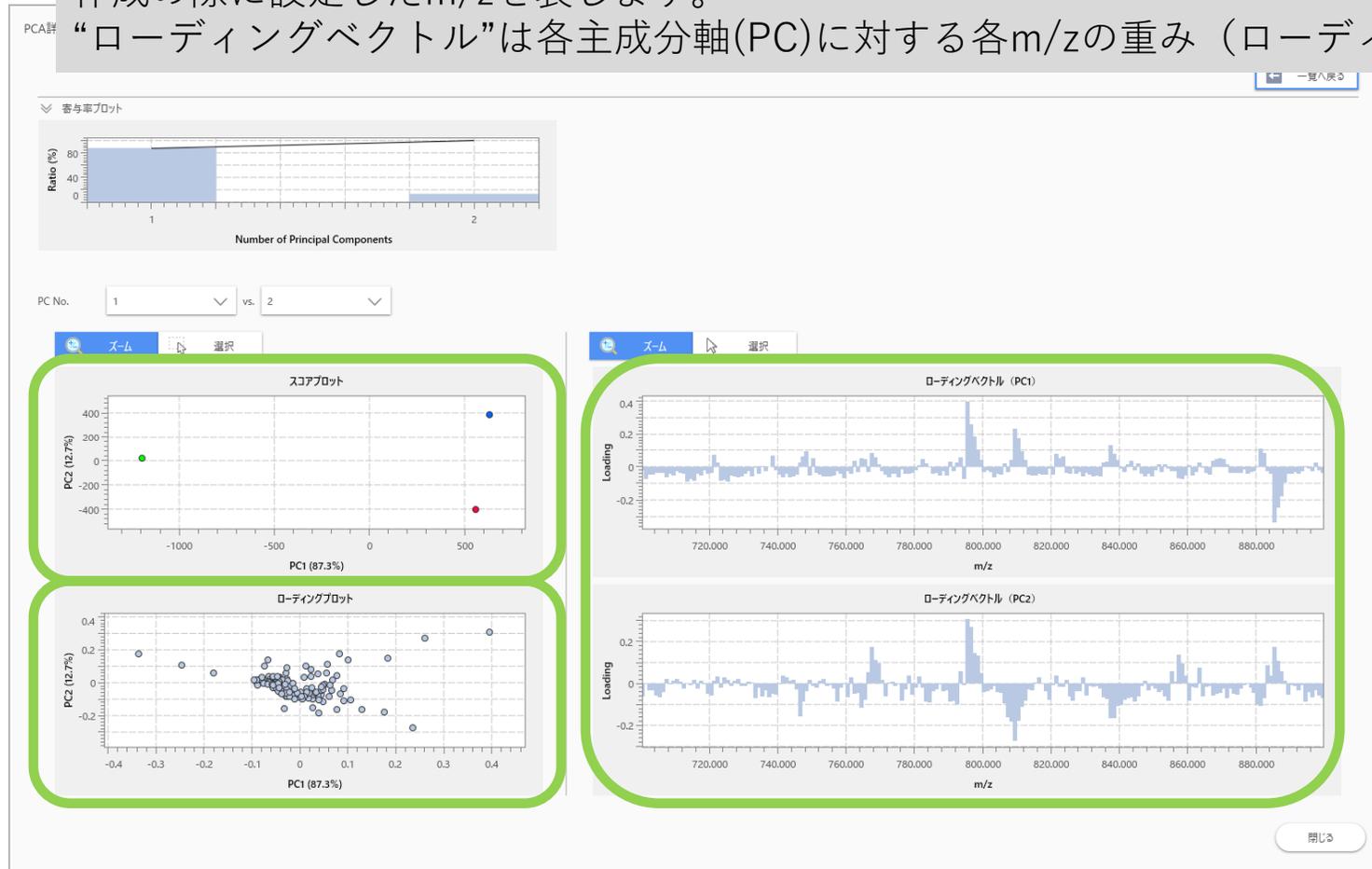
PCAの計算結果が表示されます。主成分軸が3つ以上の場合には複数の散布図が表示されます。必要な散布図を選択して“詳細表示”ボタンを押します。



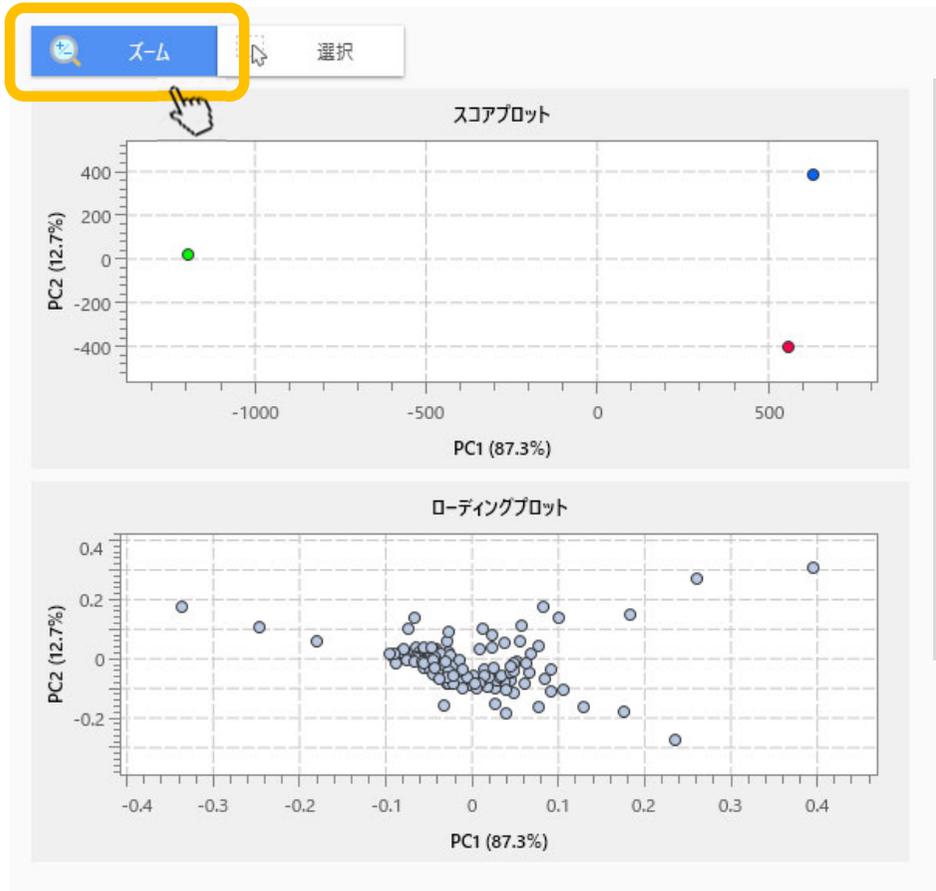
# 4.6 PCA結果画面

“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。

“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、

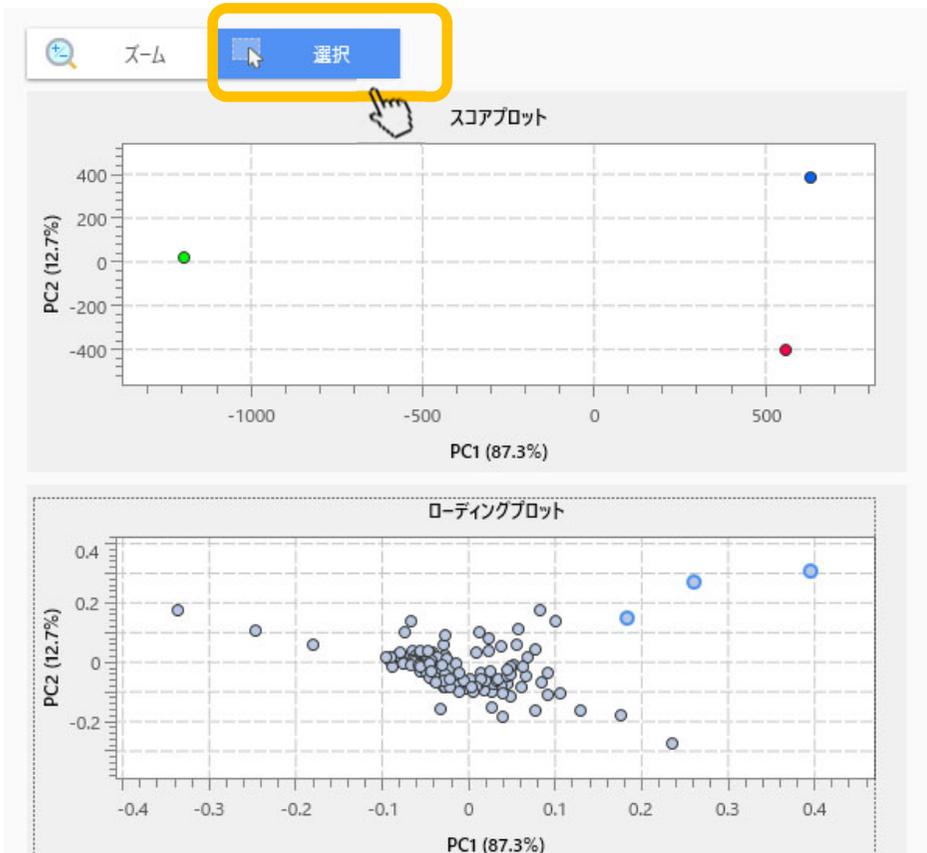
“ローディングプロット”上のデータ点はデータ行列作成の際に設定したm/zを表します。

“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

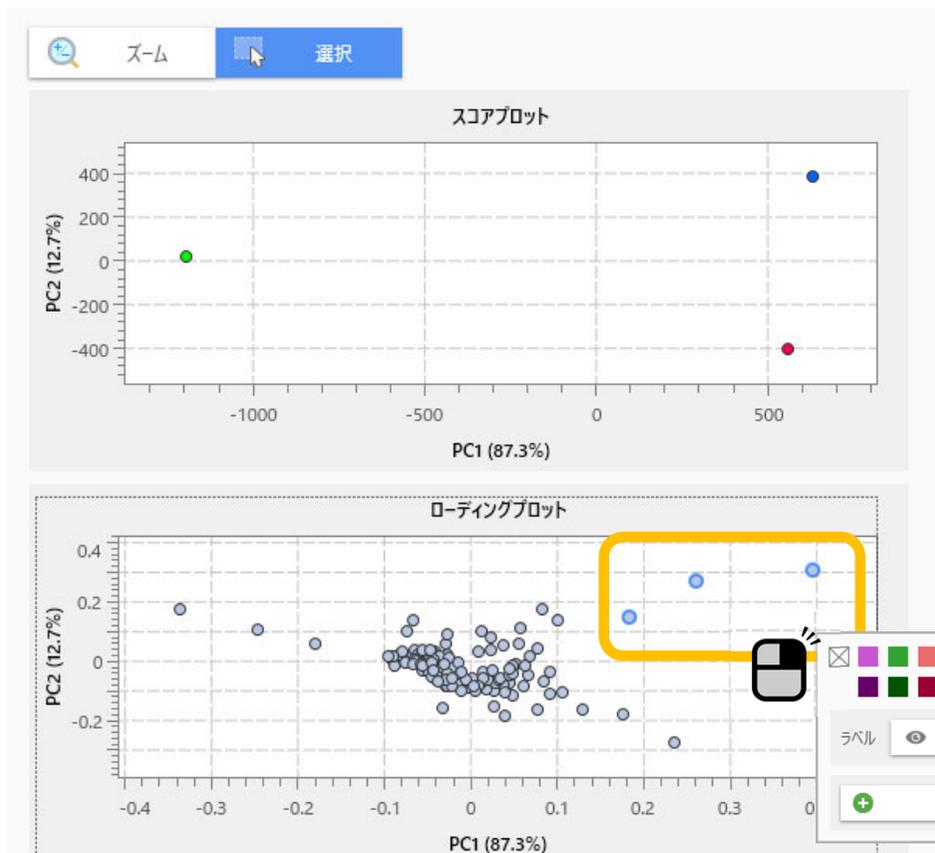


“選択”が選択されている場合は、プロット上でドラッグすると範囲内のデータポイントが選択されます。

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

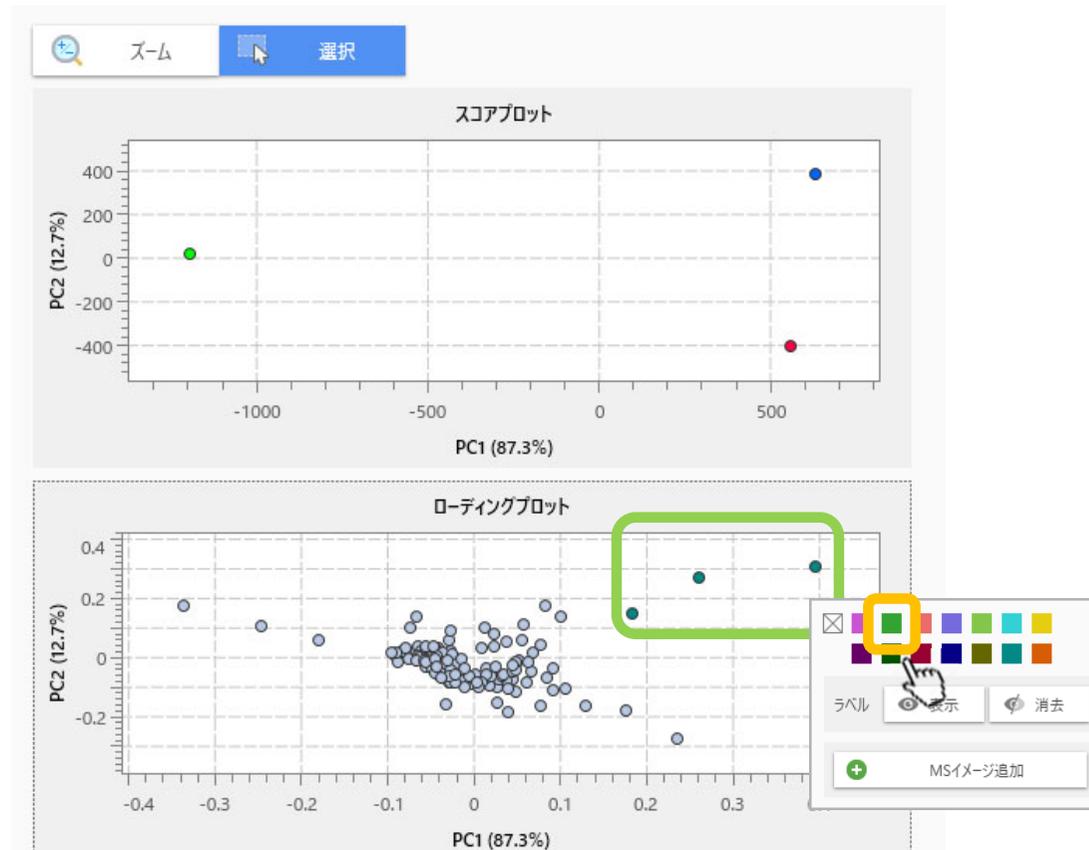


“選択”が選択されている場合は、プロット上でドラッグすると範囲内のデータポイントが選択されます。

サイドメニューから以下の操作が可能です。

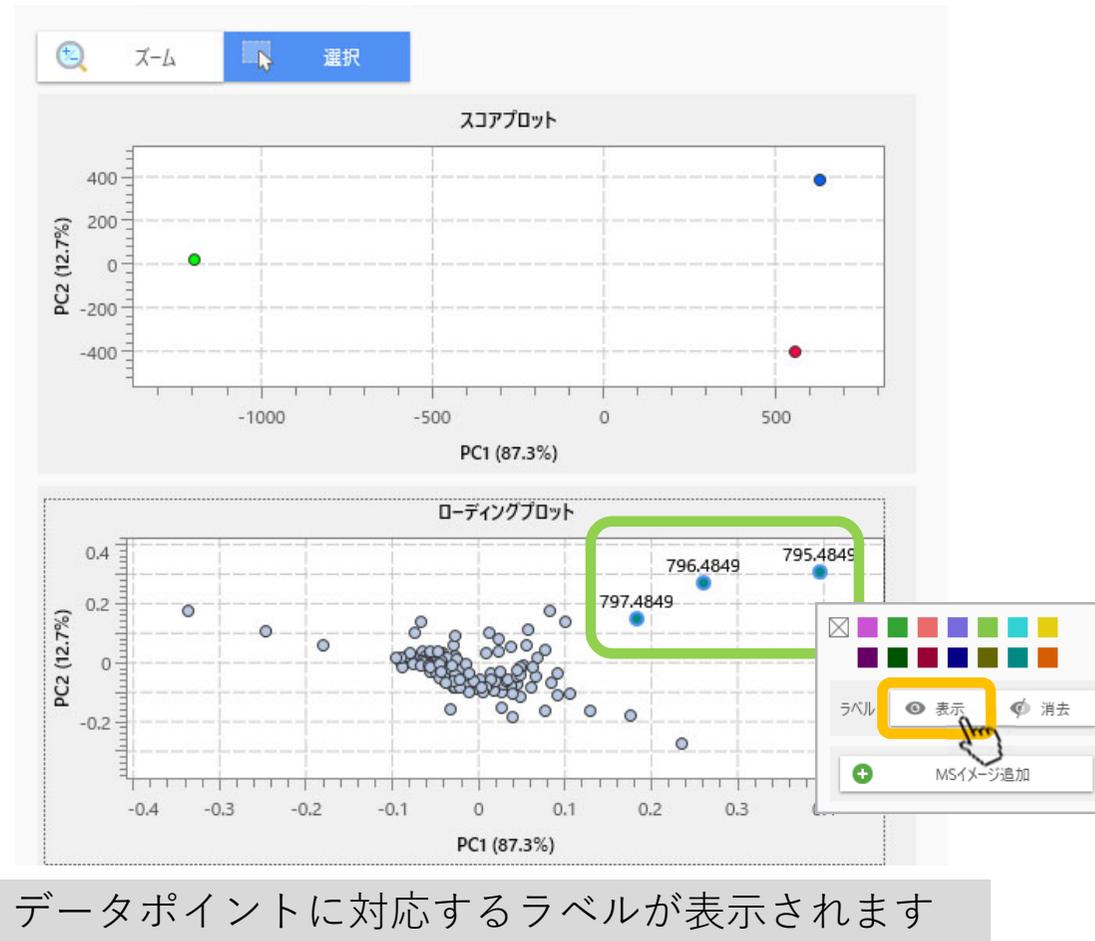
- 色をつける（タグ付：この色は他のグラフやデータ行列テーブル、MSイメージリス内で共通になります。）
- ラベルの表示
- MSイメージの追加

## 4.10 データポイントに色を付ける(タグ付)

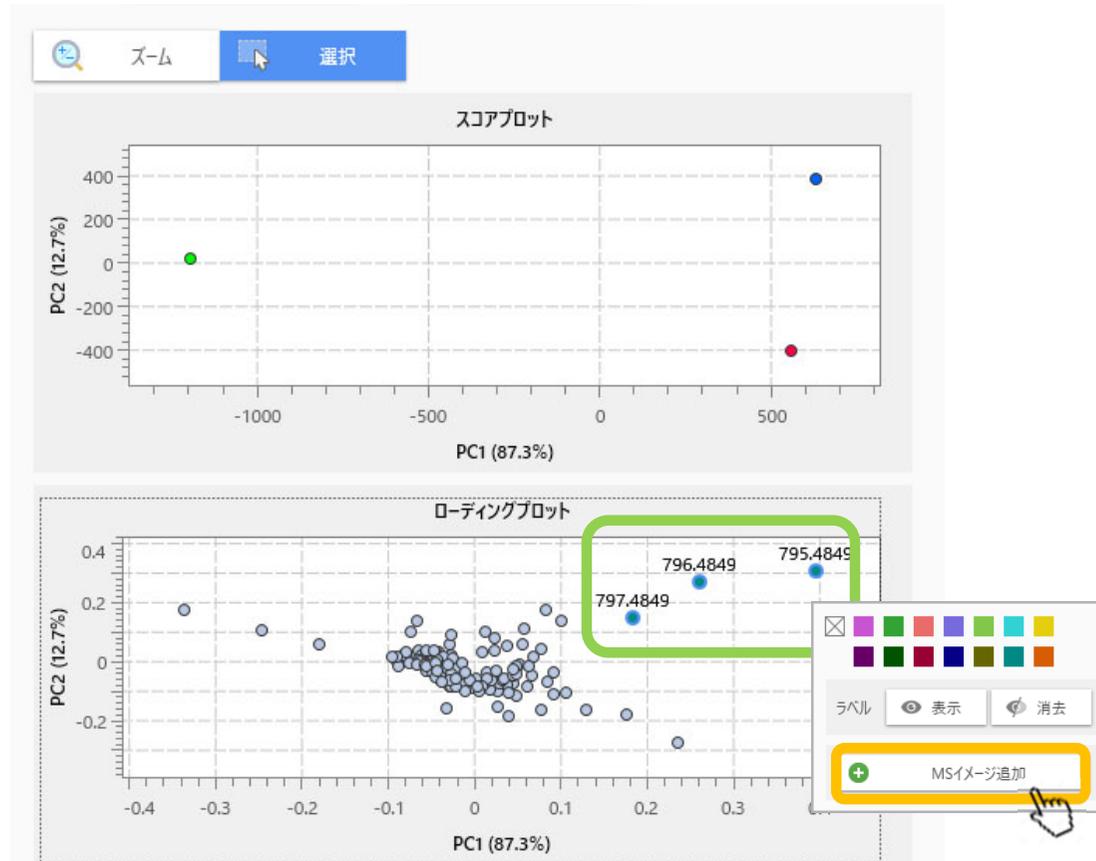


選択されたデータポイントの色が変更できます。  
この色は他のグラフやデータ行列テーブル、MSイメージリスト内で共通になります。

## 4.11 データポイントのラベルを表示する

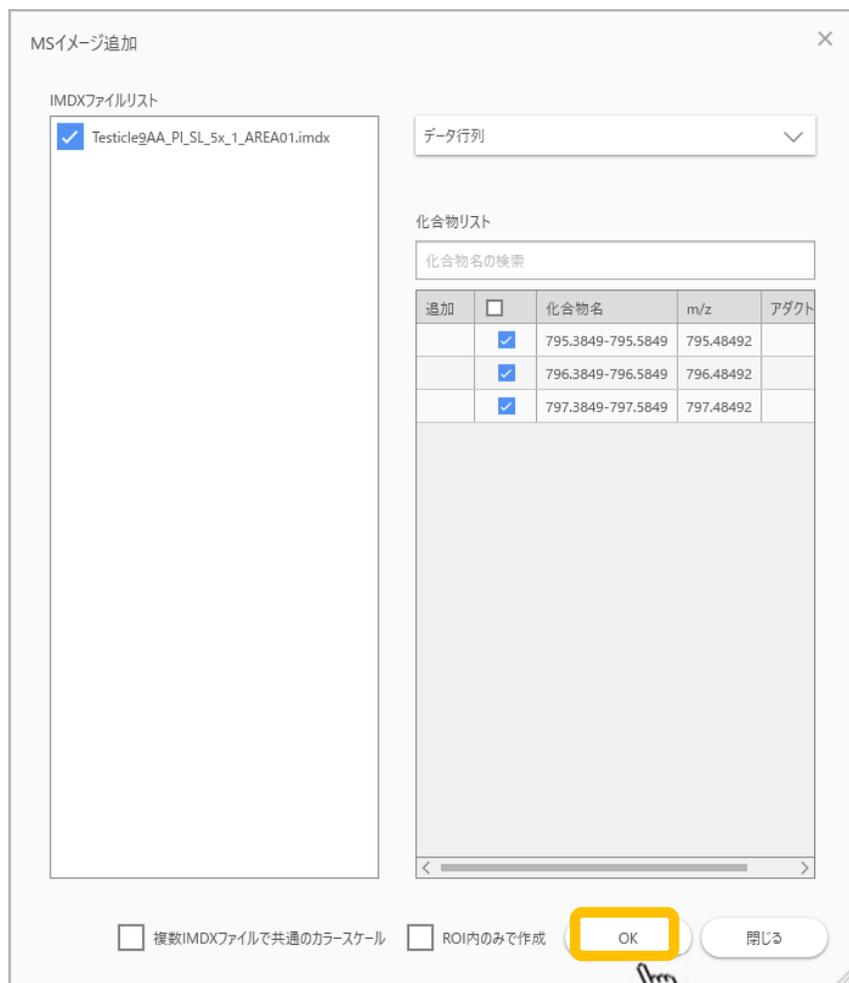


## 4.12 データポイントのMSイメージを作成



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

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The central 'データ行列テーブル' (Data Matrix Table) shows PCA results for three components: PCA-水平軸 (PCA-Horizontal Axis), PCA-垂直軸 (PCA-Vertical Axis), and ROI001. The table includes columns for No., 使用 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, and PCA values. The 'タグ' column is color-coded: green for PCA-水平軸, blue for PCA-垂直軸, and red for ROI001. The 'MSイメージ' (MS Image) panel on the right shows a large heatmap with a 250 μm scale bar. Below it, the 'MSイメージ一覧' (MS Image List) panel shows four smaller heatmaps corresponding to different m/z ranges, with the first one highlighted by a green box. The left sidebar contains various toolbars for file management, image processing, and data analysis. A text box at the bottom left explains the color coding and data display.

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。

# 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	8175.798	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	7606.531	11899.946
18	<input checked="" type="checkbox"/>		716.9849-717.9849	717.4849	8636.047	8915.057	13793.638

**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	ノンタグ
5	m/z範囲	699.9849
6	許容幅/ビンサイズ (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**

化合物名/コメント: TIC  
ファイル名: Testicle\_9AA\_PL\_SL\_5x\_1\_AREA01.mdx  
タイプ: 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

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

前処理

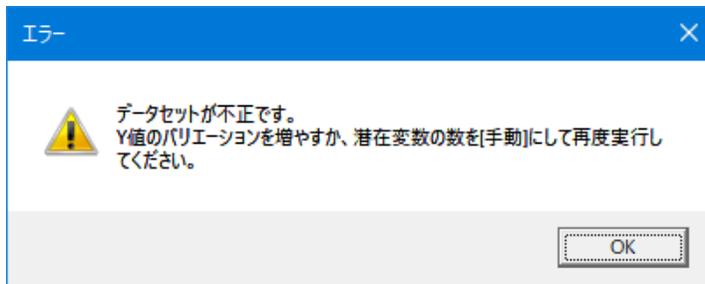
ROIリスト

No.	ファイル名	ROI名	属性	Y値
1	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1...	ROI001	Group A	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



“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

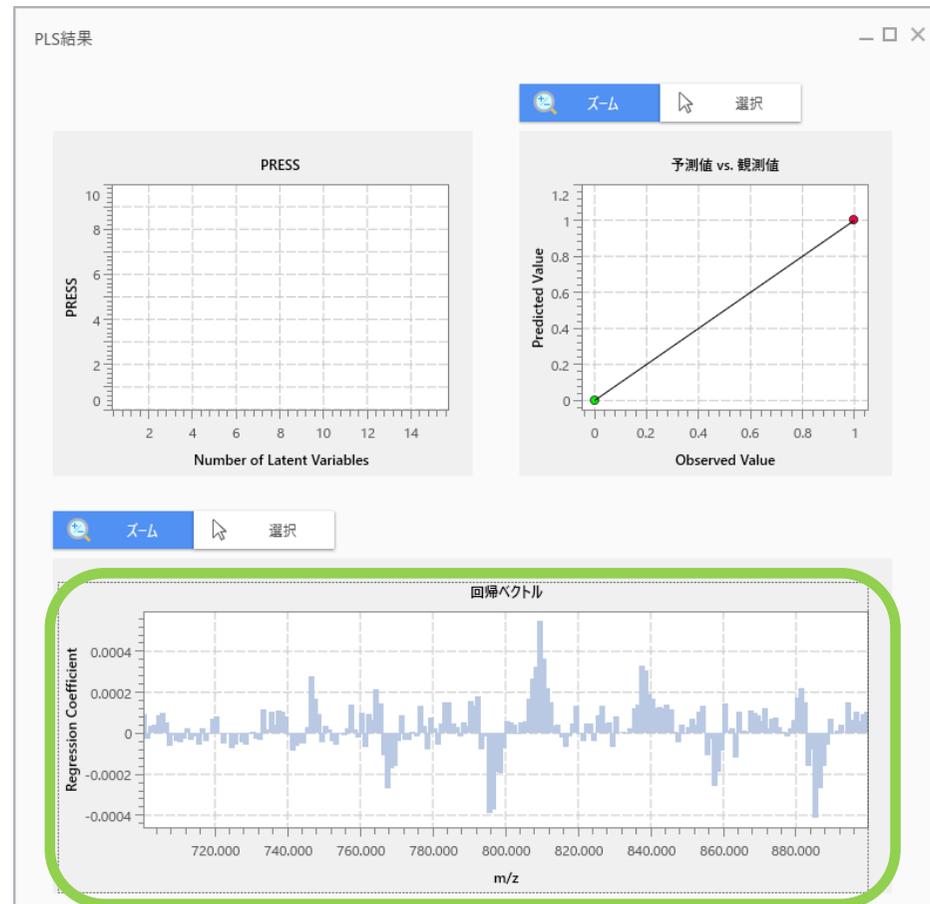


PLS結果画面には

- ・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。

The screenshot displays a software interface with several panels. On the left is a vertical toolbar with icons for file operations, analysis settings, and results display. The main area is divided into several sections:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROIs with columns for No., 使用 (Use), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), and 属性 (Attribute).
- データ行列 (Data Matrix):** A large table with columns: No., 使用 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, PLS係数 (PLS Coefficient), ROI001, and ROI002. A green box highlights the PLS Coefficient column.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the data.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller version of the MS image.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the analysis.
- グラフ (Graph):** A section for spectral and MS image manipulation.

**ROI List Table:**

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

**Data Matrix Table (Highlighted PLS Coefficient Column):**

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	8626.043	8915.057

**Analysis Parameters Table:**

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/ビンサイズ (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

## 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	9.413e-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				
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849		158	002	50724.988
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-1.9	598		59309.121
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-1.9	043		35450.414
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-1.8	297		185697.615
69	✓		767.9849-768.9849	768.4849	-1.6	786		43954.920
70	✓		768.9849-769.9849	769.4849	-1.6	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

# 5.12 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	-4.105e-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	-2.600e-004	51518.158	51518.158	157633.888
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849	-2.540e-004	51518.158	51518.158	50724.988
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-2.540e-004	51518.158	51518.158	59309.121
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-2.540e-004	51518.158	51518.158	35450.414
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-2.540e-004	51518.158	51518.158	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

# 5.13 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	<input checked="" type="checkbox"/>		884.9849-885.9849	885.4849	-4.176e-004	52242.364	91789.399	285789.467
96	<input checked="" type="checkbox"/>		794.9849-795.9849	795.4849	-3.800e-004	1029824.289	1145936.176	788355.094
97	<input checked="" type="checkbox"/>		795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-004	561465.069	629022.646	461295.998
68	<input checked="" type="checkbox"/>		766.9849-767.9849	767.4849	-2.607e-004	89399.480	105269.241	81336.045
187	<input checked="" type="checkbox"/>		885.9849-886.9849	886.4849	-2.605e-004	34271.553	51295.158	157633.888
158	<input checked="" type="checkbox"/>		856.9849-857.9849	857.4849	-2.542e-004	35594.351	44503.002	50724.988
99	<input checked="" type="checkbox"/>		797.9849-798.9849	798.4849	-1.935e-004	73407.900	86617.698	59309.121
159	<input checked="" type="checkbox"/>		857.9849-858.9849	858.4849	-1.902e-004	21195.334	27205.043	35450.414
98	<input checked="" type="checkbox"/>		796.9849-797.9849	797.4849	-1.869e-004	237984.460	263831.297	185697.615
69	<input checked="" type="checkbox"/>		767.9849-768.9849	768.4849	-1.688e-004	48100.708	54925.786	43954.920
70	<input checked="" type="checkbox"/>		768.9849-769.9849	769.4849	-1.609e-004	23381.429	26532.236	24099.820
188	<input checked="" type="checkbox"/>		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.451	82594.137
184	<input checked="" type="checkbox"/>		882.9849-883.9849	883.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702	33919.898
164	<input checked="" type="checkbox"/>		862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502
156	<input checked="" type="checkbox"/>		854.9849-855.9849	855.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458	11166.355
67	<input checked="" type="checkbox"/>		765.9849-766.9849	766.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153	26004.335
42	<input checked="" type="checkbox"/>		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282
160	<input checked="" type="checkbox"/>		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821

# 5.14 MSイメージ追加

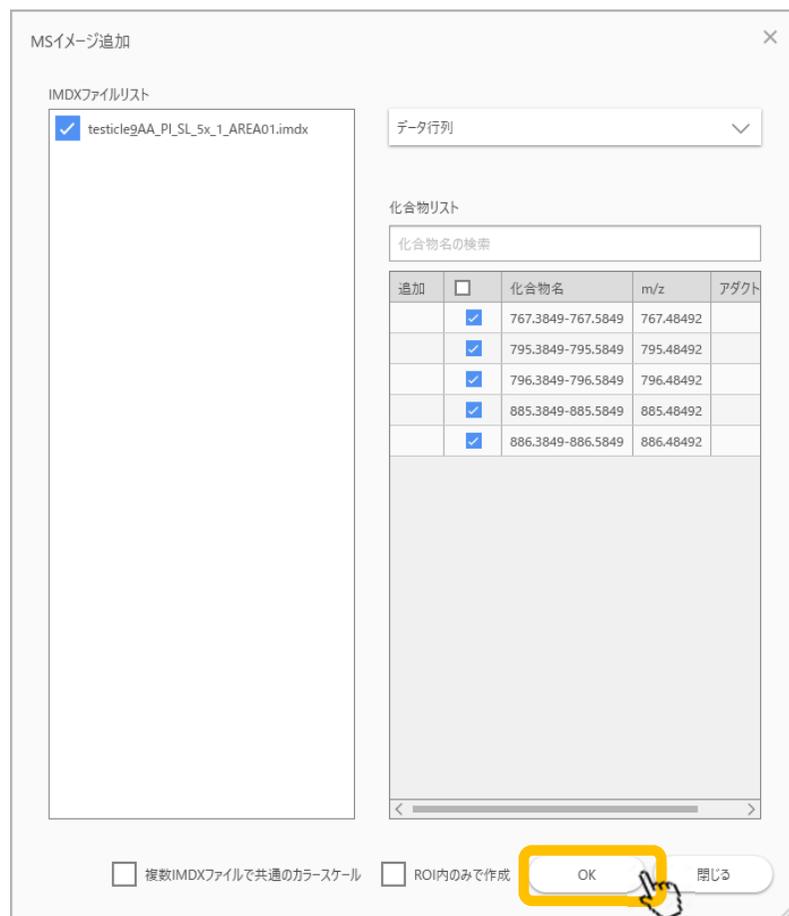
データ行列テーブル

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	5e-004	9421733	9123179	13783388
158	✓		856.9849-857.9849	857.4849			50724.988	
99	✓		797.9849-798.9849	798.4849	-1.93		59309.121	
159	✓		857.9849-858.9849	858.4849	-1.90		35450.414	
98	✓		796.9849-797.9849	797.4849	-1.8		185697.615	
69	✓		767.9849-768.9849	768.4849	-1.6		43954.920	
70	✓		768.9849-769.9849	769.4849	-1.60		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

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 (Testicle\_9A...), their names, and attributes.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A large table with columns for No., 使用 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, PLS係数 (PLS Coefficient), ROI001, and ROI002. It lists various m/z values and their corresponding PLS coefficients and ROI values.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the MS data, showing intensity across a range of m/z values. A color scale is visible on the right.
- MSイメージ詳細 (MS Image Details):** A panel on the right showing the m/z range (886.48492 ± 0.5000), chemical name (Testicle\_9AA\_PL\_SL\_Sx\_1\_AREA01), and file name.
- グラフ (Graph):** A section for plotting, including a 'MSイメージ追加' (Add MS Image) button and an 'm/z検索' (m/z Search) field.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of parameters for the analysis, such as 'TIC', 'ノーマライズ' (Normalized), and '許容値/ピンサイズ (Da)' (Tolerance/Pin Size).
- MSイメージサムネイル (MS Image Thumbnails):** A row of five small MS image thumbnails, each labeled with its m/z range and ROI name.

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。