# 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

# "A","B","C"のROIを設定 データ行列テーブル計算 検定 PCA 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

### ファイル 表示 検索 設定 オプション 拡張機能 ヘルプ ROIリスト ▼ データ行列テーブル Ξ — No. 使用 ファイル名 ROI名 属性 m/z 組成式 アダクトイオン マトリ No. 使用 タグ ラベル m/z±許容幅: 化合物名/コメント: アダクトイオン: ファイル名: タイプ: まとめて解析: 💿 • × グラフ スペクトル 箱ひげ図 📄 情報のコピー >> 🚟 🙇 👞 ——— 🚊 🌾 表示 🗸 ROI平均 $\sim$ MSイメージー覧 • × ■ 全て計算 MSイメージ追加 官 MSイメージ追加 官 MSイメージ追加 官 MSイメージ追加 MSイメージ MSイン MSイメージ MSイン MSイン</l 差異解析 計... 表... ファイル名 • × 🚺 📕 📕 😁 MSイメージ追加 🕘 m/z検索 解析パラメータ 🔅 🔘 m/z検索 < まね合わせ 🔡 四則演算 ノーマライズ未計算 Value No. Name

### 1.2 データファイル (.imdx)を追加

### 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。



### 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_9	9AA_PI_SL_5x_1_AREA01.imdx	✓ 参照画像 R	eference Image 1	✓ 参照画像の設定			ROIIJスト			. 原	性設定		11
	Les me		- 	輝度	O		No.	使用:	ファイル名 Testisla QAA DI SI Ev 1	ROI名	属性		デー
	Im		1207.377.27.7	^ コントラスト					lesticle_9AA_P1_SL_5X_1	All	Group A	~	
A	and the second			透明度									
四角、	丸、多角	形でROIを	描写できます	す。 平滑化フィルター	なし	$\sim$							
				<ul> <li>MSイメージ設定</li> </ul>									
	a			ファイル		$\sim$							
1.1		1 1 1		MSイメージ	TIC	$\sim$							
	20 Sec.	an in											
			Cherry St.										
		a series											
		States -	Real State										
C essa	a starting	and a fair of											
	and the												
× 51,23			_250 μm	×									
MSイメージ	Û			*									
ROI表示設定透	5明度	ラベル 🔽 表示	\$3				<						>
										ОК	)(+	ャンセル	D,

### 1.5 ROIを設定します



# 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
1		Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	All	Group A 🗸 🗸
2	<b>_</b>	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI001	Group A 🗸 🗸
3	~	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	RO1002	Group A Jun
4	~	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI003	Group A

### 1.7 ROIを設定します



## 1.8 ROIを設定します



### 2.1 データ行列計算の"前処理"の設定



### 2.2前処理(ノーマライズ)の設定

前処	理設定				×
J-	-マライズ なし	тіс	Im	XIC	
	- And I	D. stand (	$\mathbf{\nabla}$		
		<u></u>			
	No. (史用 m/z		副役任		
	基準値を設定				
	最小しきい値(%)	0.00			
	指定方法	() 範囲			
		● 中心±許容誤差			
			ar Stra	+++)++=	
				47721	

"ノーマライズ"の基準を設定します。 TICが一般的です。

対象とするm/zの設定を行います。 ファイル 表示 検索 設定 オプション 拡張機能 ヘルプ 🌉 萘里解析 ROIリスト ▼ データ行列テーブル ▼ × MSイメージ No. 使用 ファイル名 ROI名 属性 Θ -MDX イナ IMDXファイルを 追加 🚸 表示 🗸 🙀 🕅 🚃 🛶 -0 🖩 Testicle\_9A... All Group A m/z 組成式 アダクトイオン マト No. 使用 タグ ラベル 化合物名/コメント: 画像設定 TIC ファイル名: Testicle\_9AA\_PI\_SL\_5x\_1\_AREA01.i mdx タイプ: TIC まとめて解析: 🕕 ±&, 前処理設定 ±Ą 前処理 • × グラフ スペクトル 箱ひげ図 📄 情報のコピー >> 🚟 🙇 👞 ——— 🚊 🌾 表示 🗸 ファイル  $\sim$ MSイメージ一覧 • x \rm ノーマライズ計算は適用されま 1xr 🖬 🖬 差異解析 表... ファイル名 スパ • × 🚺 📕 🖪 🕒 MSイメージ追加 🗌 🔘 m/z検索 解析パラメータ Testicle\_9AA... Wh 🔅 🔘 m/z検索 < ● 重ね合わせ 🔠 四則演算 ノーマライズ未計算 🗼 ピークピッキング Testicle\_9AA\_PI... No. Name Value Testicle\_9AA\_PI\_SL\_5x\_1\_AREA01.imdx Who 2E+06 nten 1E+06

0E+00 768.49448 830 720 760 800

### 2.3 データ行列の設定

# 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 Leiv値	0.000 % V
m/z範囲 ● 自動 ● 手動 10.00000 - 1000.00000 Da	対象とするピークを選択します。
ビンサイズ 1.0000 Da 参 うベリング Matrix Clusters	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。
	OK キャンセル



### 2.5 データ行列の計算

### データ行列の計算を行います。

### 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。







手順

# 1. "A", "B", "C"のROIを設定 2. データ行列テーブル計算 2. ☆〜

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。



### 3.2 計算中ダイアログ



3.3 検定結5	R
----------	---

### 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。



## 3.4 検定結果

ラベル	P値 (ANOVA)	ROI001	RO1002	🗹 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 98/9-717 98/9		fm	Y	>

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

			$\bigcirc$	0	Ð
ラベル	P値(ANOVA)	ROI001	ROI002	ROI003	
884.9849-885.9849	5.473e-12	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	
707 08/0-708 08/0	2 1638-010	73/07 000	86617 608	50300 121	$\sim$

### 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) 🍝	Z ROI001	Z RO1002	Z RO1003
884.9849-885.9849	5.473e-127	52242.364	91789.399	285789.467
885.9849-886.9849	e-09	コピー		3.888
886.9849-887.9849	3.003e-06	すべてコピー		4.137
808.9849-809.9849	6.507e-05	m/zタグ付け		3.101
794.9849-795.9849	2.141e-05	ROIタグ付け	0	5.094
809.9849-810.9849	5.591e-03	MSイメージを追	the start	4.504
795.9849-796.9849	2.261e-03	比の分母/効果	量の減数に設定す	ිට <sup>1</sup> 5.998
836.9849-837.9849	1.042e-02	m/z検索		5.117
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
707 08/0_708 08/0	2 163e-010	73407 900	86617 608	50300 121

### 3.7 データファイルを選択してOK

▼ Testicle <u>9</u> AA_PI_SL_5x_1_AREA01.imdx          アーダi79!       ✓         化合物リスト       化合物名の検索         道加       ✓       化合物名         水<       図       885.3849-885.5849       885.48492	Testicle9AA_PI_SL_5x_1_AREA01.imdx	7-917	9U			~ /
化合物リスト 化合物名の検索 <u>追加</u> <u>2</u> 化合物名 m/z アダク ✓ <u>2</u> 885.3849-885.5849 885.48492						~
化合物リスト 化合物名の検索 <u>追加</u> <u>2</u> 化合物名 m/z アダク ✓ <b>2</b> 885.3849-885.5849 885.48492						
追加       ✓       化合物名       m/z       アダク         ✓       ②       885.3849-885.5849       885.48492		化合物リ	スト			
<ul> <li>追加</li> <li>✓ 化合物名</li> <li>m/z</li> <li>アダク</li> <li>✓</li> <li>Ø85.3849-885.5849</li> <li>Ø85.48492</li> </ul>		化合物	名の検索			
✓         ✓         885.3849-885.5849         885.48492		追加		化合物名	m/z	アダク
		~	~	885.3849-885.5849	885.48492	

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)

	l	<		_	>	
複数IMDXファイルで共通のカラースケール	, [	ROI内のみで作成	ok fra	閉じる	D	

### 3.8 MSイメージが追加される



### 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。



### 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イメージー覧に表示されているm/zのみ表示されます。 ్× 884,9849-885,9849 m/z+許容幅: 3 J Testicle\_9A... ROI002 Group B 187 ~ 885.9849-886.9849 6.900e-090 34271.553 51295.158 000 画像設定 885.48492±0.5000 188 ~ 886 9849-887 9849 000 3.803e-068 19271.791 25189,451 4 🗸 Testicle\_9A... ROI003 Group C 110 ~ 808,9849-809,9849 000 6.507e-057 化合物名/コメント: 884,9849-885,9849 96 ~ 794.9849-795.9849 2.141e-055 画像レジストレーショ ン 111 ~ 809.9849-810.9849 000 5.591e-038 ファイル名: 97 ~ 795.9849-796.9849 2.261e-031 561465.069 629022.646 Testicle\_9AA\_PI\_SL\_5x\_1\_AREA02.i 138 ~ 836.9849-837.9849 1.042e-026 63879.104 45687.246 mdx 98 ~ 796,9849-797,9849 8.475e-020 189 ~ 887.9849-888.9849 1.575e-019 11665.185 000 データ(국제) 182 $\checkmark$ 880,9849-881,9849 000 3.825e-017 41268.920 14 🔽 8275.835 7723.166 712.9849-713.9849 8.814e-017 まとめて解析: 💿 hoo 139 ~ 837.9849-838.9849 2.571e-015 25713.948 26 🗸 4.194e-015 724,9849-725,9849 000 9259.066 9815.346 ±4 16 🗸 714.9849-715.9849 000 2.055e-014 6666.396 7309.580 前処理設定 グラフ **•** > ₩ スペク おひげ図 「う」 信報のコピー m/z : 885,48492 5.8 2 N MSイメージー覧 m/z:885.48492 800000 🚯 MSイメージ追加 🍿 😑 🗩 🕢 😥 🛃 ソート 🗸 🏟 表示 🗸 😥 😥 600000 ..... 400000 · 🔅 🔘 m/z検索 🔷 重ね合わせ 🔠 四則演算 ╇ 200000 H 1 AREA02 inclu 差異解析 **\*** > 解析パラメータ Group A Group B Group C 1 TIC ili 🕖 — ilia 5 3 🏟 No. Name Value #\* 1 ノーマライズ TIC 884.9849-885.9... Group A 885.48492 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 J 100 4 データ行列解析方法 ノンターゲ 5 m/z範囲 699 984 6 許容幅/ピンサイズ (Da) 1.0000 100000.0 200000.0 300000.0 400000.0 500000.0 600000.0 700000.0 0.0 7 ラベリング オフ Intensity 8 除外リスト オフ Group B オフ 9 しきい値設定 PLS計算

### 3.10 箱ひげ図の表示

### 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)

🛄 ファイル 表示 検索	設定 オブション 拡張機能 ヘルプ		🛃 差異解	テポハハま			$a_{n} = b_{n} + A_{n} = b_{n} = b_{n} = b_{n} + b_{n} = b_{n} + b_{n} = b_{n} + b_{n} = b_{n} + b_{n} + b_{n} = b_{n} + b_{n} + b_{n} + b_{n} + b_{n} = b_{n} + b_{$	
⊗ 771µ	ROIUZH	<b>▼</b> <del>,</del> <del>,</del>	「-タ行列テーフ	土成分分价	VI (Princij	bai Comp	Soment Analysis: PCA/211 v z 9 。	
	No. 使用 ファイル名 ROI名	属性			7-1/5 フ ~ /	7 トルた甘	目に単質とわます	
	1 Testicle_9A All	Group A	No. 使	台NUIの十	-1	「アルを型	至に引昇されより。	
IMDX J71ルを 追加	2 🗸 Testicle_9A ROI001	Group A	1 🗹	699.9849-700.9849	700.4849 12654.115	10992.916 13195.851		>
≫ 画像設定	3 🗸 Testicle_9A ROI002	Group B	2 🔽	700.9849-701.9849	701.4849 10132.104	9749.542 20207.773	773 化合物名/JXグバー TIC	- 1
	4 🗸 Testicle_9A ROI003	Group C	3 🗸	701.9849-702.9849	702.4849 6875.912	5408.621 10541.267		
	5 Testicle_9A ROI004	Group D	4	702.9849-703.9849	703.4849 9623.874	8175.758 12906.003	003 Tasticle 9AA PLSL 5x 1 ARFA01	1.i
画像レジストレーショ			6 🔽	703.9849-704.9849	704.4849 8396.98	9338.670 13851.114	mdx	
			7	705.9849-706.9849	706.4849 7367.519	5995.169 9259.481	481 947:	
			8 🔽	706.9849-707.9849	707.4849 7841.990	8671.765 16254.045		
			9 🔽	707.9849-708.9849	708.4849 6609.30	6343.222 10192.927		
ROI設定			10 🔽	708.9849-709.9849	709.4849 12658.084	13006.758 17694.062		
			11 🔽	709.9849-710.9849	710.4849 8936.845	9317.851 10369.467		
まとめて解析: 💽 💿			12	710.9849-711.9849	711.4849 8555.765	8655.481 11234.953		
≫ データ行列			14	712,9849-712,9849	712.4849 6515.15	5488.399 9521.748 7723.166 22881.835		
<u>*A</u>			15 🔽	713.9849-714.9849	714.4849 6949.865	6083.847 16639.591		
- <b>\$</b>			16 🔽	714.9849-715.9849	715.4849 6666.39	7309.580 19637.225		
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			17 🗾	715.9849-716.9849	716.4849 8706.95	7608.531 11899.940	940	
*			18	716.08/0-717.08/0	717 /8/10 8626 0/2	8015.067 13702.630		
								_
前処理		2	777				▼ X MSイメージー覧	• ×
前処理		7	プラフ スペクトル	箱ひげ図			★ MS1X-ジー覧 ③ MS1X-ジー覧 ③ MS1X-ジー覧 ④ ⑤ ソート ∨ Ø 表示 ∨ 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10	• × «
前处理		9	オフスペクトル	箱ひげ図			<ul> <li>× MS1X-ジー覧</li> <li>MS1X-ジ島加 窗 ○</li> <li>● ● ● ソート &gt; ● 表示 &gt; ぎ ぎ</li> </ul>	• × «
前処理	<	7	<sup>1</sup> ラフ スペクトル	箱ひげ回 茶 🧳 表示			<ul> <li>× MS1/x-ジー覧</li> <li>MS1/x-ジ島加 窗 ○</li> <li>● 図 ソート ∨ ● 表示 ∨ 医 逆</li> <li>● m/2株市 ● 重ね合わせ 器 四則演算</li> </ul>	• × «
前処理 <b> </b>	< 解析パラメーク	7 >> * x	<sup>7</sup> ラフ スペクトル !! (注意) 画 ム	ÉDげ回 ★ ● 表示			<ul> <li>× MS1/3-ジー覧</li> <li>⑥ MS1/3-ジー覧</li> <li>⑥ MS1/3-ジル協加 窗 ○ ● ② ③ ソート ∨ ◎ 表示 ∨ 匹 匠 匠</li> <li>◎ m/2機束 ● 重ね合わせ 器 四則演算</li> </ul>	• × «
前处理 子-9行列設定	< 解析/(ラメーク	~ ×	757 スペクトル 9 日日 10 10	福ひげ図	<ul> <li>ホ V 図 図</li> <li>m/z検索</li> <li>エ ビークビッキング</li> </ul>		<ul> <li>× MSイメージー覧</li> <li>⑥ MSイメージー覧</li> <li>◎ MSイメージ通加 窗 ○ ● ② ソート &gt; ◎ 表示 &gt; ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○</li></ul>	• × «
前43週 データ行列設定	く 解析/(ラメータ TIC	> • x	<sup>7</sup> 77 Х <sup>(2</sup> /У-Л), <u>1</u> 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	福ひげ図	★ < 区 m/2機需 K ビークビッキング		<ul> <li>× MSイメージー覧</li> <li>● MSイメージー覧</li> <li>● MSイメージ通加 ● ○ ● ● ソート ∨ ● 表示 ∨ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○</li></ul>	• × «
前処理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算	く 解析/(ラメータ TC No. Name	→ × × Value	f77 ХКФНИ ! В До А	福ひげ図 金	★ / IY  2 ■ I ■ I		<ul> <li>× MSイメージー覧</li> <li>● MSイメージー覧</li> <li>● MSイメージ通加 ● ○ ● ● ソート ∨ ● 表示 ∨ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○</li></ul>	• × «
前処理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算 ※ 差異解析	< 解析/(ラメータ TC No. Name 1 ノーマライズ	Value TIC	197 <b>Χ<sup>Λ</sup>9ΗΝ</b>	福ひげ図 金 <u> </u>	★ / IXY P ■ ■ m/2機由 ▲ ビークビッキング		<ul> <li>× MSイメージー覧</li> <li>● MSイメージ通知 ● ○ ● ● ソート ∨ ● 表示 ∨ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○</li></ul>	• × «
前以現 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算 学 差異解析	メート・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション	Value         7           Value         100           100         100	757 2×20HJ 2 2 2 2 2 2 4 1 1 1 1	福ひげ図 金 <u> </u>	★ / IVY P C m/2機需 K ビークビッキング		<ul> <li>× MS1X-ジー覧</li> <li>▲ MS1X-ジニュロ</li> <li>● ● ● リート &gt; ● 表示 &gt; 純 ビ</li> <li>● ● ● ● リート &gt; ● 表示 &gt; 純 ビ</li> <li>● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●</li></ul>	• x «
前以現 データ行列設定 データ行列設定 データ行列設定 メントタ行列計算 を変更解析	メート・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション	✓ Value	757 X (2) HJU 2	福辺げ図 本 茶 愛 表示 興 ③ MSイメージ追加 ④	R V 1211 2 3 3 1 - Dビッキング		<ul> <li>× MS1X-ジー覧</li> <li>▲ MS1X-ジ島加 副 ● ● ● ソート &gt; ● 表示 &gt; ○ ● ●</li> <li>■ ○ ● ● ● ● ソート &gt; ● 表示 &gt; ○ ●</li> <li>■ ○ ● ● ● ● ● ● ● ●</li> <li>■ ○ ● ● ● ● ●</li> <li>■ ○ ● ● ● ●</li> <li>■ ○ ● ● ●</li> <li>■ ○ ●</li> <li>● ●</li> <l< td=""><td>• x «</td></l<></ul>	• x «
前43項 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算 学 差異解析 検定 検定	メージングログログログログログログログログログログログログログログログログログログロ	Value X2 Value 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7	757 2.4295JU : 2.1 11	W (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)	R V IXY D G m/2模集		<ul> <li>× MS1X-ジー覧</li> <li>▲ MS1X-ジ島加 単 ○ ● ● ● ソート ∨ ● 表示 ∨ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○</li></ul>	• x «
前仏理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算 学 差異所解析 検定	メート・シーク メント・シーク メント・シーク メント・シーク オント・シーク アント・シーク アント・シーク アント・シーク アン・シーク アン・シー	Value           TIC           37           0           1/19-17           699.944	57 270HL 1 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	福辺げ図	▶ ● ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○		<ul> <li>× MS1X-ジー覧</li> <li>▲ MS1X-ジ島加 ● ● ● ● ソート ∨ ● 表示 ∨ ぎ ぎ</li> <li>● ● ● ● のの2段前 ● 章 章む合わせ ● 回別道算</li> <li>Testicle_9AA_PI</li> <li>● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●</li></ul>	• x «
前処理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列設算 を実解析 を実解析 検定	メージングイズ (ク) (シングイズ (D)) (シング・マングン (D)) (シングン (D)) (シング (D)) (D)) (シング (D)) (D)) (シング (D)) (D) (D)) (D) (D) (D) (D) (D) (D)) (D) (D	✓ Value TC 37 0 1/2/9-7 699.984 1.0000	57 XX9hL I X K9hL I X K X X	福辺げ図 金 <u> </u>	▶ ● ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○		<ul> <li>× MS1X→ジー覧</li> <li>● MS1X→ジ島加 () ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●</li></ul>	• × «
前処理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列設算 学 差異解析 検定 PCA計算	メージング (マジング) (ロング)	× X Value TC 37 0 1/2/9-7 699.984 1.0000 37	57 XX9hL I I I I I I I	福辺げ図 金 (学 表示 現 ③ MSイメージ造加 ④	<ul> <li>K / ビークビッキング     <li>メ ビークビッキング     </li> </li></ul>		<ul> <li>× MS1X→ジー覧</li> <li>● MS1X→ジ造加 単 ○ ● ② ● ソート ∨ ◎ 表示 ∨ 笑 逆</li> <li>● m/2隙密 ● 重ね合わせ 器 四則運算</li> <li>Testicle_9AA,Pl</li> <li>● m/2隙密</li> <li>● 重ね合わせ</li> </ul>	• × «
前処理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算 メ 差異解析 検定 PCA計算 マ	人のシーク           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ           -マライズ最小しきい値(%)         4           4         デーク行列操作方法           5         m/z範囲           6         許容幅/ビンサイズ (Do)           7         ラバリング           8         除外リスト	× × × × × × × × × × × × × × × ×	57 2.439hJ ( 2.53 A 2.54 2.54 2.54 2.54 2.54 2.54 2.54 2.54	福辺げ図 金 一 金 使 表示 調 ③ MSイメージ追加 ④	<ul> <li>x と レンビッキング</li> <li>m/z線票</li> <li>ス ビークビッキング</li> </ul>		<ul> <li>× MS1X→ジー覧</li> <li>● MS1X→ジ島加 ● ○ ● シート ∨ ● 表示 ∨ 笑 座</li> <li>● m/2隙隙 ● 重ね合わせ 器 四則運算</li> <li>Testicle_9AA_Pl</li> <li>● m/2隙隙</li> <li>● 重ね合わせ</li> </ul>	• × «
前処理 データ行列設定 データ行列設定 データ行列計算 データ行列計算 使定 PCA計算 PCA計算	メージングング (10) (10) (10) (10) (10) (10) (10) (10)	Value           TC           77           0           1/79-7           699,984           10000           77           1,2001           77	57 2.43958 3 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	福辺げ図 金 (学 表示 単 ② MSイメージ通加 ②	<ul> <li>本&lt;</li> <li>レビ</li> <li>アレッキング</li> <li>ボ</li> <li>ビークビッキング</li> </ul>		<ul> <li> <ul> <li>MS1X→ジー覧                 ・ 「「「「」」」</li> <li>MS1X→ジー覧                 ・ 「「」」」</li> <li>                 ・ 「」」」</li> <li>                 ・ 「」」」</li> <li>                 ・ 「」」」                ・ 「」」」</li></ul></li></ul>	• × «
	メ           毎折パラメータ           TC           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ           3         ノーマライズ           3         ノーマライズ           4         データ行列単析方法           5         m/z範囲           6         許容様化とサイズ (Da)           7         ラバリング           8         除外リスト           9         しきい値設定	× ×	57 2.43958 3 2.43958 4 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2. 2.	福ひげ図	★ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●		<ul> <li>× MS1X-ジー覧</li> <li>▲ MS1X-ジ油加 ● ● ● リート &gt; ● 表示 &gt; 純 評</li> <li>● ● ● リート &gt; ● 表示 &gt; 純 評</li> <li>■ ● ● ● ● リート &gt; ● 表示 &gt; 純 評</li> <li>■ ■ ○ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●</li></ul>	• × «
詳処理 データ行列設定 データ行列設算 ※ 変現解析 ※ 変現解析 操定 快定 PCA計算 ※ PCA結果素示	メート・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×           ✓         ×	57 XX9HJ 1 2 2 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2	福Dげ図	R ~ 1211 2 3 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		<ul> <li> <ul> <li>MS1X-ジー覧                 ・ 「● ● ● ソート ∨ ● 表示 ∨ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○ ○</li></ul></li></ul>	• × «

4.2 PCAパラメータ設定

通常この設定で大丈夫です。



### 4.3 PCAパラメータ設定



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。 <sup>™</sup>"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。 - 三 一覧へ戻る ≫ 寄与率プロット 80 Ratio ( 1 Number of Principal Component 🗸 vs. 2 PC No. 1 $\sim$ 😢 ズーム 🔓 選択 濯択 スコアプロット ローディングベクトル (PC1) 400 002 (12.7%) 0 -200 0.2 -400 -1000 -500 500 720,000 740.000 880.000 760.000 780.000 800.000 820.000 840.000 860,000 PC1 (87.3%) m/z ローディングプロット ローディングベクトル (PC2) 0.4 0.2 0.2 PC2 (12.7%) Loading 0 -0.2 -0.4 -0.3 -0.2 -0.1 0.2 0.3 0.4 720.000 740.000 0 0.1 760.000 780.000 800.000 820.000 840.000 860.000 880.000 PC1 (87.3%) m/z 閉じる

### 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

データ行う	51			$\sim$
				Ŷ
化合物リ	7.F			
化合物:	名の検索			
追加		化合物名	m/z	アダク
	~	795.3849-795.5849	795.48492	
	~	796.3849-796.5849	796.48492	
	~	797.3849-797.5849	797.48492	

### 4.14 結果がメイン画面に表示される



手順

# "A", "B", "C"のROIを設定 データ行列テーブル計算 検定 PCA 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)

🔛 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:¥U	lsers¥yamac¥ 立てノ	公里小一	<b> </b>	al loact Couproce DLC)たぞ	テレキオ
	ROIJZF	Ŧ	データ行列テ	-ブル	· 이미	小取小—	·米広(Failid	ai least squares. FLS/21	10,4 20
画像レジストレーショ	No. 使用 ファイル名 ROI名	属性			夕 [	$200 \pi$	内マペクト	ルを其に計笛されます	
2	1 Testicle_9A All	Group A	No.	使用 タグ				ルで至に可弁でれより。	
	2 🗸 Testicle_9A ROI001	Group A	1		699.9849-700.9849	700.4849 12654.	115 10992.916 13195.851		>
	3 🗸 Testicle_9A ROI002	Group B	2		700.9849-701.9849	701.4849 10132.	104 9749.542 20207.773		(合物名/JXント: C
ROI設定	4 🗸 Testicle_9A ROI003	Group C	3		701.9849-702.9849	702.4849 6875.	912 5408.621 10541.267		
	5 Testicle_9A ROI004	Group D	4		702.9849-703.9849	703.4849 9623.	874 8175.758 12906.003		アイル名: acticle 9AA DI SI 5x 1 AREA01i
まとめて解析: 💷			5		703.9849-704.9849	704.4849 8598.	983 6357.625 10517.781	[1] A. M.	dx
≫ データ行列			7		705,9849-706,9849	706,4849 7367.	519 5995,169 9259,481		イプ:
<u>±4</u>			8		706.9849-707.9849	707.4849 7841.	996 8671.765 16254.045	I I I I I I I I I I I I I I I I I I I	с
			9		707.9849-708.9849	708.4849 6609.	303 6343.222 10192.927	and the second states of the second states and the second states and the second states and the second states and	
制处址設定			10		708.9849-709.9849	709.4849 12658.	084 13006.758 17694.062		
±۸.			11		709.9849-710.9849	710.4849 8936.	845 9317.851 10369.467		
<b>•</b> 5			12		710.9849-711.9849	711.4849 8555.	765 8655.481 11234.953		
前処理			13		711.9849-712.9849	712.4849 6515.	152 5488.399 9521.748 835 7723.166 22881.835		
			15		713.9849-714.9849	714.4849 6949.	865 6083.847 16639.591	A CONTRACT OF	
			16		714.9849-715.9849	715.4849 6666.	396 7309.580 19637.225	1. A start Provide the second start of the	
データ行列設定			17		715.9849-716.9849	716.4849 8706.	953 7608.531 11899.940		1##20712-
			10		716 0940 717 0940		042 8015 057 12702 520		
			<			717.4849		ter and the second s	
			<			17174840 1 8676			
			く ガ <del>ラ</del> フ			171748491 8676	•	× MS1X-ジー覧	• x
データ行列計算			く グラフ スペクト	レ 箱ひげ図		1 717 4840 1 8656		× MSイメージー覧 ● MSイメージー覧 ● MSイメージ追加 ■ ⊖ ● 目 ソート × Ø 表	★ X 示 > [h] [k]
<i>データ</i> 行列計算 ※ 差異解析			777 2891	レ 箱ひげ図				× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジ島加 ● ● ■ ソート × Ø 表	× × ≪ ₩
<b>デーク</b> 行列計算 ※ 差異解析 <b>27</b>	<	>	757 2ペクト 1010	レ 箱ひげ図 L M	★ Ø 表示		- ROI平均 / /	× MSイメージー見 ● MSイメージ通知 ■ ○ ● ■ ソート × 参表 ● ■ かんなージ通知 ■ ○ ■ N/2技術 ● 重ね合わせ ■	<ul> <li>× ×</li> <li>(</li> <li>(</li></ul>
データ行列計算 ※ 差異解析	<	- × ×	۲ 757 ۲ペクト ۲	レ 箱ひげ回 E <u>A</u> A	★ <b>●</b> 表示		ROI平均 / / / / / / / / / / / / / / / / / / /	× MSイメージー覧 ● MSイメージー覧 ● MSイメージ通加 ■ ○ ● ■ ソート × ◆ 表 ● ■ 0 m/2技術 ● 重ね合わせ 開	<ul> <li>×</li> <li></li> <li></li></ul>
データ行列計算 ※ 差異解析 検定	< 解析パラメータ		757 7×79 8	レ 箱ひげ図	→ ◆ 表示 ● MSイメージ追加   ④ (		ROI平均 ✓ × × × × × × × × × × × × × × × × × ×	× MSイメージー覧 ● MSイメージー覧 ● MSイメージ追加 ● ● ● アート × ● 素 ● ● ● アート × ● 素 ■ ● ● ● ● アート × ● 素 ■ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	<ul> <li>×</li> <li></li> <li></li></ul>
デーク行列計算 デーク行列計算 ※ 差異解析 検定	< 解析/(ラメーク TIC	- ×	757 2×94	レ 箱ひげ図 ・ 瓶	● MSイメージ点加   @ 6	R ✓ [[2]] □ G	ROI平均 至 全て計算 計… 表。 ファイル名	× MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジー覧 ● MS1X-ジ島加 ● ● ■ ソート × ◆ 泰 ■ ● ● ■ ソート × ◆ 泰 ■ ● ■ 2000 日 ■ ■ 1000 日 ■	<ul> <li>×</li> <li>(</li> <li>の別演算</li> </ul>
デーク行列計算 デーク行列計算 後定 観察	く 解析パラメータ <b>TIC</b> No. Name	× X	757 737 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	レ 箱ひげ図 ・ AA	● ① 査   ● ● MSイメージ追加	R ✓ [] □ G	ROI平均	× MS1/J-ジー覧 ● MS1/J-ジー覧 ● ■ ソート × ◆ 素 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	★ X (示 ∨ ) [K] [K] (図別演算)
データ行列計算 データ行列計算 後定 PCA計算	メート・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション・ション	Value TIC	757 747 240 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	レ 箱ひげ回	● ★ ● 表示 ● MSイメージ追加   ④ n	R ✓ ] [[[]] [] [] [] [] [] [] [] [] [] [] [	ROI平均            重 全て計算            計 表 ファイル名            □ Testicle_9AA            □ Testicle_9AA	× MS1X-ジー覧 ● ■ Y-ト ✓ ● 素 ● ■ Y-ト ✓ ● 素 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	★ X (K) (K) (K) (K) (K) (K) (K) (K) (K) (K) (K) (K)
データ行列計算 データ行列計算 ※ 差異解析 確定 時定 PCA計算	メーマングングロック (1) パング・クター・1000 (1) パング・クター・1000 (1) パング・クター・1000 (1) パング・クター・パング・クター・パング・クライズ (1) パング・クライズ (1) パング・クリック (1) パング (1) パング・クリック (1) パング・クリック (1) パング・クリック (1) パング・クリック (1) パング・クリック (1) パング・クリック (1) パング (1) パング・クリック (1) パング (1) パ	Value TIC 77	757 2×94 201 1	<ul> <li>推びげ図</li> <li>▲</li> <li>■</li> <li>■<!--</th--><th>● <u>★</u> ● 表示 ● MSイメージ造加   @ 1</th><th>R ✓ [][[]] [] [] [] m/2機業</th><th>ROI开均            重金で計算            第一条の「子均」            第二条の「子均」            第二条の「子前」            第二条の「子前」<th>× MS1X-ジー覧 ● ● ● ソート × ● 素 ● ● ● ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素</th><th>★ X (示 ∨ ) [K] [K] (図) (温)</th></th></li></ul>	● <u>★</u> ● 表示 ● MSイメージ造加   @ 1	R ✓ [][[]] [] [] [] m/2機業	ROI开均            重金で計算            第一条の「子均」            第二条の「子均」            第二条の「子前」            第二条の「子前」 <th>× MS1X-ジー覧 ● ● ● ソート × ● 素 ● ● ● ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素</th> <th>★ X (示 ∨ ) [K] [K] (図) (温)</th>	× MS1X-ジー覧 ● ● ● ソート × ● 素 ● ● ● ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 素	★ X (示 ∨ ) [K] [K] (図) (温)
データ行列計算 データ行列計算 を 差異解析 後定 PCA計算	メーマングングライズ (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)	Value           TIC           オフ           0	757 2425 2010 2010 2010 2010 2010 2010 2010 20		● 金 ● ● MS1X-ジ造加   @ 1	R ✓ [][[[]]] [] [] m/zi读鼎	ROI平均            重全て計算            計…表ファイル名            回こTesticle.9AA            回こTesticle.9AA            回こTesticle.9AA	× MS1X-ジー覧 ● ● ● ソート × ● 素 ● ● ● リート × ● 素 ■ ● ● ● ● □ リート × ● 素	▼ X (() () () () () () () () () (
データ行列計算 データ行列計算 検定 RC計算 2015日日日日	ズ           解析/(5メ-タ           TIC           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ基準値設定           3         ノーマライズ量小しきい値(%)           4         データ行列開新方法	> Value TIC 77 0 JV9-7	757 7471 24714 22 1	<ul> <li>箱ひげ回</li> <li>私 ー</li> <li>和 別、()</li> <li>-クビッキング</li> </ul>	● 査 Ø 表示 ● MS1メージ造加 Ø 0	k ✓ [Ⅲ] □ G m/ziţm	ROI平均	× MSイメージー見 ● MSイメージ追加 ● ● ● ソート × ● 表 ● ● ● ソート × ● 表 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 表 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 表 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 表 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 表 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 表 ■ ● ● ● ● 1 ソート × ● 表	
データ行列計算 差異解析 後定 PCA計算 PCA計算 PCA記書表示	マーク           TIC           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ基準値設定           3         ノーマライズ基単値設定           5         m/z範囲	Value TIC 77 0 129-97 699.984	757 2404 22 1	<ul> <li>■ 箱ひげ図</li> <li>▲ ▲ ●</li> <li>■ 2</li> <li>■ 3</li> <li>■ 3</li> <li>■ 3</li> <li>■ 3</li> <li>■ 3</li> <li>■ 3</li> <li>■ 4</li> <li>■</li></ul>	● 金 ◆ 表示 ● MS1X-ジ造加 ◎ ロ	t → 1 (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2)	ROI平均	× MSイメージー覧 ● MSイメージ注加 ● ● ● ソート × 学 表 ● ● ● ● ハート × 学 表 ■ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	
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 PCA話集奏示	No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ型準値設定           3         ノーマライズ量小山さい値(%)           4         データ行列側所方法           5         m/2範囲           6<<         許容幅/ピンサイズ (Da)	Value           TIC           Å77           0           J229-37           699.9845           1.0000	757 767 2.40	<ul> <li>箱ひげ回</li> <li>私</li> <li>32</li> <li>32</li> <li>33</li> <li>-クビッキング</li> </ul>	● 金 ● 表示 ● MS1X-ジ造加 ● 0		ROI平均 金石計算 計… 表… ファイル名 二 Testicle_9AA 二 Testicle_9AA	× MSイメージー覧 ● MSイメージ通道 ● ● ● ソート × ● 素 ● ● ● ノート × ● 素 ■ ● ● ● ● 小 / ● ● ● / ト × ● 素 ■ ● ● ● ● / ト × ● 素 ■ ● ● ● / ト × ● 素	
データ行列計算 データ行列計算 を変解析 検定 PCA計算 PCA計算 PCA記書表示	No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ型小山さい塩(%)           4         データ行列県新方法           5         m/2週囲           6         許容塔/ピンサイズ (Da)           7         ラバリング	Value           TIC           オフ           0           ノンターゲ           699.9845           1.0000           オフ	757 767 767 777 767 777 777 777 777 777	<ul> <li>箱ひげ回</li> <li>本</li> <li>2、本</li> <li>3、</li> <li>ワビッキング</li> </ul>	● 金 ◆ 表示 MS{X-ジュニカ ● 0	x → []	ROI平均 金石計算 計… 表… ファイル名 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA	× MSイメージー見 ● MSイメージー見 ● MSイメージ通知 ● ● ● アート ヾ ◆ 本 ● ● ● アート ヾ ◆ 本 ■ ● ● ● アート ヾ ◆ 本	
データ行列計算 データ行列計算 ※ 差異解析 検定 PCA計算 PCA計算表 PCA計算表示 PCA計算表示	No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ           4         データ行列規断方法           5         m/z範囲           6         許容福/ピンサイズ (Da)           7         ラバリング           8         除外リスト	Value           TIC           オフ           0           ノンターゲ           699.9845           1.0000           オフ           オフ           オフ           スク           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ	757 787 787 787 787 787 787 787 787 787	<ul> <li>箱ひげ回</li> <li>私</li> <li>ブレッキング</li> </ul>	● 金 ◆ 表示 MSイメージ追加 ● 0	★ ✓ [] [] [] [] []	ROI平均 全て計算 計表ファイル名 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA	× MSイメージー覧 ● MSイメージー覧 ● MSイメージ追加 ● ● ● アート ヾ ● 本 ● ● ● ● アート ヾ ● 本 ■ ● ● ● ● アート ヾ ● 本	
データ行列計算 データ行列計算 を差異解析 検定 PCA計算 PCA計算 PCA計算 PLS計算	Kither         No.         Name           1         ノーマライズ         1           2         ノーマライズ         2           3         ノーマライズ         1           4         データ行列規断方法         5           5         m/2期囲         6           6         許容幅/2/3サイズ (Da)         7           7         デパソプ         8           8         除外リスト         9           9         Lきい値設定         1	Value           TiC           オフ           0           Jンターゲ           69.9843           1.0000           オフ           47           70           70           71           72           73           74           75           77           77           77           77           77           77           77           77           77	757 787 787 787 787 787 787 787 787 787	<ul> <li>箱ひげ回</li> <li>私</li> <li>フビッキング</li> </ul>	● 筆 ● 表示 ● MSイメージ造加   ④ (	R ✓ [][[]] □ [] m/2換票	ROI平均 金石計算 計表ファイル名 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA	× MSYX-ジー覧 ● MSYX-ジー覧 ● MSYX-ジョ語 ● ● ● ● ソート ヾ ● 素 ● ● ● ● ノート ヾ ● 素 ■ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	
データ行列計算 データ行列計算 検定 検定 PCA計算 PCA計算 PCA計算 PLS計算 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	メロク           第年5/(5メ-ダ)           TC           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ曼単値設定           3         ノーマライズ曼小しきい強(%)           4         データ行列解析方法           5         m/2範囲           6         許容場/ピンサイズ (Da)           7         ラベリング           8         除外リスト           9         しきい協設定	Value           TIC           オフ           0           Jン/9-7           699.9845           1.0000           オフ	757 787 289 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10	<ul> <li>箱ひげ回</li> <li>本</li> <li>フビッキング</li> </ul>	<ul> <li>● 筆 ● 表示</li> <li>● MS4X-ジ島加 ● @ </li> </ul>	TATALA 1 1445 K ✓ [二] □ [ ]	ROI平均 金石計算 計表.、ファイル名 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA 一 Testicle_9AA	× MSYX-ジー覧 ● MSYX-ジー覧 ● MSYX-ジニ思加 ● ● ● ソート ◇ ● ● ■ ● ● ● ● ノート ◇ ● ■ ● ● ● ● ノート ◇ ● ■ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	

### 5.2 PLSパラメータ設定

PLSパラメー	9							×
潜在変数	(の数	● 自動	b b	5 🗸				
前処理		パレートス	ケール	$\sim$				
ROIリスト				<u></u> л	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_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			
				O	実行	)(	キャンセル	)

### 5.3 PLSパラメータ設定

PLSパラメ-	-9				×	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。
潜在変数	なの数 🚺 自	動				"なし":信号強度そのまま
	 ₹i	動	5 🗸			"中心化":ROI間の各m/zの信号強度の平均を0にします。
	Ŭ					"オートスケール":"中心化"に加えて、ROI間の変動の
前処理	パレートス	スケール	$\sim$			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
ROIリスト			+ 1	ンポート	→ エクスポート	スケール"の間になります。
No.	ファイル名	ROI名	属性	Y值		
1	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI001	Group A	0.00000		
2	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI002	Group B	0.00000		目的にしたい数値を"Y値"に入力します。
3	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI003	Group C	0.00000		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。
				実行	++>>セル	

### 5.4 PLSパラメータ設定

LSパラメー	9						:
潜在変数	の数	<b>○</b> 83 ○ 73	ib ib	5 🗸			
前処理		パレートス	マケール	~			
ROIIJスト				+ 1	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	RO1002	Group B	0.00000		
3	Testicle_9AA_PI_	SL_5x_1	RO1003	Group C	0.00000		
				0	実行 <b>A</b> hn		キャンセル

## 5.5 PLS計算



## 5.6 PLS計算



前処理	パレートス	КУ-Л.	~		
ROIリスト		1	+ 1	ンポート	- エクスポ
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	RO1002	Group B	0.00000	
3	Testicle_9AA_PI_SL_5x_1	ROI003	Group C	0.00000	

"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



### 5.9 PLS係数が表示される

			· · ·	ィ・ノ		<u> </u>	. / . / /-	- 씨나 두 -	` J	. [] - [		///////////////////////////////////////	= 1 \$	<u> か 土</u> -	-++1	A
<u>^</u>	ROIJZF	÷			回回の.	,—	`ン1.	רני אין - ר	- / //	//JICI	-LS	ク凹炉	可不安 /	小衣	11011	59 d
画像レジストレーショ	No. 使用 ファイル名 ROI名	属性						<u> </u>		6 **	/ <u>143</u> 10	7 100			*	
,	1 Testicle_9A All	Group A	No. 使	用 タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	Z ROI002	\$ 30 A		- <u>-</u>			<u> </u>	
	2 🗸 Testicle_9A ROI001	Group A	1	<b>~</b>	699.9849-700.9849	700.48	9.412e-0	12654.115	10992.916		10. A 10				A life of small st	>>
	3 🗸 Testicle_9A ROI002	Group B	2	<b>~</b>	700.9849-701.9849	701.48	-2.677e-0	10132.104	9749.542		100				台初名/JX21:	_
ROI設定	4 🗸 Testicle_9A ROI003	Group C	3	<u>~</u>	701.9849-702.9849	702.48	3.737e-0	6875.912	5408.621			12.00	3 ° 2 8			
	5 Testicle_9A ROI004	Group D	4		702.9849-703.9849	703.48	4.043e-0	9623.874	8175.758	Sec.	1.5	0.0		27	イル名: ポート 044 PLCL 5- 4 4PE	A.0.4 -
まとめて解析: 🕕 💿			5		703.9849-704.9849	704.48	8.698e-0	8598.983	6357.625					nd	tticle_9AA_PI_SL_5X_T_ARE ix	AUTI
≫ デ−タ行列			6		704.9849-705.9849	705.48	9.762e-0	11917.976	9338.670		-		a share the state		(-f.	
±.∧.			- /		705.9849-706.9849	705.48	5.505e-0	7367.519	5995.169			9.2.2.2.0	1	211 TIC		_
- <u></u>			9		707 9849-708 9849	708.48	-1.017e-0	6609 303	6343 222		1.00	64 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	1 1 1 A 10			
前処理設定			10		708.9849-709.9849	709.48	-3.990e-0	12658.084	13006.758			A A DEC	es es <del>nor</del> a			
			11		709.9849-710.9849	710.48	-4.291e-0	8936.845	9317.851		1. 1. 1.		a conte de	76		
<u>₩</u>			12		710.9849-711.9849	711.48	-2.446e-0	8555.765	8655.481	Sec. 1			and the second			
50 AU 20			13	× .	711.9849-712.9849	712.48	2.666e-0	6515.152	5488.399				martin .			
制观注			14		712.9849-713.9849	713.48	-3.227e-0	8275.835	7723.166	100 C		1.1.1				
			15		713.9849-714.9849	714.48	-1.281e-0	6949.865	6083.847	8223			and the second			
			16	× .	714.9849-715.9849	715.48	-5.775e-0	6666.396	7309.580	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1						
データ行列設定			17		715.9849-716.9849	716.48	2.779e-0	8706.953	7608.531			19-14 Sta	and the second second		1 情報のコピー	
			18		716 98/9-717 98/9	717.48	-3 7730-0	8626 042	8915.067	1963 B	100			250 µm		
										_						_
			d						<b>-</b> X	( 140 (c) 17 EF						- X
			グラフ						• ×	< MSイメージー覧						+ ×
データ行列計算			グ <del>ラ</del> フ スペクトル	箱ひげ図					• ×	<ul> <li>MSイメージー覧</li> <li>MSイメージー覧</li> </ul>	-ジ追加 👕	0	💽 🖪 y-1		<b>π ∨ [MS]</b> [RE]	- × ≪
			グラフ スペクトル	箱ひげ図		and the		801平均	• ×	< MSイメージー覧 <p>MSイメージー覧</p>	-ジ追加 👕	Q	• • V-	· ∨ _ Ø 表;	<b>π</b> ≻ [85] [85]	<ul><li>★ ×</li><li>≪</li></ul>
	<	>	グラフ スペクトル	箱ひげ図 M	— — — — — — — — — — — — — — — — —	~ <u>1</u>		ROI平均	• ×	< MSイメージー覧 <p>MSイメージー覧</p>	-ジ追加 👔	<b>Q</b>	<ul> <li>使素</li> <li>単 10-1</li> </ul>	ト ✓   ● ◆ 表示 合わせ   日日		• × «
データ行列計算 学 - タ行列計算 ※ 差異解析 ■	< 編析/(ラメーク	>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>	グラフ スペクトル	箱ひげ図 <u>M</u> —		~ <u>ixr</u>		ROI平均	• ×	< MSイメージー覧 <p>MSイメージー覧</p>	-ジ追加 <b>前</b>	(Q m/z		ト 〜 <i>●</i> 表示 含わせ   ==		<ul> <li>×</li> <li>≪</li> </ul>
デ→9行列計算 ※ 差異解析 様定	<u>く</u> 解析/(ラメーク	- x	グラフ スペクトル 日日 1		<ul> <li>● </li> <li>● MSYX-ジ追加</li> <li>● mSYX-ジ追加</li> </ul>	✓ 【 <u>×</u> ¥ /z検索		ROI平均	• ×	< MSイメージー覧 ・ MSイメージー覧 ・ MSイメー ・ Testicle_9AA	-ジ追加 👔	<b>Q</b> (m/z	● ① >-	◆ ◆ 表示 合わせ	示 > [MS] [EF] 四則演算	• × «
<b>子-</b> 夕行列計算 ※ 差異解析 使定	く 解析パラメーク TIC	- ×	Ø∋7 スペクトル			✓ XY /z検索		ROI平均		< MS1X-ジー覧 MS1X- Testicle_9AA	-ジ追加 <b>前</b>	<ul><li><b>⊘</b> m/z</li></ul>	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •	ト 〜 <table-cell> 🛷 表示 合わせ 🔡</table-cell>	示 > [兆] [死]	• × «
<u>デーク行列計算</u> ※ 変異解析	く 解析パラメーク <b>TIC</b> No. Name	× ×	Ø57 スペクトル	箱ひげ図	● <u>★</u> ◆ 表示 ● MSイメージ追加 @ m	✓ Lxx /z検索		ROI平均	<ul> <li>× ×</li> <li>ジーンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェンジェン</li></ul>	< MSイメージー覧 ● MSイメージー覧 「 Testicle_9AA」	-538.20 🗑	<ul><li><b>⊘</b> m/z</li></ul>	● • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	ト V Ø 表が 含わせ 日間 (		• × «
デージ行列計算 ※ 変異解析 ● 変異解析 ● 変異解析 ● 変異解析 ● 変異解析 ● のの計算	く 解析パラメータ <b>TC</b> No. Name 1 ノーマライズ	Value TIC	ЙЭ7	箱ひげ図	● MSイメージ追加 @ m	✓ <u>!x</u> /z検索		ROI平均	→ × → → → → → → → → → →	MS1X-37-92 MS1X-37-92 Testicle_9AA	-558/2011	<b>Q</b> m/z		▶ ✓ ● 表示 ≩わせ = == (		~ × «
データ行列計算 ※ 変異解析 構定 PCA計算	く 解析/(5メ-ク TIC No. Name 1 ノーマライズ 2 ノーマライズ集準値設定	Value TIC 77	757 2X9HL 22 4	<b>箱ひげ図</b> <b>A</b> <b>A</b> アビッキング	● MSイメージ追加 @ m	✓ 批: /z検索		ROI平均	× × +III 771/J-4 Testicle_9AA Testicle_9AA Testicle_9AA	MSイメージー発 MSイメージー発 で Testide_9AA の の の の の の の の の の の の の の の の の の	-558/20	<b>e</b>	<ul> <li>(2) 2 &gt;-1</li> <li>(4) 2 &gt;-1</li> <li>(4) 2 &gt;-1</li> <li>(5) 2 &gt;-</li></ul>	▶ ✓ ● 表示 ≩わせ = == (	示 > <u></u> (15) [15] 四別演算	~ × «
データ行列計算 ※ 変異解析 後定 PC計算	メート・マングングロック (100 mm) オンジェンジョン (100 mm) オンジョン (	→ × Value TIC オフ 0	757 XX9HL 2X	<b>箱ひげ図</b> <b>ス</b> 	● <u>★</u> ● MSイメージ追加 @ m	✓ 述 /2検索		ROI平均           罰 全てI           計. 表現           圓 []           圓 []           圓 []	→ × × × × × × × × × × × × × ×	MS1X-37-32 MS1X-37-	-538.20	• m/z	<ul> <li>●</li> <li>●</li> <li>■</li> <li>■</li></ul>	ی ۱۹۹۵ کی ایک ایک ایک ایک ایک ایک ایک ایک ایک	示 > <u> た</u> <u> </u> 回則演算	~ × «
データ行列計算 ※ 変異解析 後定 PCA計算 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	マーク           TC           No.           1           ノーマライズ           2           ノーマライズ型単値設定           3           ノーマライズ型小山さい値(%)           4           デーダ「空別単形方法	✓ X      ✓ Value      TIC	757 28941 28941 28941 28941 28941 28941 28941 29941 20000000000	箱ひげ図	<ul> <li>● 数 ● 表示</li> <li>● MSイメージ追加 ● m</li> </ul>	ン 注葉 た検索		R0I平均           面 全て1           計 表           面 [           面 [           面 [	→ × → → → → → → → → → →	MS1X-Y-Y MS1X-Y-Y Testicle_SAA	-538.20	m/z	<ul> <li>●</li> <li>●</li> <li>●</li> <li>■</li> <li>■</li></ul>	ی ۱۹۹۵ کی ۱۹۹۵ کی		~ × «
プー9行列計算 ※ 変異解析 建定 PCA計算 PCA記集表示	No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ最小しきい値(%)           4         データ行列規断方法           5         m/2期間	Value TIC 77 0 17/9-7 699.984	7777 X 47 FW 2 40 F	箱 <b>ひげ図</b>	<ul> <li>● 数</li> <li>● 数</li> <li>● MSイメージ追加</li> <li>● m</li> </ul>	✓ 注义 /2検索		R01平均		MS1X-Y-E MS1X-Y-E Testicle_9AA	-938/20	m/z	● ● ■ y-1	<ul> <li>ダ 表がせ</li> <li>部のせ</li> </ul>		- × «
<b>デーク行列計算</b> ◆ 変異解析 ● 変異解析 ● 変更 ● 変更 ● の品書類 ● CAR目表示	No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ           3         ノーマライズ           5         加く超用           6         防空国がっせズ (Da)	Value           TIC           オフ           0           Jンターゲ           699.984           10000	737 240 HU 2011 1	箱 <b>ひげ図</b>	<ul> <li>● 数 ● 表示</li> <li>● MSイメージ追加 ● m</li> </ul>	✓ Ⅲ /z検索		ROI平均		MSイメージー見 MSイメージー見 で、MSイメージー Testicle_9AA Tic	-75820		● ④ ■ y-1 検索 ● 重ね	<ul> <li>ダ表</li> <li>約世</li> </ul>		~ × «
プーク行列計算 ※ 変異解析 検定 PCA前類 PCA前果表示	メーク           第57/(5メ-ク)           TC           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ量/位置単位設定           3         ノーマライズ量小しきい値(%)           4         データ行列)第5万法           5         m/2範囲           6         許容幅(どンサイズ (Da)           2         マニーションパング	Value           TIC           オフ           0           Jンターゲ           699.9845           1.0000           +7	757 スペクトル 日日 スペクトル	箱ひげ図	<ul> <li>● 然イメージ追加</li> <li>● MSイメージ追加</li> </ul>	//////////////////////////////////////		R0(平均		MSイメージー見 MSイメージー見 でMSイメージー見 Testicle_9AA Ticsticle_9AA Tic	-75200	(0 m/z	● ● ● ソ-1 検索 ● 重ねが	<ul> <li>         ・          ・          ・</li></ul>		~ × «
デーク行列計算 ※ 変異解析 検定 PCA新算 PCA新算表示	メーク           Trc           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ           3         ノーマライズ最小しきい値(%)           4         データ行列)解析方法           5         m/z範囲           6         許容幅/どンサイズ (Da)           7         ラバリング	✓ Value TIC 7.7 8.77 0 1.79-7 699.984 1.0000 7.7 4.7	7777 XX95H/ 2 & 1 8 1 8 1 8 2 -	箱ひげ図	● MSイメージ追加 @ m	//////////////////////////////////////		ROI平均           首 全讧           計:: 奏           面 [[]           面 [[]	- X	MS1X-37-32 MS1X-37-	-53820	m/z	<ul> <li>● ● 重ね</li> </ul>	ي الح		~ × «
<b>デーク行列計算</b> ※ 室東解析 様定 PCA計算 PCA記具表示 PLS計算	メロック           Trc           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ基準値設定           3         ノーマライズ基単値設定           3         ノーマライズ基単位設定           5         m/z範囲           6         許容福/ピンサイズ (Da)           7         ラバリング           8         除外リスト	► × Value TIC 77 0 1/>9-9/ 699.984 1.0000 77 77 77 77 77	7777 X<91-W	箱ひけ図 <u>A</u> 		//////////////////////////////////////		ROI平均           面 全讧           計, 表           面 []           面 []	- X	< MS1X-Y-Y MS1X-Y-Y MS1X-Y-Y Testicle_9AA Testicle_9AA Tic	-55820	m/z	<ul> <li>●</li> <li>●</li> <li>●</li> <li>■</li> <li>■</li></ul>	ي الح	示 ✓ < < < < < < < < < < < < < < < < < <	~ × «
<b>デーク行列計算</b> ※ 変異解析 単定 ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	メログロング           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           5         パン都囲           6         許容幅/ビンサイズ (Da)           7         ラベリング           8         除外リスト           9         」さい値設定	Value           TIC           オフ           0           Jンターガ           699.984           1.0000           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           イフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ           オフ	7777 X 479HU	精ひけ図 <u> ん</u>	<ul> <li>● 数</li> <li>● MSイメージ活動</li> <li>● m</li> </ul>	✓ 述: /z续带		ROI平均           罰 全讧           計要           面 [           面 [           面 [	→ × × ± = 77/JL4 = Testicle_9AA = Testicle_9AA	< MS1X-Y-Y MS1X-Y-Y Testicle_9AA	-55820	• m/z	<ul> <li>●</li> <li>●</li> <li>●</li> <li>■</li> <li>■</li></ul>	<ul> <li>         ・          ・          ・</li></ul>		~ × «
<b>デーク行列計算</b> ※ 差異解析 検定 PCA計算 PCA記書表示 PLS計算	ズ           解析/(5メ-9)           TIC           No.         Name           1         ノーマライズ           2         ノーマライズ最小しさい値(%)           4         データ行刃解析方法           5         m/z範囲           6         許容幅/どンサイズ (Da)           7         ラバリング           8<         除外リスト           9         しさい値設定	Value           TIC           377           0           1.0000           477           477           477           477           477           477           77           77           77           77	7777 X < 279 HU	箱ひげ図	<ul> <li>● 業</li> <li>● MSイメージ追加</li> <li>● m</li> </ul>	✓ 述: /2枝带			→ × × × × × × × × × × × × × ×	< MS1X-Y-R MS1X-Y-R Testicle_9AA	-55820		<ul> <li>●</li> <li>●</li> <li>●</li> <li>■</li> <li>■</li></ul>	<ul> <li>◆ 表</li> <li>◆ 表</li> <li>◆ 表</li> <li>◆ 表</li> </ul>		• × «

# 5.10 データ行列テーブル内PLS係数

ゴーム公司のは	= <del>-</del> 711			LS 示致	インリ	77950	2 - r	21159	• • • ×
7-211293	<i>F</i> - <i>J</i> ]V							⊇ —	
No.	使用	タグ	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	ROI002	ROI003	
1	~		699.9849-700.9849	700.4849	9.418e-005	12654.115	10992.916	13195.851	
2	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		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	~		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

ブルの"DIC仮粉"たクリックナフレン しとわとナ

### 5.11 ソートされたPLS係数

カイニカルコ	î II	上位	立いくつかを選択	えして、	右クリ	ックして	て m/zタ	ッグ付け	を選択
71777	-710							<u>_</u>	
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	~		795.9849-796.9849	796.4849	-3.7(9e-004	561465.069	629022.646	461295.998	
68	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		766.9849-767.9849	767.4849	-2.68 7e-004	89399.480	105269.241	81336.045	
187			885.9849-886.9849	886.4849	<b>1</b> <sup>2</sup> '-		158	157633.888	
158	~		856.9849-857.9849	857.4849	J ===	2-	002	50724.988	
99	~		797.9849-798.9849	798.4849	-1.9 m/zタグ	付け	598	59309.121	
159	~		857.9849-858.9849	858.4849	-1.9 ROI97	ma tip	<b>)43</b>	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f	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	<b>R</b>	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	
	_								$\sim$

## 5.12 タグ付け

≓.	-夕行列号	=_ブル								<b>•</b> )
	/11/1/	210							⊇	
	No.	使用	9Ú	ラベル	m/z	PLS係数 ≜	ROI001	ROI002	ROI003	<u>^</u>
	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			795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-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 +7 -	もたみたい	32 + 🗆 5.158	157633.888	
	158	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		856.9849-857.9849	857.4849	-2.54 好る	さな巴を調	些/仄 <mark>3.002</mark>	50724.988	
	99	~		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	~		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	~		768.9849-769.9849	769.4849	-1.609e-004	23381.429	26532.236	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	<b>~</b>		862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319	6956.502	
	156	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	~		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282	
	160	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821	
										v

### 5.13 タグ付け

デ	タ行列ラ	テーブル	選折	した行のタグに	選択し	、た色が	表示され	ます	Θ	• • •
	No.	使用	9Ű	ラベル	m/z	PLS係数 🔺	ROI001	RO1002	ROI003	_
	186			884.9849-885.9849	885.4849	-4.1 6e-004	52242.364	91789.399	285789.467	
	96	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		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	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		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	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		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	<ul> <li>Image: A set of the set of the</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	~		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	
		_								$\sim$

### 5.14 MSイメージ追加

デ	-夕行列テ	ーブル							Q —	• ×	
	No.	使用	9 <i>1</i>	ラベル	m/z	PLS係数 🔺	<b>ROI001</b>	RO1002	RO1003		
	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 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	34/27 1133/3		10/000/000		
	158	Image: A start of the start		856.9849-857.9849	857.4849	□Ľ-		02	50724.988		
	99	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		797.9849-798.9849	798.4849	-1.93 JACI	1Ľ-	98	59309.121		
	159	<b>~</b>		857.9849-858.9849	858.4849	-1.90 m/z90	7付け	43	35450.414		
	98	×		796.9849-797.9849	797.4849	-1.8 MS ( )	Ind Ind	97	185697.615		
	69	<b>~</b>		767.9849-768.9849	768.4849	-1.68 HOG	母/効果量の活動に動	9定する 86	43954.920		
	70	×		768.9849-769.9849	769.4849	-1.60 m/z検		36	24099.820		
	188	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		886.9849-887.9849	887.4849	-1.588e-004	19271.791	25189.4 <mark>51</mark>	82594.137		
	184	<b>~</b>		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	<ul> <li>Image: A set of the set of the</li></ul>		740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	15886.282		
	160	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		858.9849-859.9849	859.4849	-8.150e-005	13012.774	14481.379	19711.821	~	
										Ý	

### 5.15 MSイメージ追加



### 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	げ		1 差	異解析	C:¥U	sers¥yamac¥Dropbox (株式会社	上島津製作所)	¥Yamaguchi_dat	ta¥demo_data_eto	¥DemoData¥IMDX¥f	for_wel	b_material_001.rpf* - IMAGEREVEAL	_ @ ×	
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	ROIUZ	F			Ŧ	データ行列	テーブル							• ×	MSイメージ	• x	
画像レジストレーショ	No.	使用	ファイル名	ROI名	属性									Ð		*	
	1	Т	esticle_9A	All	Group A	No.	使用	97	ラベル	m/z	PLS係数	ROI001	RO1002			-	
	2	🗸 Т	festicle_9A	ROI001	Group A	186	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		884.9849-885.9849	885.4849	-4.106e-004	52242.364	91789.399			» (n+ <sup>6</sup> ±m+#, >>	
POIE	3	🗸 Т	festicle_9A	ROI002	Group B	96	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		794.9849-795.9849	795.4849	-3.880e-004	1029824.289	1145936.176			886.48492±0.5000	
	4	🗸 Т	festicle_9A	ROI003	Group C	97			795.9849-796.9849	796.4849	-3.709e-004	561465.069	629022.646		and the second secon	化会物をついた。	
	5	T	esticle_9A	ROI004	Group D	187			766.9849-767.9849	886.4849	-2.665e-004	34271,553	51295,158			885.9849-886.9849	
						158			856.9849-857.9849	857.4849	-2.542e-004	35594.351	44503.002			ファイルタ・	
						99			797.9849-798.9849	798.4849	-1.935e-004	73407.900	86617.698			Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA01.i	
📥 🛛						159			857.9849-858.9849	858.4849	-1.902e-004	21195.334	27205.043		the second s	mdx	
前処理設定						98	Image: A state of the state		796.9849-797.9849	797.4849	-1.869e-004	237984.460	263831.297			タイプ:	
						69			767.9849-768.9849	768.4849	-1.688e-004	48100.708	54925.786			データ行列	
<u>*A</u>						188			886 9849-769.9649	887 4849	-1.509e-004	20001.429	25189.451				
						184			882.9849-883.9849	883.4849	-1.575e-004	30225.061	33169.702		and the second	8	
則処埋						164			862.9849-863.9849	863.4849	-1.199e-004	7421.796	9826.319				
						156	<ul> <li>Image: A second s</li></ul>		854.9849-855.9849	855.4849	-1.084e-004	8363.467	9994.458				
						67			765.9849-766.9849	766.4849	-1.057e-004	23124.307	24718.153				
データ行列設定						42			740.9849-741.9849	741.4849	-8.297e-005	7289.580	8878.510	$\sim$			
						< ==											
						グラフ				F		11-3	之/日	ì	hZm/70MS/X-	ジが作成される	= 1 +-
データ行列計算						7.00	LII @	±71.(+Î172)			\UI -		> 丶 元	<u>- ۲</u> ر		> J IFIX C 102	よした
≫ 差異解析						2/10	א ערז	800 A		- N	VS1	( メ –	- ~~ 1-	±.	同じ色の々グが付いて	ています	
						器	٨.	_			101		~ VC	0			
<b>1</b>	477 + 5 1 ( 3	= 1 /2			• X												
検定	8±0174.	),,					ш	Ш	🖯 MSイメージ追加 🛛 🥥 m/:	:検索		±	: (計算.	_	Testicle QAA DI SL Ev 1 APEA01 instr		
		TIC										言+	表 ファイル名				
# <u>*</u>	No	. Name			Value	Ň	ピークビッ	キング					Testicle_9AA	Α			
PCA計算		1 ノーマライ	ぼ		TIC								Testicle_9AA	Α			
1 50 101 37		2 /-マライ	(ズ基準値設定	Ê	77								Testicle_9AA	Α		100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100 - 100	
		3 ノーマライ	イズ最小しきい	値(%)	0										766 0840-767 0 704 0840-705 0 705 0840-706 0 884 0840-	85.0 885.0840-886.0	
		4 データ行	列解析方法		ノンターゲ										767.48492 795.48492 796.48492 885.48492	886.48492	
PCA結果表示		5 m/z範囲	E		699.9849												
		6 許容幅	/ピンサイズ (Da	a)	1.0000												
		7 ラベリン	Ŋ		オフ												
PLS計算		8 除外リフ	<u>۲</u> ト		77												
		9 しきい値	設定		77										TIC		
			-														
PLS結果表示	< =	_	_	_	>							<	>	>			