

切片内の局在を知りたい

例

1. 切片上でどんな成分がどんな分布をしているか
2. 既知の局在と共局在する成分はなにか
3. 各画素を指定した数に分類したい

例

1. 切片上でどんな成分がどんな分布をしているか
2. 既知の局在と共局在をする成分はなにか
3. 各画素を指定した数に分類したい

手順

1. “画像解析”を選択
2. データ読み込み
3. 必要があればROI設定
4. データ行列テーブル計算
5. 画像分類

1. “画像解析”を選択

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. A central dialog box titled "解析手法の選択" (Select Analysis Method) is open, listing several analysis options. The "画像解析" (Image Analysis) option is highlighted with a yellow border and a mouse cursor. The background interface includes a sidebar with various tool icons, a main workspace with a dark image, and a right-hand panel with input fields for parameters like "m/z±許容幅" and "化合物名/コメント".

解析手法の選択

- プロジェクトファイルを開く
- 新規プロジェクト
 - 差異解析
 - 画像解析**
 - 定量解析
 - スクリーニング
 - スクリーニング (定量)

2. データファイル (.imdx)を追加

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The left sidebar contains a menu with the option "IMDXファイルを追加" (Add .imdx file) highlighted in a yellow box. The main window is divided into several panels:

- ROIリスト** (ROI List): A table with columns for No., 使用 (Usage), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), and データ点数 (Data Points).
- データ行列テーブル** (Data Matrix Table): A table with columns for No., 使用 (Usage), 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), and 極性 (Polarity).
- MSイメージ** (MS Image): A panel showing a dark image and associated parameters such as m/z±許容幅 (m/z±Tolerance), 化合物名/コメント (Compound Name/Comment), アダクトイオン (Adduct Ion), ファイル名 (File Name), and タイプ (Type).
- グラフ** (Graph): A panel with various controls and a table for peak picking results.
- MSイメージ一覧** (MS Image List): A panel with controls for adding, deleting, and sorting MS images.
- 解析パラメータ** (Analysis Parameters): A section for "ノーマライズ未計算" (Not Normalized) with a table for No., Name, and Value.

3. 必要があればROIを設定します

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with 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), データ点数 (Data Points).

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns: No., 使用, 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), 極性 (Polarity).
- MSイメージ (MS Image):** A large color-coded mass image with a 250 μm scale bar. Metadata on the right includes: 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 (Graph):** A mass spectrum plot titled "Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.mdx Whole_Ave." showing Intensity vs. m/z. Key peaks are labeled with their m/z values: 721,482, 744,540, 767,492, 793,521, 793,524, 793,524, 811,514, 837,539, and 885,538.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images with a thumbnail and the label "TIC".
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A section for "ノーマライズ未計算" (Normalization not calculated).
- Left Panel:** A vertical toolbar with icons for file operations, image settings, ROI settings (highlighted with a yellow box and a hand cursor), and data processing.

3.1 ツールを選択してROIを描きます

四角、丸、多角形でROIを描写できます。

ROI設定

IMDXファイル Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.imdx 参照画像 Reference Image 1

MS REF

インポート エクスポート

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
1	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA_PL_SL_5x_1...	All	Group A	

MSイメージ

ROI表示設定

透明度

ラベル 表示する

OK キャンセル

3.2 ROIリストに記載されます

ROIを描いたあとに属性を設定します。

The screenshot displays the 'ROI設定' (ROI Setting) window. The main image area shows a blue-toned image with a red ROI outline. The right panel contains settings for '参照画像の設定' (Reference Image Settings) and 'MSイメージ設定' (MS Image Settings). The 'ROIリスト' (ROI List) table on the right shows two entries, with the second entry highlighted in green.

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	Center	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1...	ROI001	Center	

4. データ行列計算の”前処理”の設定

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The sidebar on the left contains several icons, with the '前処理設定' (Pre-processing Settings) icon highlighted by a yellow box and a mouse cursor. The main workspace 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), データ点数 (Data Points).

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
- 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), 極性 (Polarity).
- MSイメージ (MS Image):** A large color-coded mass image with a 250 μm scale bar. Metadata on the right includes: 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 (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.mdx Whole_Ave.' showing Intensity vs. m/z. The x-axis ranges from 700 to 900 m/z, and the y-axis ranges from 0E+00 to 2E+06. Several peaks are labeled with their m/z values: 721,482, 744,540, 767,492, 793,521, 793,524, 793,524, 811,514, 837,539, and 885,538.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images, with 'Testicle_9AA_PL...' selected.

The '前処理設定' (Pre-processing Settings) window is currently open, showing options for 'ノーマライズ未計算' (Normalization not calculated) and a table for '解析パラメータ' (Analysis Parameters).

4.1 前処理（ノーマライズ）の設定



“ノーマライズ”の基準を設定します。
TICが一般的です。

4.2 データ行列の設定

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with the following components:

- Left Sidebar:** A vertical menu with icons for file operations, image settings, and data processing. The 'データ行列設定' (Data Matrix Settings) icon is highlighted with a yellow box and a hand cursor.
- 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), データ点数 (Data Points).

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
- 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), 極性 (Polarity).
- MSイメージ (MS Image):** A heatmap visualization of the mass spectrum data. A color scale is visible on the right. Metadata on the right includes: 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 (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx Whole_Ave.'. The x-axis is m/z (700-900) and the y-axis is Intensity (0E+00 to 2E+06). Major peaks are labeled with their m/z values: 721,482, 744,540, 767,492, 793,521, 793,524, 793,524, 811,514, 837,539, and 885,538.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images with a thumbnail and the label 'TIC'.

4.3 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

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。

4.4 データ行列の計算

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The main window is titled '画像解析 | No Title* - IMAGEREVEAL'. The interface is divided into several panels:

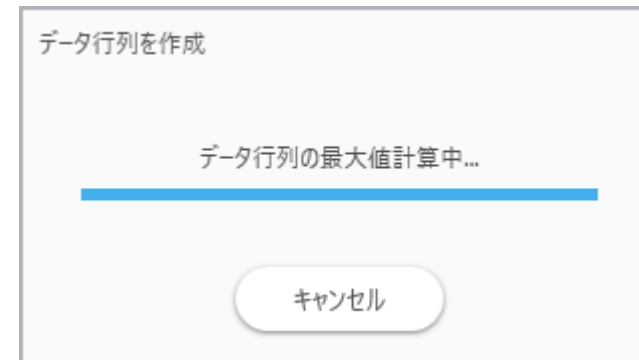
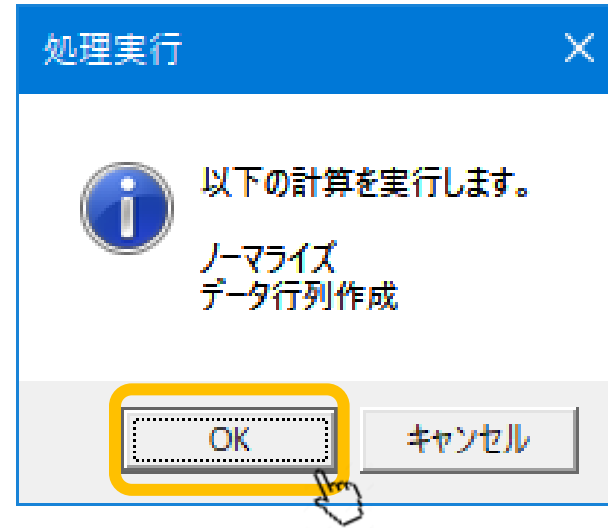
- ROIリスト (ROI List):** A table with columns 'No.', '使用', 'ファイル名', 'ROI名', and 'データ点数'. It contains one entry: No. 1, 使用 (checked), Testicle_9A..., ROI名 All, and データ点数 62500.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns 'No.', '使用', 'タグ', 'ラベル', 'm/z', '組成式', 'アダクトイオン', 'マトリックス', and '極性'. It is currently empty.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap 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_5x_1_AREA01.i.mdx, 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'.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.mdx Whole_Ave.'. The x-axis is 'm/z' (700-900) and the y-axis is 'Intensity' (0E+00 to 2E+06). Several peaks are labeled with their m/z values: 721,482, 744,540, 767,492, 793,521, 793,524, 793,524, 811,514, 837,539, and 885,538.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A section for 'ノーマライズ未計算' (Not normalized calculation) with a table for 'No.', 'Name', and 'Value'.

A central dialog box titled '処理実行' (Processing Execution) is displayed, containing the message: '以下の計算を実行します。データ行列作成' (Execute the following calculation. Data matrix creation). The dialog has 'OK' and 'キャンセル' (Cancel) buttons. A hand cursor is pointing at the 'OK' button.

On the left sidebar, the 'データ行列計算' (Data Matrix Calculation) icon is highlighted with a yellow box and a hand cursor, indicating the current step in the workflow.

4.5 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。



4.6 データ行列計算完了

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table with columns: No., 使用 (checked), ファイル名 (Testicle_9A...), ROI名 (All/ROI001), データ点数 (62500/61254).
- データ行列テーブル (Data Table):** A table with columns: No., 使用 (checked), タグ, ラベル, m/z, ROI001. It lists 18 rows of data with m/z values ranging from 699.9849 to 703.3849.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap showing intensity distribution. Metadata on the right includes: 化合物名/コメント: TIC, ファイル名: Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx, タイプ: TIC.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled "Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx Whole_Ave." showing intensity vs m/z. Key peaks are labeled at m/z 721.482, 744.540, 767.492, 795.521, 796.524, 811.514, 837.539, and 885.538.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table with 7 rows of parameters:

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	なし
2	データ行列解析方法	ノンターゲット
3	m/z範囲	699.9849
4	許容幅/ピンサイズ (Da)	0.2000
5	ラベリング	オフ
6	除外リスト	オフ
7	しきい値設定	オフ

5. “画像分類”を選択

The screenshot shows the IMAGEREVEAL software interface with the following components:

- Left Sidebar:** A vertical menu with icons for file operations, image settings, and analysis. The '画像分類計算' (Image Classification Calculation) icon is highlighted with a yellow box and a mouse cursor.
- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROI information.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing peak data with columns for No., 使用 (Used), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, and ROI001.
- MSイメージ (MS Image):** A large color-coded mass image with a 250 μm scale bar. Metadata on the right includes: 化合物名/コメント: TIC, ファイル名: Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx, タイプ: TIC.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx Whole_Ave.' showing intensity vs m/z. Key peaks are labeled at m/z 721.482, 744.540, 767.492, 795.521, 796.524, 811.514, 837.539, and 885.538.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller view of the MS image with a TIC label.
- Bottom Panel:** '解析パラメータ' (Analysis Parameters) table and a file selection area.

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	61254

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001
1	✓		699.9849-700.1849	700.0849	6341.196
2	✓		700.1849-700.3849	700.2849	16757.443
3	✓		700.3849-700.5849	700.4849	38292.827
4	✓		700.5849-700.7849	700.6849	2880.231
5	✓		700.7849-700.9849	700.8849	2776.375
6	✓		700.9849-701.1849	701.0849	7521.977
7	✓		701.1849-701.3849	701.2849	20404.030
8	✓		701.3849-701.5849	701.4849	28908.854
9	✓		701.5849-701.7849	701.6849	2518.149
10	✓		701.7849-701.9849	701.8849	2329.254
11	✓		701.9849-702.1849	702.0849	5823.114
12	✓		702.1849-702.3849	702.2849	15118.571
13	✓		702.3849-702.5849	702.4849	15825.690
14	✓		702.5849-702.7849	702.6849	1892.297
15	✓		702.7849-702.9849	702.8849	1821.811
16	✓		702.9849-703.1849	703.0849	7263.296
17	✓		703.1849-703.3849	703.2849	18872.587
18	✓		703.3849-703.5849	703.4849	23395.261

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	なし
2	データ行列解析方法	ノンターゲット
3	m/z範囲	699.9849
4	許容幅/ピンサイズ (Da)	0.2000
5	ラベリング	オフ
6	除外リスト	オフ
7	しきい値設定	オフ

5.1 画像分類パラメータ

画像分類パラメータ

クラスター数 自動 手動 5

クラスター間距離 ウォード法

個体間距離 ユークリッド距離

m/z範囲 700.08492 - 899.88492 Da 自動設定

データ点数間引き なし

実行 キャンセル



自動的にクラスター数を決めたい場合は“自動”を、
沢山のクラスターが欲しい場合は“手動”
を選択して数を設定してください。

5.2 計算中ダイアログ



5.3 画像分類結果

画像分類結果

m/z 700.08492 検索

クラスター平均MSイメージ

クラスター-詳細

読み込むサムネイル数 10

ファイル名	化合物名	m/z	強度
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		888.48492	7657.47062
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		753.48492	6184.03658
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		713.28492	5987.04237
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		753.28492	4131.06866
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		772.48492	3341.00146
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		713.48492	2579.94697
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		888.68492	1805.01981
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		887.88492	1295.55710
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		888.08492	1286.63526
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		772.68492	879.42355

選択したクラスターに含まれるm/z

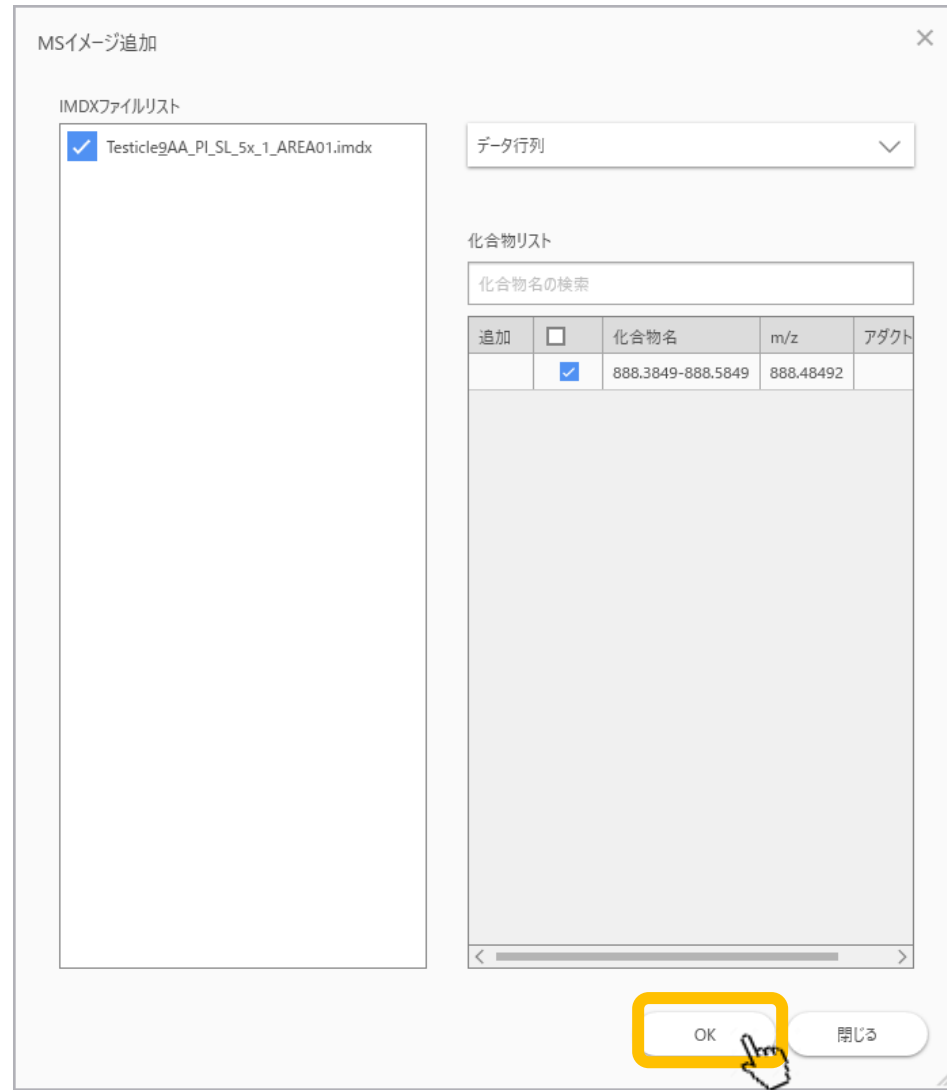
各クラスターの平均像

MSイメージ一覧に追加

閉じる

リスト内のm/zを選択、“MSイメージ一覧に追加”ボタンを押すとメインの画面の“MSイメージ一覧”に追加されます。

5.4 MSイメージをメイン画面に追加



5.5 “画像分類”内のイメージが追加される

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- ROIリスト (ROI List):** A table listing ROI information.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table showing peak data for ROI001.
- MSイメージ (MS Image):** A large image showing a mass spectrometry image with a 250 μm scale bar. Metadata on the right includes:
 - m/z許容幅: 889.48492±0.1000
 - 化合物名/コメント: 889.3849-889.5849
 - ファイル名: Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx
 - タイプ: データ行列
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled "Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx Whole_Ave." showing intensity vs m/z with peaks at 721.482, 744.540, 767.492, 795.521, 796.524, 811.514, 837.539, and 885.538.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images, with "Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.i.mdx" highlighted.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of analysis settings.

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
2	✓	Testicle_9A...	ROI001	61254

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001
1	✓		699.9849-700.1849	700.0849	6341.196
2	✓		700.1849-700.3849	700.2849	16757.443
3	✓		700.3849-700.5849	700.4849	38292.827
4	✓		700.5849-700.7849	700.6849	2880.231
5	✓		700.7849-700.9849	700.8849	2776.375
6	✓		700.9849-701.1849	701.0849	7521.977
7	✓		701.1849-701.3849	701.2849	20404.030
8	✓		701.3849-701.5849	701.4849	28908.854
9	✓		701.5849-701.7849	701.6849	2518.149
10	✓		701.7849-701.9849	701.8849	2329.254
11	✓		701.9849-702.1849	702.0849	5823.114
12	✓		702.1849-702.3849	702.2849	15118.571
13	✓		702.3849-702.5849	702.4849	15825.690
14	✓		702.5849-702.7849	702.6849	1892.297
15	✓		702.7849-702.9849	702.8849	1821.811
16	✓		702.9849-703.1849	703.0849	7263.296
17	✓		703.1849-703.3849	703.2849	18872.587
18	✓		703.3849-703.5849	703.4849	23395.261

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	なし
2	データ行列解析方法	ノンターゲット
3	m/z範囲	699.9849
4	許容幅/ピンサイズ (Da)	0.2000
5	ラベリング	オフ
6	除外リスト	オフ
7	しきい値設定	オフ

5.6 画像分類内の検索

興味のあるm/zがある場合、それがどのクラスタに含まれるか検索できます。

画像分類結果

m/z 700.08492 検索

クラスタ-平均MSイメージ

クラスタ-詳細

ファイル名	化合物名	m/z	強度
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		888.48492	7657.47062
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		753.48492	6184.03658
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		713.28492	5987.04237
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		753.28492	4131.06866
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		772.48492	3341.00146
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		713.48492	2579.94697
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		888.68492	1805.01981
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		887.88492	1295.55710
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		888.08492	1286.63526
Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREA0...		772.68492	879.42355

MSイメージ一覧に追加

閉じる

5.7 画像分類内の検索結果

画像分類結果

m/z 700.08492 検索

検索したm/zが含まれるクラスタにフォーカスが移動します。

クラスター平均MSイメージ

読み込むサムネイル数 10

ファイル名	化合物名	m/z	強度
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		829.68492	619.5602
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		853.08492	640.8681
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		847.68492	685.2169
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		815.08492	728.0568
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		814.08492	760.9092
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		785.08492	804.1476
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		784.08492	806.2186
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		873.68492	820.4018
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		789.08492	838.8988
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		802.08492	870.7487
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		716.08492	893.3790
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		803.08492	908.2578
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		763.08492	943.0532
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		720.08492	970.2610
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		736.08492	1012.4763
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		745.08492	1014.4589
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		741.08492	1032.7175
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		737.08492	1085.3102
Testicle_9AA_PI_SL_5x_1_AREA0...		771.08492	1087.7045

MSイメージ一覧に追加

閉じる