

セグメンテーション

セグメンテーション

- 各画素を指定したクラス数に分類します。
- 画像解析 の中の一機能です。

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. セグメンテーション
 1. 前処理あり (UMAP + k-means)
 2. 前処理なし (k-means)

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 vertical menu of icons, with the top icon labeled "IMDXファイルを追加" (Add .imdx file) highlighted by a yellow box and a hand cursor. The main workspace is divided into several panels:

- 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), データ点数 (Data Points).
- 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), 極性 (Polarity).
- MSイメージ (MS Image):** A large dark area representing the mass spectrum, with a sidebar on the right containing input fields for: 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). A "情報のコピー" (Copy Information) button is at the bottom.
- グラフ (Graph):** A panel with various controls including "ROI平均" (ROI Average), "全て計算" (Calculate All), and "ピークピッキング" (Peak Picking).
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A panel with controls for "MSイメージ追加" (Add MS Image), "ソート" (Sort), "表示" (Display), "m/z検索" (m/z Search), "重ね合わせ" (Overlay), and "四則演算" (Arithmetic Operations).
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A section titled "ノーマライズ未計算" (Normalization Not Calculated) with a table with columns: No., Name, 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. The left sidebar contains a vertical menu of icons, with the 'ROI設定' (ROI Setting) icon highlighted by a yellow rectangle and a mouse cursor. The main workspace is divided into several sections:

- ROIリスト (ROI List):** A table with columns for No., 使用 (Use), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), and データ点数 (Data Points). It contains one entry: No. 1, 使用 checked, ファイル名 Testicle_9A..., ROI名 All, データ点数 62500.
- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns for 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), and 極性 (Polarity). It is currently empty.
- MSイメージ (MS Image):** A large panel showing a color-coded mass image. A small dark spot is visible. To the right, a metadata panel shows: 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. A '情報のコピー' (Copy Information) button is at the bottom.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.imdx Whole_Ave.'. The x-axis is m/z (700-900) and the y-axis is Intensity (0E+00 to 2E+06). A prominent peak is labeled at m/z 799.521. Other labeled peaks include 721.482, 744.540, 767.492, 799.524, 811.514, 837.539, and 885.538.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A panel showing a list of MS images with a small thumbnail of the current image and the label 'TIC'.

At the bottom left, the '解析パラメータ' (Analysis Parameters) section shows 'ノーマライズ未計算' (Normalization not calculated) and an empty table with columns No., Name, and Value.

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

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。

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.i.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 a '解析パラメータ' (Analysis Parameters) section with a 'ノーマライズ未計算' (Normalization not calculated) button. The 'グラフ' (Graph) panel also shows a 'ピークピッキング' (Peak Picking) button and a table of peak data.

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 data matrix. 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.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

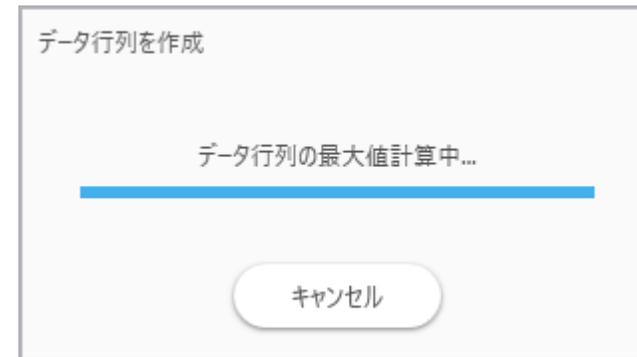
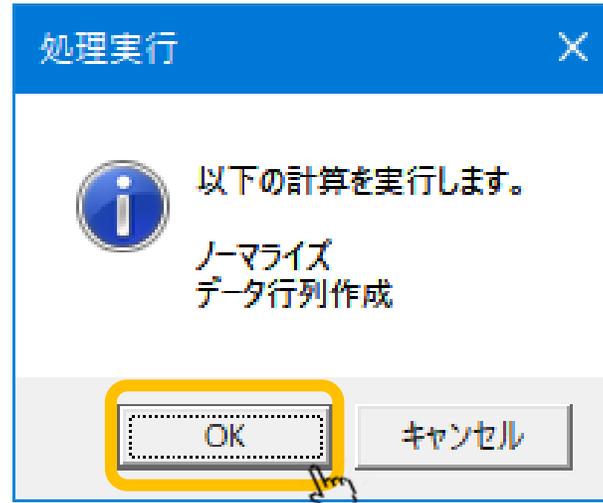
The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- 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, ラベル, m/z, 組成式, アダクトイオン, マトリックス, 極性.
- 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).
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller thumbnail of the MS image labeled '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. Peaks are labeled with their m/z values: 721,482, 744,540, 767,492, 793,521, 793,524, 793,524, 811,514, 837,539, 885,538.
- 処理実行 (Processing Execution) Dialog:** A central dialog box with the text: '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). It has 'OK' and 'キャンセル' (Cancel) buttons.
- 左側メニュー (Left Sidebar):** A vertical toolbar with various icons. The 'データ行列計算' (Data Matrix Calculation) icon is highlighted with a yellow box and a hand cursor.

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. The main window is divided into 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 the results of the data matrix calculation.
- MSイメージ (MS Image):** A large image showing the mass spectrum data.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller image showing the mass spectrum data.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table showing the parameters used for the analysis.

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	データ点数
1		Testicle_9A...	All	62500
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI001	61694

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001
1	<input checked="" type="checkbox"/>		699.9849-700.9849	700.4849	67090.121
2	<input checked="" type="checkbox"/>		700.9849-701.9849	701.4849	61720.554
3	<input checked="" type="checkbox"/>		701.9849-702.9849	702.4849	40473.360
4	<input checked="" type="checkbox"/>		702.9849-703.9849	703.4849	53635.944
5	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-704.9849	704.4849	37308.463
6	<input checked="" type="checkbox"/>		704.9849-705.9849	705.4849	60508.251
7	<input checked="" type="checkbox"/>		705.9849-706.9849	706.4849	40493.792
8	<input checked="" type="checkbox"/>		706.9849-707.9849	707.4849	58054.928
9	<input checked="" type="checkbox"/>		707.9849-708.9849	708.4849	41749.677
10	<input checked="" type="checkbox"/>		708.9849-709.9849	709.4849	82038.027
11	<input checked="" type="checkbox"/>		709.9849-710.9849	710.4849	52471.059
12	<input checked="" type="checkbox"/>		710.9849-711.9849	711.4849	56998.105
13	<input checked="" type="checkbox"/>		711.9849-712.9849	712.4849	37281.444
14	<input checked="" type="checkbox"/>		712.9849-713.9849	713.4849	57921.662
15	<input checked="" type="checkbox"/>		713.9849-714.9849	714.4849	42273.941
16	<input checked="" type="checkbox"/>		714.9849-715.9849	715.4849	48015.930
17	<input checked="" type="checkbox"/>		715.9849-716.9849	716.4849	44784.738
18	<input checked="" type="checkbox"/>		716.9849-717.9849	717.4849	49573.888

解析パラメータ

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/ピクサイズ (Da)	1.0000
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. “セグメンテーション”を選択

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels. The left sidebar contains a vertical menu of icons, with the 'セグメンテーション計算' (Segmentation Calculation) icon highlighted by a yellow box and a mouse cursor. The main window is divided into several sections:

- ROIリスト (ROI List):** A table with columns for No., 使用 (Use), 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 (Use), タグ (Tag), ラベル (Label), m/z, and ROI001.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the data, with a color scale on the right. The right sidebar shows metadata for this image, including '化合物名/コメント' (Compound Name/Comment) and 'ファイル名' (File Name).
- グラフ (Graph):** A section for graphing, including a 'ピークピッキング' (Peak Picking) button and a table for peak data.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table with columns for No., Name, and Value, showing various 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	61694

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001
1	✓		699.9849-700.9849	700.4849	67090.121
2	✓		700.9849-701.9849	701.4849	61720.554
3	✓		701.9849-702.9849	702.4849	40473.360
4	✓		702.9849-703.9849	703.4849	53635.944
5	✓		703.9849-704.9849	704.4849	37308.463
6	✓		704.9849-705.9849	705.4849	60508.251
7	✓		705.9849-706.9849	706.4849	40493.792
8	✓		706.9849-707.9849	707.4849	58054.928
9	✓		707.9849-708.9849	708.4849	41749.677
10	✓		708.9849-709.9849	709.4849	82038.027
11	✓		709.9849-710.9849	710.4849	52471.059
12	✓		710.9849-711.9849	711.4849	56998.105
13	✓		711.9849-712.9849	712.4849	37281.444
14	✓		712.9849-713.9849	713.4849	57921.662
15	✓		713.9849-714.9849	714.4849	42273.941
16	✓		714.9849-715.9849	715.4849	48015.930
17	✓		715.9849-716.9849	716.4849	44784.738
18	✓		716.9849-717.9849	717.4849	49573.888

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)	1.0000
5	許容幅/ピンサイズ (Da)	オフ
6	除外リスト	オフ
7	しきい値設定	オフ

5.0.1 セグメンテーションの前処理（有）

セグメンテーションの前処理の有無が選択できます。

セグメンテーションパラメータ

距離

m/z範囲 - Da

前処理 あり (UMAP) なし

UMAPモデル

データ点数間引き クラスター数

距離 (UMAP)

No.	ファイル名	ROI名	属性	データ点数	データの種類
1	Liver_Quant_Right1-2_R...	All	Center	25265	トレーニングデータ
2	Liver_Quant_Right1-2_R...	All	Center	25265	テストデータ

5.0.2 前処理の有無による違い

- 前処理あり：UMAPで m/z の次元を3次元まで削減します。
 - その3次元をRGB（色）として疑似カラー画像を作成できます。
 - さらにk-meansで3次元空間内の画素をセグメンテーションします。
- 前処理なし：データをk-meansでセグメンテーションします。
 - 画素の色は各セグメントに割り振られた色になります。

5.1.1 前処理ありの場合

セグメンテーションパラメータ

距離

m/z範囲 - Da

前処理 あり (UMAP) なし

UMAPモデル なし

データ点数間引き

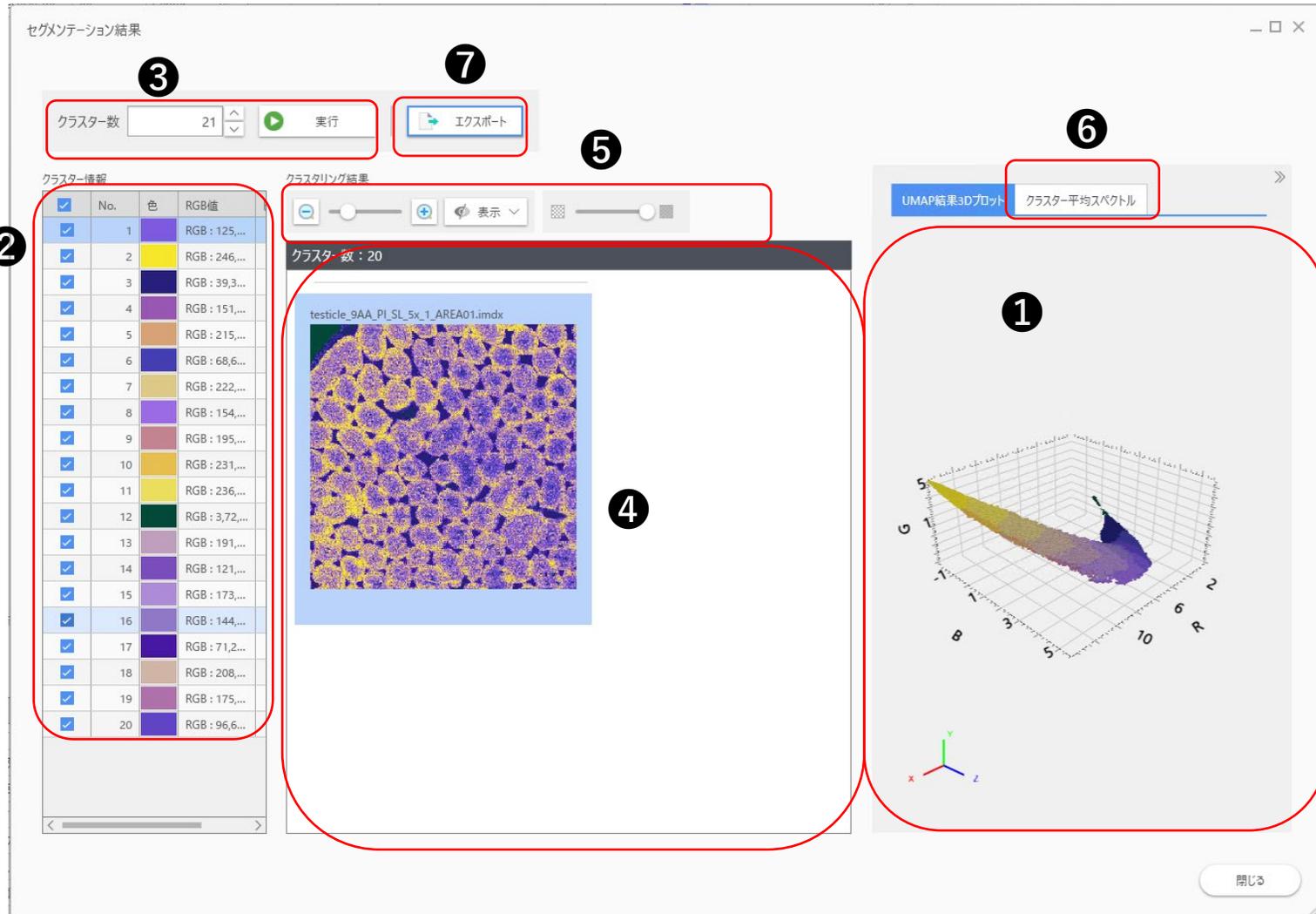
クラスター数

距離 (UMAP)

No.	ファイル名	ROI名	属性	データ点数	データの種類
1	Liver_Quant_Right1-2_R...	All	Center	25265	トレーニングデータ
2	Liver_Quant_Right1-2_R...	All	Center	25265	テストデータ

- 前処理で”あり (UMAP) “を選択
- クラスター数を設定
- データが複数個ある場合はデータの種類のトレーニングデータ (最低一つ必要) を設定

5.1.2 前処理ありのセグメンテーション結果



1. UMAPによる次元削減結果
2. セグメンテーションのクラスター情報
3. クラスター数変更コントロール
4. クラスターリング結果画像
5. クラスターリング結果画像用コントロール
6. クラスター平均スペクトルタブ
7. エクスポートボタン

④ が疑似カラー化後にクラスター数に減色した結果です。

5.2.1 前処理なしの場合

セグメンテーションパラメータ

距離 ユークリッド

m/z範囲 609.48645 - 659.48645 Da 自動設定

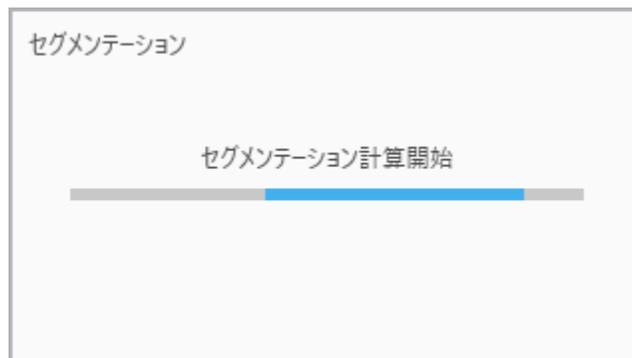
前処理 あり (UMAP) なし

クラスター数 2 - 5

実行 キャンセル

セグメントの数を設定します。
この場合だと、2群、3群、4群、5群に分けた4つの結果が表示されます。

5.2.2 セグメンテーション計算



5.2.3 セグメンテーション結果

セグメンテーション結果

色の変更

結果の出力

クラスタリング結果

クラスター平均スペクトル (セントロイド)

一括エクスポート

クラスター数 2

Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREAO1.imdx

クラスター数 3

Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREAO1.imdx

クラスター数 4

Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREAO1.imdx

クラスター数 5

Testicle_9AA_Pi_SL_5x_1_AREAO1.imdx

クラスター数 2/ 測定点数 : 33331 (53.3%)

Intensity

m/z

クラスター数 2/ 測定点数 : 29169 (46.7%)

Intensity

m/z

閉じる

セグメンテーションの結果
2群から5群の4つの結果が表示されている

選択している結果の各セグメントの平均スペクトル
スペクトルの左の色（赤、青）はセグメントの色に対応
スペクトルの上部には点の数や割合が表示される

5.2.4 セグメントの色の変更

