

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. 既知の局在と同じ分布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

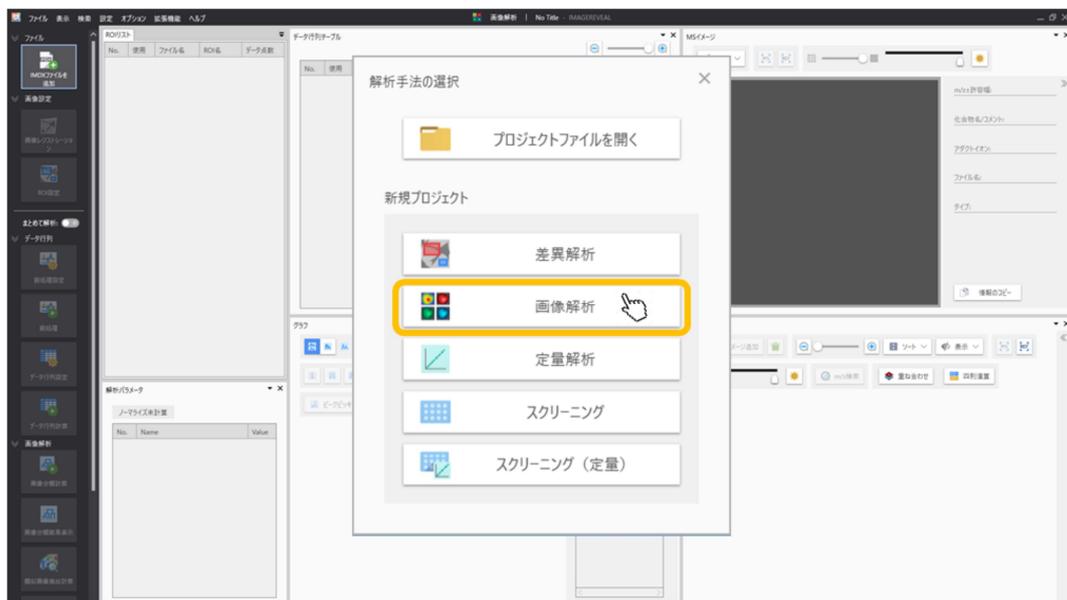
例

1. 切片上でどんな成分がどんな分布をしているか
2. 既知の局在と同じ分布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

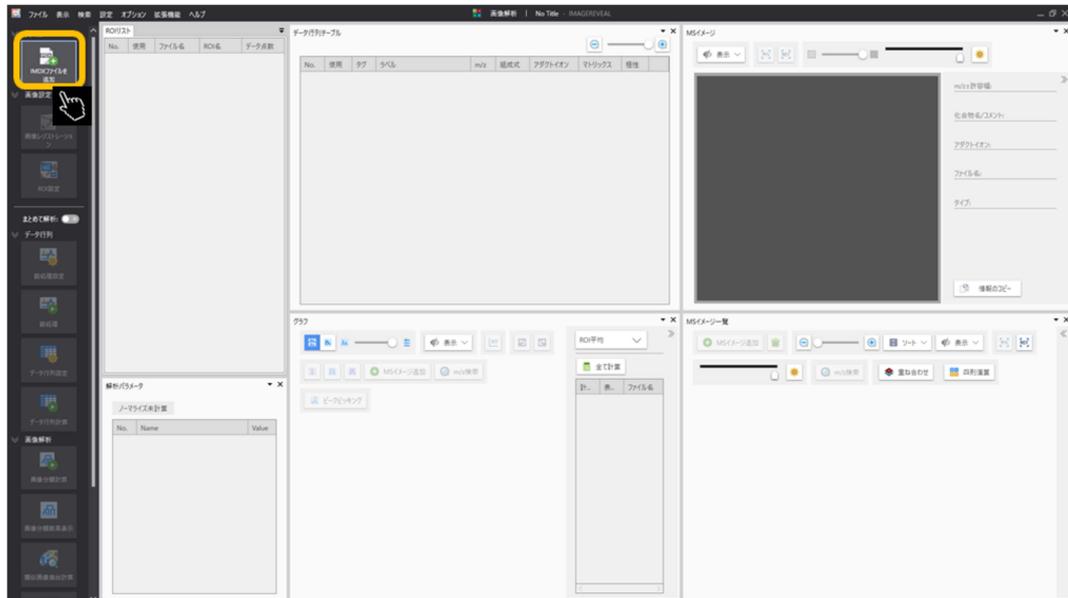
1. “画像解析”を選択
2. データ読み込み
3. 必要があればROI設定
4. データ行列テーブル計算
5. 画像分類

# 1. “画像解析”を選択



データファイル(.imdx形式)を読み込みます。

## 2. データファイル (.imdx)を追加



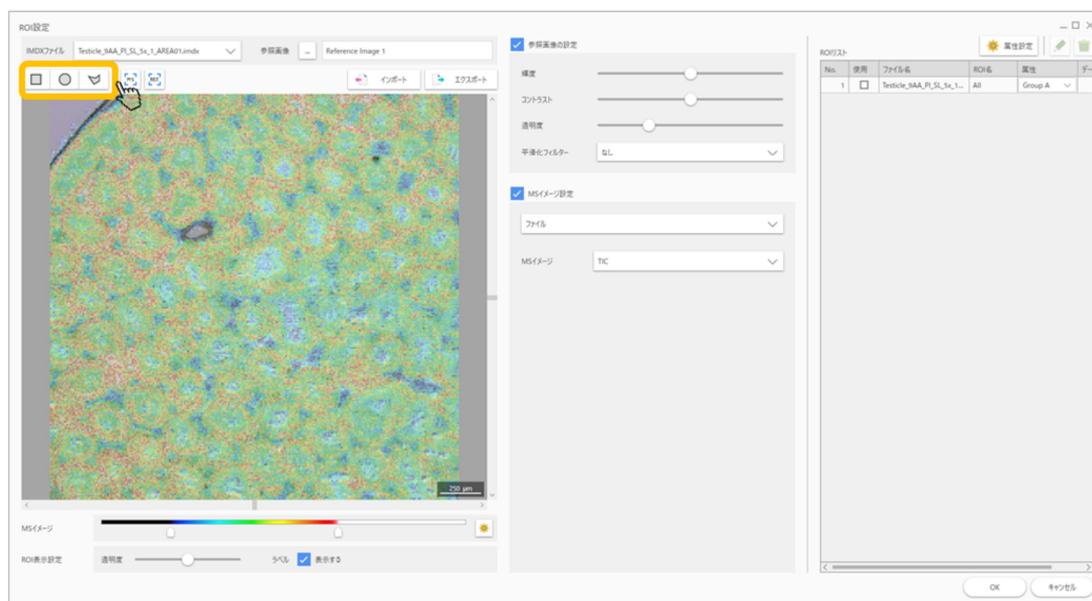
### 3. 必要があればROIを設定します

The screenshot displays the software interface for setting an ROI. The 'ROI' window is the primary focus, showing a table of ROI configurations:

No.	名前	ファイル名	ROI名	データ点数
1	Testicle_Sk	All		6200

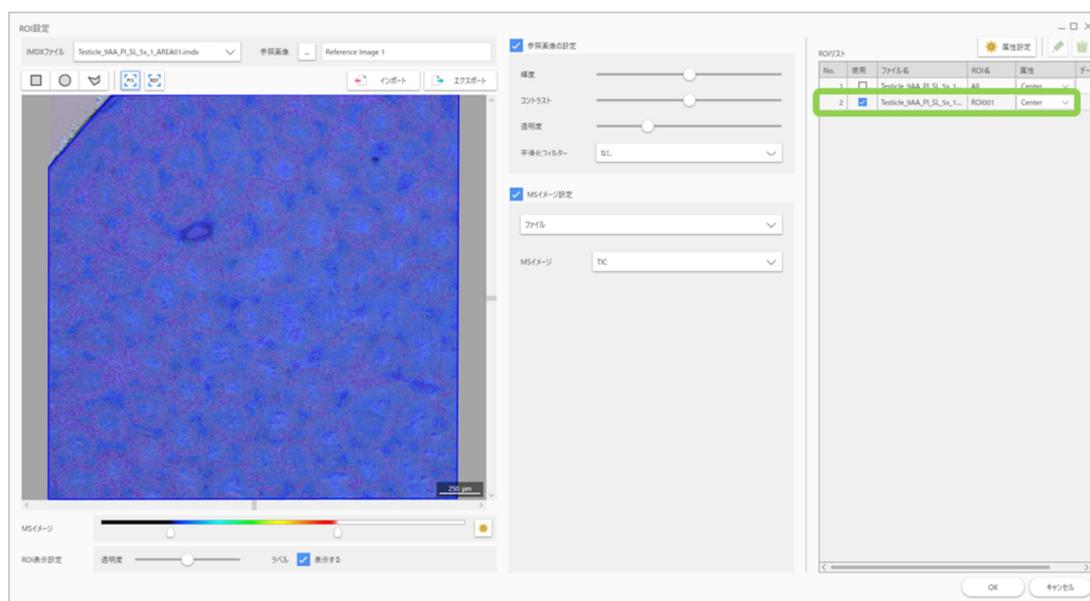
The 'MS/MS-View' window shows a mass spectrum plot with intensity on the y-axis and m/z on the x-axis. The 'MS/MS-View-2' window shows a 2D mass spectrum plot with intensity on the y-axis and m/z on the x-axis.

### 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。

## 3.2 ROIリストに記載されます



ROIを書いたあとに属性を設定します。  
※属性が2つ以上ないと設定しないと検定が行われません。

## 4. データ行列計算の”前処理”の設定

The screenshot displays a software interface for data matrix calculation. The main window is titled "MS/MS" and contains several panels:

- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns for No., 処理 (Processing), ファイル名 (File Name), 検出値 (Detection Value), and データ点数 (Data Points). The first row shows "1", "Testicle\_SAL", "All", and "6200".
- MS/MS:** A large panel showing a 2D heatmap of mass spectrometry data. The x-axis is labeled "m/z" and the y-axis is labeled "Intensity". The plot shows a complex pattern of peaks.
- MS/MS-View:** A smaller panel showing a zoomed-in view of the MS/MS data, with a color scale on the right.
- プロット (Plot):** A chromatogram showing a single sharp peak. The x-axis is labeled "m/z" and the y-axis is labeled "Intensity". The peak is labeled "Testicle\_SAL\_PI\_SLS\_LAREA01.indm-Whole\_Ave".
- MS/MS-View (Bottom Right):** A panel showing a zoomed-in view of the MS/MS data, with a color scale on the right.

The interface also includes a sidebar on the left with various icons and a top menu bar with options like "ファイル" (File), "表示" (View), "設定" (Settings), "オプション" (Options), "結果情報" (Result Information), and "ヘルプ" (Help).

## 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。

TICが用いられることが多いです。

## 4.2 データ行列の設定

The screenshot displays a software interface for configuring data matrices. The main window is titled "MS/MS" and contains several panels:

- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns for No., 名前 (Name), ファイル名 (File Name), MS名 (MS Name), and データ点数 (Data Points). It contains one entry: No. 1, 名前 Testicle\_Sk, ファイル名 All, MS名 62500.
- MS/MS (Top Right):** A heatmap visualization of mass spectrometry data. The x-axis is labeled "m/z" and the y-axis is labeled "Intensity". The plot shows a complex pattern of peaks.
- MS/MS (Bottom Right):** A smaller heatmap visualization of mass spectrometry data, similar to the top right panel.
- MS/MS (Bottom Center):** A plot showing a mass spectrum with a peak list. The x-axis is labeled "m/z" and the y-axis is labeled "Intensity". The plot title is "Testicle\_SkA\_P1\_Sk\_Sk\_1\_AREAD1.indx-Whole\_Ave". The peak list includes the following data points:

m/z	Intensity
721.402	144.540
767.402	70.534
771.414	101.514
807.402	101.514
811.414	101.514
815.414	101.514
819.414	101.514
823.414	101.514
827.414	101.514
831.414	101.514
835.414	101.514
839.414	101.514
843.414	101.514
847.414	101.514
851.414	101.514
855.414	101.514
859.414	101.514
863.414	101.514
867.414	101.514
871.414	101.514
875.414	101.514
879.414	101.514
883.414	101.514
887.414	101.514
891.414	101.514
895.414	101.514
899.414	101.514
903.414	101.514
907.414	101.514
911.414	101.514
915.414	101.514
919.414	101.514
923.414	101.514
927.414	101.514
931.414	101.514
935.414	101.514
939.414	101.514
943.414	101.514
947.414	101.514
951.414	101.514
955.414	101.514
959.414	101.514
963.414	101.514
967.414	101.514
971.414	101.514
975.414	101.514
979.414	101.514
983.414	101.514
987.414	101.514
991.414	101.514
995.414	101.514
999.414	101.514
1003.414	101.514
1007.414	101.514
1011.414	101.514
1015.414	101.514
1019.414	101.514
1023.414	101.514
1027.414	101.514
1031.414	101.514
1035.414	101.514
1039.414	101.514
1043.414	101.514
1047.414	101.514
1051.414	101.514
1055.414	101.514
1059.414	101.514
1063.414	101.514
1067.414	101.514
1071.414	101.514
1075.414	101.514
1079.414	101.514
1083.414	101.514
1087.414	101.514
1091.414	101.514
1095.414	101.514
1099.414	101.514
1103.414	101.514
1107.414	101.514
1111.414	101.514
1115.414	101.514
1119.414	101.514
1123.414	101.514
1127.414	101.514
1131.414	101.514
1135.414	101.514
1139.414	101.514
1143.414	101.514
1147.414	101.514
1151.414	101.514
1155.414	101.514
1159.414	101.514
1163.414	101.514
1167.414	101.514
1171.414	101.514
1175.414	101.514
1179.414	101.514
1183.414	101.514
1187.414	101.514
1191.414	101.514
1195.414	101.514
1199.414	101.514
1203.414	101.514
1207.414	101.514
1211.414	101.514
1215.414	101.514
1219.414	101.514
1223.414	101.514
1227.414	101.514
1231.414	101.514
1235.414	101.514
1239.414	101.514
1243.414	101.514
1247.414	101.514
1251.414	101.514
1255.414	101.514
1259.414	101.514
1263.414	101.514
1267.414	101.514
1271.414	101.514
1275.414	101.514
1279.414	101.514
1283.414	101.514
1287.414	101.514
1291.414	101.514
1295.414	101.514
1299.414	101.514
1303.414	101.514
1307.414	101.514
1311.414	101.514
1315.414	101.514
1319.414	101.514
1323.414	101.514
1327.414	101.514
1331.414	101.514
1335.414	101.514
1339.414	101.514
1343.414	101.514
1347.414	101.514
1351.414	101.514
1355.414	101.514
1359.414	101.514
1363.414	101.514
1367.414	101.514
1371.414	101.514
1375.414	101.514
1379.414	101.514
1383.414	101.514
1387.414	101.514
1391.414	101.514
1395.414	101.514
1399.414	101.514
1403.414	101.514
1407.414	101.514
1411.414	101.514
1415.414	101.514
1419.414	101.514
1423.414	101.514
1427.414	101.514
1431.414	101.514
1435.414	101.514
1439.414	101.514
1443.414	101.514
1447.414	101.514
1451.414	101.514
1455.414	101.514
1459.414	101.514
1463.414	101.514
1467.414	101.514
1471.414	101.514
1475.414	101.514
1479.414	101.514
1483.414	101.514
1487.414	101.514
1491.414	101.514
1495.414	101.514
1499.414	101.514
1503.414	101.514
1507.414	101.514
1511.414	101.514
1515.414	101.514
1519.414	101.514
1523.414	101.514
1527.414	101.514
1531.414	101.514
1535.414	101.514
1539.414	101.514
1543.414	101.514
1547.414	101.514
1551.414	101.514
1555.414	101.514
1559.414	101.514
1563.414	101.514
1567.414	101.514
1571.414	101.514
1575.414	101.514
1579.414	101.514
1583.414	101.514
1587.414	101.514
1591.414	101.514
1595.414	101.514
1599.414	101.514
1603.414	101.514
1607.414	101.514
1611.414	101.514
1615.414	101.514
1619.414	101.514
1623.414	101.514
1627.414	101.514
1631.414	101.514
1635.414	101.514
1639.414	101.514
1643.414	101.514
1647.414	101.514
1651.414	101.514
1655.414	101.514
1659.414	101.514
1663.414	101.514
1667.414	101.514
1671.414	101.514
1675.414	101.514
1679.414	101.514
1683.414	101.514
1687.414	101.514
1691.414	101.514
1695.414	101.514
1699.414	101.514
1703.414	101.514
1707.414	101.514
1711.414	101.514
1715.414	101.514
1719.414	101.514
1723.414	101.514
1727.414	101.514
1731.414	101.514
1735.414	101.514
1739.414	101.514
1743.414	101.514
1747.414	101.514
1751.414	101.514
1755.414	101.514
1759.414	101.514
1763.414	101.514
1767.414	101.514
1771.414	101.514
1775.414	101.514
1779.414	101.514
1783.414	101.514
1787.414	101.514
1791.414	101.514
1795.414	101.514
1799.414	101.514
1803.414	101.514
1807.414	101.514
1811.414	101.514
1815.414	101.514
1819.414	101.514
1823.414	101.514
1827.414	101.514
1831.414	101.514
1835.414	101.514
1839.414	101.514
1843.414	101.514
1847.414	101.514
1851.414	101.514
1855.414	101.514
1859.414	101.514
1863.414	101.514
1867.414	101.514
1871.414	101.514
1875.414	101.514
1879.414	101.514
1883.414	101.514
1887.414	101.514
1891.414	101.514
1895.414	101.514
1899.414	101.514
1903.414	101.514
1907.414	101.514
1911.414	101.514
1915.414	101.514
1919.414	101.514
1923.414	101.514
1927.414	101.514
1931.414	101.514
1935.414	101.514
1939.414	101.514
1943.414	101.514
1947.414	101.514
1951.414	101.514
1955.414	101.514
1959.414	101.514
1963.414	101.514
1967.414	101.514
1971.414	101.514
1975.414	101.514
1979.414	101.514
1983.414	101.514
1987.414	101.514
1991.414	101.514
1995.414	101.514
1999.414	101.514
2003.414	101.514
2007.414	101.514
2011.414	101.514
2015.414	101.514
2019.414	101.514
2023.414	101.514
2027.414	101.514
2031.414	101.514
2035.414	101.514
2039.414	101.514
2043.414	101.514
2047.414	101.514
2051.414	101.514
2055.414	101.514
2059.414	101.514
2063.414	101.514
2067.414	101.514
2071.414	101.514
2075.414	101.514
2079.414	101.514
2083.414	101.514
2087.414	101.514
2091.414	101.514
2095.414	101.514
2099.414	101.514
2103.414	101.514
2107.414	101.514
2111.414	101.514
2115.414	101.514
2119.414	101.514
2123.414	101.514
2127.414	101.514
2131.414	101.514
2135.414	101.514
2139.414	101.514
2143.414	101.514
2147.414	101.514
2151.414	101.514
2155.414	101.514
2159.414	101.514
2163.414	101.514
2167.414	101.514
2171.414	101.514
2175.414	101.514
2179.414	101.514
2183.414	101.514
2187.414	101.514
2191.414	101.514
2195.414	101.514
2199.414	101.514
2203.414	101.514
2207.414	101.514
2211.414	101.514
2215.414	101.514
2219.414	101.514
2223.414	101.514
2227.414	101.514
2231.414	101.514
2235.414	101.514
2239.414	101.514
2243.414	101.514
2247.414	101.514
2251.414	101.514
2255.414	101.514
2259.414	101.514
2263.414	101.514
2267.414	101.514
2271.414	101.514
2275.414	101.514
2279.414	101.514
2283.414	101.514
2287.414	101.514
2291.414	101.514
2295.414	101.514
2299.414	101.514
2303.414	101.514
2307.414	101.514
2311.414	101.514
2315.414	101.514
2319.414	101.514
2323.414	101.514
2327.414	101.514
2331.414	101.514
2335.414	101.514
2339.414	101.514
2343.414	101.514
2347.414	101.514
2351.414	101.514
2355.414	101.514
2359.414	101.514
2363.414	101.514
2367.414	101.514
2371.414	101.514
2375.414	101.514
2379.414	101.514
2383.414	101.514
2387.414	101.514
2391.414	101.514
2395.414	101.514
2399.414	101.514
2403.414	101.514
2407.414	101.514
2411.414	101.514
2415.414	101.514
2419.414	101.514
2423.414	101.514
2427.414	101.514
2431.414	101.514
2435.414	101.514
2439.414	101.514
2443.414	101.514
2447.41	

## 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: 0.000 %

m/z範囲:  自動  手動 (10,00000 - 10000,00000 Da) ファイル範囲を設定

ビンサイズ: **10000** Da

タバリング Matrix Clusters

指定ピーク除外 指定m/zを除外

OK キャンセル

対象とするピークを選択します。

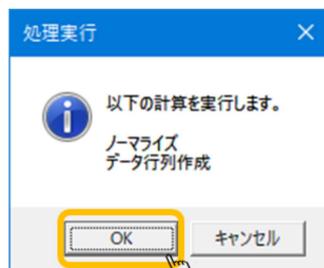
ノンターゲットはスペクトルから一定幅で信号強度を切り出します。ターゲットは特定のm/z値と許容幅を指定します。

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 a software interface with several panels. A central dialog box titled "処理実行" (Processing Execution) is active, containing the message "以下の計算を実行します。データ行列作成" (Perform the following calculations. Data matrix creation) and two buttons: "OK" and "キャンセル" (Cancel). The "OK" button is highlighted with a yellow box. In the background, the "データ行列作成" (Data Matrix Creation) panel shows a table with columns "No.", "ファイル名" (File Name), "測定値" (Measurement), and "データ点数" (Data Points). The table contains one entry: No. 1, File Name: Testfile\_001, Measurement: All, Data Points: 62500. Below this, a "解析パラメータ" (Analysis Parameters) panel shows a table with columns "No.", "Name", and "Value". To the right, a "グラフ" (Graph) panel displays a chromatogram with peaks labeled with retention times: 721.402, 744.542, 767.402, 781.514, 807.539, and 845.538. The x-axis is labeled "min" and the y-axis is labeled "Intensity". Further right, an "MSイメージ" (MS Image) panel shows a heatmap with a color scale from 0 to 255. The top of the interface includes a menu bar with options like "ファイル", "表示", "検索", "設定", "オプション", "結果情報", and "ヘルプ".

## 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 a software interface with several panels. The central panel shows a table of data points with columns for No., 番号, タイプ, 分子, and MS. The table contains 18 rows of data. To the right, there is a heatmap visualization. Below the table, there is a plot titled 'Tetelic\_3AA\_P1\_S1\_Sk\_1\_AREAD1.mde Whole\_Ave' showing intensity versus m/z. The plot has a y-axis labeled 'Intensity' ranging from 0E+00 to 2E+05 and an x-axis labeled 'm/z' ranging from 700 to 900. The plot shows a prominent peak at m/z 700.201. The interface also includes a sidebar on the left with various icons and a top menu bar.

No.	番号	タイプ	分子	MS
1	499.8649-703.1849		703.0849	6349.126
2	703.1849-703.3849		703.2849	6779.449
3	703.3849-703.5849		703.4849	3670.877
4	703.5849-703.7849		703.6849	4800.111
5	703.7849-703.9849		703.8849	2726.375
6	703.9849-704.1849		704.0849	7225.977
7	704.1849-704.3849		704.2849	3034.033
8	704.3849-704.5849		704.4849	1093.814
9	704.5849-704.7849		704.6849	2198.149
10	704.7849-704.9849		704.8849	2325.234
11	704.9849-705.1849		705.0849	3623.114
12	705.1849-705.3849		705.2849	15118.971
13	705.3849-705.5849		705.4849	1562.690
14	705.5849-705.7849		705.6849	1892.287
15	705.7849-705.9849		705.8849	1821.611
16	705.9849-706.1849		706.0849	1725.296
17	706.1849-706.3849		706.2849	18979.387
18	706.3849-706.5849		706.4849	21395.361

## 5. “画像分類”を選択

The screenshot displays a software interface with the following components:

- Sidebar (Left):** A vertical menu with icons for various functions. The 'Image Classification' icon is highlighted with a yellow box and a mouse cursor.
- ROI List (Top Left):** A table listing ROI information.
 

No.	名前	ファイル名	ROI名	データ数
1		Tecticle_3A_1	All	6250
2		Tecticle_3A_1	ROI001	6124
- Data Selection Table (Center):** A table showing selected data points.
 

No.	選択	タグ	Start	End	ROI	Intensity
1	<input checked="" type="checkbox"/>		499.8649-703.1849	703.0849	ROI001	6248.766
2	<input checked="" type="checkbox"/>		703.1849-703.3849	703.2849	ROI001	4979.449
3	<input checked="" type="checkbox"/>		703.3849-703.5849	703.4849	ROI001	3670.877
4	<input checked="" type="checkbox"/>		703.5849-703.7849	703.6849	ROI001	4880.111
5	<input checked="" type="checkbox"/>		703.7849-703.9849	703.8849	ROI001	2726.375
6	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-703.1849	703.0849	ROI001	7225.877
7	<input checked="" type="checkbox"/>		703.1849-703.3849	703.2849	ROI001	3034.833
8	<input checked="" type="checkbox"/>		703.3849-703.5849	703.4849	ROI001	3908.854
9	<input checked="" type="checkbox"/>		703.5849-703.7849	703.6849	ROI001	2398.149
10	<input checked="" type="checkbox"/>		703.7849-703.9849	703.8849	ROI001	2325.254
11	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-703.1849	703.0849	ROI001	5625.154
12	<input checked="" type="checkbox"/>		703.1849-703.3849	703.2849	ROI001	35118.971
13	<input checked="" type="checkbox"/>		703.3849-703.5849	703.4849	ROI001	15425.490
14	<input checked="" type="checkbox"/>		703.5849-703.7849	703.6849	ROI001	1882.287
15	<input checked="" type="checkbox"/>		703.7849-703.9849	703.8849	ROI001	1851.811
16	<input checked="" type="checkbox"/>		703.9849-703.1849	703.0849	ROI001	1725.296
17	<input checked="" type="checkbox"/>		703.1849-703.3849	703.2849	ROI001	18875.387
18	<input checked="" type="checkbox"/>		703.3849-703.5849	703.4849	ROI001	21395.361
- MSI View (Top Right):** A heatmap visualization of the data, showing intensity variations across a spatial area. The legend indicates the file name 'Tecticle\_3A\_1\_Sk\_1\_AREAD1.mde' and the tag 'TIC'.
- Plot (Bottom Center):** A line graph titled 'Tecticle\_3A\_1\_Sk\_1\_AREAD1.mde-Whole\_Ave'. The y-axis is labeled 'Intensity' and the x-axis is 'ms'. The plot shows a series of peaks corresponding to the data points in the table above.
- MSI View (Bottom Right):** A smaller version of the heatmap visualization, also showing the 'TIC' tag.

## 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 ワード法

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。

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: 700.05492 検索

クラスター平均MSイメージ

クラスター詳細

ファイル名	化合物名	m/z	強度
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		888.68492	7657.47062
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		753.48492	6184.03658
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		713.28492	5987.04237
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		753.28492	4131.06866
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		772.48492	3341.00146
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		713.48492	2578.94697
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		888.68492	1805.01981
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		887.88492	1295.55710
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		888.08492	1286.63526
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREA...		772.68492	878.42355

選択したクラスターに含まれるm/z

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。

各クラスターの平均像

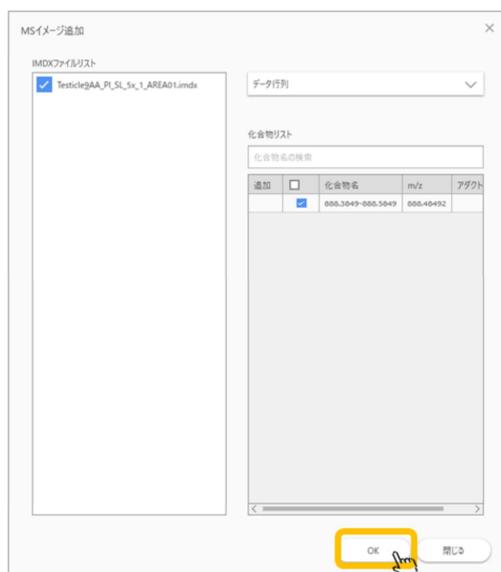
MSイメージ一覧に追加

自動で選択された各クラスターの平均像が左側に表示されます。

右側は各クラスターに含まれるm/zのリストです。

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

## 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 a software interface with several panels. The central panel shows a table of data points with columns for No., 画像 (Image), サイズ (Size), and MSZ (MSZ). The table contains 18 rows of data. To the right, there is a large image showing a dense, colorful pattern of points, likely representing the classified image. Below the main table, there is a smaller plot titled "ヒストグラム" (Histogram) showing the distribution of data points. The bottom right panel shows a list of files and a preview of the classified image.

No.	画像	サイズ	MSZ	
1	Testicle_3A_01	499,849-703,1849	703,0849	8348,126
2	Testicle_3A_02	703,1849-703,3849	703,2849	8479,449
3	Testicle_3A_03	703,3849-703,5849	703,4849	8670,877
4	Testicle_3A_04	703,5849-703,7849	703,6849	8862,311
5	Testicle_3A_05	703,7849-703,9849	703,8849	9053,745
6	Testicle_3A_06	703,9849-704,1849	703,9849	9245,179
7	Testicle_3A_07	704,1849-704,3849	704,0849	9436,613
8	Testicle_3A_08	704,3849-704,5849	704,1849	9628,047
9	Testicle_3A_09	704,5849-704,7849	704,2849	9819,481
10	Testicle_3A_10	704,7849-704,9849	704,3849	10010,915
11	Testicle_3A_11	704,9849-705,1849	704,4849	10202,349
12	Testicle_3A_12	705,1849-705,3849	704,5849	10393,783
13	Testicle_3A_13	705,3849-705,5849	704,6849	10585,217
14	Testicle_3A_14	705,5849-705,7849	704,7849	10776,651
15	Testicle_3A_15	705,7849-705,9849	704,8849	10968,085
16	Testicle_3A_16	705,9849-706,1849	704,9849	11159,519
17	Testicle_3A_17	706,1849-706,3849	705,0849	11350,953
18	Testicle_3A_18	706,3849-706,5849	705,1849	11542,387

## 5.6 画像分類内の検索

興味のあるm/zの値を入力し、「検索」をクリック

検索

化合物名

不整合係数

クラスター平均MSイメージ

クラスター詳細

見つかるサンプル数 10

ファイル名	化合物名	m/z	強度
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		888.68492	7657.47062
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		753.48492	6184.03658
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		713.28492	5987.04237
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		753.28492	4131.06866
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		772.48492	3341.00146
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		713.48492	2579.94697
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		888.68492	1805.01981
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		887.88492	1295.55710
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		888.08492	1286.63526
Testicle_SAA_Pt_Si_1_AREAD...		772.68492	879.42355

MSイメージ一覧に追加

閉じる

事前に興味のあるm/zがある場合にそれがどのクラスターに含まれるか検索できます。

## 5.7 画像分類内の検索結果

画像分類結果

m/z 700.08492 検索

クラスター平均MSイメージ

検索したm/zが含まれるクラスターにフォーカスが移動します。

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_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		829.68492	619.5602
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		853.08492	640.8681
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		847.68492	685.2168
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		815.08492	728.0566
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		814.08492	760.9092
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		785.08492	804.1476
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		784.08492	806.2186
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		873.68492	820.4018
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		789.08492	838.8986
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		802.08492	870.7487
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		716.08492	893.3790
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		803.08492	908.2576
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		763.08492	943.0532
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		720.08492	970.2610
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		736.08492	1012.4763
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		745.08492	1014.4588
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		741.08492	1032.7179
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		737.08492	1085.3102
Testicle_SAA_Pi_Si_1_AREAO...		771.08492	1087.7045

MSイメージ一覧に追加

閉じる

検索したm/zが含まれるクラスターにフォーカスが移動します。

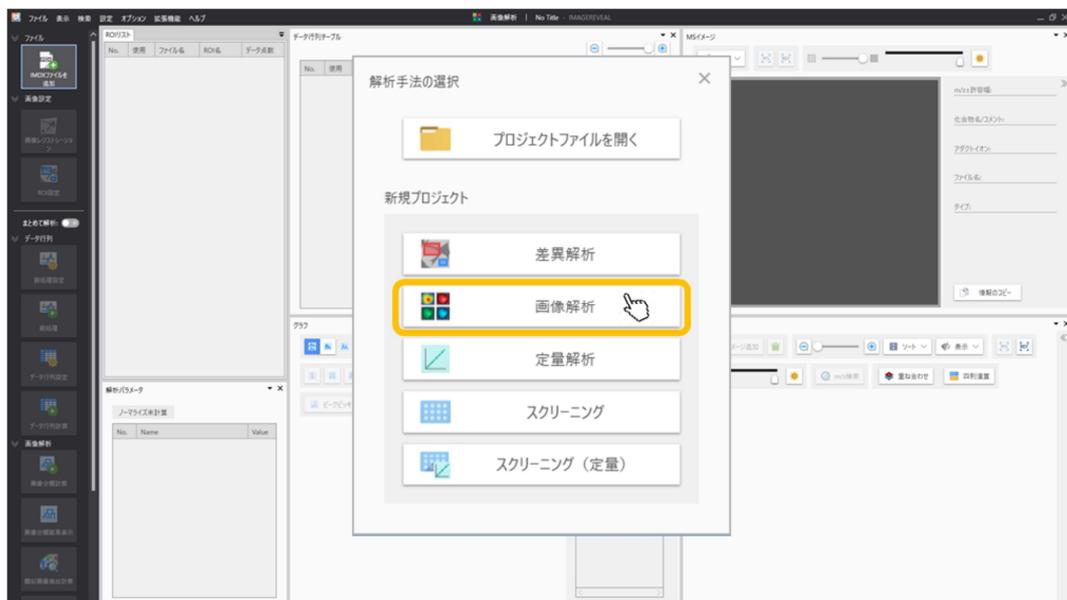
例

1. 切片上でどんな成分がどんな分布をしているか
2. 既知の局在と同じ分布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

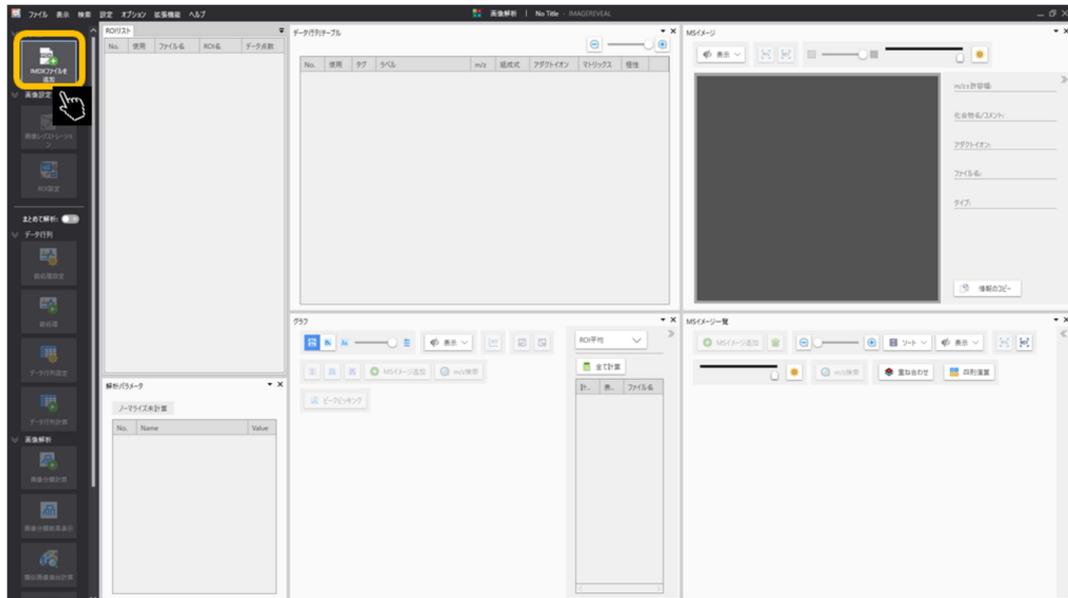
1. 画像解析を選択
2. データ読み込み
3. 参照画像（既知の局在）読み込み
4. 位置合わせ（画像レジストレーション）
5. 必要があればROI設定
6. データ行列テーブル計算
7. 類似画像抽出

# 1. “画像解析”を選択

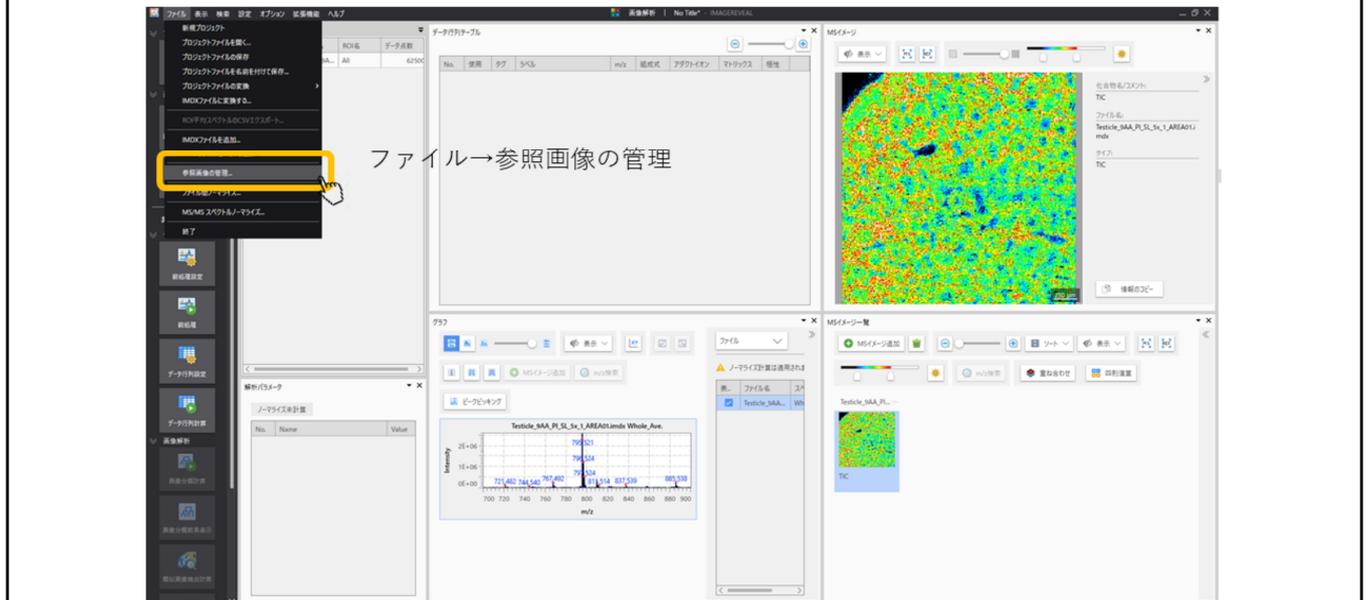


データファイル(.imdx形式)を読み込みます。

## 2. データファイル (.imdx)を追加

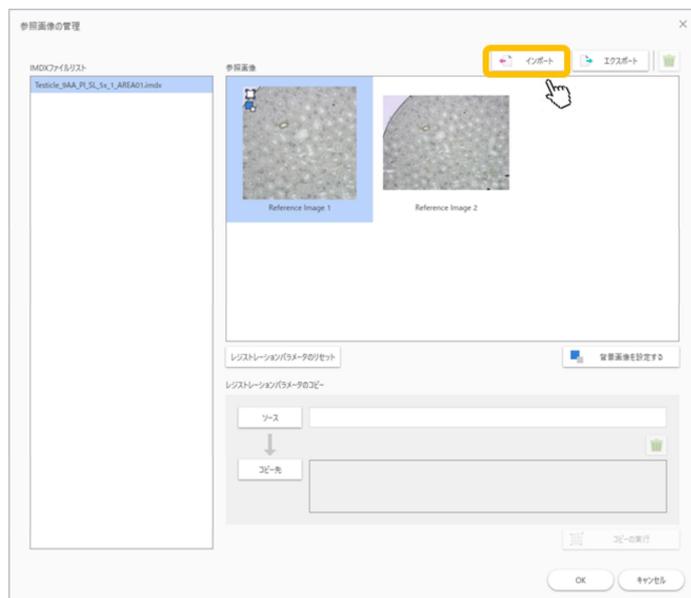


### 3. 参照画像の読み込み

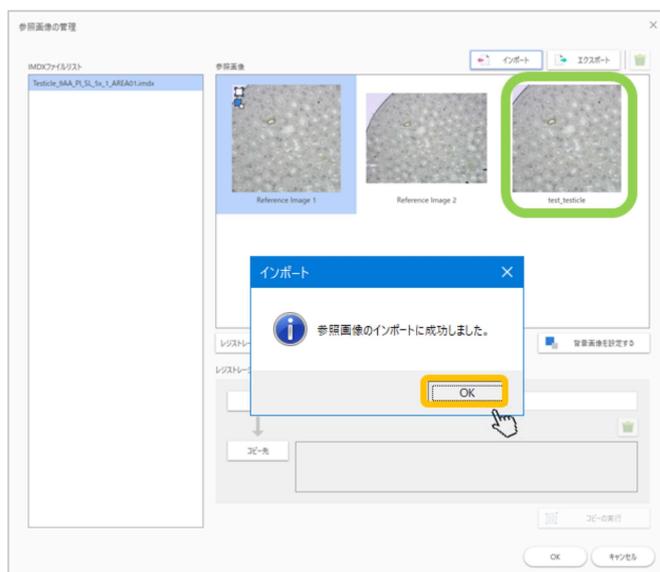


参照画像として使用する画像ファイルを読み込みます。  
メニューバーの ファイル→参照画像の管理 を選択します。

### 3.1 “参照画像の管理”画面が開きます

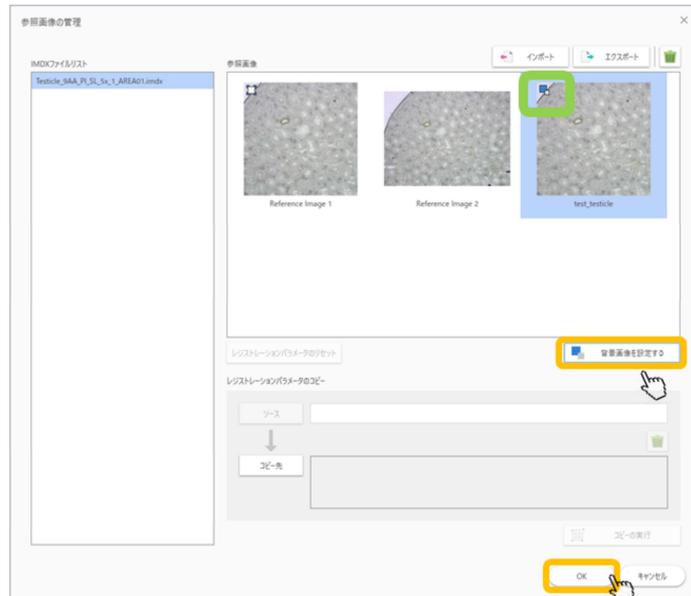


## 3.2 使用する画像をインポート

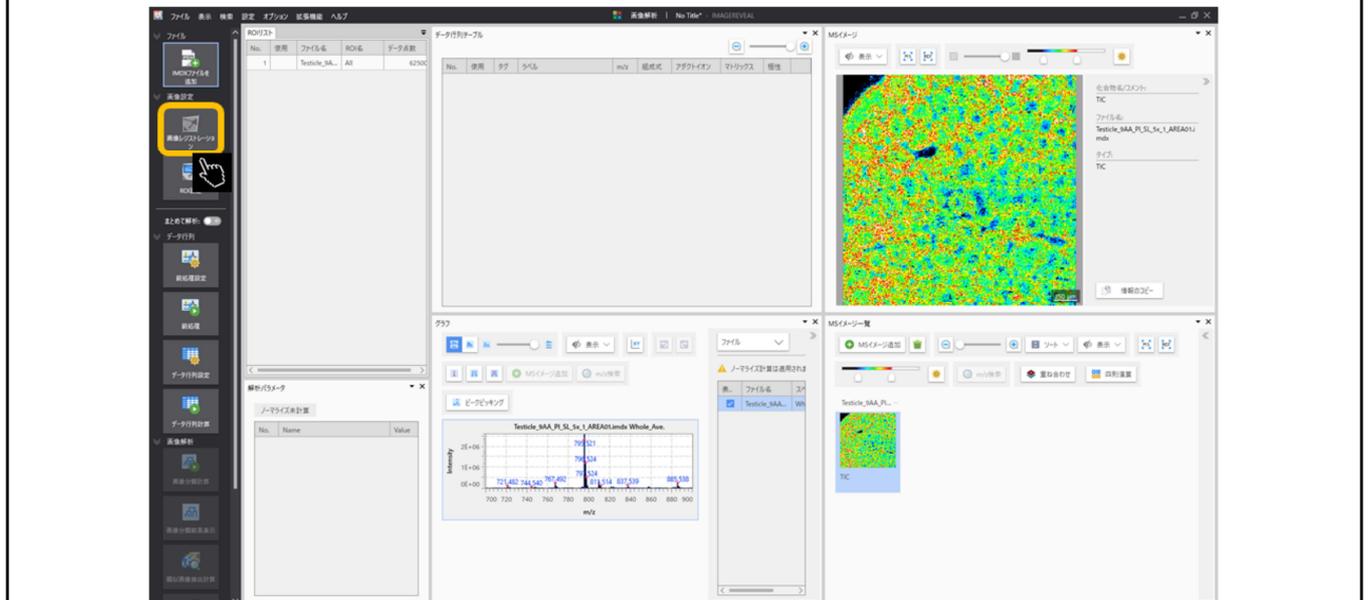


使用する画像を選択します。  
この例では既に入っていた画像と同じ画像をインポートしています。

### 3.3 インポートした画像を背景用に設定します。

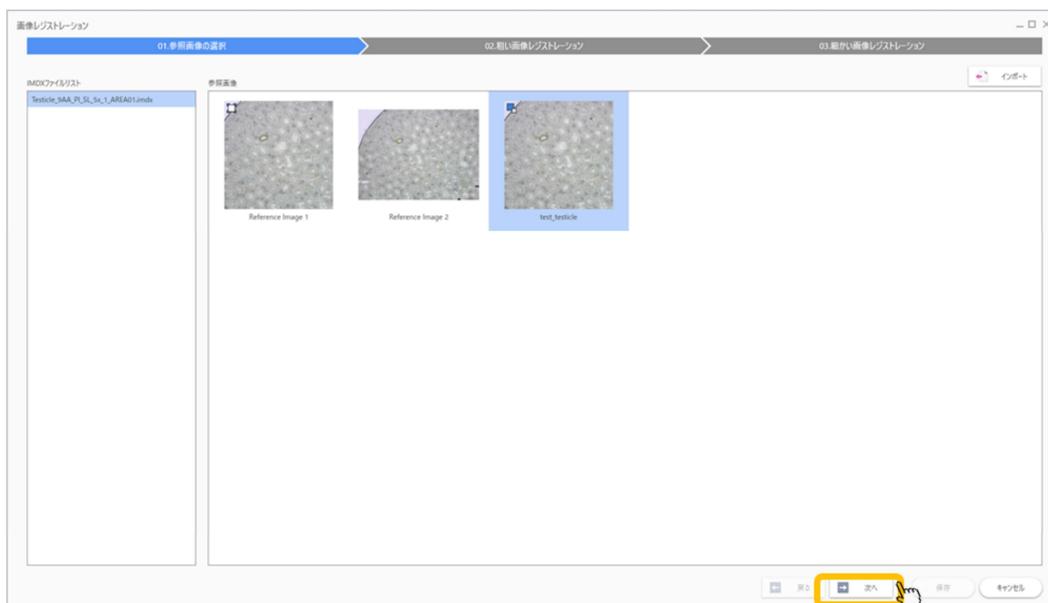


## 4. 位置合わせ(画像レジストレーション)

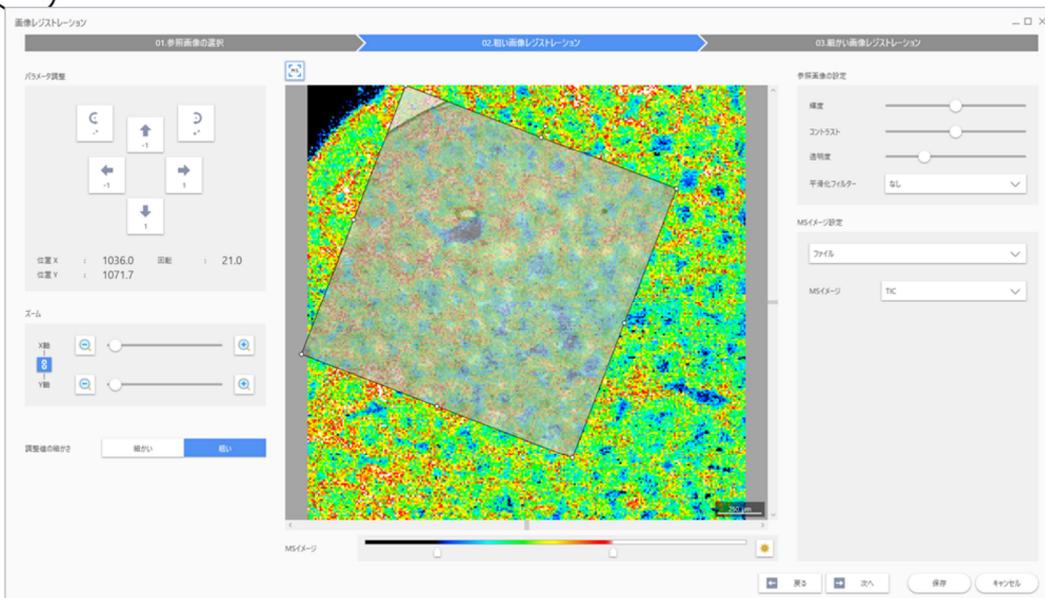


“画像レジストレーション”を選択します

## 4.1 背景画像が選択されています



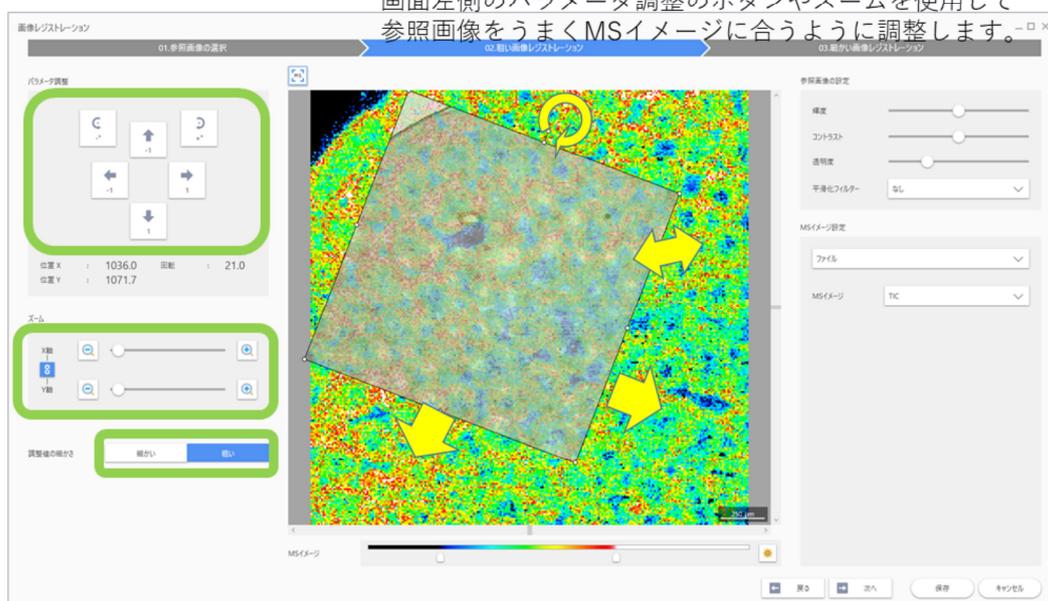
## 4.2 画像レジストレーション画面が開きます



画像とMSイメージのTIC像が重なった状態で表示されます。

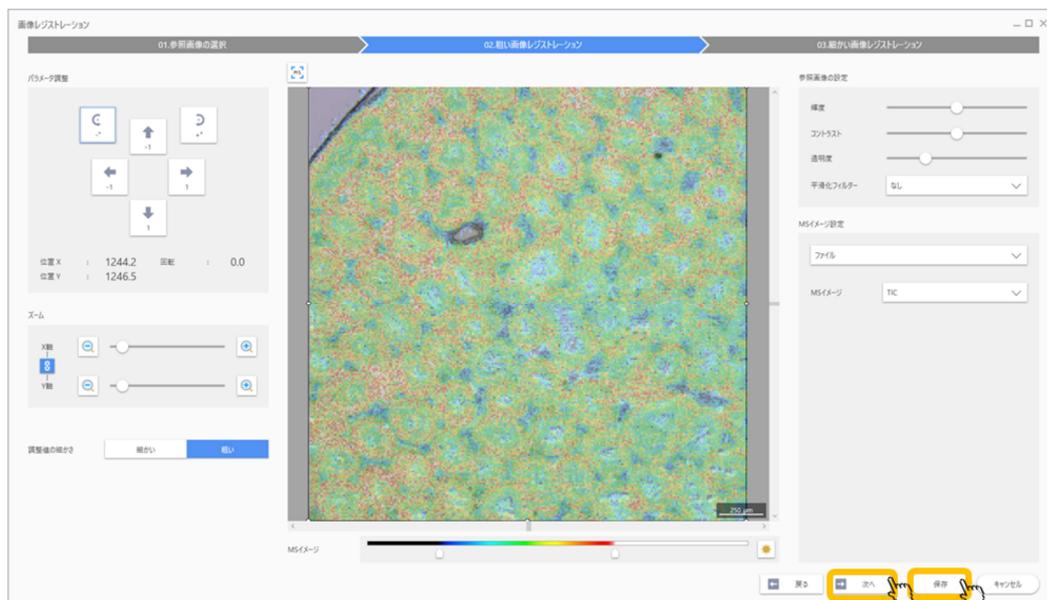
## 4.3 粗い画像レジストレーション

画面左側のパラメータ調整のボタンやズームを使用して参照画像をうまくMSイメージに合うように調整します。



画面左側のパラメータ調整のボタンやズームを使用して参照画像をうまくMSイメージに合うように調整します。

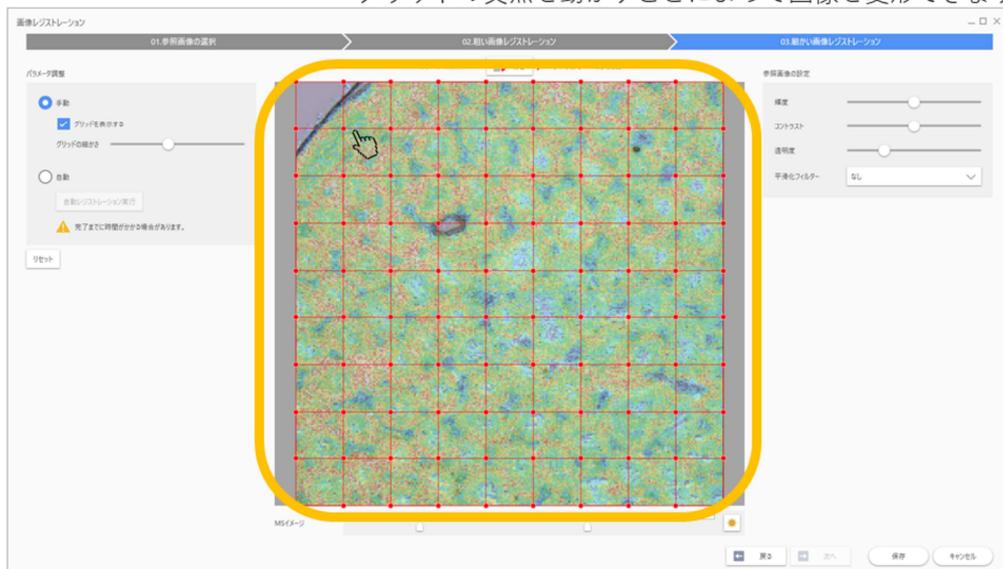
## 4.4 粗い画像レジストレーション



うまく合えば“保存”を選択します。  
更に合わせ込む場合は“次へ”を押します。

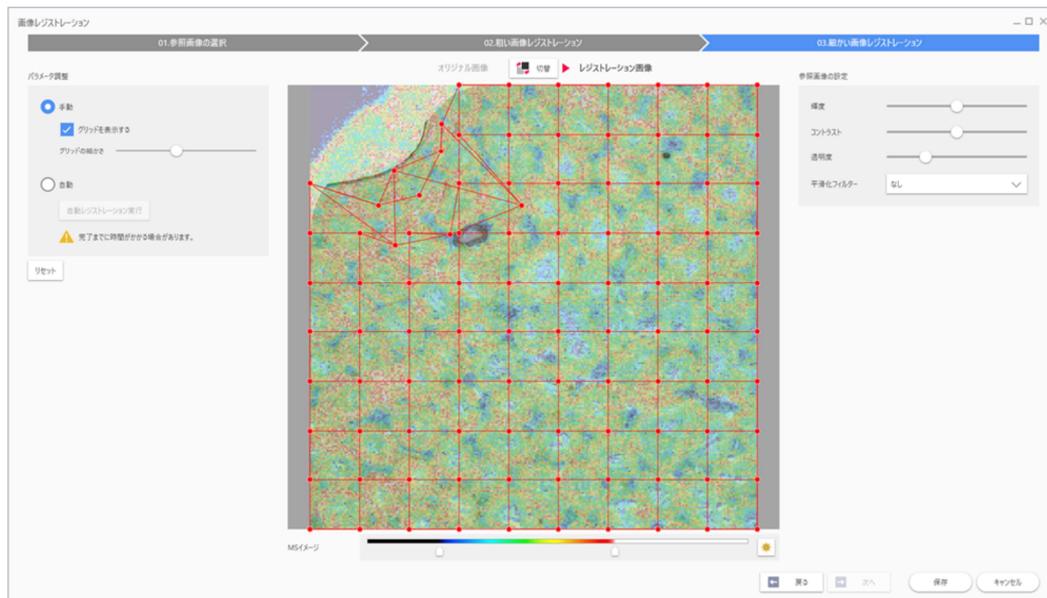
## 4.5 細かい画像レジストレーション

グリッドの交点を動かすことによって画像を変形できます。

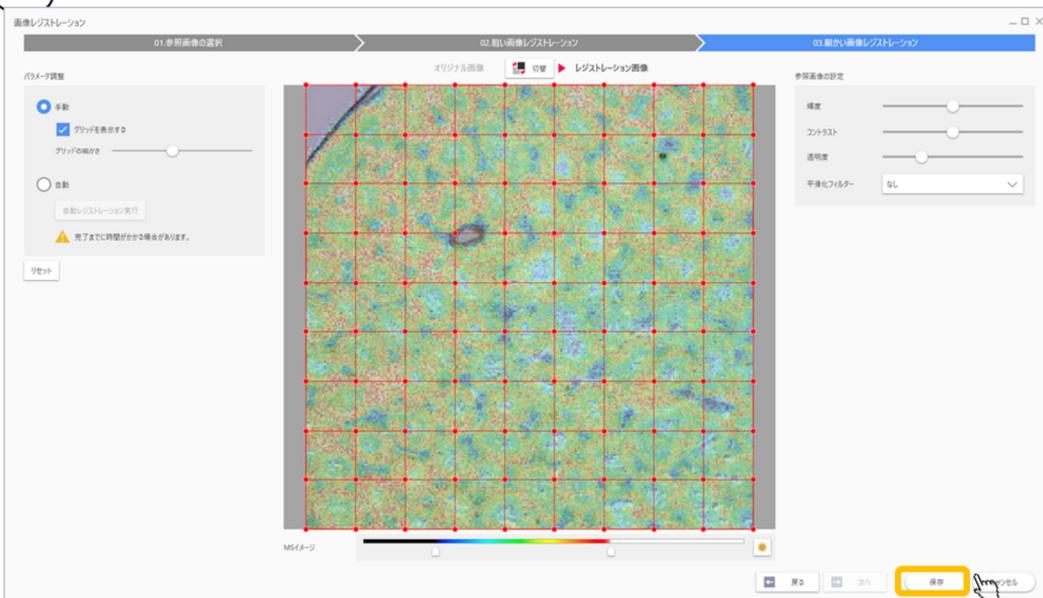


グリッドが重ね書きされた画像が表示されます。  
このグリッドの交点を動かすことによって画像を変形できます。

## 4.6 画像変形例



## 4.7 位置合わせが完了したら“保存”を押します



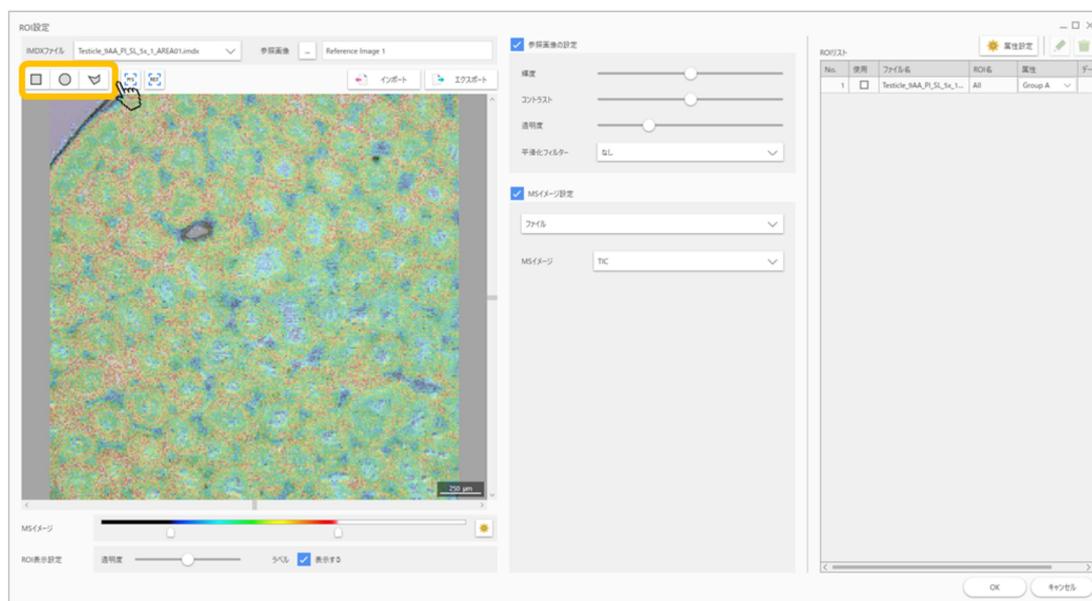
## 5. 必要があればROIを設定します

The screenshot displays the software interface for setting a Region of Interest (ROI). The 'ROI' window is open, showing a table with the following data:

No.	ファイル名	ROI名	データ点数
1	Testfile_SAA	All	62500

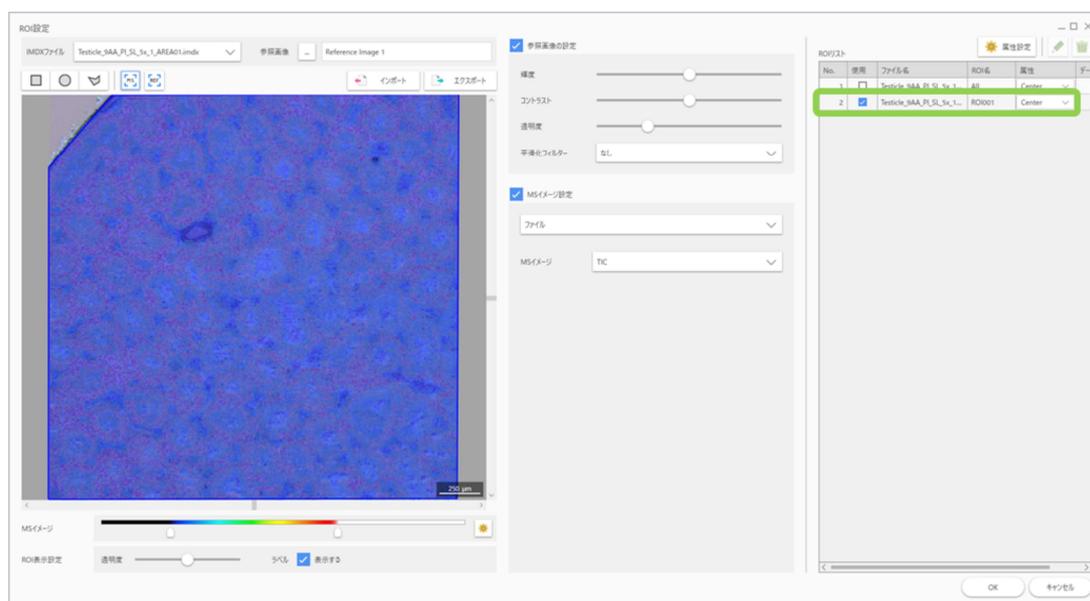
The 'MS Image' window shows a color-coded chromatogram. The 'Total Ion Chromatogram (TIC)' window shows a peak at approximately 800 minutes. The 'MS Image' window also shows a peak at approximately 800 minutes.

## 5.1 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。

## 5.2 ROIリストに記載されます



ROIを書いたあとに属性を設定します。  
※属性が2つ以上ないと設定しないと検定が行われません。

## 6. データ行列計算の”前処理”の設定

The screenshot displays the software interface for data processing. The sidebar on the left contains various icons, with the '前処理設定' (Pre-processing Settings) icon highlighted in yellow. The main window is divided into several panels:

- データ行列テーブル (Data Matrix Table):** A table with columns for No., 名前 (Name), ファイル名 (File Name), 検出値 (Detection Value), and データ点数 (Data Points). The first row shows: 1, Testicle\_SAL, All, 6200.
- MS/MS:** A window showing a chromatogram with a color scale from 0 to 255. The title bar indicates 'MS/MS' and the content area shows a chromatogram with a peak at approximately 800 minutes.
- プロット (Plot):** A window showing a chromatogram with a color scale from 0 to 255. The title bar indicates 'プロット' and the content area shows a chromatogram with a peak at approximately 800 minutes. The x-axis is labeled 'min' and the y-axis is labeled 'Intensity'. The plot title is 'Testicle\_SAL\_PL\_SLS\_LAREA01.indx-Whole\_Ave'.
- MS/MS-View:** A window showing a chromatogram with a color scale from 0 to 255. The title bar indicates 'MS/MS-View' and the content area shows a chromatogram with a peak at approximately 800 minutes.

## 6.1 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。

TICが用いられることが多いです。



## 6.3 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: 0.000 %

m/z範囲:  自動  手動 (10,00000 - 10000,00000 Da) ファイル範囲を設定

ビンサイズ: **10000** Da

タバリング Matrix Clusters

指定ピーク除外 指定m/zを除外

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。

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。

## 6.4 データ行列の計算

The screenshot displays a software interface with a central dialog box titled "処理実行" (Execute Processing). The dialog box contains the following text:

以下の計算を実行します。  
データ行列作成

Buttons for "OK" and "キャンセル" (Cancel) are visible at the bottom of the dialog box.

The background interface includes several panels:

- データ行列テーブル** (Data Matrix Table): A table with columns for No., 名前 (Name), and Value. It contains one row with No. 1, Name Testicle\_Sk\_A01, and Value 6200.
- グラフ** (Graph): A plot 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+05. Several peaks are labeled with their m/z values: 721.402, 744.540, 767.402, 781.534, 811.534, 837.530, and 865.530.
- MSイメージ** (MS Image): A heatmap showing intensity distribution across m/z and retention time. The x-axis is labeled "m/z" and the y-axis is labeled "TIC".

## 6.5 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。

# 6.7 データ行列計算完了

The screenshot displays a software interface with several panels:

- Table (Data Matrix):** A table with columns 'No.', '質量', 'タグ', '分子', and '強度'. It lists 18 data points with their respective mass, tag, molecular weight, and intensity values.
- MSイメージ (MS Image):** A heatmap visualization showing intensity across a range of mass and tag values.
- プロット (Plot):** A chromatogram plot showing intensity versus time (min) with several peaks labeled with their retention times.
- 解像パラメータ (Resolution Parameters):** A table listing parameters such as 'ノイズサイズ', 'データ行列線形化方法', 'm/z範囲', '許容幅(中心サイズ [Da])', 'スリッパ', '解内リスト', and 'しきい値設定'.

## 7. “類似画像抽出計算”を選択

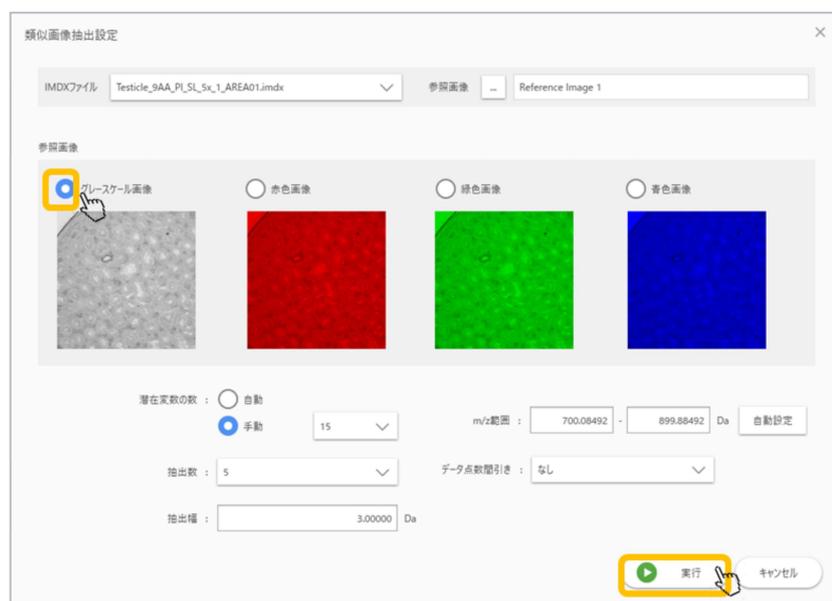
The screenshot displays a software interface with several panels. The central panel shows a table of data processing methods. The '類似画像抽出計算' (Similar Image Extraction Calculation) method is highlighted in blue. The right panel shows a heatmap visualization of the data. The bottom panel shows a plot of the data.

No.	処理	ファイル名	ROI名	データ数
1	選択	Tetlicke_3A_	All	6250
2	✓	Tetlicke_3A_	ROI001	6124

No.	処理	タイプ	手段	ROI	ROI001
1	✓		499.9849-705.9849	705.9849	652925.339
2	✓		705.9849-705.9849	702.9849	94122.669
3	✓		705.9849-705.9849	704.9849	97835.294
4	✓		705.9849-707.9849	706.9849	96553.804
5	✓		707.9849-709.9849	708.9849	121751.631
6	✓		709.9849-711.9849	710.9849	109664.271
7	✓		711.9849-713.9849	712.9849	90297.347
8	✓		713.9849-715.9849	714.9849	90355.113
9	✓		715.9849-717.9849	716.9849	94399.211
10	✓		717.9849-719.9849	718.9849	110795.174
11	✓		719.9849-721.9849	720.9849	105205.372
12	✓		721.9849-723.9849	722.9849	96992.969
13	✓		723.9849-725.9849	724.9849	144113.918
14	✓		725.9849-727.9849	726.9849	103443.039
15	✓		727.9849-729.9849	728.9849	87352.024
16	✓		729.9849-731.9849	730.9849	84029.524
17	✓		731.9849-733.9849	732.9849	93534.969
18	✓		733.9849-735.9849	734.9849	114660.525

## 7.1 使用する色を選択（この例では白黒）



画像の中の単色しか扱えません。

参照画像の内、使用する色を指定してください。

白黒の場合はグレースケールを選択してください。

潜在変数は自動のほうが精度はいいですが時間がかかります。

抽出数は自動的に画像化されるm/zの数です。

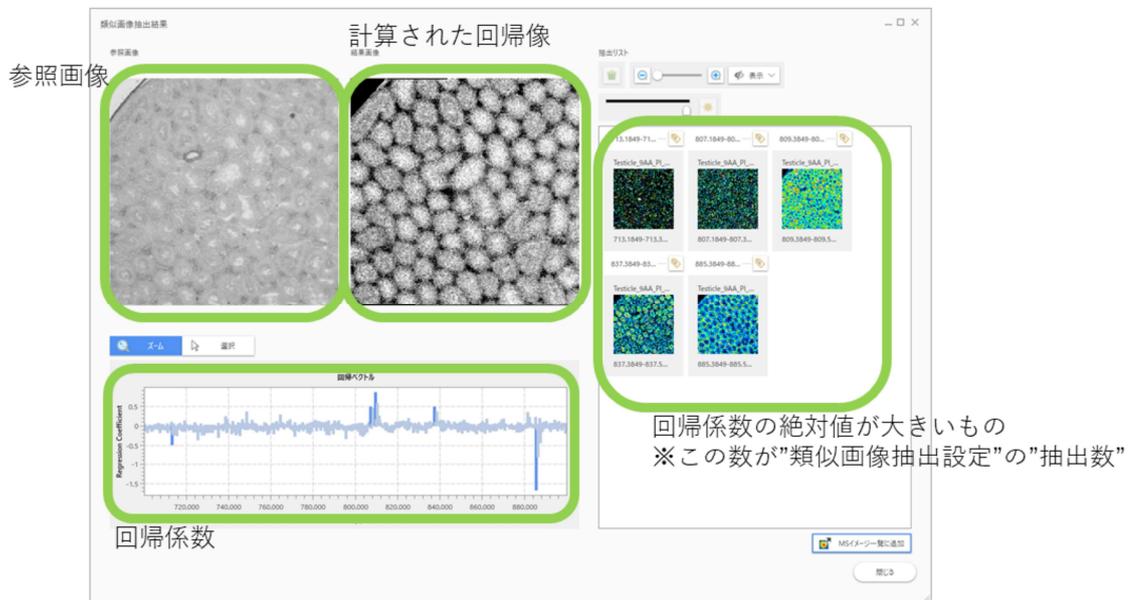
データ点数を間引くと得られる像も間引かれます。

抽出幅は同位体ばかり出てくるのを防ぐための幅でその範囲内の最大の回帰係数もm/zだけが抽出されます。

## 7.2 計算ダイアログ



## 7.3 類似画像抽出結果



左側が参照画像、中央がMSイメージングデータから計算された回帰像です。右側の抽出リスト内に回帰係数の絶対値が大きいものが画像化されます。この数が"類似画像抽出設定"の"抽出数"です。

## 7.3メイン画面に画像を追加

抽出リストで画像を選択して  
“MSイメージ一覧に追加”ボタン  
を押す

抽出リストで画像を選択して“MSイメージ一覧に追加”ボタンを押すと、メインの画面に選択した画像が追加されます。

## 7.4 MSイメージ一覧に画像が追加された

The screenshot displays a software interface with several panels:

- Table:** A table with columns: No., 処理 (Processing), タイプ (Type), 中心座標 (Center Coordinates), and 共有値 (Shared Value). It lists 18 rows of data.
- MSイメージ (MS Image):** A large plot showing a color-coded image with a central dark spot. The title is 'Tic'. The x-axis is labeled 'm/z' and the y-axis is labeled 'Intensity'.
- Zoomed-in Plot:** A smaller plot showing a zoomed-in view of the MS image, with a green circle highlighting a specific region. The title is 'Tic'. The x-axis is labeled 'm/z' and the y-axis is labeled 'Intensity'.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images with columns: ファイル名 (File Name), タイプ (Type), and 共有値 (Shared Value). The list includes files like 'Tic', 'Tic\_1', 'Tic\_2', etc.

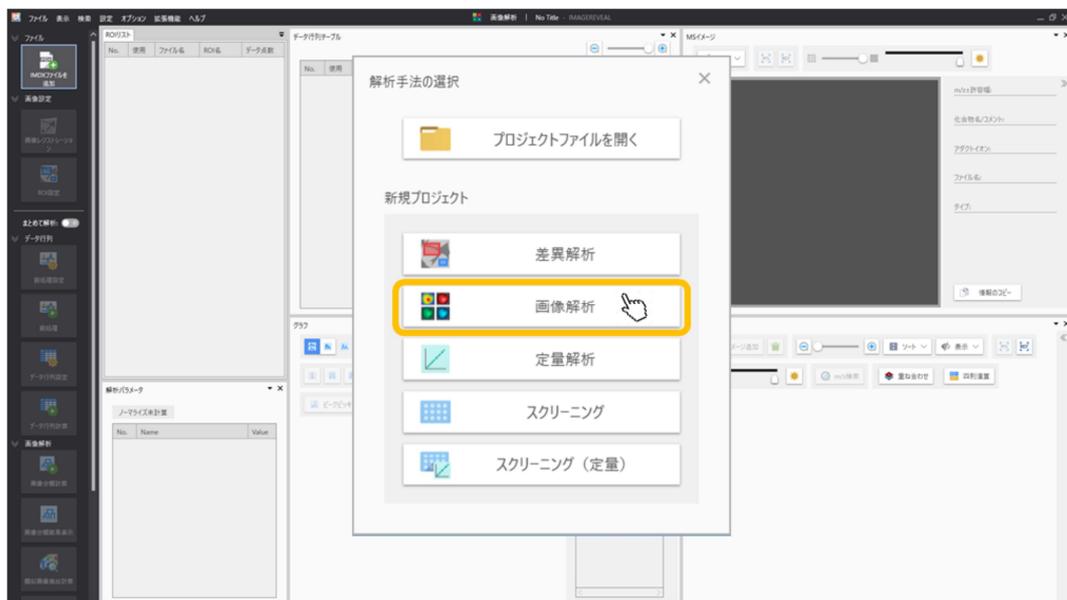
例

1. 切片上でどんな成分がどんな分布をしているか
2. 既知の局在と同じ分布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

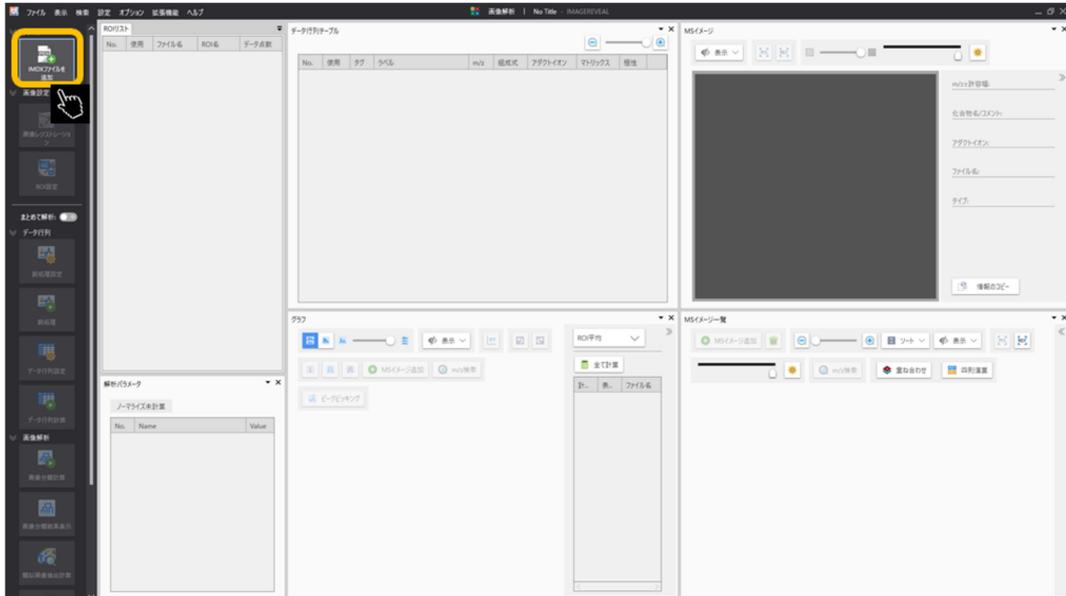
1. “画像解析”を選択
2. データ読み込み
3. 必要があればROI設定
4. データ行列テーブル計算
5. セグメンテーション

# 1. “画像解析”を選択



データファイル(.imdx形式)を読み込みます。

## 2. データファイル (.imdx)を追加

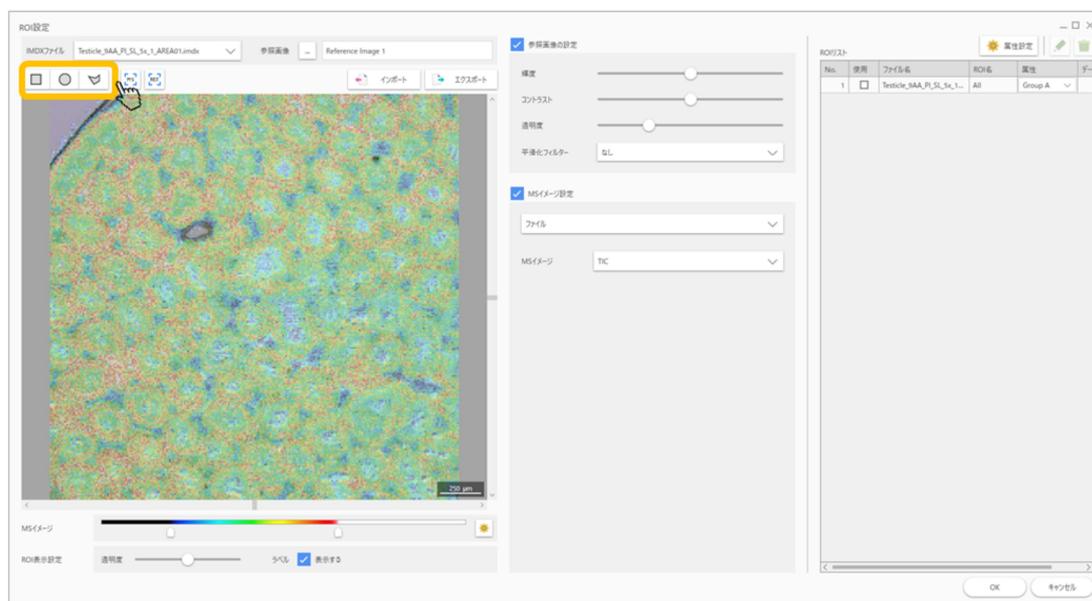


### 3. 必要があればROIを設定します

The screenshot shows the software interface for setting a Region of Interest (ROI). The left sidebar contains a vertical menu with icons for various functions, and the 'ROI設定' (ROI Setting) icon is highlighted with a yellow box and a mouse cursor. The main window is divided into several panels:

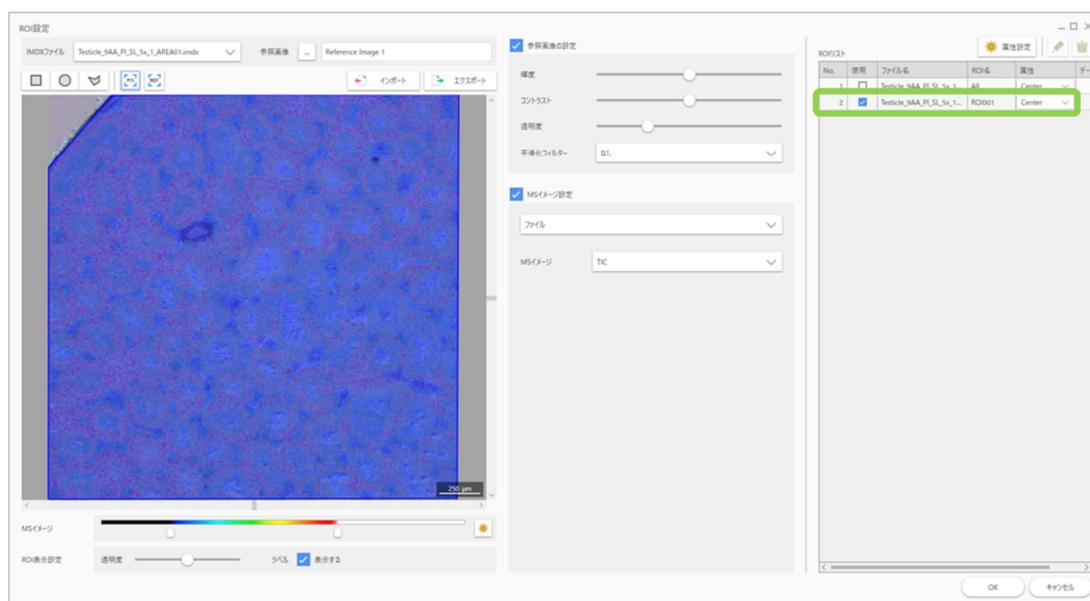
- ROI設定 (ROI Setting):** A table with columns for No., 名前 (Name), ファイル名 (File Name), ROI名 (ROI Name), and データ点数 (Data Points). The table contains one entry: No. 1, 名前 Testicle\_Sk, ファイル名 All, ROI名 All, and データ点数 62500.
- データ行列タブ (Data Matrix Tab):** A table with columns for No., 名前 (Name), タイプ (Type), and 単位 (Unit). The table is currently empty.
- MSイメージ (MS Image):** A color-coded mass spectrum image showing intensity across a range of m/z values.
- グラフ (Graph):** A chromatogram plot showing intensity versus m/z. The x-axis ranges from 700 to 900 m/z, and the y-axis ranges from 0E+00 to 2E+05. A prominent peak is visible at approximately 800 m/z. The plot title is 'Testicle\_SkA\_P1\_Sk\_1\_AREAD1.indx-Whole\_Ave'.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images, including 'Testicle\_SkA\_P1\_Sk\_1\_AREAD1.indx' and 'TIC'.

### 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。

## 3.2 ROIリストに記載されます



ROIを書いたあとに属性を設定します。  
※属性が2つ以上ないと設定しないと検定が行われません。

## 4. データ行列計算の”前処理”の設定

The screenshot displays a software interface for data matrix calculation. The main window is titled "No Title - MMS000001". The interface is divided into several panels:

- Left Panel:** A vertical toolbar with various icons. The "前処理設定" (Pre-processing Settings) icon is highlighted with a yellow box and a mouse cursor.
- Top Left Panel (RDFリスト):** A table with columns: No., 名前, ファイル名, 対応, データ点数. It contains one entry: No. 1, 名前 Testicle\_SAL, ファイル名 All, データ点数 62500.
- Top Middle Panel (データ行列テーブル):** A table with columns: No., 名前, タイプ, サイズ. It contains one entry: No. 1, 名前 m/z, タイプ 縦向き, サイズ アダプトイン, マトリクス 横向き.
- Top Right Panel (MSイメージ):** A 2D heatmap visualization of the data matrix. The x-axis is labeled "m/z" and the y-axis is labeled "Intensity". The plot shows a complex pattern of colored spots (red, green, blue, yellow) representing different mass-to-charge ratios and their intensities.
- Bottom Left Panel (クロマト):** A chromatogram plot 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+05. A prominent peak is visible at approximately 800 m/z. The plot is titled "Testicle\_SAL\_PL\_SLS\_SLS\_1\_AREAD1.indx-Whole\_Ave".
- Bottom Middle Panel (ファイル):** A list of files with columns: 名前, ファイル名, サイズ. It contains two entries: Testicle\_SAL\_1 and Testicle\_SAL\_100.
- Bottom Right Panel (MSイメージ一覧):** A list of MS images with columns: 名前, ファイル名, サイズ. It contains two entries: Testicle\_SAL\_PL\_SLS\_SLS\_1\_AREAD1.indx and Testicle\_SAL\_PL\_SLS\_SLS\_100\_AREAD1.indx.

## 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。

TICが用いられることが多いです。

## 4.2 データ行列の設定

The screenshot displays a software interface for configuring data matrices. The main window is titled "No Title - MAGEPROVAL".

**データ行列テーブル (Data Matrix Table):**

No.	名前	ファイル名	MS名	データ点数
1		Testicle_Sk_	All	6200

**プロット (Plot):**

Intensity vs. m/z. Title: Testicle\_SkA\_P1\_Sk\_1\_AREAd1.indx-Whole\_Ave.

m/z	Intensity
721.402	1.4E+06
744.540	1.4E+06
767.402	1.4E+06
781.514	1.4E+06
807.538	1.4E+06
821.538	1.4E+06
845.538	1.4E+06

**MS/MS (Mass Spectrometry):**

MS/MS-View: Testicle\_SkA\_P1\_Sk\_1\_AREAd1.indx. TIC. 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: 0.000 %

m/z範囲:  自動  手動 (10,00000 - 1000,00000 Da) ファイル範囲を設定

ビンサイズ: **10000** Da

タバリング Matrix Clusters

指定ビン除外 指定m/z除外

OK キャンセル

対象とするピークを選択します。

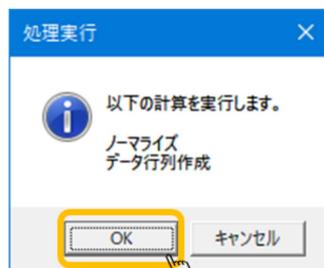
ノンターゲットはスペクトルから一定幅で信号強度を切り出します。ターゲットは特定のm/z値と許容幅を指定します。

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 a software interface with several panels. A central dialog box titled "処理実行" (Execute Processing) is active, containing 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) and two buttons: "OK" and "キャンセル" (Cancel). The "OK" button is highlighted with a yellow box. In the background, the "データ行列作成" (Data Matrix Creation) panel shows a table with columns "No.", "ファイル名" (File Name), "測定値" (Measurement Value), and "データ点数" (Data Points). The table contains one entry: No. 1, File Name: Testfile\_SAA\_001, Measurement Value: A01, Data Points: 62500. Below this, the "解析パラメータ" (Analysis Parameters) panel shows a table with columns "No.", "Name", and "Value". The "グラフ" (Graph) panel shows a chromatogram with intensity on the y-axis (0E+00 to 2E+05) and time on the x-axis (700 to 900 minutes). The "MSイメージ" (MS Image) panel shows a color-coded mass spectrum plot.

## 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 a software interface with the following components:

- Left Sidebar:** Contains navigation icons for file operations, data processing, and analysis.
- Top Panel:** Shows 'ROIリスト' (ROI List) with two entries: 'Tetdicc\_MAL\_A0' (No. 1, 62700) and 'Tetdicc\_MAL\_RC0001' (No. 2, 61604).
- Main Window:** Displays a table titled 'データ行列テーブル' (Data Matrix Table) with columns for No., 番号, 形状, サイズ, and 平均. The table lists 18 rows of data points.
- MSイメージ (Top Right):** Shows a large heatmap visualization of the data matrix. The legend indicates '生物物私ノット: TC' and 'ファイル名: Tetdicc\_MAL\_P\_RL\_Sc\_LARRAU.moh'.
- MSイメージ (Bottom Right):** Shows a smaller heatmap visualization of the data matrix. The legend indicates '生物物私ノット: TC'.
- Bottom Panel:** Contains a '解析パラメータ' (Analysis Parameters) table and a 'パラメータ' (Parameters) section.

No.	番号	形状	サイズ	平均
1	499.9849-703.9849	703.4849	62068.316	
2	703.9849-703.9849	703.4849	63720.544	
3	703.9849-703.9849	703.4849	49473.960	
4	703.9849-703.9849	703.4849	33605.944	
5	703.9849-704.9849	704.4849	37306.413	
6	704.9849-703.9849	703.4849	60726.376	
7	705.9849-703.9849	703.4849	49493.792	
8	706.9849-703.9849	703.4849	58954.616	
9	707.9849-703.9849	703.4849	41149.677	
10	708.9849-703.9849	703.4849	62335.237	
11	709.9849-710.9849	710.4849	54811.288	
12	710.9849-711.9849	711.4849	58996.103	
13	711.9849-712.9849	712.4849	37281.444	
14	712.9849-713.9849	713.4849	37281.444	
15	713.9849-714.9849	714.4849	62377.341	
16	714.9849-715.9849	715.4849	60321.903	
17	715.9849-716.9849	716.4849	48194.118	
18	716.9849-717.9849	717.4849	49373.888	

No.	Name	Value
1	ノボサイズ	なし
2	データ行列解析方法	ノンタグ
3	mノ数値	699.984
4	許容確率閾値 (Da)	1.0000
5	タグリング	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 shows a software interface with several panels. The 'ROI設定' (ROI Settings) panel is the primary focus, with the 'セグメンテーション' (Segmentation) option highlighted by a yellow box and a mouse cursor. Other panels include a data table, a heatmap, and various control panels.

No.	名前	ROI名	データ番号
1	ROI1	ROI1	6200
2	ROI2	ROI2	6199

No.	番号	タグ	タグ名	ROI名	ROI値
1	1	ROI1	ROI1	ROI1	6200
2	2	ROI2	ROI2	ROI2	6199
3	3	ROI3	ROI3	ROI3	6198
4	4	ROI4	ROI4	ROI4	6197
5	5	ROI5	ROI5	ROI5	6196
6	6	ROI6	ROI6	ROI6	6195
7	7	ROI7	ROI7	ROI7	6194
8	8	ROI8	ROI8	ROI8	6193
9	9	ROI9	ROI9	ROI9	6192
10	10	ROI10	ROI10	ROI10	6191
11	11	ROI11	ROI11	ROI11	6190
12	12	ROI12	ROI12	ROI12	6189
13	13	ROI13	ROI13	ROI13	6188
14	14	ROI14	ROI14	ROI14	6187
15	15	ROI15	ROI15	ROI15	6186
16	16	ROI16	ROI16	ROI16	6185
17	17	ROI17	ROI17	ROI17	6184
18	18	ROI18	ROI18	ROI18	6183

必要があれば ROI設定  
データ行列を計算

## 5.1 セグメンテーションパラメータ

セグメンテーションパラメータ

クラスター数 2 - 5

距離 ユークリッド

m/z範囲 709.42480 - 897.48088 Da 自動設定

実行 キャンセル

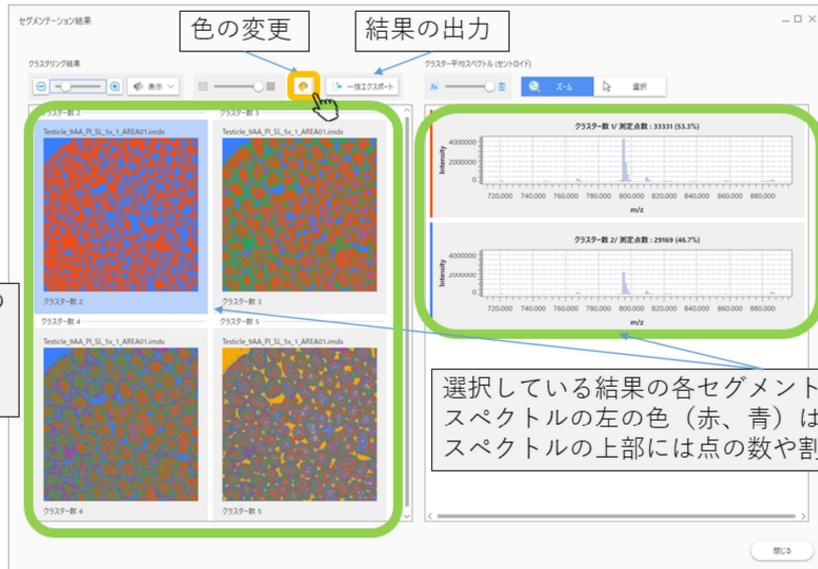
セグメントの数を設定します。  
この場合だと、2群、3群、4群、5群に分けた4つの結果が表示されます。

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 セグメンテーション計算



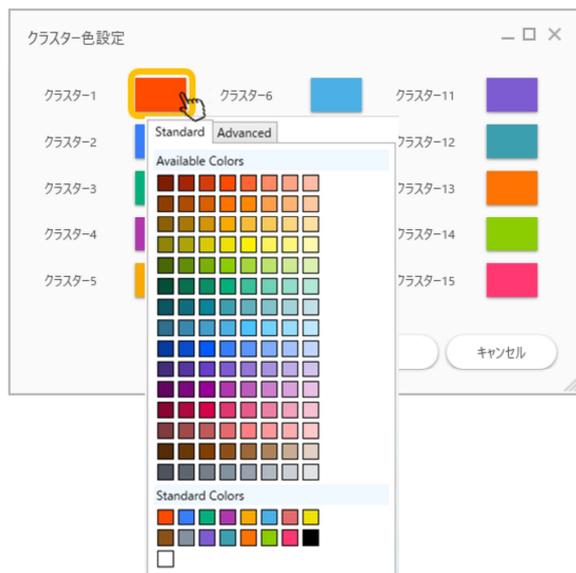
## 5.3セグメンテーション結果



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

## 5.4 セグメントの色の変更



各クラスタの色を変更できます。