

まとめて解析

まとめて解析 機能Ver1.1から付きました。

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The left sidebar contains various function buttons, with 'まとめて解析' (Batch Analysis) highlighted by a yellow box. 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 for data matrix details.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the sample.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A smaller thumbnail of the MS image.
- グラフ (Graph):** A panel for data visualization and analysis options.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A section for configuring analysis settings.

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

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イメージ詳細情報:

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

グラフ設定:

- スเปクトル: 箱ひげ図
- 表示: 表示
- MSイメージ追加
- m/z検索
- ROI平均
- ピークピッキング

解析パラメータ:

- ノーマライズ未計算
- Table with columns: No., Name, Value

まとめて解析のスイッチでアシスタント  
バーの内容が変わります



# まとめて解析 設定画面

画像レジストレーション、ROI設定が必要な場合は事前に済ませてください。



まとめて解析

前処理 なし

データ行列 ノンターゲット 自動 0.2Da

検定

PCA

PLS

プロジェクトファイルの保存 !

ノーマライズ **なし** TIC XIC

インポート エクスポート

No.	使用	m/z	許容幅
-----	----	-----	-----

前処理、データ行列設定、検定、PCA、PLS、プロジェクトファイルの保存の設定が可能です。

検定、PCA、PLS、プロジェクトファイルの保存については選択可能です。

基準値を設定

最小しきい値 (%)

指定方法  範囲  中心+許容範囲

戻る 次へ 確定 キャンセル

# 1. 前処理（ノーマライズ）

まとめて解析

前処理 なし

データ行列  
ノンターゲット  
自動  
0.2Da

検定

PCA

PLS

プロジェクトファイルの保存 !

ノーマライズ **なし** TIC XIC

インポート エクスポート

No.	使用	m/z	許容幅
スペクトルのノーマライズの基準を設定します。			

基準値を設定

最小しきい値 (%)

指定方法  範囲  中心+許容幅

戻る 次へ 確定 キャンセル

## 2. データ行列設定

まとめて解析

前処理  
なし

データ行列  
ノンターゲット  
自動  
0.2Da

検定

PCA

PLS

プロジェクトファイルの保存 !

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 700.00000 - 900.01906 Da ファイル範囲を設定

ピンサイズ  
0.2000 Da

ラベリング Matrix Clusters

指定ピーク除外 指定m/zを除外

データ行列設定はターゲット、ノンターゲットから選択可能です。  
ピークピッキングの結果を使用する場合はまずメインウィンドウからピークピッキングを行います。  
この際にROIのスペクトルが必要な場合は先に通常の手順でのデータ行列計算が必要です。

戻る 次へ 確定 キャンセル

## 2. データ行列設定

# ピークピッキングが必要な場合

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface with several panels:

- ROIリスト** (ROI List): A table listing four ROIs for 'Testicle\_9A...' files, all belonging to 'Group A'.
- データ行列テーブル** (Data Matrix Table): An empty table with columns for 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.
- MSイメージ** (MS Image): A heatmap visualization of the sample with a color scale on the right. Metadata includes '化合物名/コメント: TIC' and 'ファイル名: Testicle\_9AA\_Pi\_SL\_5x\_1\_AREA01.i.mdx'.
- グラフ** (Graph): A mass spectrum plot titled 'Testicle\_9AA\_Pi\_SL\_5x\_1\_AREA01.mdx Whole\_Ave.' showing intensity vs. m/z. A 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 list of MS images with a table showing 'Testicle\_9AA\_Pi...' and '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) with an empty table.

Two yellow boxes highlight the 'ピークピッキング' (Peak Picking) button in the 'グラフ' panel and the 'ピークピッキング' button in the 'MSイメージ一覧' panel, both with hand cursors pointing to them. A circled '2' is next to the first button, and a circled '1' is next to the second button.

## 2. データ行列設定

# ピークピッキング

ピークピッキング

パラメータ設定

m/z範囲  -  Da   しきい値  %

スムージング    モノアイソトピックの検出

データポイント数  同位体クラスター最小ピーク本数

検出ピーク数  マッチング許容誤差(ppm)

指定ピーク除外

許容幅  Da

スペクトルグラフ  ピークを表示    ピークリストに追加 **①**

No.	m/z	強度
1	795.52084	2610406.78912
2	796.52363	1246547.02408
3	797.52374	477373.43005
4	809.50934	333509.80191
5	767.49182	222009.97713
6	885.53782	209515.60662
7	810.51233	161081.70626
8	798.52468	134667.84063
9	886.54171	112779.08309
10	795.76852	112315.95918
11	796.05312	100498.69080
12	768.49448	99257.37820
13	837.53900	87275.49571
14	796.35302	86106.85497
15	857.50878	84254.39123
16	796.76528	82976.12782
17	793.50771	80525.26493
18	795.93371	77177.85759
19	721.48186	72416.24142
20	823.54467	71382.65062
21	797.05848	68667.62055
22	821.53493	66841.67027
23	811.51406	62674.23448
24	883.52173	50823.30020
25	797.36418	50104.53510
26	794.51569	49913.50003

化合物テンプレートとして保存  **②**  ターゲットリストとして使用



## 2. データ行列設定

自動的に“ターゲット”になり、ピークピッキング結果が入力される

まとめて解析

解析方法 **ターゲット** ノンターゲット  しきい値  %

化合物リスト

使用した化合物テンプレート：ピークリスト  
除外した化合物テンプレート： リストの作成

No.	<input checked="" type="checkbox"/>	m/z	化合物名	組成式	マトリックス	極性	アダクトイオン
1	<input checked="" type="checkbox"/>	273.04150	273.04150		Any	両極性	
2	<input checked="" type="checkbox"/>	230.04050	230.04050		Any	両極性	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	385.14503	385.14503		Any	両極性	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	241.01762	241.01762		Any	両極性	
5	<input checked="" type="checkbox"/>	229.05424	229.05424		Any	両極性	
6	<input checked="" type="checkbox"/>	370.13479	370.13479		Any	両極性	
7	<input checked="" type="checkbox"/>	386.14078	386.14078		Any	両極性	
8	<input checked="" type="checkbox"/>	232.03642	232.03642		Any	両極性	
9	<input checked="" type="checkbox"/>	274.03961	274.03961		Any	両極性	
10	<input checked="" type="checkbox"/>	231.04678	231.04678		Any	両極性	
11	<input checked="" type="checkbox"/>	384.13629	384.13629		Any	両極性	
12	<input checked="" type="checkbox"/>	259.02437	259.02437		Any	両極性	
13	<input checked="" type="checkbox"/>	421.12234	421.12234		Any	両極性	
14	<input checked="" type="checkbox"/>	284.09077	284.09077		Any	両極性	
15	<input checked="" type="checkbox"/>	371.13084	371.13084		Any	両極性	
16	<input checked="" type="checkbox"/>	299.05953	299.05953		Any	両極性	
	<input checked="" type="checkbox"/>	239.06423	239.06423		Any	両極性	

許容幅  Da

← 戻る 次へ → 確定 キャンセル

# 3. 検定

まとめ解析

- 前処理 なし
- データ行列  
ターゲット  
ピークリスト  
0.2Da
- 検定
- PCA
- PLS
- プロジェクトファイルの保存 !

設定項目はありません。

戻る 次へ 確定 キャンセル

設定項目は表示されませんが、2種類以上の属性を持つROIの設定が必要です

# PCA

まとめて解析

主成分数  自動  手動 5

前処理

- 前処理 なし
- データ行列 ターゲット ピークリスト 0.2Da
- 検定
- PCA
- PLS
- プロジェクトファイルの保存 !

戻る 次へ 確定 キャンセル

# PLS

まとめて解析

前処理 なし

データ行列  
ターゲット  
ピークリスト  
0.2Da

検定

PCA

PLS

プロジェクトファイルの保存 !

潜在変数の数  自動  手動 5

前処理 パレートスケール

ROIリスト

No.	ファイル名	ROI名	属性	Y値
1	Testicle_9AA_PL_SL_5x_1...	ROI001	Group A	0.00000
2	Testicle_9AA_PL_SL_5x_1...	ROI002	Group A	0.00000
3	Testicle_9AA_PL_SL_5x_1...	ROI003	Group A	0.00000

インポート エクスポート

PLSを使用するにはY値に入力が必要です。

戻る 次へ 確定 キャンセル

# プロジェクトファイルの保存

- 前処理なし
- データ行列  
ターゲット  
ピークリスト  
0.2Da
- 検定
- PCA
- PLS
- プロジェクトファイルの保存 !

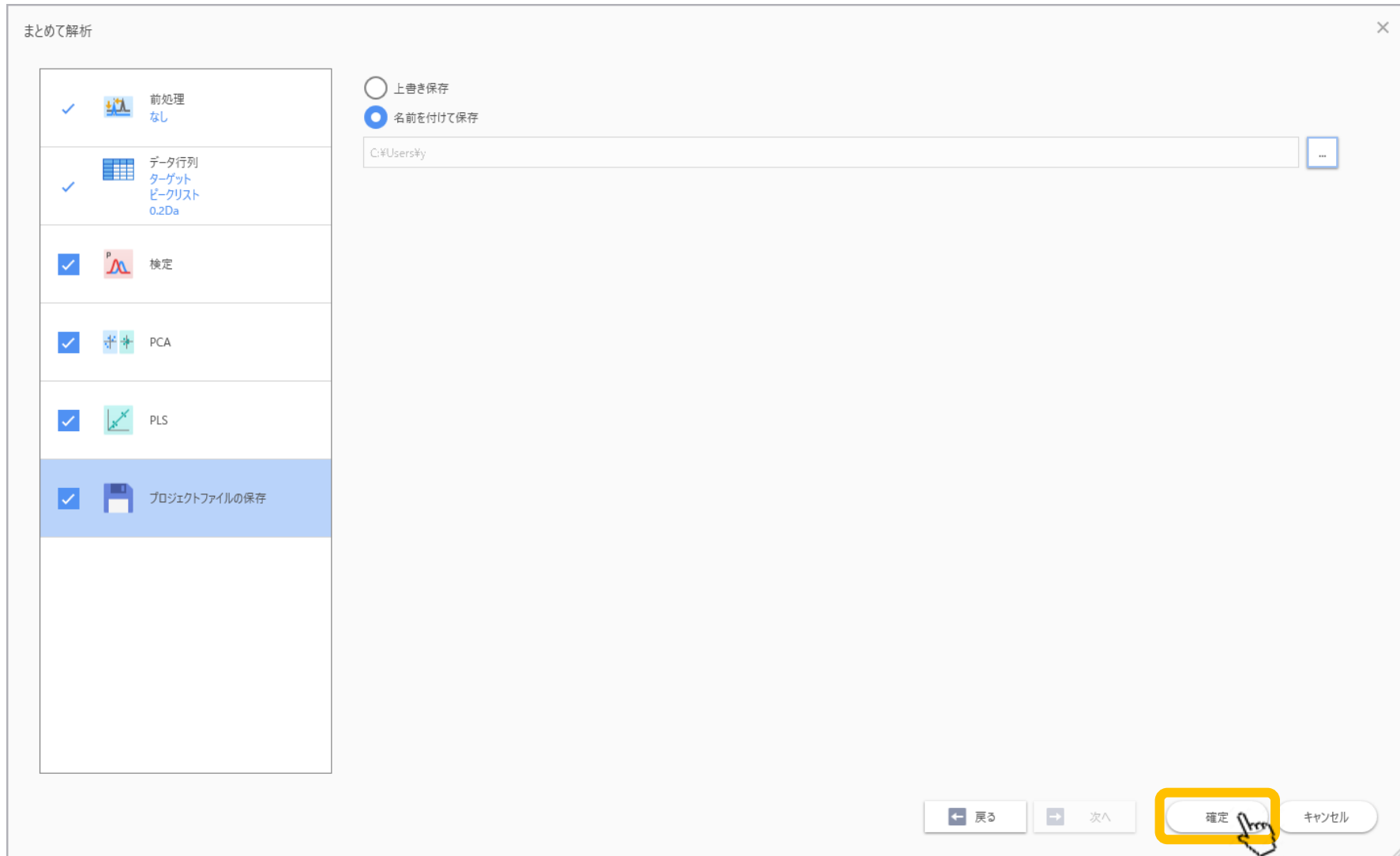
- 上書き保存
- 名前を付けて保存

入力が必要です。

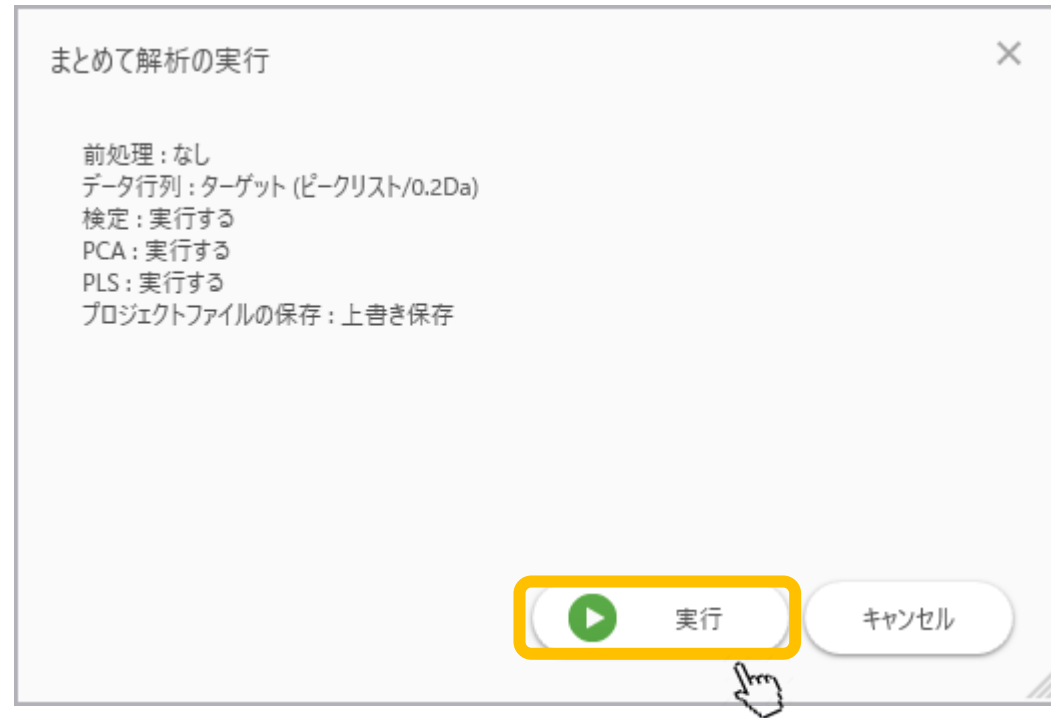
保存する場合は保存先のフォルダを選択、  
保存するプロジェクトファイル名を入力し  
てください。

保存しない場合はチェックを外してください。

# 全部設定できたら”確定”を押します








実行内容の確認画面が表示されます。



# 実行内容が表示されます。

まとめ解析

 前処理 なし	✓ 正常終了	処理時間: 前処理の処理時間はデータ行列作成に含まれます。
 データ行列 ターゲット ピークリスト 0.2Da	✓ 正常終了	処理時間: 00:00
 検定	✓ 正常終了	処理時間: 00:00
 PCA	✓ 正常終了	処理時間: 00:00
 PLS	✓ 正常終了	処理時間: 00:00
 プロジェクトファイルの保存	✓ 正常終了	

データ行列を作成

計算中...31872

キャンセル

閉じる



完了すると解析結果が表示されます。

ROIリスト

No.	使用	ファイル名	ROI名	属性
1		Testicle_9A...	All	Group A
2	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI001	Group A
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI002	Group B
4	<input checked="" type="checkbox"/>	Testicle_9A...	ROI003	Group C

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	比(Group A)	P値 (ANOVA)	ROI001
			PCA-水平軸	-----	-----	4.612e+002
			PCA-垂直軸	-----	-----	-7.787e+002
1	<input checked="" type="checkbox"/>		795.52084	1.000	1.770e-090	5468311.761
2	<input checked="" type="checkbox"/>		796.52363	1.000	6.435e-062	2688637.248
3	<input checked="" type="checkbox"/>		797.52374	1.000	6.721e-046	1060182.528
4	<input checked="" type="checkbox"/>		809.50934	1.000	2.609e-051	1207444.129
5	<input checked="" type="checkbox"/>		767.49182	1.000	2.265e-027	464170.009
6	<input checked="" type="checkbox"/>		885.53782	1.000	1.506e-074	271578.327
7	<input checked="" type="checkbox"/>		810.51233	1.000	1.923e-035	595925.363
8	<input checked="" type="checkbox"/>		798.52468	1.000	3.418e-021	293653.608
9	<input checked="" type="checkbox"/>		886.54171	1.000	8.841e-049	157102.847
10	<input checked="" type="checkbox"/>		795.76852	1.000	6.522e-064	752801.429

MSイメージ

MSイメージ一覧

Retention Time	MS Image
767.49182	[MS Image]
795.52084	[MS Image]
795.76852	[MS Image]
796.52363	[MS Image]
797.52374	[MS Image]
798.52468	[MS Image]
809.50934	[MS Image]
810.51233	[MS Image]
885.53782	[MS Image]
886.54171	[MS Image]

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	ターゲット
3	化合物テンプレート	ピークリス
4	許容幅/ピンサイズ (Da)	0.2000
5	しきい値設定	オフ