

簡単にMSイメージを確認
するには

MSイメージを確認する手順

1. データ行列を作成
2. スペクトルを表示
3. スペクトル上に”m/z指定カーソル”を表示
 1. ”m/z指定カーソル”を左クリックで掴んで移動させるとサムネイル画像が表示されます

1.1 データ行列計算の”前処理”の設定

The screenshot displays the IMAGEREVEAL software interface. The left sidebar contains a menu with the '前処理設定' (Pre-processing Settings) option highlighted. The main window 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 color-coded mass spectrum image. 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. Peaks are labeled with their m/z values: 721, 744, 754, 767, 793, 811, 837, and 885.
- MSイメージ一覧 (MS Image List):** A list of MS images, currently showing 'Testicle_9AA_PL...' with a small thumbnail.

1.2 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。

1.3 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 listing regions of interest.

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 for defining data matrix parameters.

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 heatmap visualization of the data matrix. The right panel shows metadata: 化合物名/コメント: TIC, ファイル名: Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AEA01.i.mdx, タイプ: TIC.
- グラフ (Graph):** A mass spectrum plot titled 'Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AEA01.i.mdx Whole_Ave.' showing intensity versus m/z. The x-axis ranges from 700 to 900 m/z, and the y-axis shows intensity up 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 panel showing a list of MS images, with 'Testicle_9AA_PL...' and 'TIC' visible.

1.4 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 しまいぬ

m/z範囲 自動 手動 - 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。

目的に応じて設定してください。

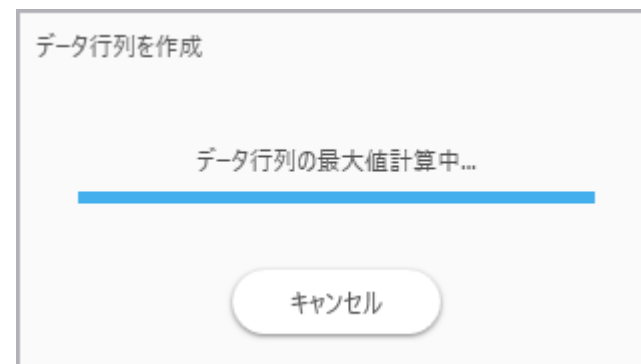
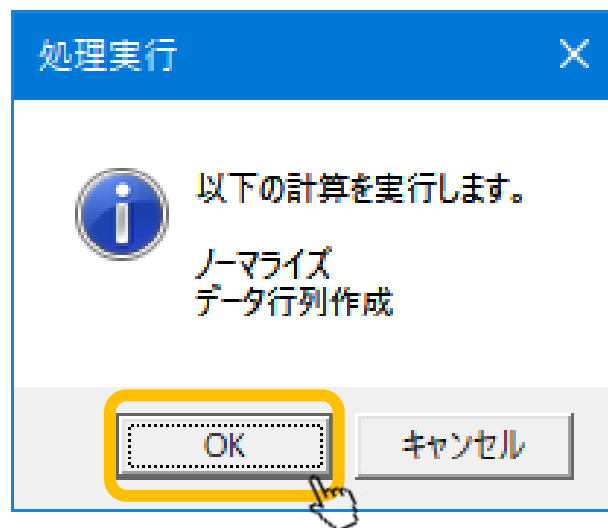
1.5 データ行列の計算

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, 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.imdx 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.
- 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 features '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.

1.6 計算の実行



1.7 データ行列計算完了

データ行列テーブルにデータ行列の概要が表示されます。

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 B
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C
5		Testicle_9A...	ROI004	Group D

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
1	✓		699.9849-700.9849	700.4849	12654.115	10992.916	13195.851
2	✓		700.9849-701.9849	701.4849	10132.104	9749.542	20207.773
3	✓		701.9849-702.9849	702.4849	6875.912	5408.621	10541.267
4	✓		702.9849-703.9849	703.4849	9623.874	8175.758	12906.003
5	✓		703.9849-704.9849	704.4849	8598.983	6357.625	10517.781
6	✓		704.9849-705.9849	705.4849	11917.976	9338.670	13851.114
7	✓		705.9849-706.9849	706.4849	7367.519	5995.169	9259.481
8	✓		706.9849-707.9849	707.4849	7841.996	8671.765	16254.045
9	✓		707.9849-708.9849	708.4849	6609.303	6343.222	10192.927
10	✓		708.9849-709.9849	709.4849	12658.084	13006.758	17694.062

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
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
4	データ行列解析方法	ノンターゲット
5	m/z範囲	699.9849
6	許容幅/ピンサイズ (Da)	1.0000
7	ラベリング	オフ
8	除外リスト	オフ
9	しきい値設定	オフ

2.1 グラフリストの表示

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 Table):** A table showing data points for each ROI.
- MSイメージ (MS Image):** A large heatmap visualization of the sample.
- グラフ (Graph):** A panel for graph settings and a list of graphs.
- 解析パラメータ (Analysis Parameters):** A table of analysis settings.

The **ROIリスト** table contains the following data:

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 B
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C

The **データ行列テーブル** table contains the following data:

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
1	✓		699.9849-700.9849	700.4849	12654.115	10992.916	13195.851
2	✓		700.9849-701.9849	701.4849	10132.104	9749.542	20207.773
3	✓		701.9849-702.9849	702.4849	6875.912	5408.621	10541.267
4	✓		702.9849-703.9849	703.4849	9623.874	8175.758	12906.003
5	✓		703.9849-704.9849	704.4849	8598.983	6357.625	10517.781
6	✓		704.9849-705.9849	705.4849	11917.976	9338.670	13851.114
7	✓		705.9849-706.9849	706.4849	7367.519	5995.169	9259.481
8	✓		706.9849-707.9849	707.4849	7841.996	8671.765	16254.045
9	✓		707.9849-708.9849	708.4849	6609.303	6343.222	10192.927
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
12	✓		710.9849-711.9849	711.4849	8555.765	8655.481	11234.953
13	✓		711.9849-712.9849	712.4849	6515.152	5488.399	9521.748
14	✓		712.9849-713.9849	713.4849	8275.835	7723.166	22881.835
15	✓		713.9849-714.9849	714.4849	6949.865	6083.847	16639.591
16	✓		714.9849-715.9849	715.4849	6666.396	7309.580	19637.225
17	✓		715.9849-716.9849	716.4849	8706.953	7608.531	11899.940
18	✓		716.9849-717.9849	717.4849			

The **グラフ** (Graph) panel shows a list of graphs with a green box highlighting the 'すべて計算' (Calculate All) button and a yellow box highlighting the right arrow button. The graph list contains the following data:

計..	表..	ファイル名
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Testicle_9AA

A text box at the bottom of the screenshot reads: 「<<」をクリックしてグラフリストを展開できます (Clicking '<<' allows you to expand the graph list).

2.2 スペクトルの表示

ROIリスト

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 B
4	✓	Testicle_9A...	ROI003	Group C

データ行列テーブル

No.	使用	タグ	ラベル	m/z	ROI001	ROI002	ROI003
1	✓		699.9849-700.9849	700.4849	12654.115	10992.916	13195.851
2	✓		700.9849-701.9849	701.4849	10132.104	9749.542	20207.773
3	✓		701.9849-702.9849	702.4849	6875.912	5408.621	10541.267
4	✓		702.9849-703.9849	703.4849	9623.874	8175.758	12906.003
5	✓		703.9849-704.9849	704.4849	8598.983	6357.625	10517.781
6	✓		704.9849-705.9849	705.4849	11917.976	9338.670	13851.114
7	✓		705.9849-706.9849	706.4849	7367.519	5995.169	9259.481
8	✓		706.9849-707.9849	707.4849	7841.996	8671.765	16254.045
9	✓		707.9849-708.9849	708.4849	6609.303	6343.222	10192.927
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
12	✓		710.9849-711.9849	711.4849	8555.765	8655.481	11234.953
13	✓		711.9849-712.9849	712.4849	6515.152	5488.399	9521.748
14	✓		712.9849-713.9849	713.4849	8275.835	7723.166	22881.835
15	✓		713.9849-714.9849	714.4849	6949.865	6083.847	16639.591
16	✓		714.9849-715.9849	715.4849	6666.396	7309.580	19637.225
17	✓		715.9849-716.9849	716.4849	8706.953	7608.531	11899.940
18	✓		716.9849-717.9849	717.4849	8636.042	8915.057	13793.636

MSイメージ

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

情報のコピー

グラフ

MSイメージ一覧

グラフリスト内で必要な種類のグラフを選択してスペクトルを表示させます。

解析パラメータ

No.	Name	Value
1	ノーマライズ	TIC
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
4	データ行列解析方法	ノンターゲット
5	m/z範囲	699.9849-717.9849
6	許容幅/ピンサイズ (Da)	1.0000
7	ラベリング	オフ
8	除外リスト	オフ
9	しきい値設定	オフ

ピークピッキング

Intensity

Testicle_9AA_PL_SL_5x_1_AREA01.imdx ROI003_Average

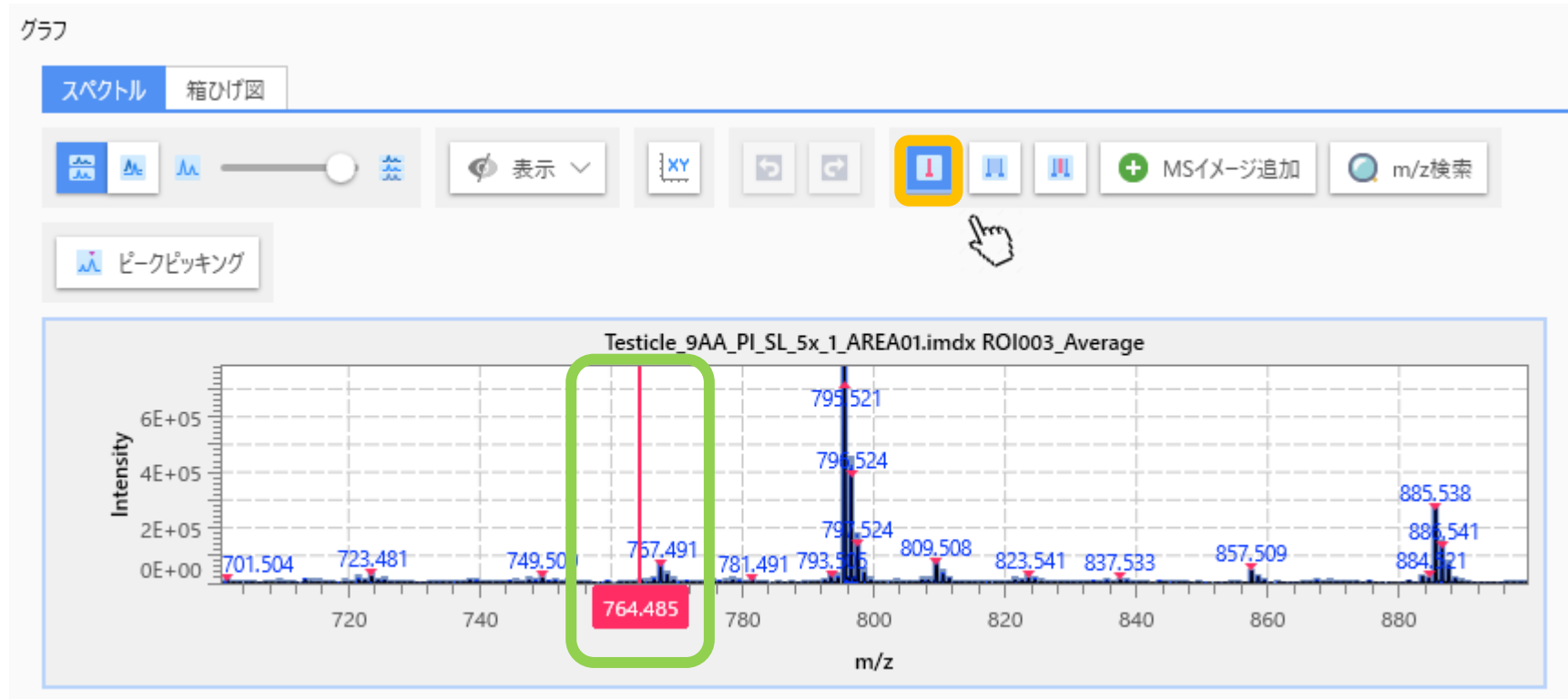
m/z

723.481 767.491 793.505 795.521 796.524 799.524 823.541 857.509 885.538 886.541 887.521

MSイメージ

Testicle_9AA_PL...
TIC

3.1 m/z指定カーソルボタンをクリックしてm/z指定カーソルを表示



3.2 m/z指定カーソルをドラッグすると対応するm/zイメージのサムネイル画像が表示されます。

