

# imzMLから変換する際の データサイズの減らし方

Imdx コンバーター

# データサイズを減らす方法

1. 領域を絞る
2. m/z範囲を絞る
3. ダウンサンプリング
4. サンプリング間隔を大きくする
  1. Processed タイプの imzML もしくは Thermo Fisher RAW 形式の場合

# IMDX コンバーター

The screenshot shows the IMDX Converter application window. The interface is divided into two main sections: '入力' (Input) and '出力' (Output).

**入力 (Input):** KBD/imzML/analyze/RAW

- 対象データ (Target Data):**
  - フォルダ: C:\temp
  - ファイル名: processed.imzml
  - ピクセル数: 713(23, 31)
  - ピッチ: 100.0, 100.0 [um]
  - 測定範囲: m/z 100.038749694 - 1500.225708008
  - m/z: Processed
  - プロファイル (selected)
  - セントロイド
- 参照画像 (Reference Image):**
  - フォルダ:
  - ファイル名:
  - プレビュー:

**出力 (Output):** IMDX

**変換パラメータ (Conversion Parameters):**

- 変換領域 (Conversion Area):**
  - 全測定領域 (selected)
  - 指定矩形領域
  - 左上座標 [ x: 0, y: 0 ]
  - 右下座標 [ x: 0, y: 0 ]
- m/z範囲 (m/z Range):**
  - 全範囲 (変換時に自動計算) (selected)
  - m/z: 100.038749694 - 1500.225708008
- ノイズカット (Noise Cut):**
  - なし (selected)
  - 指定割合以下をカット: 10 %
- サンプリング間隔 (Sampling Interval):**
  - 自動
  - 手動: 10 ppm (selected)
  - IMDXファイルを参照する
- ダウンサンプリング (Downsampling):**
  - ピンサイズ: 3

**質量補正 (Mass Correction):**

- ピーク設定

**強度値補正 (Intensity Correction):**

- TOF用の強度値補正

**サンプル情報 (Sample Information):**

- 極性: 不明
- マトリックス: 不明
- コメント:

**Annotations:**

- 変換領域 (Conversion Area)
- m/z 範囲 (m/z Range)
- サンプリング間隔 (Sampling Interval)
- サンプリング間隔 (Sampling Interval)

変換リストに追加

# 変換領域を絞る

必要な領域だけ変換します。  
単位は測定点数です。

変換パラメータ

変換領域

全測定領域

指定矩形領域

左上座標 [ x  ,  
y  ]

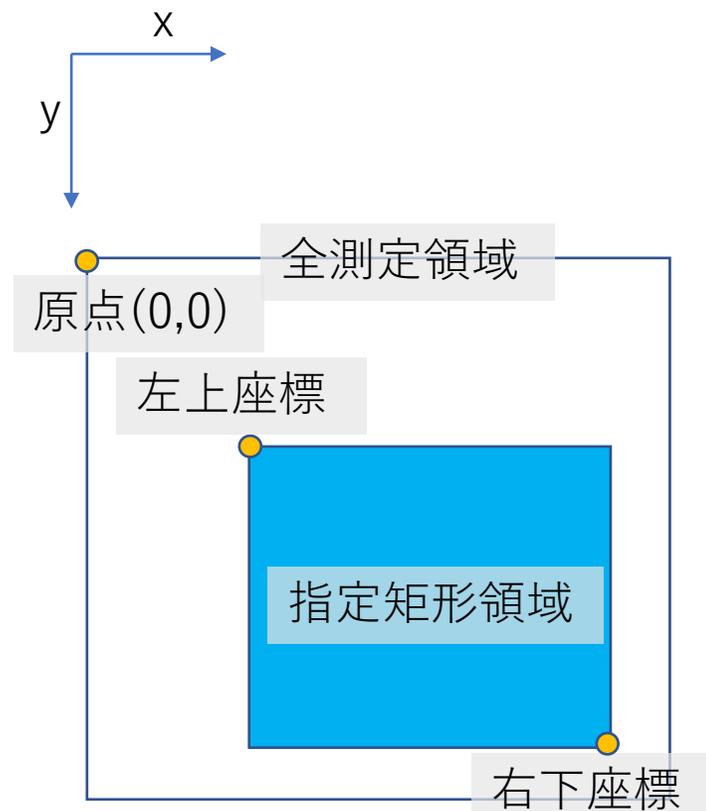
右下座標 [ x  ,  
y  ]

m/z範囲

全範囲 (変換時に自動計算)

m/z  -

ノイズカット



# m/z範囲を絞る

m/z範囲を必要な範囲に限定します。

右下座標 [ x  ,  
y  ]

**m/z範囲**

全範囲 (変換時に自動計算)

m/z  -

**ノイズカット**

なし

指定割合以下をカット  %

**サンプリング間隔**

# サンプリング間隔を変えます。

Processed タイプの imzML もしくは Thermo Fisher RAW 形式の場合

The image shows a software interface with a main settings window and a '詳細設定' (Detailed Settings) dialog box. In the main window, the 'サンプリング間隔' (Sampling Interval) section is highlighted with a green border. It has two radio buttons: '自動' (Automatic) and '手動' (Manual), with '手動' selected. A text input field next to '手動' contains the value '10 ppm'. A gear icon is highlighted with a yellow box, and a blue arrow points from it to the '詳細設定' dialog box. The '詳細設定' dialog box has three radio buttons: '定数' (Constant), 'ppm', and 'm/zの平方根 (m/zが500のときの許容幅を指定)' (Square root of m/z (specify tolerance at m/z 500)), with the last one selected. At the bottom of the dialog are 'OK' and 'キャンセル' (Cancel) buttons.

サンプリング間隔

- 自動
- 手動  ppm

IMDXファイルを参照する

詳細設定

- 定数
- ppm
- m/zの平方根 (m/zが500のときの許容幅を指定)

OK キャンセル

# サンプリング間隔の目安

- “自動”および“定数”：一定間隔が用いられます。
  - “自動”の場合はデータ内の最小間隔です。
  - ※データサイズが大きくなりがちです。
- PPM:  $m/z$ に比例して間隔が広がります。
  - **FT型MS**に使用してください。
  - 目安は(分解能 $\times 10$ )の逆数
    - 分解能100k:  $1/100k/10=1\text{ppm}$
- $m/z$ の平方根：  $m/z$ の平方根に比例して間隔が広がります。
  - **TOF型MS**に使用してください。
  - $m/z$ 500の分解能を基に設定してください。
    - 分解能10k:  $500/10k/10 = 0.005\text{Da}$



# ダウンサンプリング

質量スペクトルのデータ点の間隔を大きくします。

