全サンプルのアラインメントデータ

■ アラインメントについて

アラインメントとは、サンプル間において、*m/z*値および保持時間が近く、同一成分由来と思われるピークを対応付けする作業のことです。本データは、万物メタボロームレポジトリ（http://metabolites.in/things）に含まれる全サンプルのデータを使ってアラインメントを行い、サンプル vs 独立成分を、表形式にまとめたものです。

データ含まれるサンプルの数などについては、version.txt をご覧ください。

※アラインメントの計算には大きな計算機コストと時間が必要なため、データの作成は不定期に実施しています。
※アラインメントの計算は、細かな部分で対応付けのミスが発生することがありますので、データのご利用時にはこの点をご留意ください。例えば、多数のサンプルで共有されている一つの成分が、微妙な溶出時間のゆらぎ等により、ふたつの独立した成分であるかのうように対応付けられている場合などがあり得ます。

■ データについて

ESI ポジティブモードおよびネガティブモードについてアラインメントを実施した結果は、「pos」および「neg」のフォルダにそれぞれ格納されています。各フォルダには、以下の 7 個のファイルが含まれています。ファイルの形式はいずれも、タブ区切りテキスト形式です。

ファイル名	説明
Adduct.txt	アダクトイオンの種類
Charge.txt	電荷
ID.txt	各サンプルにおけるピーク ID
Int.txt	ピーク強度（リニア値）
IntLog.txt	ピーク強度（ログ 10 に変換後、中央値で補正した値）
Mz.txt	*m/z* 値
Rt.txt	保持時間

各ファイルの内容は以下です。

1 行目はヘッダーで、2 行目からがデータとなります。

列	ヘッダー	説明
1	No	対応付けされたピーク群に振られた ID(アラインメント ID)
2	Ave.RT	対応付けされたピークの平均保持時間(分)
3	Ave.m/z	対応付けされたピークの平均 *m/z* 値
4	Ave.Int	対応付けされたピークの平均強度(リニア値)
5-	[サンプル ID]_[ファイル名]*	各ピークの値。空白は、そのサンプルで対応するピークがないことを示します。

* [ファイル名]には、分析モード(P:ポジティブ、N:ネガティブ)と、簡略化したサンプル名が記載されています。サンプルを区別する参考にご利用ください。

■ アラインメント方法について

アラインメントは PowerGetBatch 0.6.5 を用いて作成されました。PowerGetBatch は以下の URL からダウンロードできます。
http://www.kazusa.or.jp/komics/software/PowerGetBatch/ja

アラインメントに使用したパラメーター設定は、align_parameters.txt ファイルに記載されています。ESI ポジティブモード、ネガティブモードで、同一のパラメーターが使用されています。