

説明資料

# 全サンプルのアラインメントデータ

2025年8月11日 版

執筆者： 櫻井望（株式会社さくら科学）

メール： ns AT sakura-kagaku.com（AT を半角のアットマークに変換してください）

# 1. 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る作業のことです。

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。データご利用の際には、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ひとつの成分が、微妙な溶出時間のゆらぎ等により、二つの独立した成分であるかのように対応付けられている場合などがあり得ます。

## 1.1. アラインメント方法

アラインメントの計算は、PowerGetBatch 0.6.5 を用いて行われました。PowerGetBatch は、以下の URL からダウンロードできます。

<https://sakura-kagaku.net/komics/software/PowerGetBatch/>

PowerGetBatch のアラインメントに用い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。

# 2. データ詳細

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 種類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(リニア値をログ 10 に変換後、中央値が 0 となるよう

	に補正した値)
Mz.txt	<i>m/z</i> 値
Rt.txt	保持時間

各ファイルの内容は以下です。

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 です(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 <i>m/z</i> 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かったことを示します。

※[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。

以上