

Before_force_converter ソフトウェア 説明書

Version 1.3.0 対応

2024/8/7

Copyright 2024 before inc.

1. ダウンロード方法

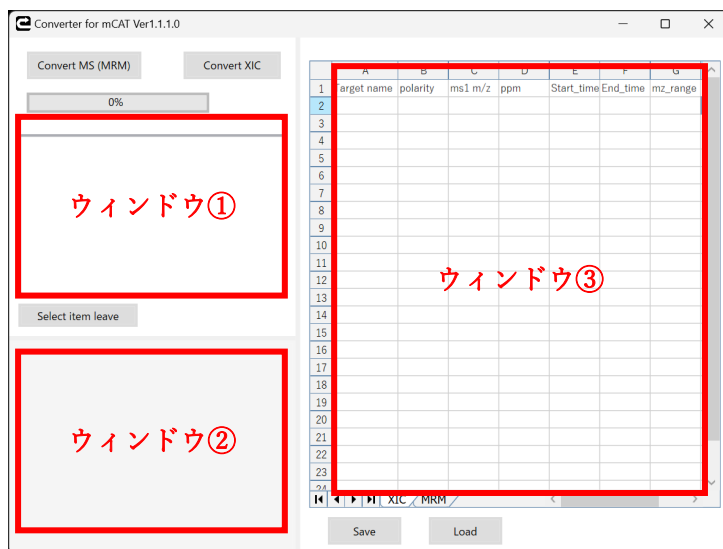
- [1] 下記の URL の BeForce_converter からダウンロードしてください。
https://be-force.jp/mcat/?page_id=48
- [2] zip ファイルを解凍する前に、ファイルのプロパティを確認してください。
これを行うには、ファイルを右クリックし、「プロパティ」を選択し、「全般」タブを開きます。セキュリティのセクションに「許可する」のオプションがある場合、このボックスにチェックを入れてください。
- [3] 上記の設定後、zip ファイルの解凍を行ってください。



2. 起動方法

- [1] 解凍したフォルダ内にある converter.exe をダブルクリックすることで、ソフトウェアが起動します。ソフトウェアを終了させたい場合は、右上にある閉じるボタン（バツ印）をクリックしてください。
- [2] このソフトウェアはインストール不要で、直接実行可能です。そのため、もしソフトウェアが今後不要になった場合、フォルダごと削除してください。

起動後に下記のような画面が表示されます。



ウィンドウ① サンプルウインドウ

ウィンドウ② 情報表示（インフォメーション）ウインドウ

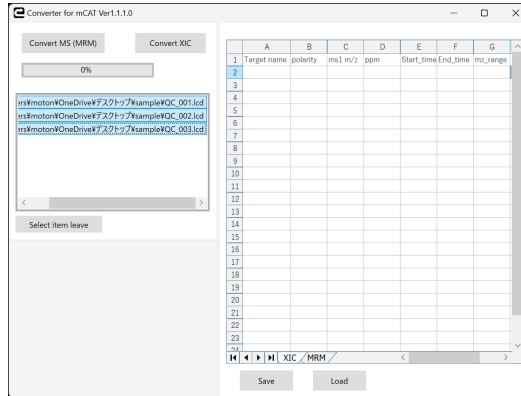
ウィンドウ③ 入力ウインドウ

3. 操作方法

起動後に表示される画面では、コンバーターの主要機能が利用者に提示されます。コンバートを行いたい質量分析装置のデータファイルは、画面左上に位置するウィンドウ①へドラッグアンドドロップしてください。対応可能なデータ形式については、実際に試していただくか、あるいはお問い合わせいただくことで確認できます。データ形式によっては、ファイルまたはフォルダの形式でドラッグアンドドロップする必要があります。

- 島津製作所の.lcd データなど、単一ファイルで構成されるデータはそのままドラッグアンドドロップしてください。
- WatersMassLynx や AgilentMassHunter のように、1つのデータがフォルダ形式である場合は、フォルダごとドラッグアンドドロップしてください。
- Sciex のデータが.wiff と.wiff.scan の2つのファイルに分かれている場合、.wiff ファイルのみをドラッグアンドドロップしてください。

データをウィンドウ①にドラッグアンドドロップすると、対象のファイル名がこのウィンドウに表示されます。これにより、ユーザーはコンバート対象のファイルを明確に確認でき、処理の準備が整ったことを把握できます。



コンバート対象のファイルを除外したい場合は、以下の手順を行ってください：

- [1] ウィンドウ①内で除外したいファイルを選択します。
- [2] 次に、ウィンドウ①の下部にある「select item leave」ボタンをクリックして、選択したファイルをリストから削除します。

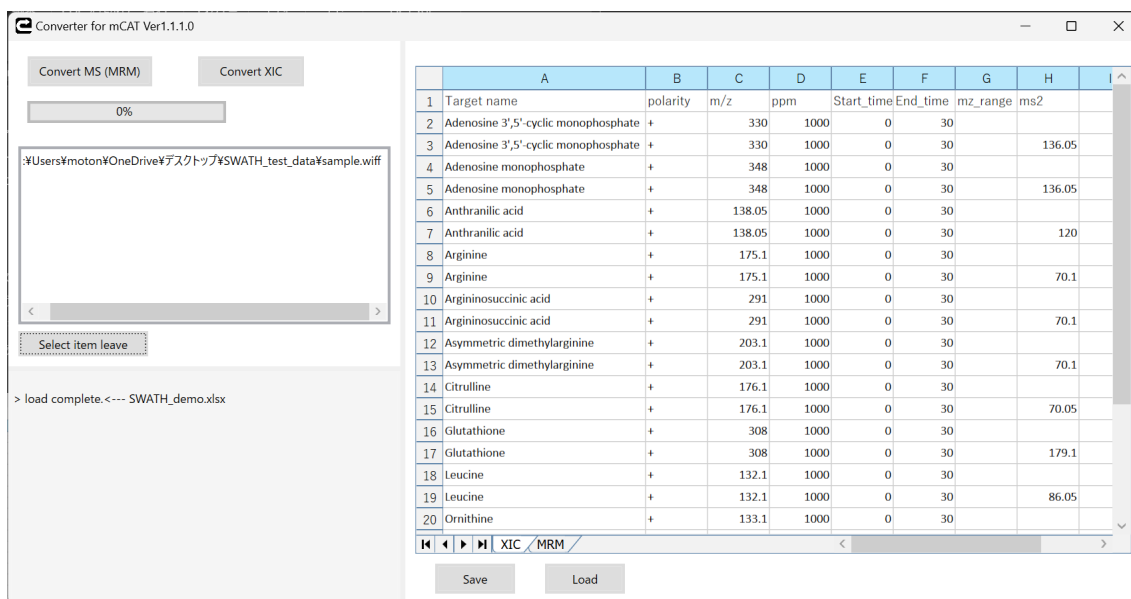
この操作により、不要なファイルを簡単に除外し、コンバートするファイルのリストを正確に管理できます。

また、MRM (Multiple Reaction Monitoring)、SRM (Selected Reaction Monitoring)、SIM (Selected Ion Monitoring) といったクロマトグラムデータのコンバートを行う場合は、ウィンドウ①上部の[Convert MS(MRM)]ボタンを押すことで、データを.hive 形式および.txt 形式で元データが保存されているフォルダ上に生成します。生成されたどちらのファイル形式も、弊社の Multi-ChromatoAnalysT ソフトウェアで直接読み込みが可能です。

Thermo Orbitrap や ToF-MS など、精密質量マススペクトラムで保存されているデータ形式を変換する際には、特定の手順を踏む必要があります。以下は、そのプロセスをスムーズに進行させるための具体的なガイドです：

[1] ソフトウェアの右側に位置するウィンドウ③を使用して、変換したいデータの対象となる化合物の m/z (質量対荷電比) を入力します。これにより、特定の化合物に対する変換処理が可能になります。

[2] 具体的な例を以下に示します。



A 列	Target name	クロマトグラムに変換する対象化合物名、特に制限なし（どのような名前でも構わない）
B 列	polarity	対象イオンの polarity、positive の場合は + もしくは positive と表記、negative の場合も同様に - もしくは negative と表記
C 列	m/z	対象イオンの Q1 の m/z
D 列	ppm	対象イオンの \pm ppm
E 列	Start_time	クロマトグラムに変換するスタートの時間
F 列	End_time	クロマトグラムに変換するエンドの時間

G 列	mz_range	特殊な測定方法に置いて、Q1 の m/z のレンジを制限したい場合
H 列	ms2	PRM, SWATH などの特殊な測定方法に置いて、ms2 (プロダクトイオン) によるクロマトグラムを描画したい場合。D 列の \pm ppm が適用される。

[3] 入力完了した後、ウィンドウ③の下部にある「Save」ボタンと「Load」ボタンを使用して、入力した表の保存および読み込みを行うことができます。これにより、将来的に同じタイプのデータ変換を行う際に、再度同じ情報を手動で入力する手間を省くことができます。

このプロセスにより、精密質量マスペクトラムデータの変換を効率的に、保存・読み込み機能を活用することで、時間を節約します。

コンバート操作が正常に完了すると、ソフトウェアのウィンドウ②にコンバートされた化合物の数が表示されます。この表示は、コンバート処理が成功したこと、処理された化合物の具体的な数をユーザーに知らせるものです。例えば、今回の場合では、26 個の m/z 値を持つ化合物のクロマトグラムの抽出が完了したことが示されています。この情報は、変換プロセスの結果を一目で理解するのに役立ちます。

Converter for mCAT Ver1.1.1.0

Convert MS (MRM) Convert XIC

100%

\\Users\motom\OneDrive\デスクトップ\SWATH_test_data\sample.wiff

Select item leave

> load complete. <--- SWATH_demo.xlsx
 Source file: C:\Users\motom\OneDrive\デスクトップ\SWATH_test_data\src
 XIC converted file: C:\Users\motom\OneDrive\デスクトップ\SWATH_test_da
 Number of Measurement Collection Count: 26
 finished to XIC convert

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
11	Argininosuccinic acid	+	291	1000	0	30		70.1	
12	Asymmetric dimethylarginine	+	203.1	1000	0	30			
13	Asymmetric dimethylarginine	+	203.1	1000	0	30		70.1	
14	Citrulline	+	176.1	1000	0	30			
15	Citrulline	+	176.1	1000	0	30		70.05	
16	Glutathione	+	308	1000	0	30			
17	Glutathione	+	308	1000	0	30		179.1	
18	leucine	+	132.1	1000	0	30			
19	leucine	+	132.1	1000	0	30		86.05	
20	Ornithine	+	133.1	1000	0	30			
21	Ornithine	+	133.1	1000	0	30		70.1	
22	Pantothenic acid	+	220.1	1000	0	30			
23	Pantothenic acid	+	220.1	1000	0	30		90.15	
24	THP	+	288.1	1000	0	30			
25	THP	+	288.1	1000	0	30		164.1	
26	Tyrosine	+	182.1	1000	0	30			
27	Tyrosine	+	182.1	1000	0	30		136.1	
28									
29									
30									

XIC / MRM

Save Load

4. 本ソフトウェアについて

コンバート操作の条件は保存が可能であり、保存した条件はマイクロソフト社製の Excel を使用して編集することもできます。これにより、ユーザーは変換条件を柔軟に管理し、必要に応じて簡単に調整することが可能になります。

ただし、設定された条件が測定された質量分析データの実際のパラメータと一致しない場合、変換過程でエラーが発生することがあります。例えば、質量範囲 (Mass Range) が 50-400 のデータに対して、480 m/z を指定した場合、この不一致によりエラーが生じます。

質量分析データの具体的な条件に不明な点がある場合は、お気軽にお問い合わせください。当方でデータの解析を行い、適切な条件設定のサポートを提供いたします。

本ソフトウェアに関するお問い合わせ先

株式会社ビーフォース

product@be-force.co.jp