

2013.8.12

# ComSpecツール(GUI version)の 利用マニュアル

作成

国立環境研究所 頭士 泰之

# ComSpec.exeの動作環境について

- Windows 7のOSで動作確認済みです。
- 他社OSでは正しく動作しません。
- 英語版windowsのOSについては、同ソフトウェアのEnglishバージョンをご利用ください。
- データ解析ソフト「R」のインストールが必要です。下記サイトからフリーダウンロード可能です。
- <http://cran.md.tsukuba.ac.jp/bin/windows/base/>
- Agilent, Waters, JEOLのnetCDFデータ(LC及びGC)に対して動作を確認済みです。
- 本ツールはAutoKey技術を利用しており、PCはプログラム実行中、自動キー操作されます。プログラム実行中(最初の1分程度)はPCに触れないでください。大事なファイル等も保存して、閉じてから本ツールを実行してください。

# 2つの実行ファイル(.exe)について

- 配布フォルダ中には、下記の2種類の実行ファイルがあります。
- 「ComSpec\_x32.exe」: 32bitのOS用
- 「ComSpec\_x64.exe」: 64bitのOS用
- メモリ使用量の関係上、基本的には64bitOS環境下のみでしか動作しません。物理メモリも10GB以上ある事が望ましいです。
- GCxGC-HRTOFMSのデモ用データは、下記サイトからダウンロード可能です。
- <http://www.nies.go.jp/analysis/member.html#downloads>

# 起動画面と操作方法について

The screenshot shows the 'ComSpec exe for Japanese OS (64 bit version)' window. It contains several sections for file selection and configuration. Five numbered steps are overlaid on the left side of the window:

- ① Select .cdf file for ComSpec processing. (File... button)
- ② Select database .csv file for ComSpec processing. (File... button)
- ③ Select save folder and input file name. Chromat pictures (.jpg) and a result file (.csv) are created. (File... button)
- ④ - R Package instillation -  
☐ Install Packages. Check that you are online!  
☒ Package ncodf are installed
- ⑤ - Check your R version -  
R-3.0.0 Input your R version for using.  
☒ Place of R folder is [Program files]. Check off if C drive directly

Below these steps, there are tabs for 'Separation parameter' and 'Mass parameter'. The 'Separation parameter' tab is active, showing a dropdown menu set to 'Two-dimensional' with the text 'Select dimension.' below it. Further down, there are input fields for 'MPeriod: The modulation time period.' (value: 4) and 'Phaseshift: The time of phase shift.' (value: -1.3). At the bottom right, there is a 'ComSpec run' button.

①解析するデータ(CDF)を選びます。

②抽出する化合物の入力されたデータベースファイル(csv)を選びます。

③解析結果を出力するフォルダとファイル名を設定します。

④初回の場合、必要なプログラムをインストールする必要があるので、上の○を選んで下さい。

⑤「R」を呼び出すためのパス設定をします。インストールされたRのバージョンを入力し、「R」フォルダがCドライブ直下にあるか、それ以外かを指定してください。

# 起動画面と操作方法について

The screenshot shows a software window with two tabs: "Separation parameter" and "Mass parameter". The "Separation parameter" tab is active. Inside this tab, there is a dropdown menu currently set to "Two-dimensional" with a downward arrow, followed by the text "Select dimension.". Below this, there are two input fields. The first is labeled "MPeriod: The modulation time period." and contains the value "4". The second is labeled "Phase.shift: The time of phase shift." and contains the value "-1.3". At the bottom of the window, there is a button labeled "ComSpec run".

- 測定データの分離パラメータを設定します。1Dデータか2Dデータかを選んで下さい。
- 2次元クロマトグラムに適用する場合は、描画に必要な情報であるモジュレーション時間とフェーズシフトのパラメータを入力してください。

# 起動画面と操作方法について

The screenshot shows the 'Mass parameter' tab of the ComSpec software. It contains several input fields and a dropdown menu for configuring mass spectrometry parameters. The 'Accurate MS' dropdown is selected. The 'CountMS' field is set to 5. The 'Tolerance (m/z)' is calculated as  $\text{HR.wide.order} \times \text{HR.wide.order.fluc}$ . The 'HR.wide.order' field is set to 0.01, and the 'HR.wide.order.fluc' field is set to 5. The 'MSthreshold' field is set to 0. A 'ComSpec run' button is located at the bottom right of the interface.

Separation parameter   Mass parameter

Accurate MS   Select MS type.

5   CountMS: The number of MS counting for searching/assignment of target compounds.

Tolerance (m/z) = HR.wide.order × HR.wide.order.fluc

0.01   HR.wide.order: The decimal point position in accurate mass.

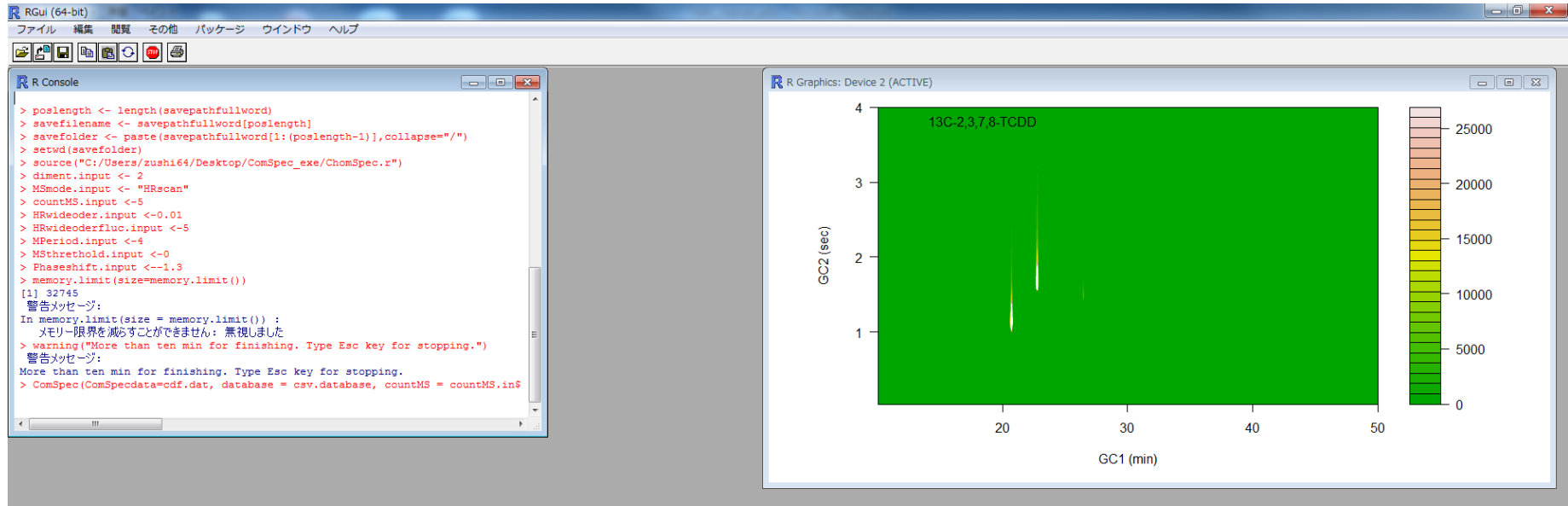
5   HR.wide.order.fluc: The degree of fluctuation.

0   MSthreshold: The minimum threshold of ion intensity.

ComSpec run

- 測定データのMSパラメータを設定します。
- 整数MSか精密MSかを選んで下さい。
- 精密MSを選んだ場合、質量精度の情報(Tolerance)が必要です。画面情報に従って入力してください。
- 整数MSを選んだ場合、「HR.wide.order」,「Hrwide.order.fluc」は解析に利用されません。
- 全ての設定が終わったら、「ComSpec run」ボタンを押してください。

# 解析実行中の画面



- 正しく設定が行われると、「R」が起動し、設定に従ったコードが読み込まれます。
- 「R」に全てコードが渡されると、マスペクトラの抽出作業が順次始まります。
- 標準データサイズでは1化合物の抽出に30秒程度かかるので、100リスト程度では計算終了まで50分程度待つ必要があります。
- 解析終了後、保存先に設定したフォルダに、画像ファイルと積分結果ファイルが作成されます。

# 積分結果出力ファイルについて

## イオン強度の合計値



	A	B	C
1		Chemical Group	Total Intensity
2	1	13C-1,3,6,8-TC	755951.2686
3	2	13C-2,3,7,8-TC	675241.3295
4	3	13C-2,3,7,8-TC	845765.7558
5	4	13C-1,2,3,7,8-F	1067394.943
6	5	13C-2,3,4,7,8-F	1139565.646
7	6	13C-1,2,3,7,8-F	413155.4418
8	7	13C-1,2,3,4,7,8-	2400718.739
9	8	13C-1,2,3,6,7,8-	2420457.081
10	9	13C-2,3,4,6,7,8-	1902501.398
11	10	13C-1,2,3,4,7,8-	1412971.102
12	11	13C-1,2,3,6,7,8-	1192387.261
13	12	13C-1,2,3,7,8,9-	1210614.606
14	13	13C-1,2,3,7,8,9-	2181478.082
15	14	13C-1,2,3,4,6,7,	794531.7906
16	15	13C-1,2,3,4,6,7,	322024.2945
17	16	13C-1,2,3,4,7,8,	959849.9805
18	17	13C-OCDD	463800.7483
19	18	13C-OCDF	516117.5448
20	19	2,3,7,8-TCDF	3425557.111
21	20	2,3,7,8-TCDD	2557332.038
22	21	1,2,3,7,8-PeCDI	6406933.802
23	22	2,3,4,7,8-PeCDI	6240099.218
24	23	1,2,3,7,8-PeCDI	2075728.916
25	24	1,2,3,4,7,8-HxC	9563031.872
26	25	1,2,3,6,7,8-HxC	9594927.783
27	26	2,3,4,6,7,8-HxC	9451968.644



デモ用のデータベースファイルを利用しているため、個別名称となっていますが、実際にはChemical Group名となります。

- Chemical Groupの名前と定量値（設定MS数のフラグメントパターンで測定MSフラグメントをクリーンにした後の第一MSの合計intensity）が出力されます。
- (計算法参考: *Analytica Chimica Acta*, 778, (17), 54–62, 2013.)



# データベースについて

## Chemical Group名

(デモ用のデータベースファイルを利用しているため、個別名称となっています)

↓ Qの列からMS情報を入力

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W
1	BlobID	Compound Abbreviation	Group Name	Rtcorrect	Internal Standard	Peak I	Peak II	IS_Native_ref	Reference	MS1	MS2	MS3	MS4	MS5	MS6	MS							
2	-	13C-2,3,7,8-TCDF	PCDD	1	1	22.24	0.834	0	低分子	317.95283	315.94825	319.93246	318.92842	316.93021	321.92677								
3									Rtc-大	15.265677	12.887926	9.9872899	4.4107563	2.5250874	2.3886481	1							
4		13C-1,3,6,8-TCDD	PCDD	0	1	20.63	0.001	1	中分子	333.9487	331.94479	335.93219	267.97001	269.96701	204.00319	3							
5									中分子	12.049672	10.114774	8.0782124	6.1127712	5.8802501	2.8517746	2							
6		13C-2,3,7,8-TCDF	PCDD	4	1	22.24	0.834	2	中分子	317.95283	315.94825	319.93246	251.9708	253.96762	182.03453	3							
7									中分子	15.265677	12.887926	9.9872899	3.685348	3.5346513	3.128246	2							
40	13	2,3,7,8-TCDF	PCDD	0	0	22.24	0.834	2		305.89596	303.89921	307.89436	240.9406	242.93661	171.00252	3							
41										22.536902	17.63751	10.841941	4.0036323	3.9958859	3.8846943								
42	9	2,3,7,8-TCDD	PCDD	0	0	22.77	0.978	3		321.89055	319.89321	323.88787	256.93147	258.92932	193.97054	3							

- リストの上の化合物から解析が始まります。
- 2行で一つの化合物情報です。2行目にはMS相対強度比(合計100%となるように計算される値です)を入力してください。
- 基本的には化合物名(B列)とマスペクトル情報(Q列以降)以外は使用しません。
- IセルからPセルは備考欄です。ご自由にメモをお書きください。

# 予想されるエラーと対処について

Q: 「ComSpec run」ボタンを押した後、ComSpec.exeがフリーズして解析が始まりません。

A: データ解析ソフト「R」のリンク先が誤って入力された可能性があります。→タスクバー右下にComSpecのアイコンが表示されているので、右クリックして一度Exitしてください。再度解析を際に、R.exeのファイルパスを確かめ、ComSpec.exeに正しく情報入力してください。詳しくは本マニュアルの「起動画面と操作方法について」を参照してください。

Q: 同じ設定でComSpecツールを実行しているのに、解析がうまく始まる時とエラーで終わるときがあります。

A: 自動キー入力が安定していない事が原因と考えられます。PCのその他処理信号と重複によるものかもしれませんので、うまく始まらなかった際には再度試してください。

# 注意事項について

- ソースファイルについて
- 配布フォルダ内にComSpecソースファイル「 ComSpec.r」があります。
- 「 ComSpec.exe」と同じフォルダ(もしくは同じ階層)に収めたままにしてください。
- License: Artistic License 2.0
- 免責: 本ツールを利用したことにより生じた、いかなる不利益も補償されません。