

KnowItAll ソフトウェアトレーニング

KnowItAll Trendfinder を使用したケメトリックス分析

スペクトル分析

KnowItAll Trendfinder を使用して Chemometrics Analysis を実行する方法

目的

これらの演習では、KnowItAll Trendfinder を使用してさまざまなスペクトルのケモメティクス解析を実行する方法を示す。

目的

これらの練習は KnowItAll Trendfinder をに適用するように教える

- IR
- LC-MS
- GC-MS
- ラマン
- UV-Vis

背景

KnowItAll Trendfinder アプリケーションを使用すると、スペクトルおよびクロマトグラフィーデータの化学分析を実行できる。

このレッスンで使用するトレーニングファイル
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples
KnowItAll 使用されるアプリケーション

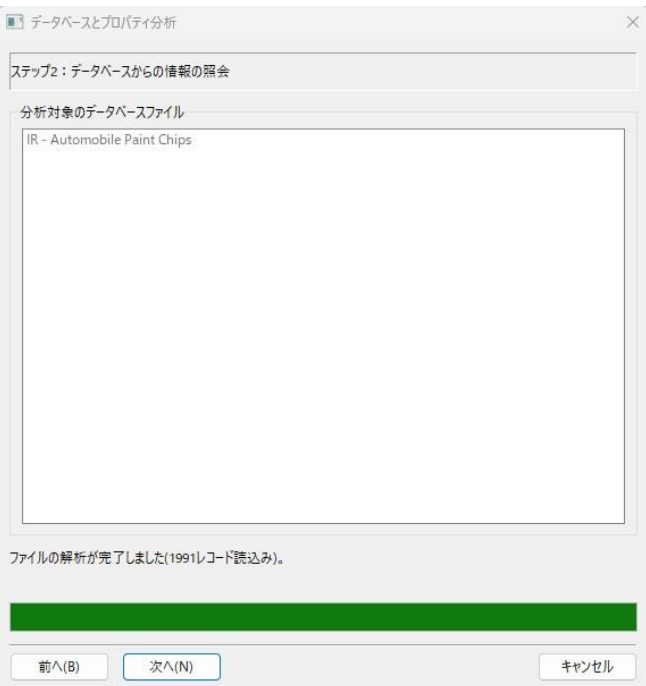
- KnowItAll TrendFinder (ノウイットオール・トレンドファインダー)

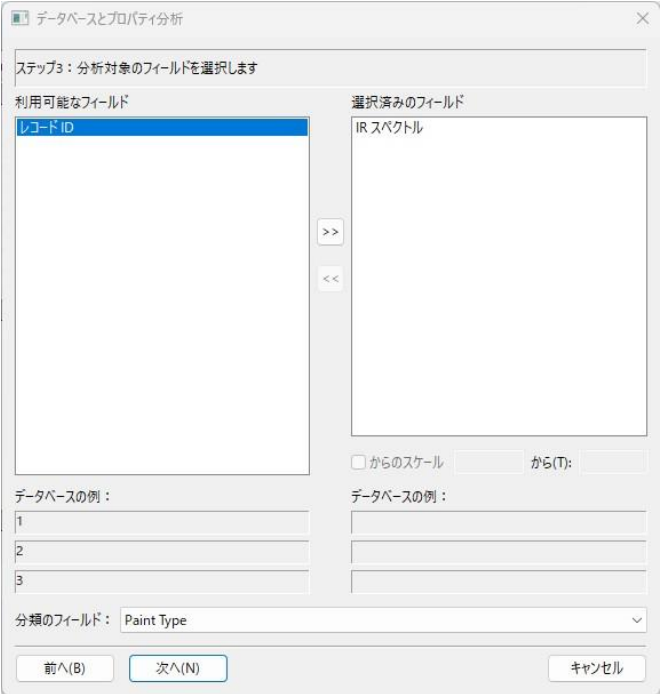
IR の例

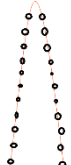
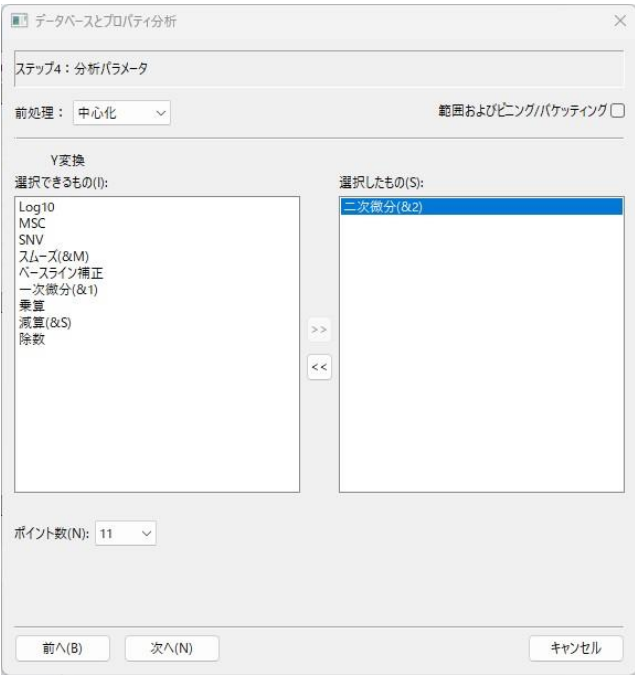
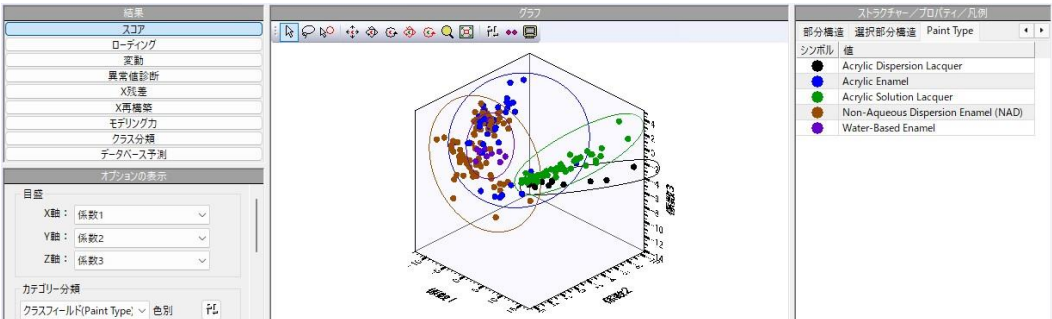
A. 自動車用塗料チップの主成分分析 (PCA)

	アクション	結果
1	Spectral Analysis ツールボックスで Trendfinder アプリケーションのアイコンをクリックして、Trendfinder アプリケーションを開く。  Trendfinder	アプリケーションが開く。
2	[ファイル]>[新規 PCA 解析]を選択する。	データベースとプロパティの解析ウィザードが開く。 

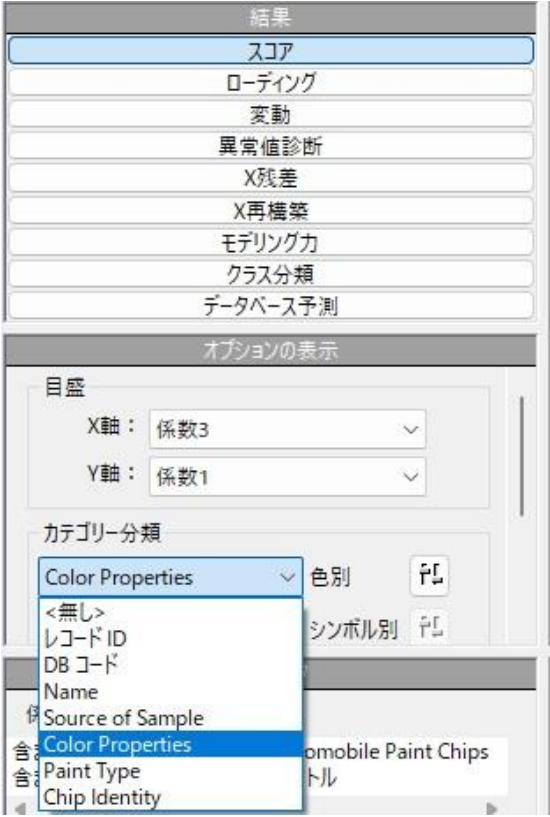
	アクション	結果																																
3	- 参照データベース IR-Automobile Paint Chips (APX) を選択し、追加 (Add) をクリックする。 [分析対象として選択]ボックスでデータベースを強調表示し、[レコード ID 範囲]フィールドに「1-200」と入力する（最初の 200 レコードを使用する場合）。 次へ>をクリックする。	データベースとプロパティ分析 ステップ1：分析用データソースを選択します 利用可能なデータベース： インターネットデータベースは... 対象スペクトル(L): IR リフレッシュ(R) <table><tr><td>Reference</td><td>名称</td><td>レコード</td><td>DB コード</td></tr><tr><td>算出済み</td><td>IR - Automobile Paint Chips</td><td>1991</td><td>APX</td></tr><tr><td>User DB</td><td>IR - Canadian Forensics</td><td>3495</td><td>CFX</td></tr><tr><td>Hit List</td><td>IR - Georgia State Crime Lab</td><td>1910</td><td>DLX</td></tr><tr><td>データ制御</td><td>IR - Industrial Chemicals, Basic Org...</td><td>1000</td><td>HLX</td></tr><tr><td></td><td>IR - Industrial Chemicals, Pure Org...</td><td>20316</td><td>HIX</td></tr><tr><td></td><td>IR - Microscopic Classification</td><td>6</td><td>MPCV</td></tr></table> すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(M) 分析対象として選択 <table><tr><td>データベース名/パス</td><td>レコード範囲</td></tr><tr><td>IR - Automobile Paint Chips</td><td>1-200</td></tr></table> 参照(B)... レコードIDの範囲 (「,」と「-」を使用) : 1-200 前へ(B) 次へ(N) キャンセル	Reference	名称	レコード	DB コード	算出済み	IR - Automobile Paint Chips	1991	APX	User DB	IR - Canadian Forensics	3495	CFX	Hit List	IR - Georgia State Crime Lab	1910	DLX	データ制御	IR - Industrial Chemicals, Basic Org...	1000	HLX		IR - Industrial Chemicals, Pure Org...	20316	HIX		IR - Microscopic Classification	6	MPCV	データベース名/パス	レコード範囲	IR - Automobile Paint Chips	1-200
Reference	名称	レコード	DB コード																															
算出済み	IR - Automobile Paint Chips	1991	APX																															
User DB	IR - Canadian Forensics	3495	CFX																															
Hit List	IR - Georgia State Crime Lab	1910	DLX																															
データ制御	IR - Industrial Chemicals, Basic Org...	1000	HLX																															
	IR - Industrial Chemicals, Pure Org...	20316	HIX																															
	IR - Microscopic Classification	6	MPCV																															
データベース名/パス	レコード範囲																																	
IR - Automobile Paint Chips	1-200																																	

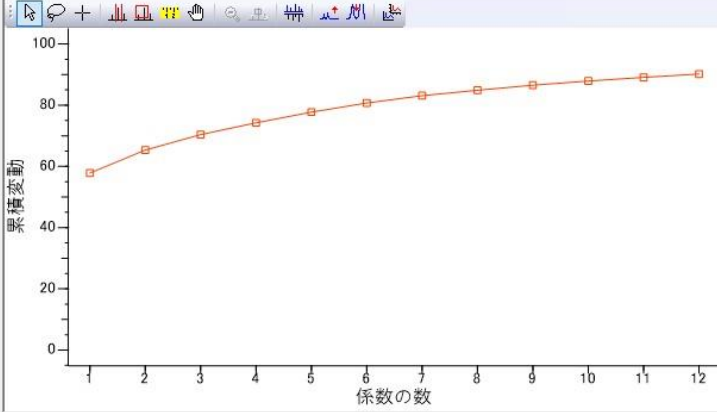
	アクション	結果
4	次へ>をもう一度クリックする。	

	アクション	結果
5	このダイアログでは、 • 左のボックスから右のボックスに IR スペクトル を移動するには、左のボックスを選択して「>>」をクリックするか、ダブルクリックして右に移動する • 分類のフィールドを ペイントタイプに設定する。次へ>をクリックする。	

	アクション	結果
6	このダイアログでは、 - 第 2 微分法を右のボックスに移動し、IR スペクトルに対して Y 変換 を実行する。 - IR ピークの両側の ポイント数 を 11 に設定する（下の例を示す図）。  - 次へをクリックする。 注：1 次微分は頂点をピンポイント、2 次微分はピーク肩を釘で打ち込んでいる。	
7	解析が完了したら、[完了 (Finish)] をクリックする。 注：因子は互いに直交する数学的軸である。	 これは、異なる種類の塗料の分布を示す分析の 3 つの要因ビューである。 円 (Trajectory : 軌跡) は、分類フィールド (Field of Classification) 内の値の境界を定義する。

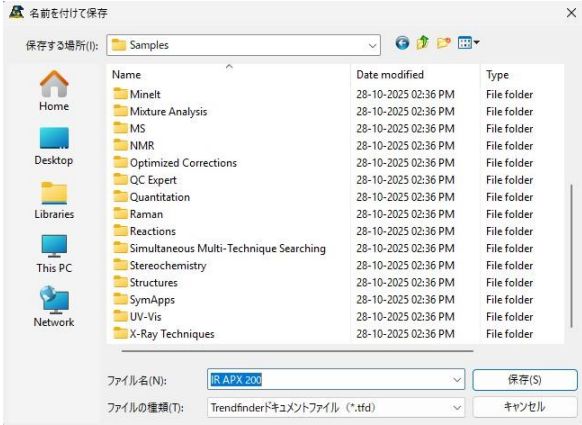
	アクション	結果
8	アクション XY 旋回 XY 旋回 - クリックする - 回転して、3 因子空間でのスペクトル分布を観察する。	
9	[2D プロット (2D Plot)] ツールバー ボタンをクリックして、グラフ表示を2次元で切り替える。 - X 軸を 係数 3 に設定し、Y 軸を係数 1 に設定する。	結果 スコア ローディング 変動 異常値診断 X残差 X再構築 モデリング力 クラス分類 データベース予測 オプションの表示 目盛 X軸: 係数3 Y軸: 係数1 カテゴリ分類 クラスフィールド(Paint Type) 色別 PL <無し> シンボル別 PL グラフ ストラクチャー / プロパティ / 凡例 部分構造 選択部分構造 Paint Type シンボル 値 ● Acrylic Dispersion Lacquer ● Acrylic Enamel ● Acrylic Solution Lacquer ● Non-Aqueous Dispersion Enamel (NAD) ● Water-Based Enamel 漆の種類(上)はエナメル質(下)から分離されている。

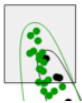
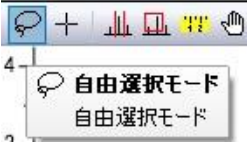
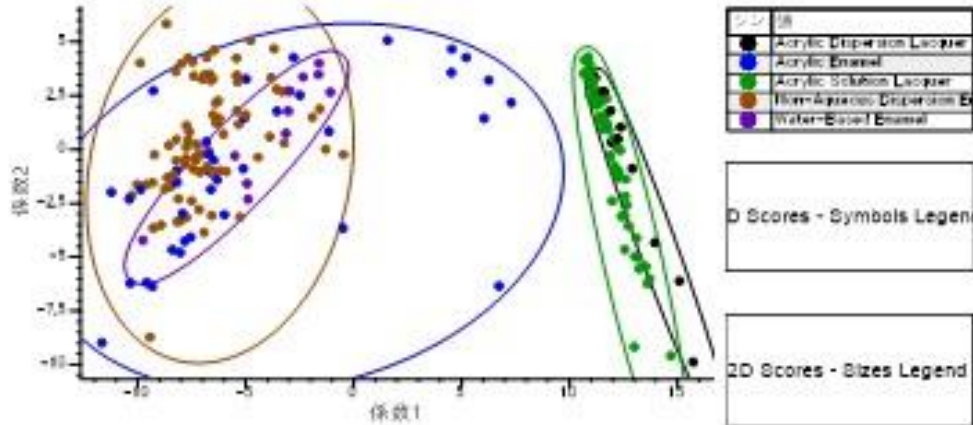
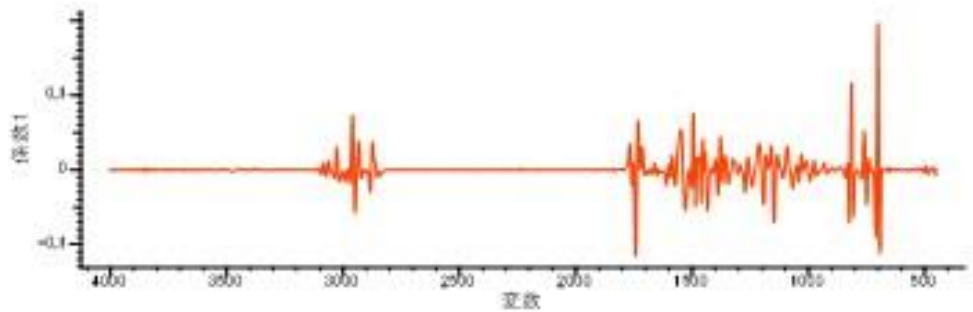
	アクション	結果
10	[分類] ドロップダウンリストを使用すると、他のプロパティがスペクトル空間にどのように関連するかを確認できる。	

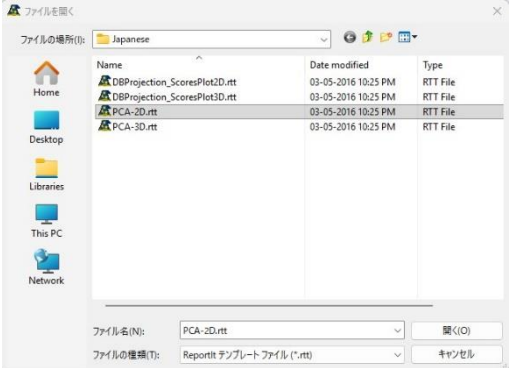
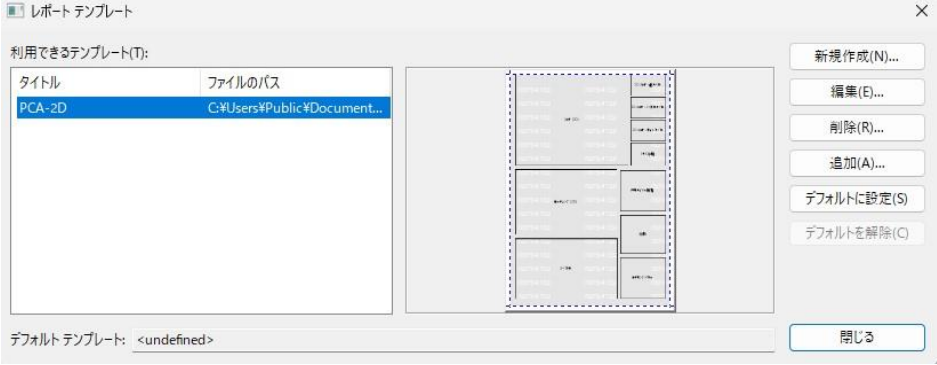
	アクション	結果																										
11	分散により PCA 品質を調べることができる。	結果 スコア ローディング 変動 異常値診断 X残差 X再構築 モデリング力 クラス分類 データベース予測 オプションの表示 目盛 X軸: 係数の数 Y軸: 累積変動 グラフ <table><tr><th>係数の数</th><th>累積変動 (%)</th></tr><tr><td>1</td><td>58</td></tr><tr><td>2</td><td>65</td></tr><tr><td>3</td><td>70</td></tr><tr><td>4</td><td>74</td></tr><tr><td>5</td><td>78</td></tr><tr><td>6</td><td>81</td></tr><tr><td>7</td><td>83</td></tr><tr><td>8</td><td>85</td></tr><tr><td>9</td><td>87</td></tr><tr><td>10</td><td>88</td></tr><tr><td>11</td><td>89</td></tr><tr><td>12</td><td>90</td></tr></table> 上記のように、6つの要因がケースの80%以上を説明することができる。	係数の数	累積変動 (%)	1	58	2	65	3	70	4	74	5	78	6	81	7	83	8	85	9	87	10	88	11	89	12	90
係数の数	累積変動 (%)																											
1	58																											
2	65																											
3	70																											
4	74																											
5	78																											
6	81																											
7	83																											
8	85																											
9	87																											
10	88																											
11	89																											
12	90																											

	アクション	結果
12	外れ値診断 (Outlier Diagnostics) を選択して、外れ値の可能性を調べる。 Manhalanobis Distance は標本が外れ値であるかどうかを決定する最も一般的な尺度である。	結果 - スコア - ローディング - 変動 - 異常値診断 - X残差 - X再構築 - モデリング力 - クラス分類 - データベース予測 オプションの表示 目盛 X軸: マハラノビス距離 Y軸: サンプル残差 カテゴリ分類 クラスフィールド(Paint Type): 色別 <無し> シンボル別 グラフ 右端の黒い点 (スペクトル標本) は群の明らかな外れ値であり、分布の中心からほぼ 100% 外れている。
13	再構成された X は右図のようになる。	結果 - スコア - ローディング - 変動 - 異常値診断 - X残差 - X再構築 - モデリング力 - クラス分類 - データベース予測 オプションの表示 目盛 X軸: 変数 Y軸: X再構築 グラフ 注: 上記は Y の「再構成された」二次微分形式である。

B. 解析を保存してレポートを作成する

	アクション	結果
1	解析の保存方法： • [保存 (Save)]アイコンをクリックする  • または、[ファイル (File)]>[解析を保存 (Save Analysis)]を選択する。 • または Ctrl + S キーを押す。。	

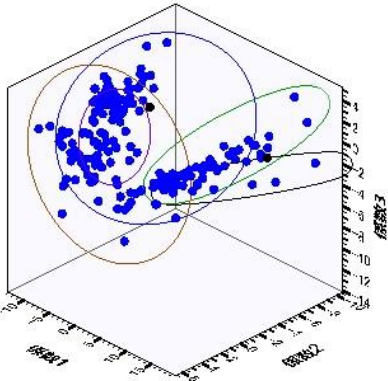
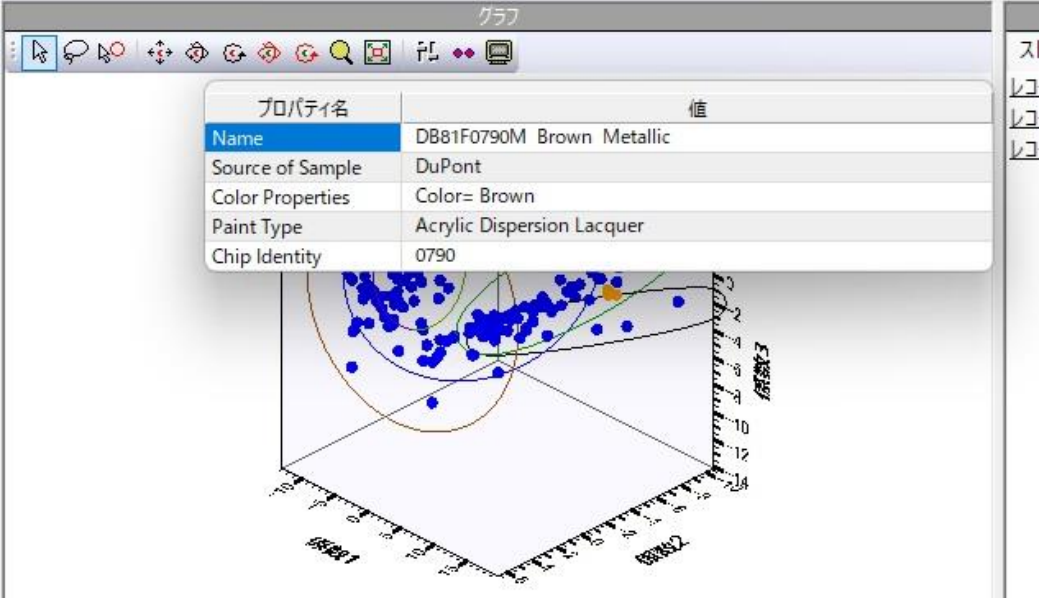
	アクション	結果
2	レポートへの分析の転送方法： - スペクトルのグループを選択し、 - マウスを使用して位置をクリックし、別の位置にドラッグドロップする。  - または、なげなわツールを使用して点を円で囲む。  - または、Ctrl キーを押しながらクリックしてポイントを選択します。 - 次に、Transfer To バーの ReportIt をクリック 	WILEY Date/Time: 13-11-2025 03:59 PM ライセンスシリアル番号 348 Operator:  2D Scores - Symbols Legend 2D Scores - Sizes Legend 

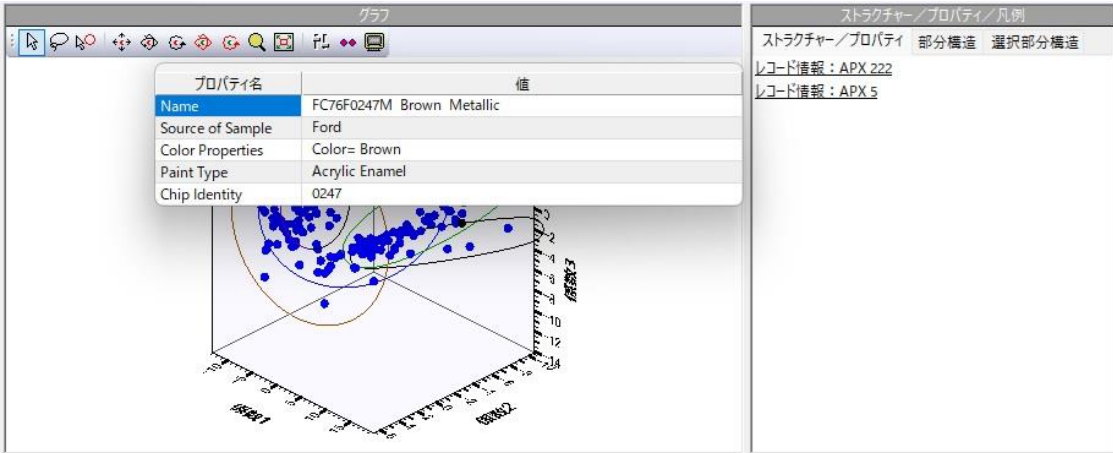
	アクション	結果
注：	• テンプレートを初めて使用する場合、ユーザーは ReportIt アプリケーションにデータを転送する前に次の操作を行う必要がある。[ファイル]>[レポートテンプレートの編集] • [追加] ボタンをクリックする • テンプレートファイル C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Report Templates\Trendfinder に移動して、オプションを表示する。 • [開く (Open)] をクリックして追加する。。	
3	必要な数のテンプレートを追加し、終了したら[閉じる (Close)] をクリックする。 	

C. 未知のスペクトルを PCA の「スペース」に投影

	アクション	結果
1	前と同じデータを使用して、 【結果 (Results)】 セクションの下にある 【データベース投影 (Database Projection)】 ボタンをクリックする。	 KnowItAll Informatics System 2026, Analytical Edition ファイル(F) 編集(E) 表示(V) ライセンス(L) ヘルプ(H) 送り先: ReportIt Spectral Analysis ▼ Basics Data Spectral Processing Spectral Analysis Analyzelt Trendfinder PredictIt NMR 結果 スコア ローディング 変動 異常値診断 X残差 X再構築 モデリング力 クラス分類 データベース予測 オプションの表示 データベースからプロジェクト...

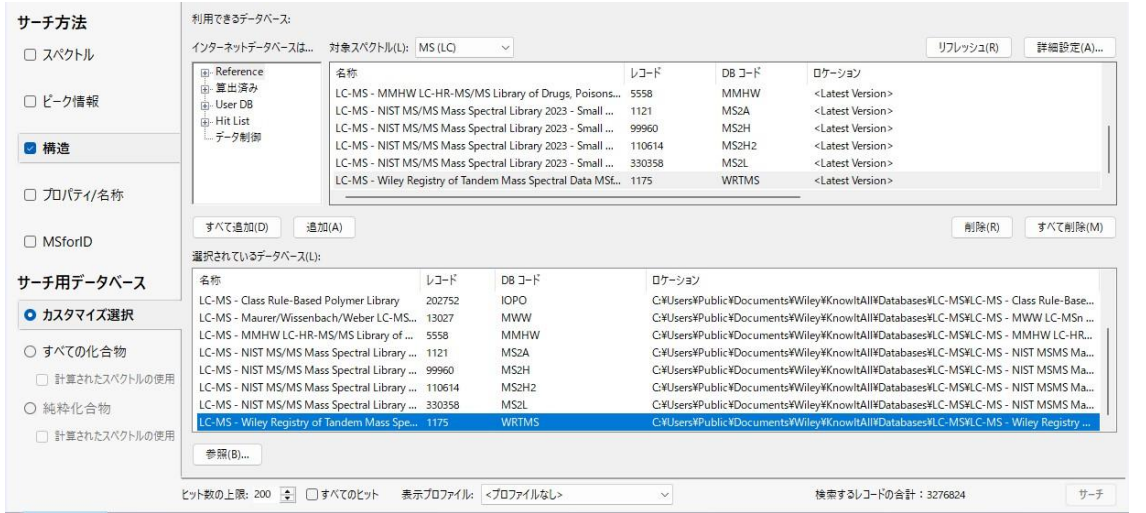
	アクション	結果
2	IR-Automobile Paint Chips データベースが選択されていることを確認します: 「Record Range(s)」の下に 222 と 1111 と入力し（「,」と「-」を使用）、最初の 200 個のスペクトルに基づいてこれらの未検出スペクトルの分類をテストする。 Y スケールを設定：PCA と同じ。 [OK]をクリックする。	

	アクション	結果
3	2つの黒い点がPCA空間にどのように収まるかを確認する(現在は青)。	
4	• ドットの1つをクリックすると、そのレコードの詳細が表示される。(選択したドットはオレンジ色に変わる)。 • レコード情報リンクにカーソルを合わせると、詳細が表示される。	 この点はアクリル分散ラッカーの円の中にある。

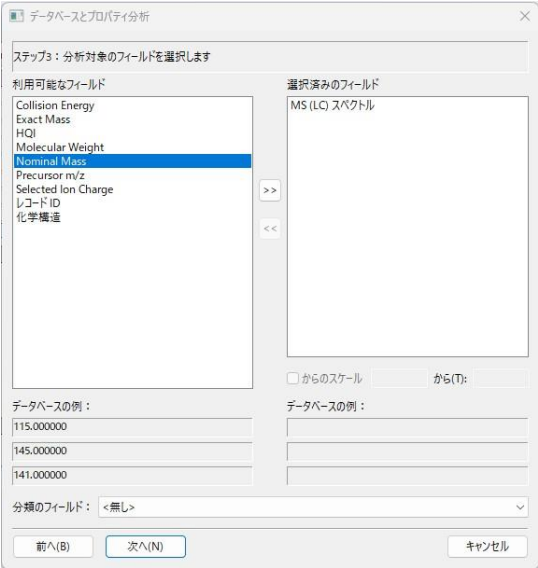
	アクション	結果
5	もう一方の点をクリックし、レコード情報にカーソルを合わせると、詳細が表示される。	 この点はアクリルエナメルの中にある。

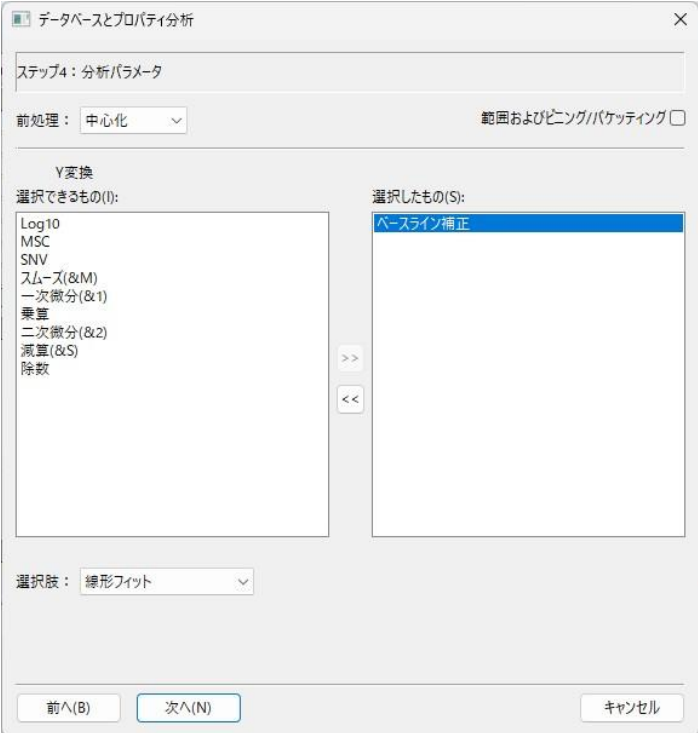
LC-MS

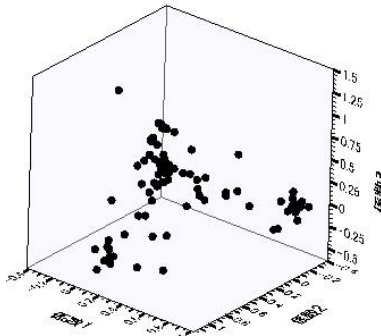
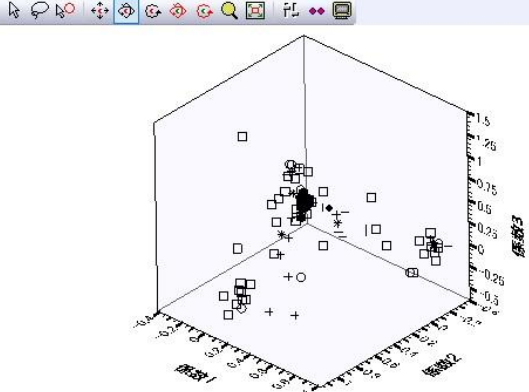
類似構造のヒットリスト解析

	アクション	結果
1	SearchIt では、結果列に示すように類似構造検索を設定する。	
2	• 【データベースの検索 (Search Databases)】、【ユーザー選択 (User-Select)】に移動します。 • Limit to spectral technique を MS (LC) に設定する。 • データベース LC-MS-Wiley Registry of Tandem Mass Spectral Data MSforID を選択し、Add をクリックする。 • ヒットリストのサイズ制限を設定：200。 • 検索をクリックする。	

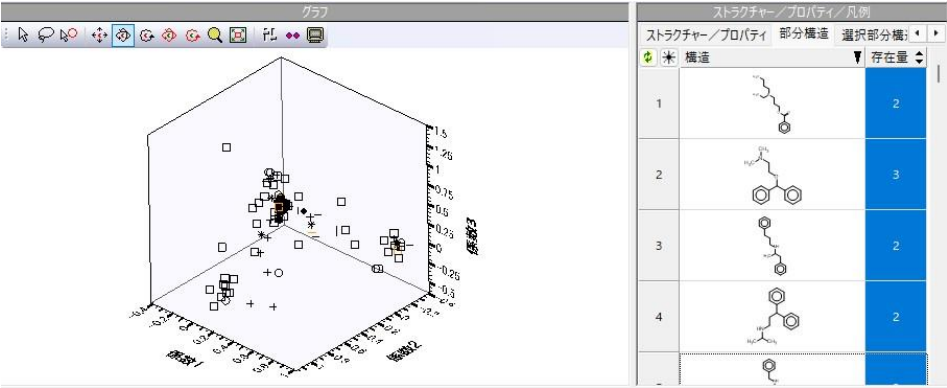
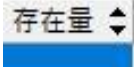
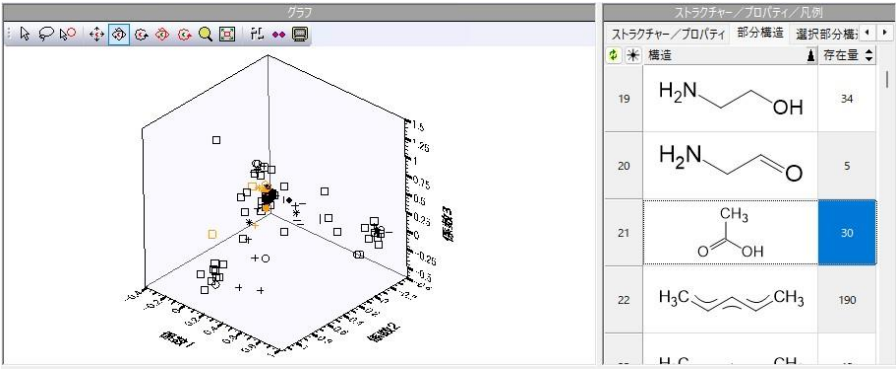
アクション		結果	
4	【プロパティ (Property)】 ドロップダウンリストで 【衝突エネルギー (Collision Energy)】 を選択し、【すべて (All)】 を選択する。	すべて表示 プロパティ Collision Energy 5 eV 5 eV 10 eV 10 eV 15 eV 15 eV 20 eV 20 eV 500 </	

	アクション	結果
5	- 分析する MS (LC) スペクトルを選択する。 次へ>をクリックする。	
	ヒント：経験に基づいて、Y変換の使用可能なリストから除算を選択し、選択肢ドロップダウンからサンプル最大を選択すると、MS スペクトルに有効になる。	

	アクション	結果
6	[次へ>]をクリックして続行する。	

	アクション	結果																						
7	完了をクリックする。	 スコアプロットは上記のように開く。																						
8	カテゴリ (Categorization) で、衝突エネルギー (Collision Energy by Symbol) を選択して表示する。	オプションの表示 カテゴリ分類 <無し> 色別 Collision Energy シンボル別 <無し> サイズ別 <無し> ラベル別 <table><thead><tr><th>シンボル</th><th>値</th></tr></thead><tbody><tr><td>●</td><td>5</td></tr><tr><td>■</td><td>10</td></tr><tr><td>▲</td><td>15</td></tr><tr><td>◆</td><td>20</td></tr><tr><td>✱</td><td>25</td></tr><tr><td>—</td><td>30</td></tr><tr><td>—</td><td>35</td></tr><tr><td>+</td><td>40</td></tr><tr><td>○</td><td>45</td></tr><tr><td>□</td><td>50</td></tr></tbody></table> このプロットはこのデータセットを見る興味深い方法だ。高い衝突エネルギーは分子をより徹底的に破壊し、スペクトルの違いをもたらす!	シンボル	値	●	5	■	10	▲	15	◆	20	✱	25	—	30	—	35	+	40	○	45	□	50
シンボル	値																							
●	5																							
■	10																							
▲	15																							
◆	20																							
✱	25																							
—	30																							
—	35																							
+	40																							
○	45																							
□	50																							
9	特定のスポット (*) を選択																							

一般的な断片

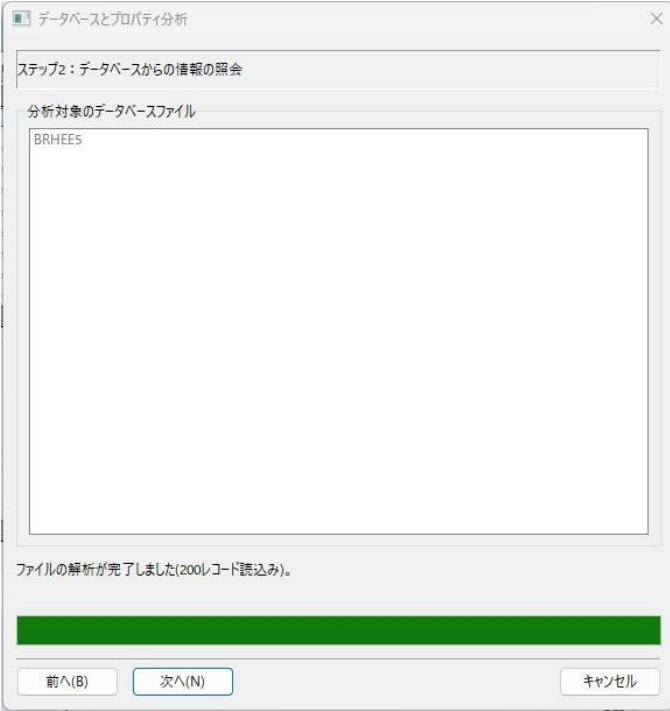
	アクション	結果															
1	上記の例を続ける。 - 構造/プロパティ/凡例ペインの下にあるサブ構造タブを開く。 - 計算を開始 (Start Calculations) をクリックする。	 このデータセット全体のフラグメントと存在量(出現頻度)を右の表に示す。 <table border="1"> <thead> <tr> <th>フラグメントID</th> <th>化学構造</th> <th>存在量</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td><chem>CCCCCCCC</chem></td> <td>2</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td><chem>CCCCCCCC</chem></td> <td>3</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td><chem>CCCCCCCC</chem></td> <td>2</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td><chem>CCCCCCCC</chem></td> <td>2</td> </tr> </tbody> </table>	フラグメントID	化学構造	存在量	1	<chem>CCCCCCCC</chem>	2	2	<chem>CCCCCCCC</chem>	3	3	<chem>CCCCCCCC</chem>	2	4	<chem>CCCCCCCC</chem>	2
フラグメントID	化学構造	存在量															
1	<chem>CCCCCCCC</chem>	2															
2	<chem>CCCCCCCC</chem>	3															
3	<chem>CCCCCCCC</chem>	2															
4	<chem>CCCCCCCC</chem>	2															
2	「Select a fragment」をクリックすることで、とで、 - Abundance (存在比) を並べ替えることができます。	 このフラグメントを含むスペクトルは、スコアプロットで強調表示される。 ザ・セル。Substructures タブでは、ユーザはドットのグループを選択し、そのグループ内のフラグメント量を見ることができる。 <table border="1"> <thead> <tr> <th>フラグメントID</th> <th>化学構造</th> <th>存在量</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>19</td> <td><chem>NCCCO</chem></td> <td>34</td> </tr> <tr> <td>20</td> <td><chem>NCC=O</chem></td> <td>5</td> </tr> <tr> <td>21</td> <td><chem>CC(=O)O</chem></td> <td>30</td> </tr> <tr> <td>22</td> <td><chem>CC=CC=C</chem></td> <td>190</td> </tr> </tbody> </table>	フラグメントID	化学構造	存在量	19	<chem>NCCCO</chem>	34	20	<chem>NCC=O</chem>	5	21	<chem>CC(=O)O</chem>	30	22	<chem>CC=CC=C</chem>	190
フラグメントID	化学構造	存在量															
19	<chem>NCCCO</chem>	34															
20	<chem>NCC=O</chem>	5															
21	<chem>CC(=O)O</chem>	30															
22	<chem>CC=CC=C</chem>	190															

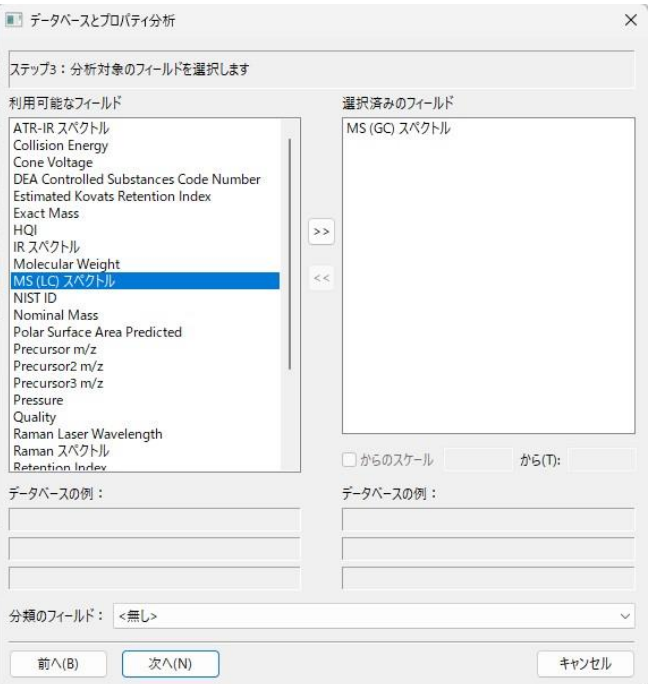
GC-MS

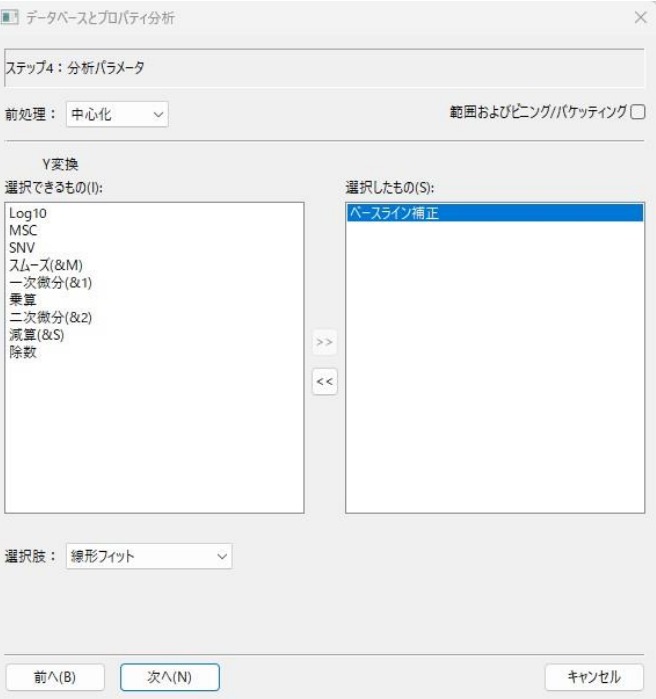
フェンタニルのヒットリスト分析

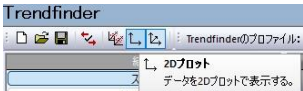
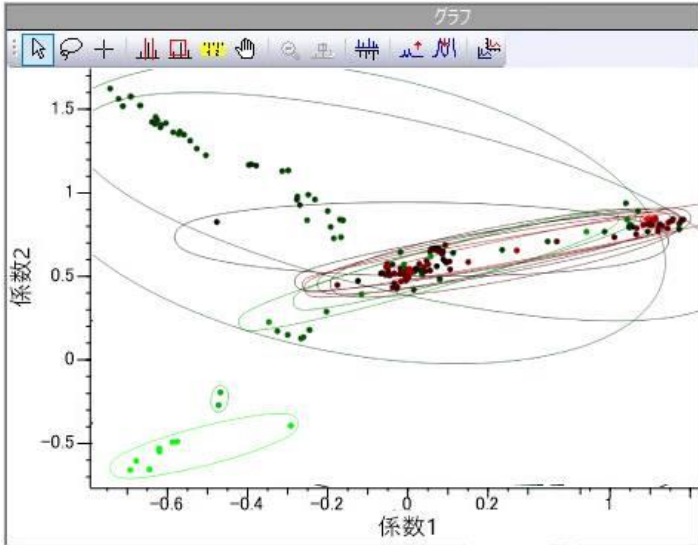
	アクション	結果																																																												
1	- SearchIt で、User-select に移動する。 - スペクトル法を MS (GC) に制限し、 - 検索用にすべての GC-MS データベースを追加する。	SearchIt 検索方法 ☐ スペクトル ☐ ピーク情報 ☐ 構造 ☒ プロパティ/名称 ☐ MSforID サーチ用データベース ☒ カスタマイズ選択 ☐ すべての化合物 ☐ 計算されたスペクトルの使用 ☐ 純粋化合物 ☐ 計算されたスペクトルの使用 サマリー 利用できるデータベース: インターネットデータベース... 対象スペクトル(L): MS (GC) Reference 算出済み User DB Hit List データ制御 <table><tr><th>名称</th><th>レコード</th><th>DB コード</th><th>ロケーション</th></tr><tr><td>GC-MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of ...</td><td>2758</td><td>AFX</td><td><Latest Version></td></tr><tr><td>GC-MS - Wiley Androstanes, Estrogens & other Steroids</td><td>2979</td><td>MUX</td><td><Latest Version></td></tr><tr><td>GC-MS - Wiley Drugs</td><td>2204</td><td>MDX</td><td><Latest Version></td></tr><tr><td>GC-MS - Wiley Geochemicals, Petrochemicals & Biomarkers</td><td>1093</td><td>MGX</td><td><Latest Version></td></tr><tr><td>GC-MS - Wiley Industrial Chemicals</td><td>41110</td><td>MTX</td><td><Latest Version></td></tr><tr><td>GC-MS - Wiley Mass Spectra of Designer Drugs 2025</td><td>36360</td><td>WDD1X</td><td><Latest Version></td></tr></table> すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(M) 選択されているデータベース(L): <table><tr><th>名称</th><th>レコード</th><th>DB コード</th><th>ロケーション</th></tr><tr><td>GC-MS - Food, Flavors, Fragrances, and Related Compounds: GC-MS Li...</td><td>13677</td><td>WFCX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr><tr><td>GC-MS - Maurer, Meyer, Pfleger, Weber: GC-MS Library of Drugs, Poiso...</td><td>10948</td><td>MMPWX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr><tr><td>GC-MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Main Library</td><td>347100</td><td>MSX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr><tr><td>GC-MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Replicate Library</td><td>46954</td><td>MSRX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr><tr><td>GC-MS - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compound...</td><td>476</td><td>NSX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr><tr><td>GC-MS - SWGDUG Mass Spectral Library - Wiley</td><td>3047</td><td>SWGMSX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr><tr><td>GC-MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of Drugs</td><td>2758</td><td>AFX</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#</td></tr></table> 参照(B)... ビット数の上限: 200 ☐ すべてのビット 表示プロファイル: <プロファイルなし> 検索するレコードの合計: 4706445 サーチ	名称	レコード	DB コード	ロケーション	GC-MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of ...	2758	AFX	<Latest Version>	GC-MS - Wiley Androstanes, Estrogens & other Steroids	2979	MUX	<Latest Version>	GC-MS - Wiley Drugs	2204	MDX	<Latest Version>	GC-MS - Wiley Geochemicals, Petrochemicals & Biomarkers	1093	MGX	<Latest Version>	GC-MS - Wiley Industrial Chemicals	41110	MTX	<Latest Version>	GC-MS - Wiley Mass Spectra of Designer Drugs 2025	36360	WDD1X	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	GC-MS - Food, Flavors, Fragrances, and Related Compounds: GC-MS Li...	13677	WFCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#	GC-MS - Maurer, Meyer, Pfleger, Weber: GC-MS Library of Drugs, Poiso...	10948	MMPWX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#	GC-MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Main Library	347100	MSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#	GC-MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Replicate Library	46954	MSRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#	GC-MS - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compound...	476	NSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#	GC-MS - SWGDUG Mass Spectral Library - Wiley	3047	SWGMSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#	GC-MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of Drugs	2758	AFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																											
GC-MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of ...	2758	AFX	<Latest Version>																																																											
GC-MS - Wiley Androstanes, Estrogens & other Steroids	2979	MUX	<Latest Version>																																																											
GC-MS - Wiley Drugs	2204	MDX	<Latest Version>																																																											
GC-MS - Wiley Geochemicals, Petrochemicals & Biomarkers	1093	MGX	<Latest Version>																																																											
GC-MS - Wiley Industrial Chemicals	41110	MTX	<Latest Version>																																																											
GC-MS - Wiley Mass Spectra of Designer Drugs 2025	36360	WDD1X	<Latest Version>																																																											
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																											
GC-MS - Food, Flavors, Fragrances, and Related Compounds: GC-MS Li...	13677	WFCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											
GC-MS - Maurer, Meyer, Pfleger, Weber: GC-MS Library of Drugs, Poiso...	10948	MMPWX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											
GC-MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Main Library	347100	MSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											
GC-MS - NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 - Replicate Library	46954	MSRX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											
GC-MS - Sadtler NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compound...	476	NSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											
GC-MS - SWGDUG Mass Spectral Library - Wiley	3047	SWGMSX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											
GC-MS - Wiley AAFS Toxicology Section Mass Spectra of Drugs	2758	AFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WGC-MS#																																																											

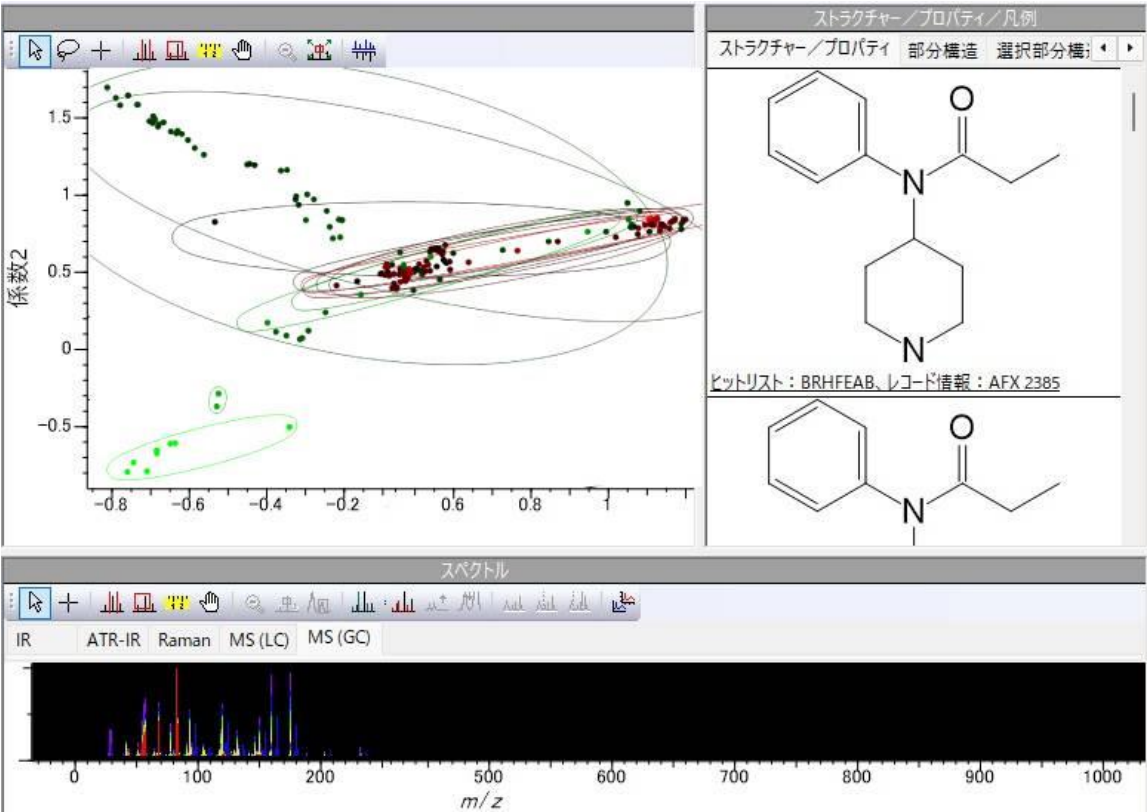
	アクション	結果						
2	- Property/Name を “Any Field contains ‘fentanyl’ ” に設定します。 - ヒットリストのサイズ制限を設定：200. [検索 (Search)] ボタンをクリックする。	☐ InChI, InChIKey, 名前, SMILES, またはCASレジストリ番号による検索(L) ☐ スペクトル ☐ ピーク情報 ☒ 構造 ☒ プロパティ/名称 ☐ MSforID 検索用データベース ☒ カスタマイズ選択 ☐ すべての化合物 ☐ 計算されたスペクトルの使用 ☐ 純粋化合物 ☐ 計算されたスペクトルの使用 サマリー ☐ プロパティ ☒ 検索(S) プロパティ テキスト 完全一致(X) を含む(T) で始まる(W) 値(U): fentanyl AND OR NOT <input type="button" value("(")"=""/> <input type="button" value(")"=""/> <table> <thead> <tr> <th>Property</th> <th></th> <th>Value</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>テキスト</td> <td>contains</td> <td>fentanyl</td> </tr> </tbody> </table> すべてクリア(R) クリア(Q) ヒット数の上限: 200 ☐ すべてのヒット 表示プロファイル: <プロファイルなし> 検索	Property		Value	テキスト	contains	fentanyl
Property		Value						
テキスト	contains	fentanyl						

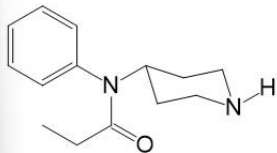
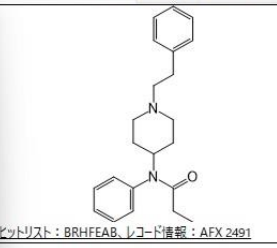
	アクション	結果
3	Minelt は様々なフェンタニルのヒットリストを提供する。 - このヒットリストを Trendfinder に転送する。 Transfer to:  Trendfinder 注： ヒットリストを転送せずに Trendfinder アプリケーションを起動するには、Spectral Analysis ツールボックスのアイコンをクリックして Trendfinder アプリケーションを開く。 - プロンプトで次へ>をクリックする。	

	アクション	結果
4	• MS (GC) スペクトルを分析のために選択した照射野に移動する。 • 分類のフィールドとして正確質量を選択する。 • 次へ>をクリックする。	 データベースとプロパティ分析 ステップ3: 分析対象のフィールドを選択します 利用可能なフィールド - ATR-IR スペクトル - Collision Energy - Cone Voltage - DEA Controlled Substances Code Number - Estimated Kovats Retention Index - Exact Mass - HQI - IR スペクトル - Molecular Weight MS (GC) スペクトル - NIST ID - Nominal Mass - Polar Surface Area Predicted - Precursor m/z - Precursor2 m/z - Precursor3 m/z - Pressure - Quality - Raman Laser Wavelength - Raman スペクトル - Retention Index 選択済みのフィールド - MS (GC) スペクトル からのスケール ☐ から(T): データベースの例: データベースの例: 分類のフィールド: <無し> 前へ(B) 次へ(N) キャンセル

	アクション	結果
5	• Y Transform で「Divide By」を選択し、Choices で「Sample Max」を選択すると、MS スペクトルにおいて最適な結果が得られます。 • 次へ>をクリックする。	 データベースとプロパティ分析 ステップ4: 分析パラメータ 前処理: 中心化 範囲およびピーキングパッケージング ☐ Y変換 選択できるもの(I): - Log10 - MSC - SNV - スムース(&M) - 一次微分(&1) - 乗算 - 二次微分(&2) - 減量(&S) - 除数 選択したもの(S): - ベースライン補正 選択肢: 線形フィット 前へ(B) 次へ(N) キャンセル

	アクション	結果
6	- 完了をクリックする。 2D スコアプロットビューを選択する。 	  明るい緑色(質量が小さい)スペクトルのグループを見ることができる。 円 (軌跡) は、[分類 (Classification)]フィールドの値の境界を定義する。

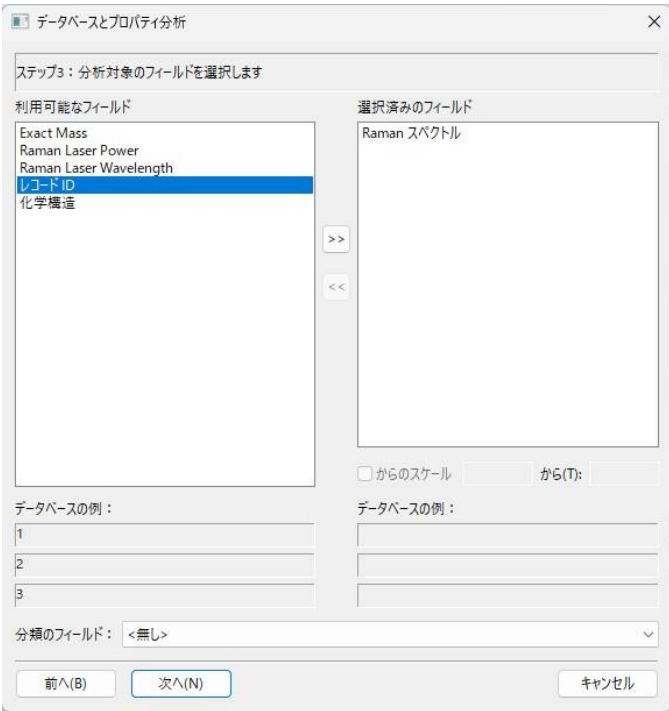
	アクション	結果
7	- 左マウスを使用して長方形を描画し、左下の緑色のスペクトルが選択されてオレンジ色に変わるようにする。 - 構造/プロパティ/凡例ペインの下にある構造/プロパティタブに移動する。 - 下部ペインの MS (GC) タブをクリックしてスペクトルを開く。	 The screenshot displays the KnowItAll software interface. The top-left panel shows a PCA plot with '係数2' on the y-axis and 'm/z' on the x-axis. The top-right panel, titled 'ストラクチャー/プロパティ/凡例', shows the chemical structure of a compound (a benzene ring attached to a piperidine ring via a carbonyl group) and a list of hits: 'ヒットリスト: BRHFEAB, レコード情報: AFX 2385'. The bottom panel, titled 'スペクトル', shows a mass spectrum plot with 'm/z' on the x-axis and intensity on the y-axis. The plot shows several peaks, with the base peak at m/z 100. The plot is labeled 'MS (GC)'. これらは様々なノルフェンタニル MS スペクトルである。 下部ペインには、選択した MS スペクトルオーバーレイヒートマップが表示される。

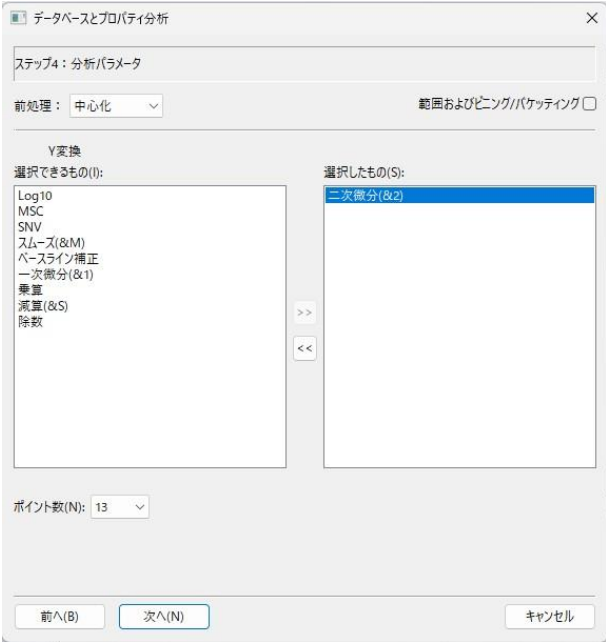
	アクション	結果
8	2つの暗いグループドットを選択すると、ノルフェンタニル AC スペクトルがグループ化される。	グラフ プロパティ名 値 Name Norfentanyl Synonyms Fentanyl(-phenethyl+H) InChIKey PMCBD8WCCQ8SRJ-UHFFFAOYSA-N Formula C₁₄H₂₀N₂O Nominal Mass 232.000000 Wiley ID DD2025_003304 Technique GC/MS Retention Index 1957.000000 Classification Designer drug precursor, Fentanyl metabolite Ionization Type Electron Ionization (EI) ヒットリスト: BRHFEAB、レコード情報: WDD1X 3304 
9	左上から中央までの緑色の直線点の線はフェンタニルである	グラフ プロパティ名 値 Name Fentanyl Formula C₂₂H₂₈N₂O Molecular Weight 336.477000 Source of Spectrum Mass Spectrometry Committee of the Toxicology Section of the InChIKey PJMPHNIQZUBGLI-UHFFFAOYSA-N InChI InChI=1S/C₂₂H₂₈N₂O/c1-2-22(25)24(20-11-7-4-8-12-20)21-14- Estimated Kovats Rete 2739.000000 Exact Mass 336.220164 Nominal Mass 336.000000 SMILES c1cccc(c1)N(C1CCN(CC1)CCc1ccccc1)C(C)=O ヒットリスト: BRHFEAB、レコード情報: AFX 2491 

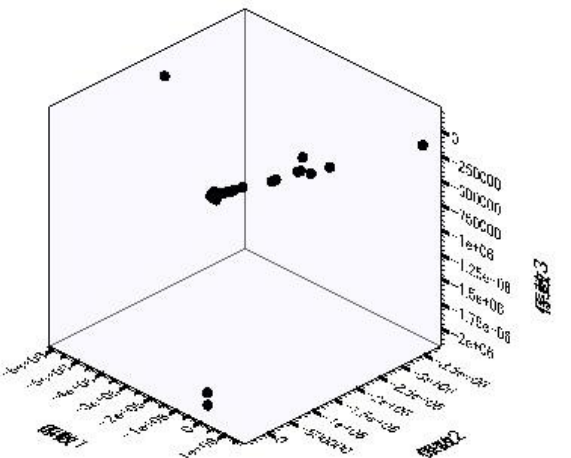
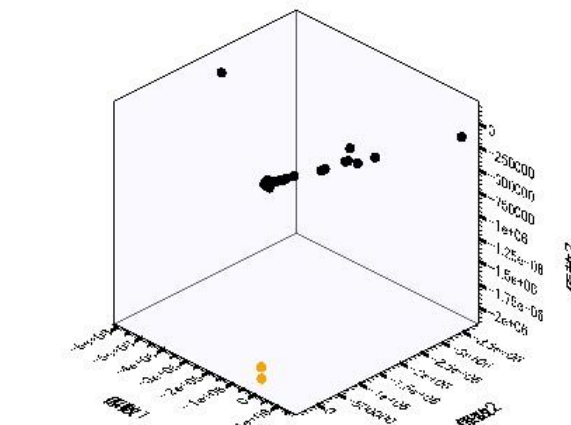
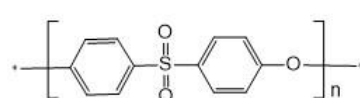
ラマン

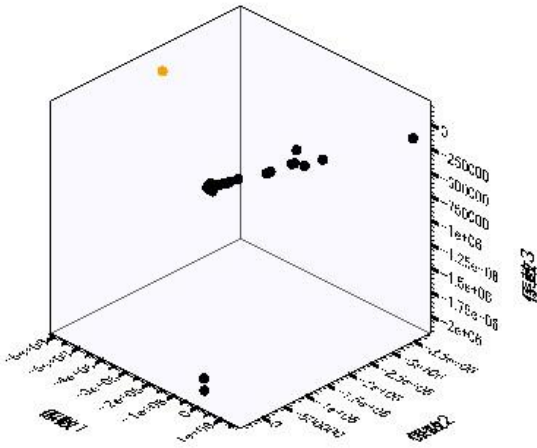
ポリマー分析

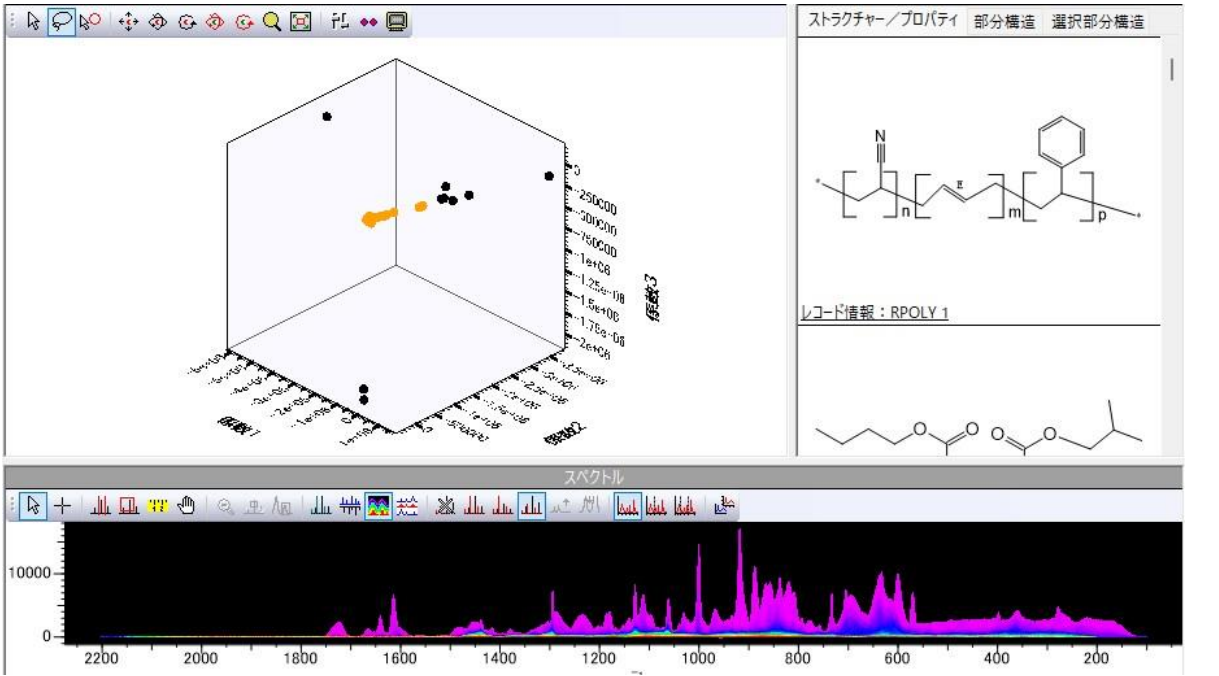
	アクション	結果
1	Spectral Analysis ツールボックスで Trendfinder アプリケーションのアイコンを クリックして、Trendfinder アプリケーショ ンを開く。	アプリケーションが開く。
2	• スペクトル法の限界をラマンに設定す る。 • 分析対象のデータベース Raman- Polymers-Wiley を選択し、Add をクリ ックする。 • [次へ>]、[次へ>]をクリックする。	

	アクション	結果
3	- ラマンスペクトルを右に移動するには： >>をクリックするか、 - ラマンスペクトルをダブルクリックする。 - 次へ>をクリックする。	

	アクション	結果
4	● Y変換使用可能リストで2番目の微分を選択する。 ● 点の数 (Number of Points) を 13 に設定する。	
5	次へ>をクリックする。	

	アクション	結果
6	完了をクリックする。	 3つの大きなグループが明確に特定されている。
7	左マウスを使用して点のグループを選択する。	  レコード情報: RPOLY 56 レコード情報: RPOLY 61

	アクション	結果
8	別の点に移動して、別のポリマーを調べる。	 $\text{---} \left[\text{C}_6\text{H}_4\text{---S} \right]_n \text{---}$ レコード情報: RPOLY 57

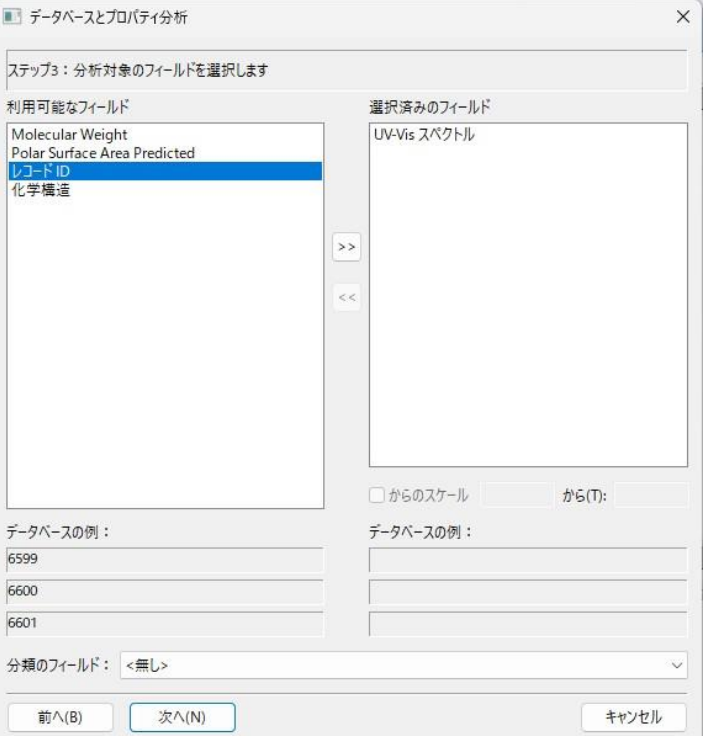
	アクション	結果
9	マウスの左ボタンをクリックしたままにして別の点グループを選択し、別のポリマーを検査する。	 それらは全く異なるポリマーである。 下部のペインには、選択したスペクトルのオーバーレイヒートマップが表示される。

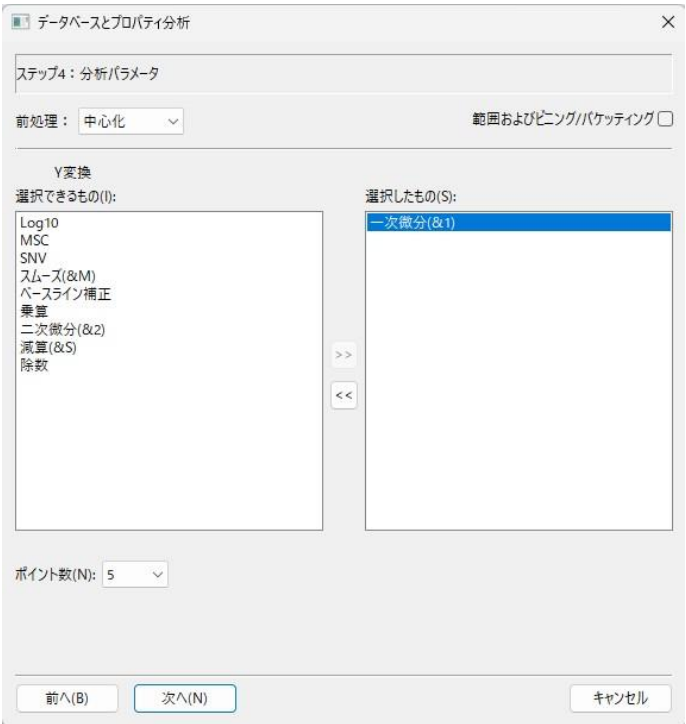
UV-Vis

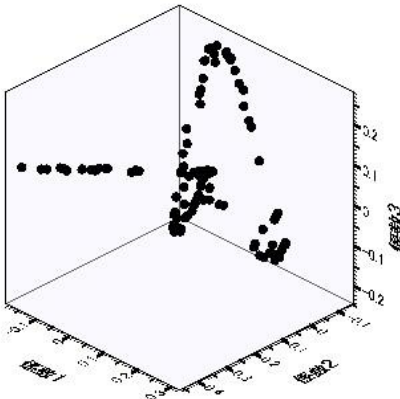
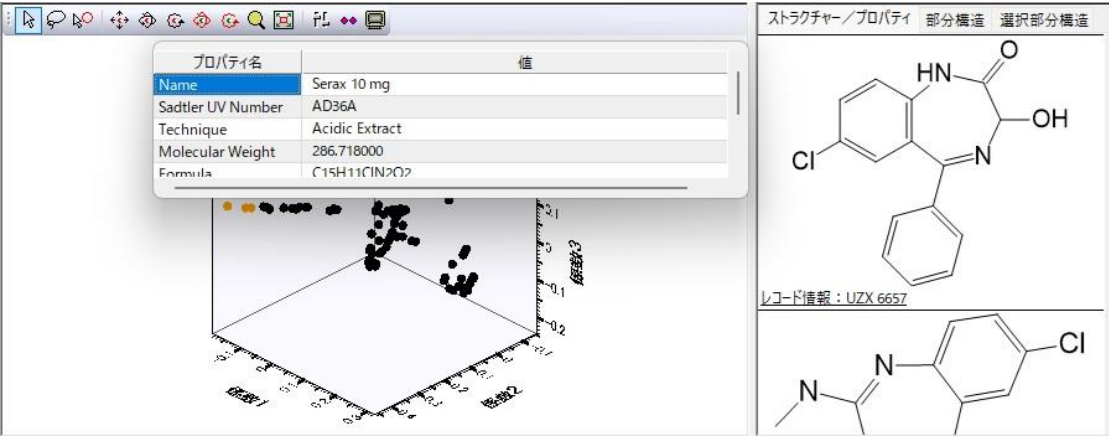
フォレンジックマテリアル分析

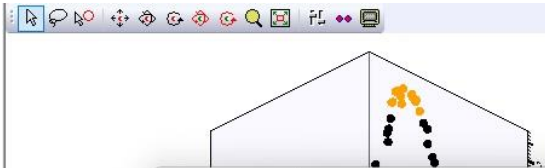
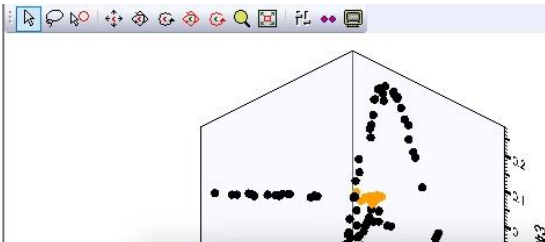
	アクション	結果
1	Spectral Analysis ツールボックスで Trendfinder アプリケーションのアイコンをクリックして、Trendfinder アプリケーションを開く。	アプリケーションが開く。
2	[ファイル]>[新規 PCA 解析]を選択する。	データベースとプロパティの解析ウィザードが開く 

	アクション	結果																		
3	- 分析対象として UV-Vis データベース UV-Vis-Sadtler Forensics 200 to 500 nm-Wiley を選択し、Add をクリックする。 [次へ>]、[次へ>] をクリックする。	データベースとプロパティ分析 ステップ1：分析用データソースを選択します 利用可能なデータベース： インターネットデータベースは... 対象スペクトル(L): UV-Vis リフレッシュ(R) [-] Reference [-] 算出済み [-] User DB [-] Hit List [-] データ制御 <table><thead><tr><th>名称</th><th>レコード</th><th>DB コード</th></tr></thead><tbody><tr><td>Multi-Technique Sadtler Demo Dat...</td><td>37</td><td>DEMOX</td></tr><tr><td>UV-Vis - Sadtler 200 to 350 nm - Wi...</td><td>21660</td><td>UWX</td></tr><tr><td>UV-Vis - Sadtler 200 to 500 nm - Wi...</td><td>6824</td><td>UXX</td></tr><tr><td>UV-Vis - Sadtler 200 to 800 nm - Wi...</td><td>2006</td><td>UYX</td></tr><tr><td>UV-Vis - Sadtler Forensics 200 to 50...</td><td>231</td><td>UZX</td></tr></tbody></table> すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(M) 分析対象として選択 データベース名/パス レコード範囲 UV-Vis - Sadtler Forensics 200 to 500 nm - Wiley 参照(B)... レコードIDの範囲 (「J」と「-」を使用) : 前へ(B) 次へ(N) キャンセル	名称	レコード	DB コード	Multi-Technique Sadtler Demo Dat...	37	DEMOX	UV-Vis - Sadtler 200 to 350 nm - Wi...	21660	UWX	UV-Vis - Sadtler 200 to 500 nm - Wi...	6824	UXX	UV-Vis - Sadtler 200 to 800 nm - Wi...	2006	UYX	UV-Vis - Sadtler Forensics 200 to 50...	231	UZX
名称	レコード	DB コード																		
Multi-Technique Sadtler Demo Dat...	37	DEMOX																		
UV-Vis - Sadtler 200 to 350 nm - Wi...	21660	UWX																		
UV-Vis - Sadtler 200 to 500 nm - Wi...	6824	UXX																		
UV-Vis - Sadtler 200 to 800 nm - Wi...	2006	UYX																		
UV-Vis - Sadtler Forensics 200 to 50...	231	UZX																		

	アクション	結果
4	このダイアログでは、 - 左のボックスを選択して「>>」を使用するか、ダブルクリックして右に移動し、左のボックスから右のボックスに UV-Vis Spectrum を移動する。 - 次へ>をクリックする。	

	アクション	結果
5	このダイアログでは、 ● 第1微分法を右のボックスに移動し、IRスペクトルに対してY変換を実行する。 ● IRピークの両側のポイント数を9に設定する。 ● 次へをクリックする。 注：紫外可視光では、ピークの最上部位置を求める一次微分で十分である。	

	アクション	結果												
6	完了をクリックする。	 上記の 3 つの要因ビューが返される。												
7	左マウスを使用して、各点グループのボックスを選択し、選択時にオレンジ色に変わる。	 The screenshot displays the software interface for spectral analysis. It includes a 3D scatter plot with axes labeled 変数1, 変数2, and 変数3. A properties window is open, showing the following information: <table><tr><th>プロパティ名</th><th>値</th></tr><tr><td>Name</td><td>Serax 10 mg</td></tr><tr><td>Sadtler UV Number</td><td>AD36A</td></tr><tr><td>Technique</td><td>Acidic Extract</td></tr><tr><td>Molecular Weight</td><td>286.718000</td></tr><tr><td>Formula</td><td>C₁₅H₁₁ClN₂O₂</td></tr></table> On the right, the chemical structure is shown, labeled with the record number UZX 6657. The structure is a benzimidazole derivative with a chlorine atom and a hydroxyl group.	プロパティ名	値	Name	Serax 10 mg	Sadtler UV Number	AD36A	Technique	Acidic Extract	Molecular Weight	286.718000	Formula	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂
プロパティ名	値													
Name	Serax 10 mg													
Sadtler UV Number	AD36A													
Technique	Acidic Extract													
Molecular Weight	286.718000													
Formula	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂													

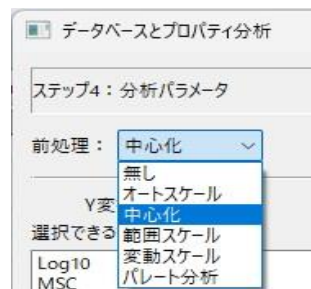
	アクション	結果																		
8		<table><thead><tr><th>プロパティ名</th><th>値</th></tr></thead><tbody><tr><td>Sadtler UV Number</td><td>AD43B</td></tr><tr><td>Technique</td><td>Basic Extract</td></tr><tr><td>Molecular Weight</td><td>299.843000</td></tr><tr><td>Formula</td><td>C19H22ClN</td></tr><tr><td>Polar Surface Area Pre</td><td>12.030000</td></tr><tr><td>Source of Sample</td><td>Eli Lilly & Company</td></tr><tr><td>InChIKey</td><td>SHAYBENGXDALFF-UHFFFAOYSA-N</td></tr><tr><td>InChI</td><td>InChI=1S/C19H21N.ClH/c1-20-14-6-11-19-17-9-4-2-7-15(17)12-</td></tr></tbody></table> ストラクチャー／プロパティ 部分構造 選択部分構造 <chem>CN(C)CCCC1=CC=CC2=C1C=CC3=CC=CC=C23</chem> HCl レコード情報：UZX 6670 レコード情報：UZX 6682 レコード情報：UZX 6702	プロパティ名	値	Sadtler UV Number	AD43B	Technique	Basic Extract	Molecular Weight	299.843000	Formula	C19H22ClN	Polar Surface Area Pre	12.030000	Source of Sample	Eli Lilly & Company	InChIKey	SHAYBENGXDALFF-UHFFFAOYSA-N	InChI	InChI=1S/C19H21N.ClH/c1-20-14-6-11-19-17-9-4-2-7-15(17)12-
プロパティ名	値																			
Sadtler UV Number	AD43B																			
Technique	Basic Extract																			
Molecular Weight	299.843000																			
Formula	C19H22ClN																			
Polar Surface Area Pre	12.030000																			
Source of Sample	Eli Lilly & Company																			
InChIKey	SHAYBENGXDALFF-UHFFFAOYSA-N																			
InChI	InChI=1S/C19H21N.ClH/c1-20-14-6-11-19-17-9-4-2-7-15(17)12-																			
9		<table><thead><tr><th>プロパティ名</th><th>値</th></tr></thead><tbody><tr><td>Name</td><td>LSD</td></tr><tr><td>Sadtler UV Number</td><td>AD3A</td></tr><tr><td>Technique</td><td>Acidic Extract</td></tr><tr><td>Molecular Weight</td><td>323.438000</td></tr><tr><td>Formula</td><td>C20H25N3O</td></tr><tr><td>Polar Surface Area Pre</td><td>36.440000</td></tr><tr><td>CAS Registry Number</td><td>50-37-2</td></tr></tbody></table> ストラクチャー／プロパティ 部分構造 選択部分構造 <chem>CN(C)C(=O)[C@H]1CC[C@@H]2C=C[C@H]3C=CC=C[C@@H]3N2C1=O</chem> レコード情報：UZX 6603	プロパティ名	値	Name	LSD	Sadtler UV Number	AD3A	Technique	Acidic Extract	Molecular Weight	323.438000	Formula	C20H25N3O	Polar Surface Area Pre	36.440000	CAS Registry Number	50-37-2		
プロパティ名	値																			
Name	LSD																			
Sadtler UV Number	AD3A																			
Technique	Acidic Extract																			
Molecular Weight	323.438000																			
Formula	C20H25N3O																			
Polar Surface Area Pre	36.440000																			
CAS Registry Number	50-37-2																			

主成分分析 (PCA) 理論

主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)は次元削減を行うプロセスである。したがって、変数の大きな集合を、相関のない変数（主成分）の小さな集合に変換する。同時に、元のデータの分散の大部分を保持する。この部分では、これが KnowItAll によるスペクトルデータ解析にどのように適用されるかを説明する。

パラメータ

前処理



- なし：前処理は行われない。
- 自動スケール：

主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)において、autoscale はデータセット内の各変数が標準化される前処理ステップを指す。これには主に 2 つのアクションが含まれる。

1. センタリング：変換された変数の平均がゼロになるように各変数の平均を減算する。
2. スケーリング：各変数をその標準偏差で割って、変換された変数の分散が 1 になるようにする。

自動スケーリングは、元のスケールや単位に関係なく、すべての変数が PCA に等しく寄与することを保証する。これは PCA が最大分散の方向を識別するために重要であり、自動スケーリングを行わないと、より大きなスケールの変数が分析を支配する可能性があるためである。

- 平均中心：参照点¹を基準にしてデータを中央に配置する。
- 範囲スケール：特定の範囲内に収まるようにデータを変換する最小最大スケーリング²。
- 分散スケール：まず、各値の分散を計算する。次に、各変数を標準偏差で割る。

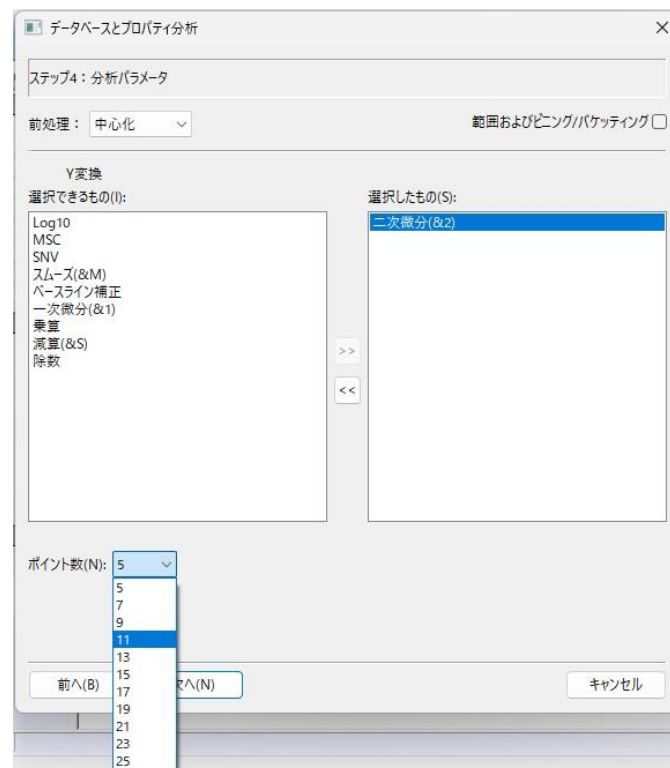
- **パレート分析**：パレート分析は、プロジェクトの利益の 80%は、20%の作業を行うことで達成できる、逆に 80%の問題は原因の 20%にまで辿ることができるという考えに基づく意思決定ツールである。言い換えれば、全ての入力を与えられた出力 3 に対して同一あるいは比例的な影響を与えるわけではないという仮定である。

¹ Eigenvector Research Documentation Wiki (2012) 高度な前処理：可変センタリング、https://www.wiki.eigenvector.com/index.php?title=Advanced_Preprocessing:_Variable_Centering (accessed 2025-08-19).

² Geeks for Geeks (2025) Normalization and Scaling, [Normalization and Scaling - GeeksforGeeks](https://www.geeksforgeeks.org/normalization-and-scaling/) (accessed 2025-08-19).

³ Kenton, W. (2025) パレート分析：定義、パレート図の作成方法、および例、<https://www.investopedia.com/terms/p/pareto-analysis.asp> (accessed 2025-08-19).

Y 変換



- **第 1 導関数**: パラメータ「点の数」はバル曲線(ピーク)の各辺の点の数である。

- **2nd derivative:**パラメータの「点の数」の定義。
- **Baseline Correction (ベースライン修正) :** ベースラインを修正する。
- **除算 :** さまざまなデータマトリックス変換および正規化方法。
 - **サンプル 1 -ノルム:**面積正規化。
 - **サンプル 2-ノルム:**ベクトル長正規化。
 - **サンプル最大 :** サンプル最大値 (MS スペクトルに適している)。
 - **サンプル範囲:**さまざまな機器の測定の違いを考慮する。
 - **変数の値:**特定の変数 n の値に正規化する。
- **Log10:** 10 を適用して Y 値をスケールする。
- **MSC:** 複数散布変数⁴。
- **SNV:** 標準正常変動⁵。
- **乗算 :** 編集可能な数値による複数の Y。
- **スムージング :** 標準の Savitzky-Golay アルゴリズムを使用して、ノイズの多いデータを滑らかにする。
- **減算 :** ユーザーは減算する値を定義できる。

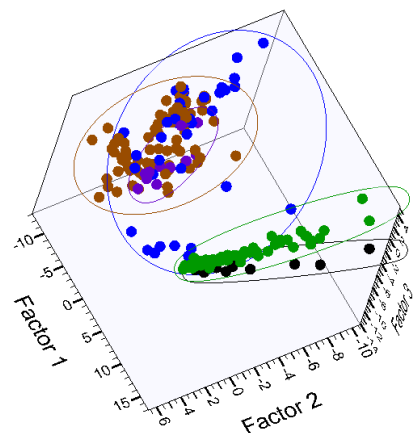
4 Fearn, T., Riccioli, C., Garrido-Varo, A., and Guerrero-Ginel, J.E. 「SNV と MSC の幾何学について」、*Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2009 年, 96 巻 1 号, 22-26 頁 Doi: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2008.11.006>.

Standard Normal Variate (標準正規変換, 2025) [Standard Normal Variate - an overview | ScienceDirect Topics](#), ScienceDirect (参照日: 2025 年 8 月 19 日)。

結果

スコア (プロット)

最初の 2 つまたは 3 つの主成分のスコアを因子として表示するグラフィカル表現で、数学的軸は互いに直交しており、データセット内の観測間関係を視覚化することができる⁶。パラメータ **Mean-center** を指定して IR-Automobile Paint Chips (APX) データベースの最初の 200 レコードを選択すると、次のプロットが表示される。

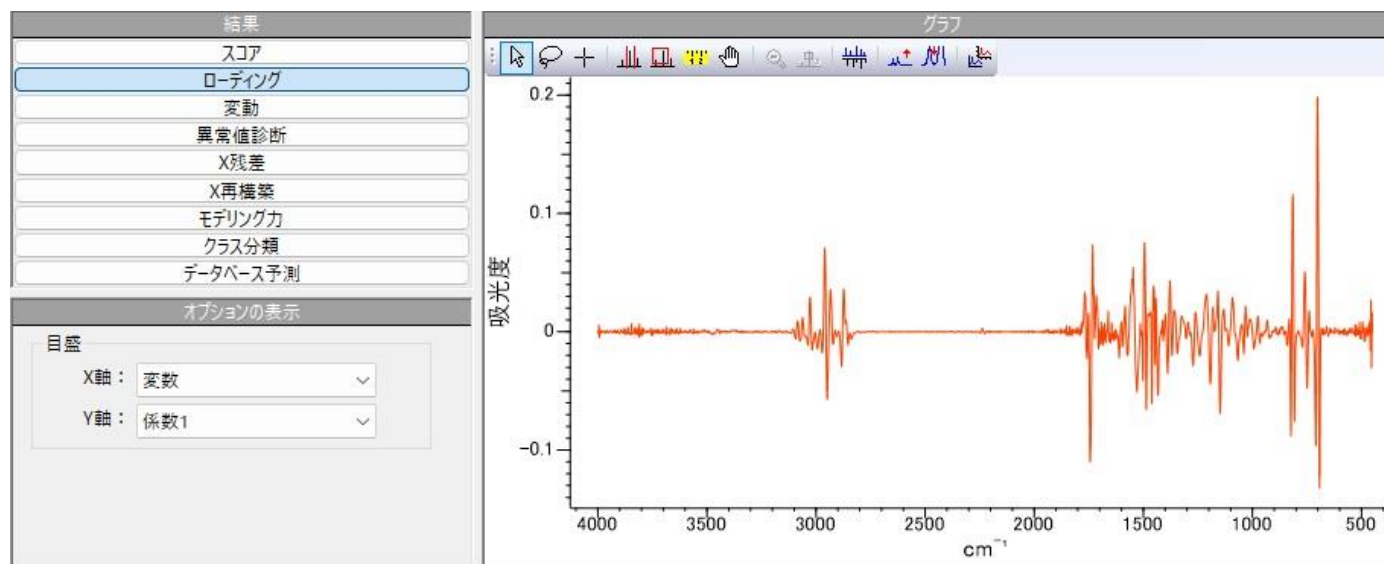


円 (軌跡) は、[分類 (Classification)]フィールドの値の境界を定義する)。

6 Dunn, K.G.(2025)データを用いたプロセス改善における潜在変数モデリング(<https://learnche.org/pid/latent-variable-modelling/principal-component-analysis/interpreting-score-plots-and-loading-plots>)(アクセス 2025-08-19)。

荷重

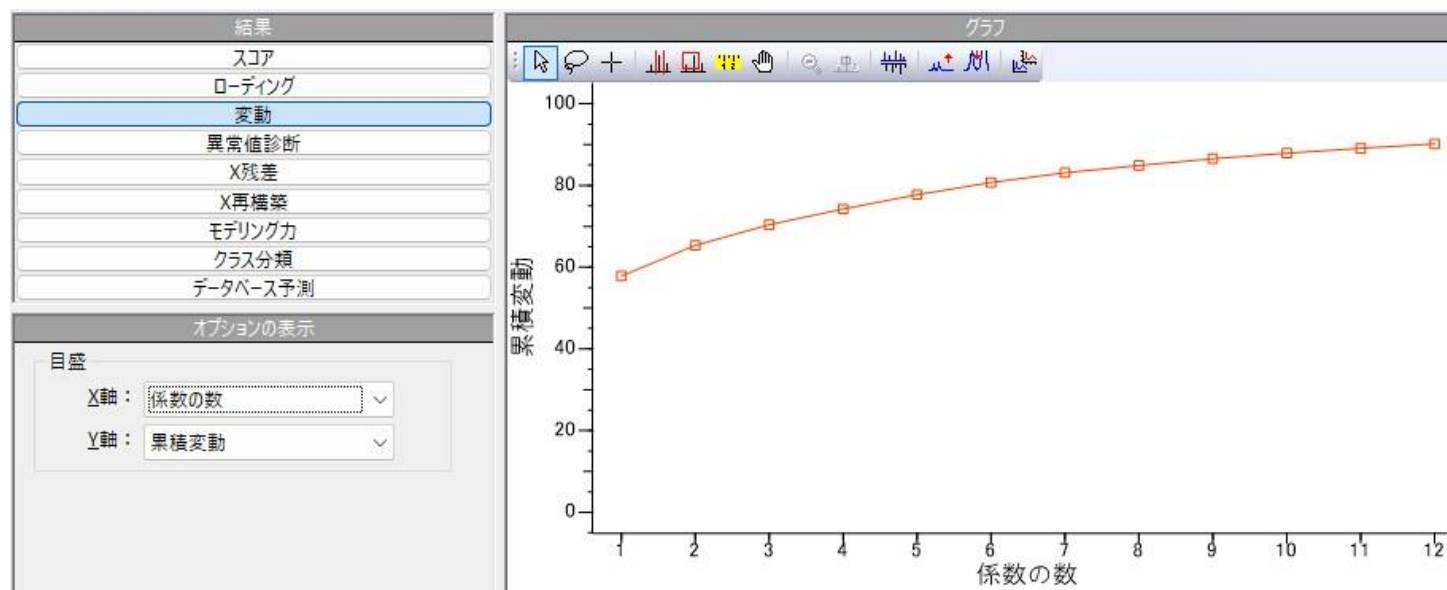
元の変数と主成分との関係を示すためには、それぞれの元の変数が主成分にどれだけ寄与しているか、そしてこれらの寄与の性質を理解するのに役立つ⁷。上記の例を使用すると、



7 Schork, J.(2025) PCA の負荷とは? Statistics Global (<https://statisticsglobe.com/what-are-loadings-pca#loadings-in-pca>) (アクセス 2025-08-19)。

差異

分散とは、各主要部品に起因する総分散の割合を指す⁸。これは次元削減後にどの程度の情報が保持されるかを理解するのに役立つ。主成分によって説明される分散の割合は、その主成分の分散と総分散の比率である⁹ 上記の例に適用すると、結果は次のようになる。



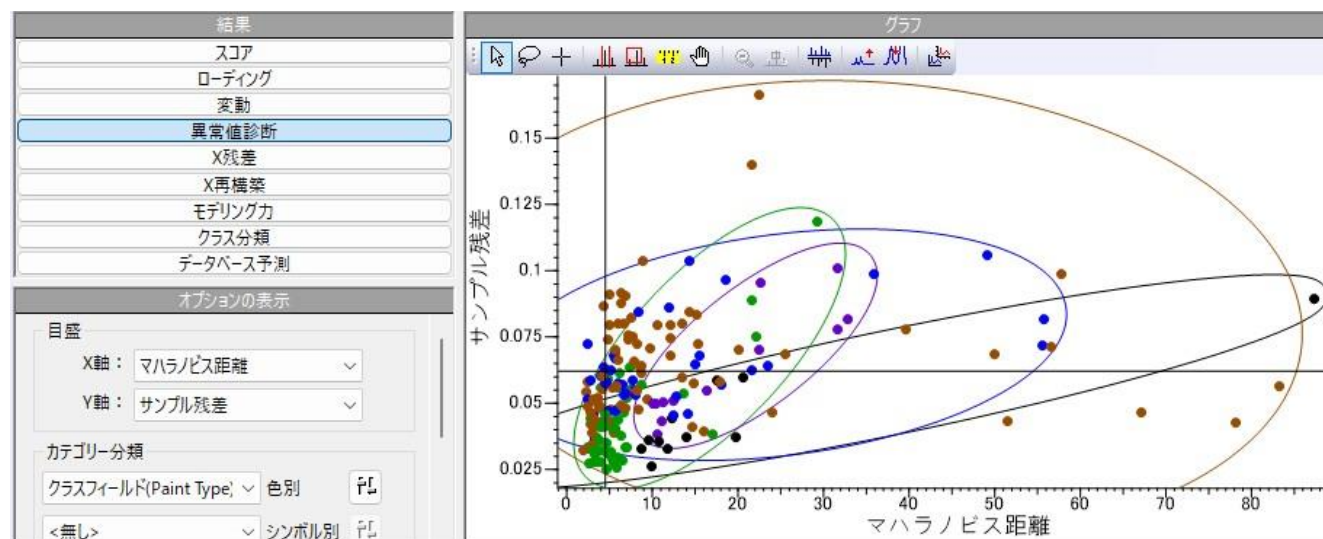
⁸ Chouinard, J.C.(2023) What is the Explained Variance in PCA (Python Example), <https://www.jcchouinard.com/pca-explained-variance/> (accessed 2025-08-19)。

⁹ Cheplyaka, R.(2017) PCA における分散について説明した <https://ro-che.info/articles/2017-12-11-pca-explained-variance> (accessed 2025-08-19)。

異常診断

次元を減らし、スコアプロット上のデータを視覚化することで、外れ値を特定する。[Outlier Diagnostics] パネルの [KnowItAll] で使用される用語：

- **マハラノビス距離 11**：2点間の距離を測定する。これは、標準得点の二乗 $z=(x-\mu)/\sigma$ $z=(x-\mu)/\sigma$ $z=(x-\mu)/\sigma$ を多変量に一般化したものです。つまり、点 P がデータ集合 D の平均からどれだけ標準偏差離れているかを示します。この距離は、P が D の平均位置にある場合は 0 となり、P が平均から各主成分軸に沿って離れるにつれて大きくなります。これらの軸のそれぞれが単位分散を持つように再スケールされた場合、マハラノビス距離は変換空間内の標準ユークリッド距離に対応する。したがって、マハラノビス距離は単位がなく、スケール不変であり、データセットの相関を考慮に入れる。要するに、**これは共分散構造を考慮したうえで、ある点がデータ分布の中心からどれだけ離れているかを測定する指標だ**。PCA は、縮小されたフィーチャー空間におけるこの距離を計算するのに使用できる。以下の手順が適用される。
 - PCA を適用して寸法を削減する。
 - 削減された空間内の各データ点について、マハラノビス距離を計算する。
 - 距離がしきい値を超えている点（例えばカイ二乗分布に基づく）を外れ値として識別する。上記の例を使用すると、結果は次のようになる。



- サンプル：各サンプルの ID（1 から行/スペクトルの数）。
- サンプルの残留
- **F 比率**：これは、2 つの分散または標準偏差が有意に異なっているかどうかを評価するための統計である。ある分散を別の分散で割ることによって計算される。帰無仮説が真なら、F の値はほとんどの場合 1.0 に近いと期待する。F 比が大きいということは、群平均間の変動が偶然に見られると予想されるよりも大きいことを意味する。F-比（F-ぶんるい、英: F- ratio）は、検定統計量のヌル分布としてよく現れる連続確率分布であり、特に分散分析 (ANOVA) や他の 15 において顕著である。
- 確率
- レコード ID

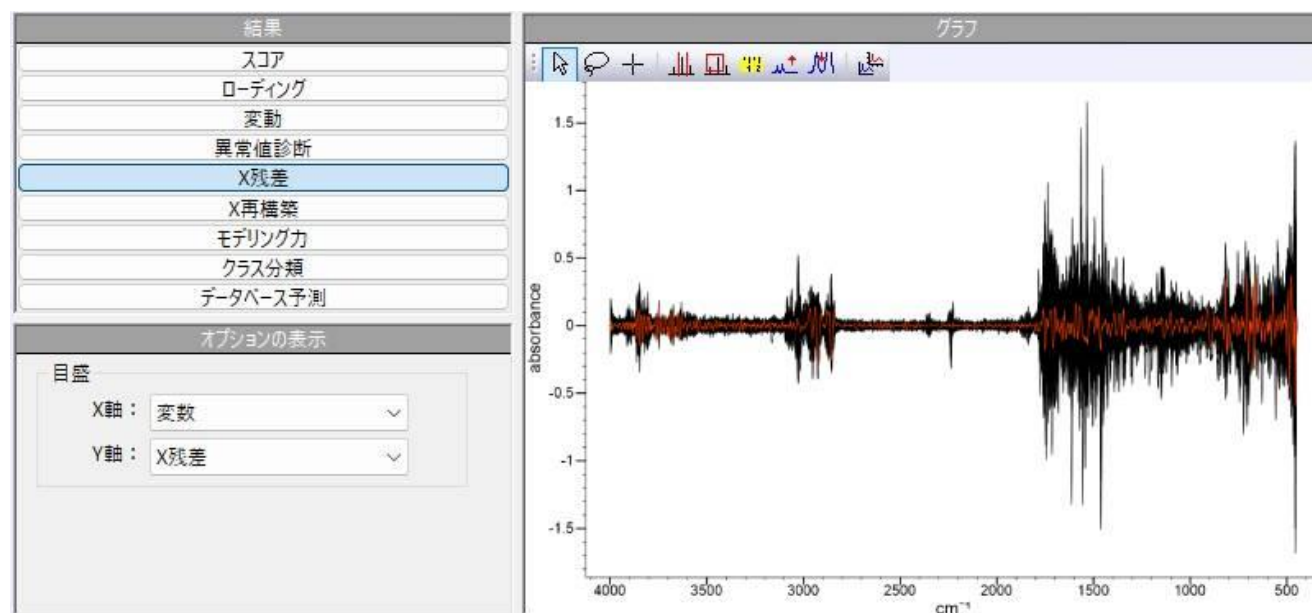
¹⁰ Datathatmatters (2024) 外れ値検出の簡素化：「データ解析を改善するための PCA 手法」 <https://datathatmatter.com/2024/11/03/outlier-detection-simplified-pca-techniques-for-improved-data-analysis/> (2025 年 8 月 19 日アクセス)。

¹¹ ウィキペディア (2025 年) マハラノビス距離、https://en.wikipedia.org/wiki/Mahalanobis_distance (2025 年 8 月 19 日参照)。

¹² GraphPad Software, LLC. (2025) 結果の解釈：一元配置分散分析 (One-way ANOVA)、https://www.graphpad.com/guides/prism/latest/statistics/f_ratio_and_anova_table_one_way_anova.htm (2025 年 8 月 19 日参照)。

X 残差

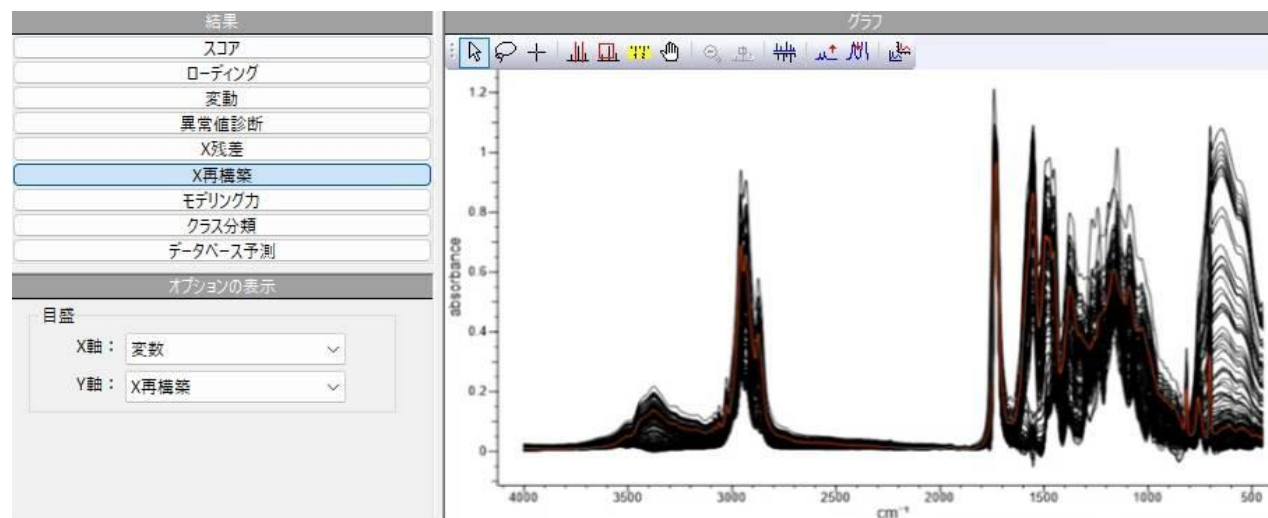
PCA 残差は残留行列 $E = X - T P' = X - X^{\wedge}$ （ここで X は元の行列、 $T P'$ は PCA モデル）を用いて計算される。元の行列の各列の残差は R^2 値を用いて計算することができ、これは PCA モデルがその列のデータをどれだけうまく記述しているかを示す。関数 `pcares(X, ndim)` は n -by- p 行列 X の $ndim$ 主成分を保持することによって得られる残差を返す。モデル残差の PCA は、解析しているデータに対する Z 内の変数の効果をモデルがどれだけうまく変換するかに基づいている。残差行列 $E = X - T P' = X - X^{\wedge}$ を使うと元の行列の各列の残差を計算することができる。これは X の各列に対する R^2 の値によって要約され PCA モデルがその列 13 からのデータをどれだけうまく記述しているかを示す。上記の例を使用すると、次のようになる：



¹³ Dunn, K.G. (2025)データを使用したプロセス改善における潜在変数モデリング, <https://learnche.org/pid/latent-variable-modelling/principal-component-analysis/interpreting-the-residuals> (accessed 2025-08-19)。

X 再構成

主成分から元の変数を再構築する ¹⁴「逆 PCA」と見ることができる。上記のデータセットでは、以下のようになる。



¹⁴ Stack Exchange (2025) PCA を逆にして、いくつかの主成分から元の変数を再構築する方法は? <https://stats.stackexchange.com/questions/229092/how-to-reverse-pca-and-reconstruct-original-variables-from-several-principal-com> (accessed 2025-08-19).

モデリングのパワー

クラスの分離

これは、異なるクラスがどれだけうまく分離されているかを測定する ¹⁵。最初の 1000 スペクトルの例：

結果	マトリックス				
スコア	Paint Type	Non-Aqueous Dispersion Enamel (NAD)	Acrylic Solution Lacquer	Water-Based Enamel	Acrylic
ローディング	Non-Aqueous Dispersion Enamel (NAD)		10.90	N.A.	0.09
変動	Acrylic Solution Lacquer	10.90		N.A.	7.87
異常値診断	Water-Based Enamel	N.A.	N.A.		N.A.
X残差	Acrylic Enamel	0.09	7.87	N.A.	
X再構築	Acrylic Dispersion Lacquer	N.A.	N.A.	N.A.	N.A.
モデリング力					
クラス分類					

¹⁵ Stack Exchange (2025 年) 分類問題におけるクラス分離性の指標、<https://stats.stackexchange.com/questions/46780/measures-of-class-separability-in-classification-problems> (2025 年 8 月 19 日参照)

