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

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

WILEY

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

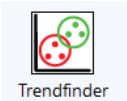
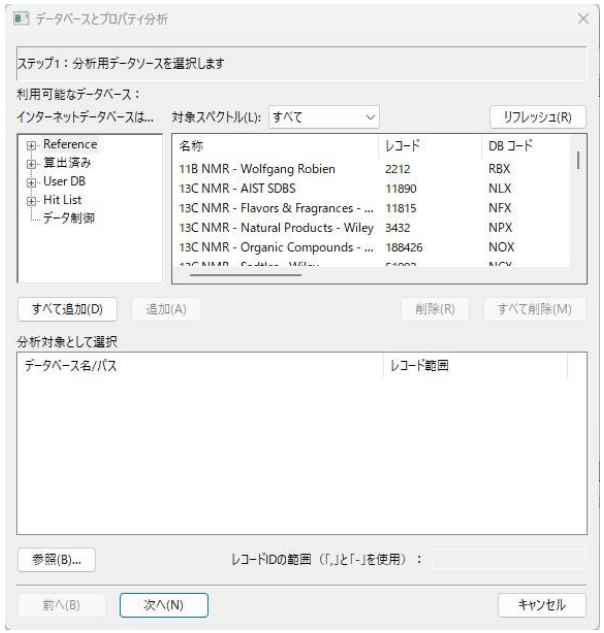
***KnowItAll** 使用されるアプリケーション*

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

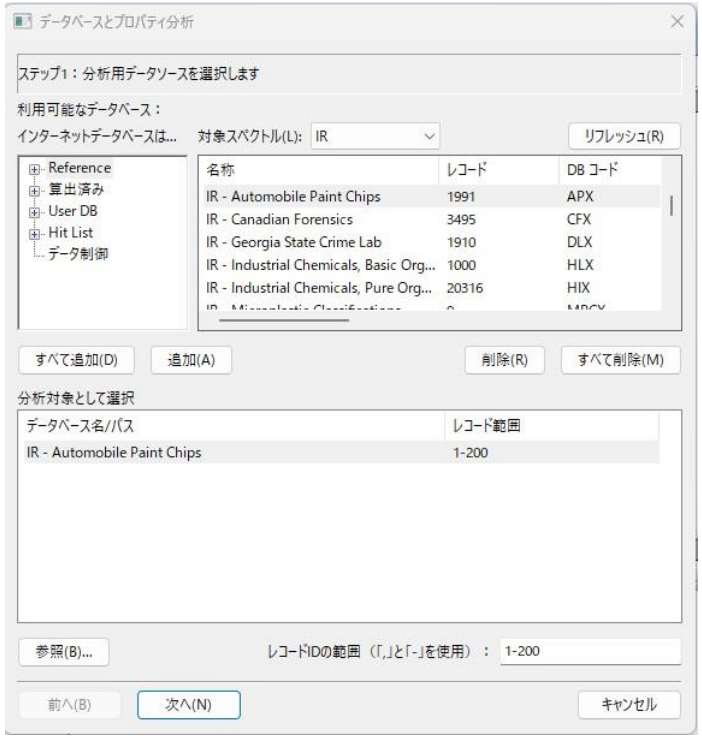
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

IR の例

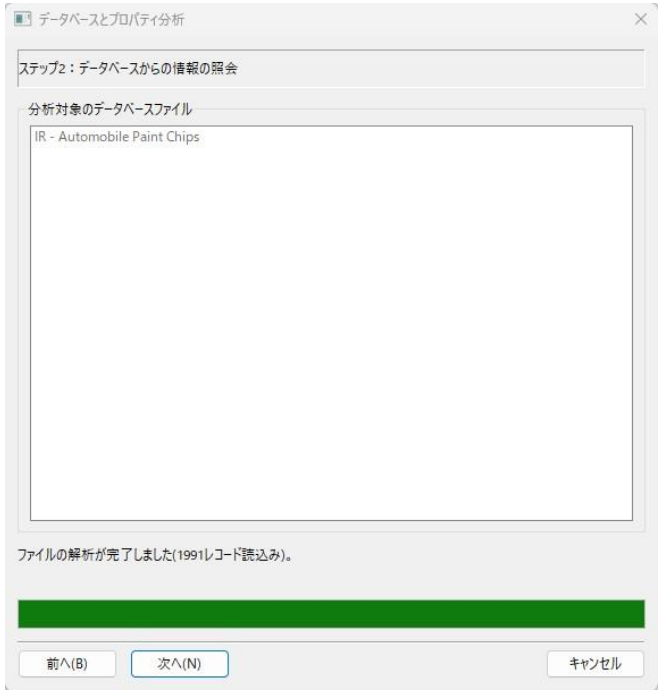
A. 自動車用塗料チップの主成分分析（PCA）

	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。 	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。 

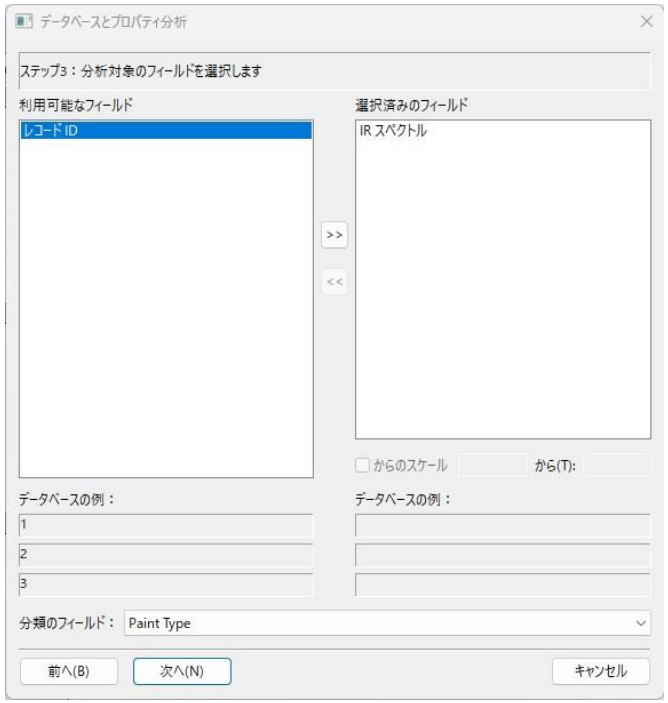
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

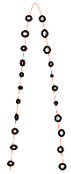
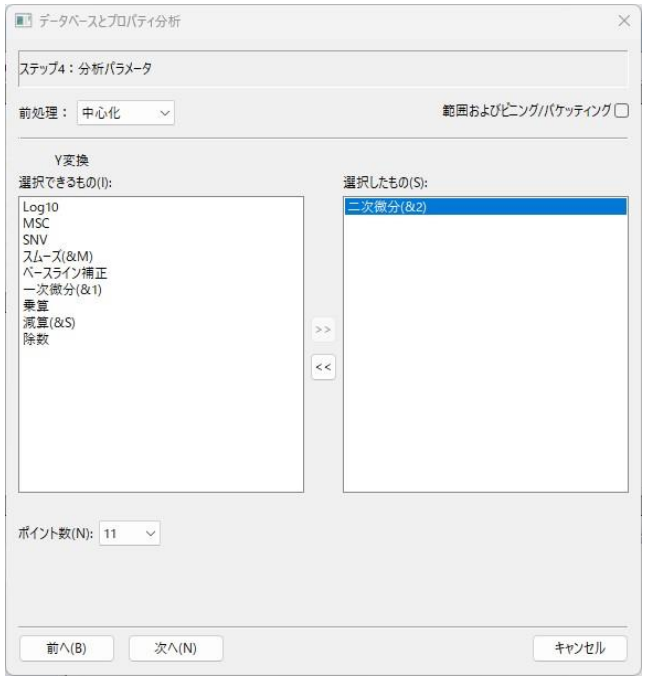
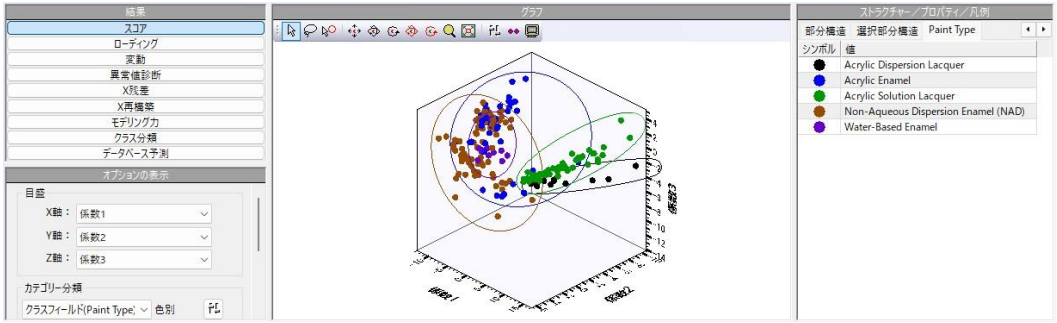
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	アクション	結果
4	**次へ>**をもう一度クリックする。	

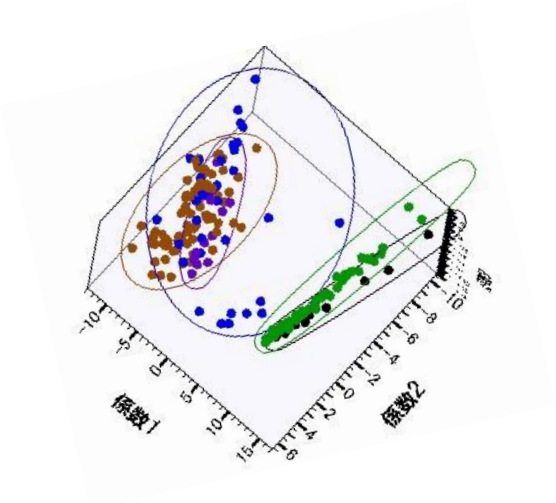
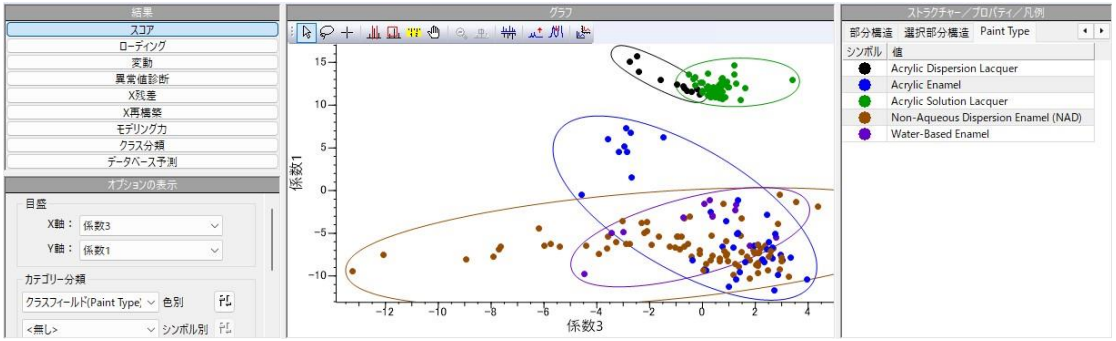
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

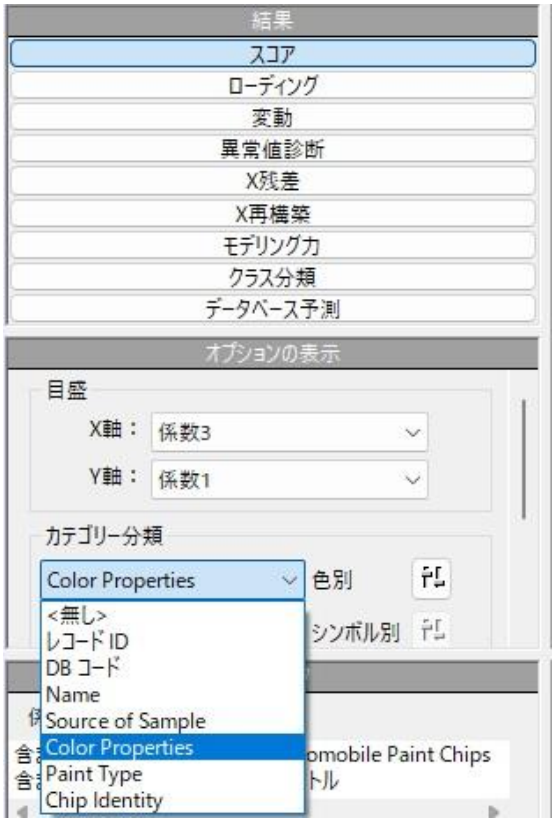
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。

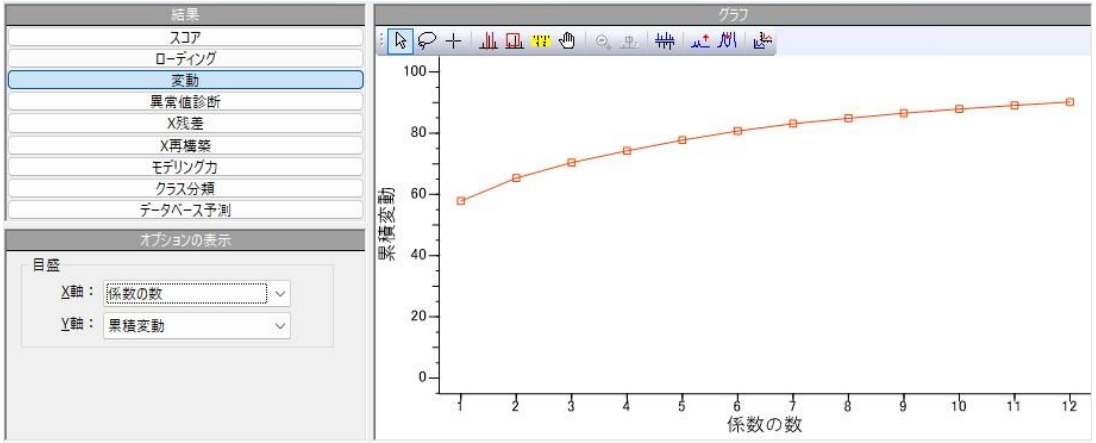
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	アクション	結果
8	 • 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。	 漆の種類(上)はエナメル質(下)から分離されている。

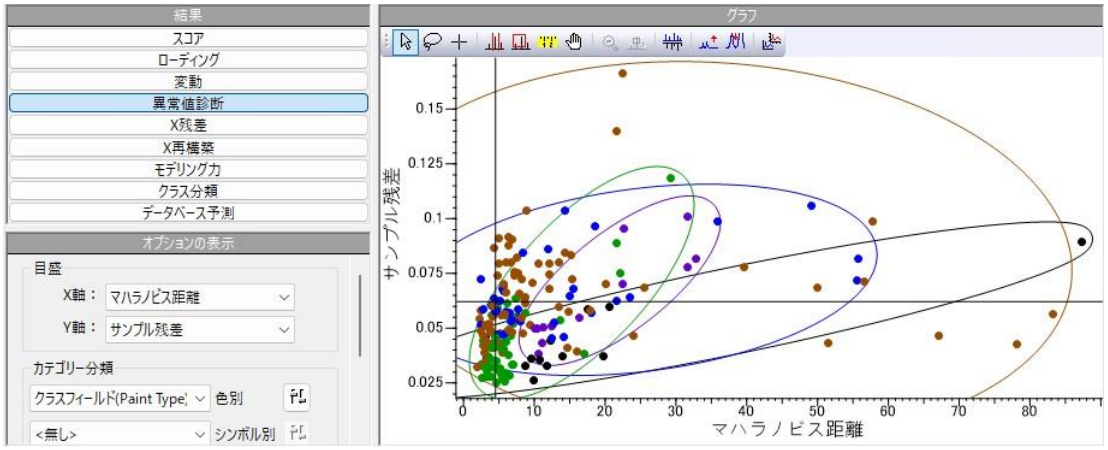
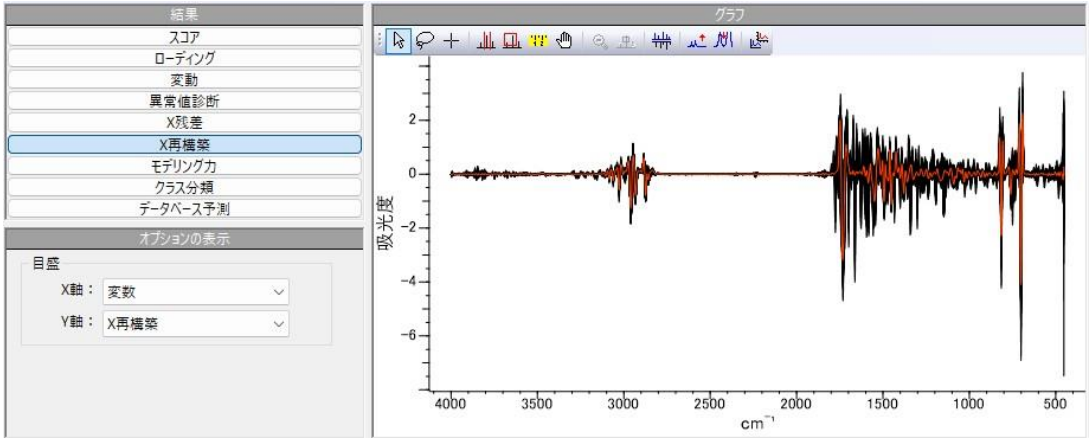
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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相関するかを確認できる。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

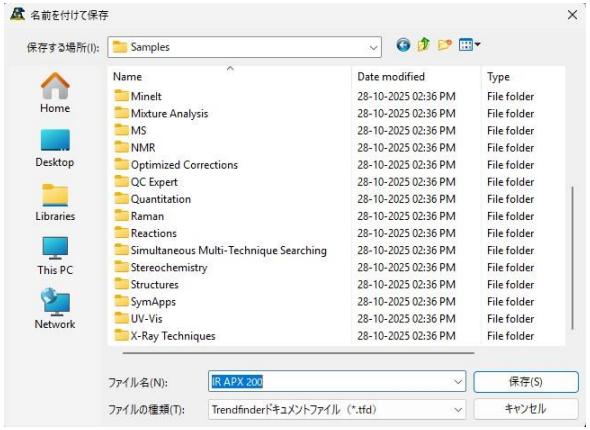
	アクション	結果
11	**分散**により PCA 品質を調べることができる。	 上記のように、6 つの要因がケースの 80%以上を説明することができる。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

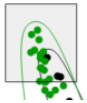
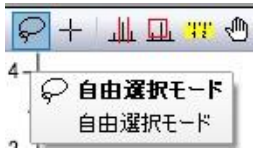
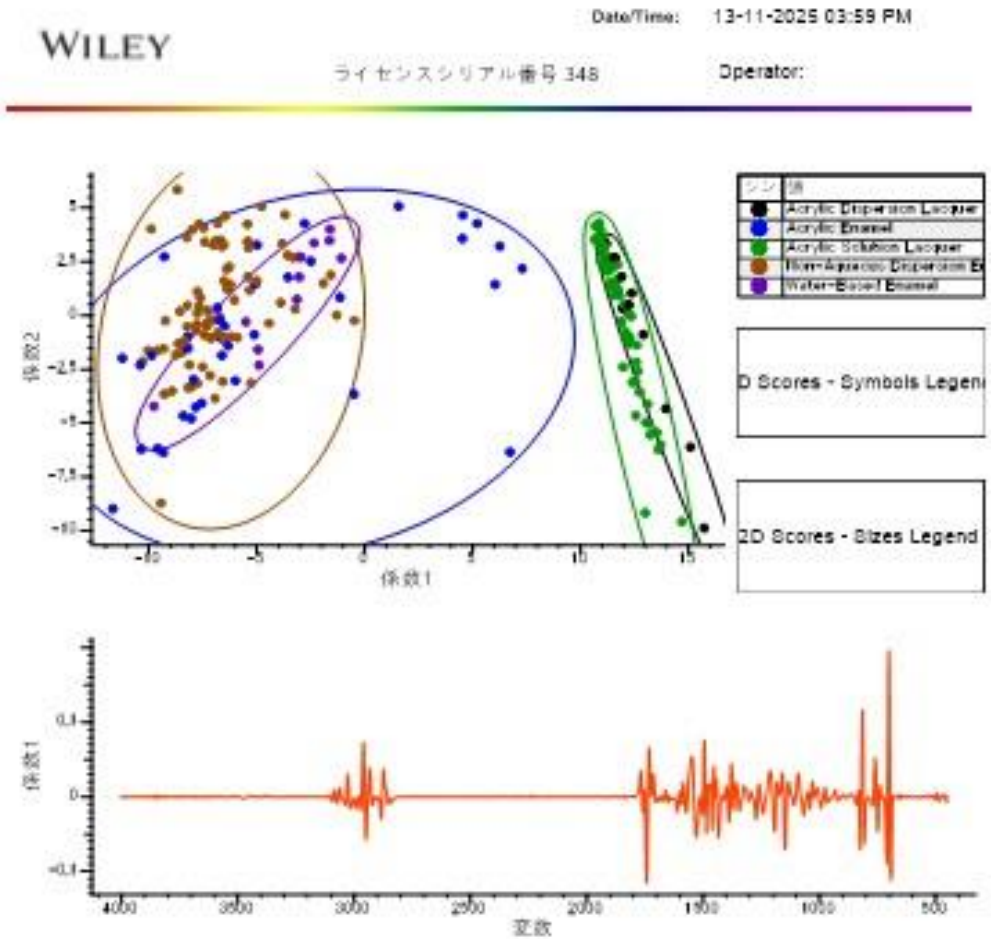
	アクション	結果
12	**外れ値診断（Outlier Diagnostics）**を選択して、外れ値の可能性を調べる。 ***Manhalanobis Distance*** *は標本が外れ値であるかどうかを決定する最も一般的な尺度である。*	 右端の黒い点（スペクトル標本）は群の明らかな外れ値であり、分布の中心からほぼ 100%外れている。
13	**再構成された X** は右図のようになる。	 *注： 上記は Y の「再構成された」二次微分形式である。*

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

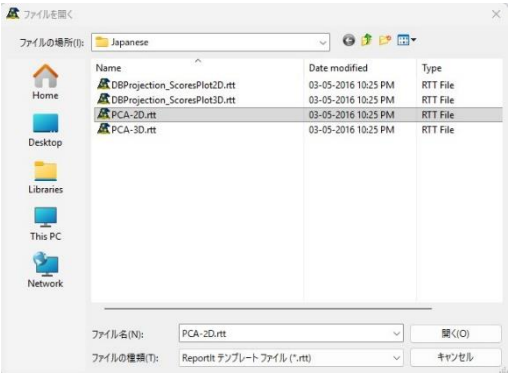
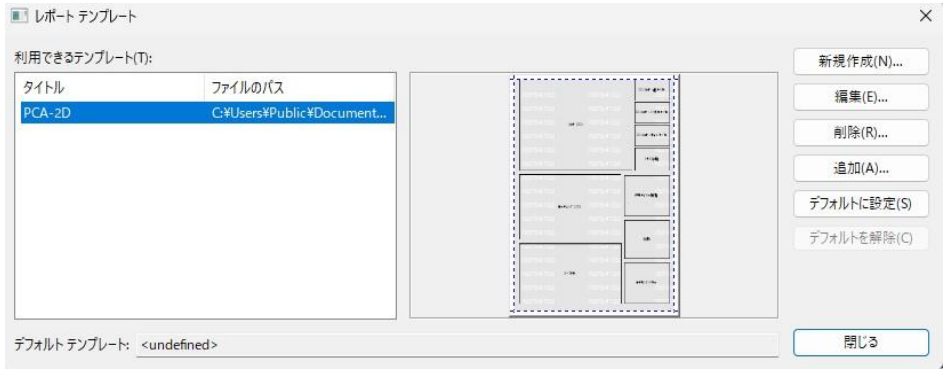
B. 解析を保存してレポートを作成する

	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。。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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、 o 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。  o または、なげなわツールを使用して点を円で囲む。  o 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** をクリックする 。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。 	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

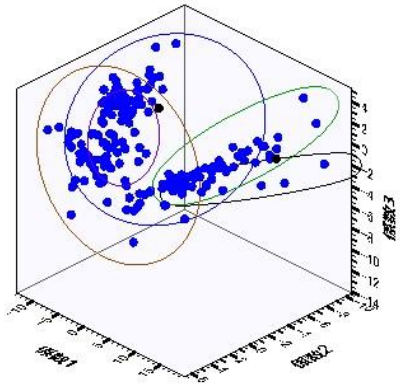
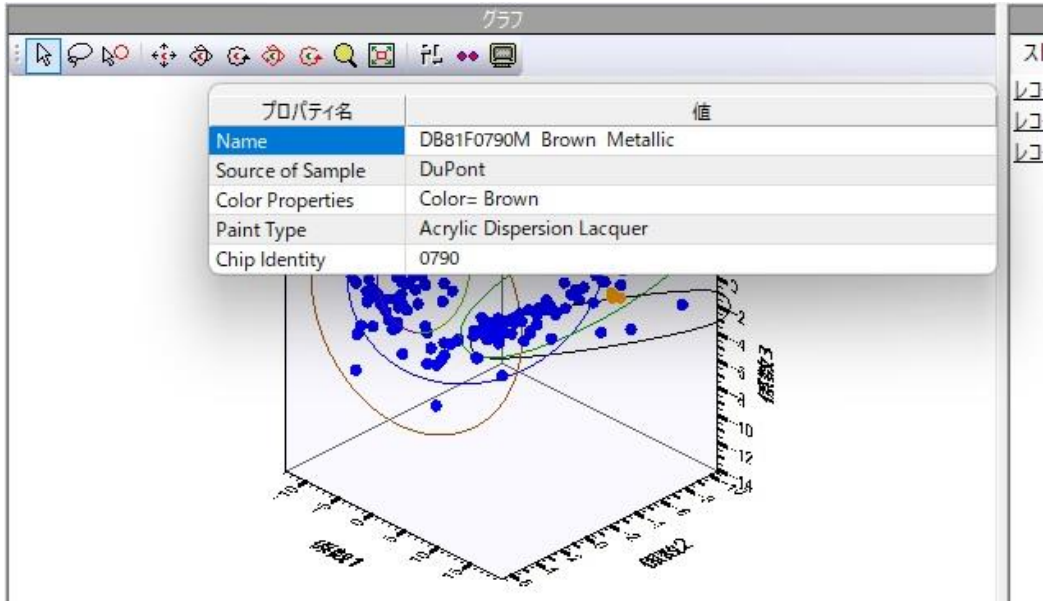
C. 未知のスペクトルを PCA の「スペース」に投影

	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。	

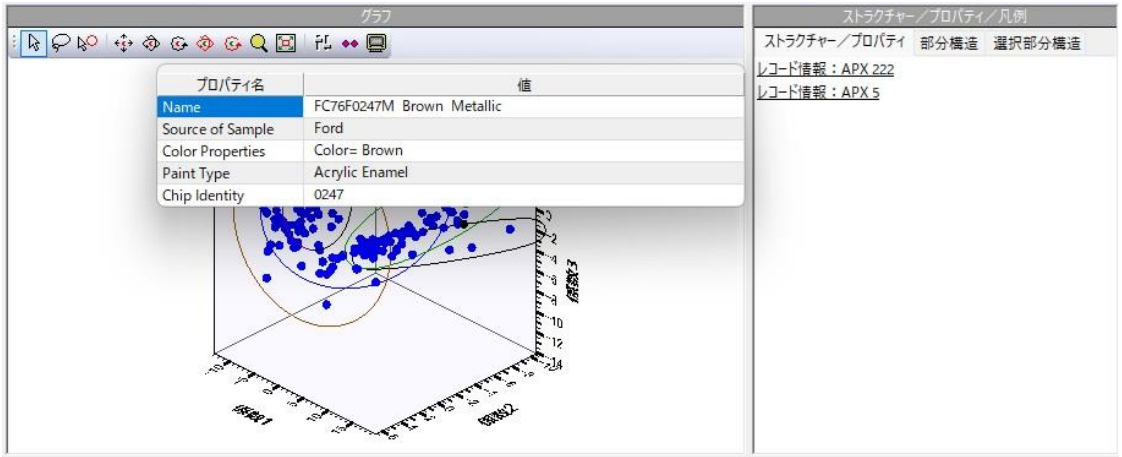
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。

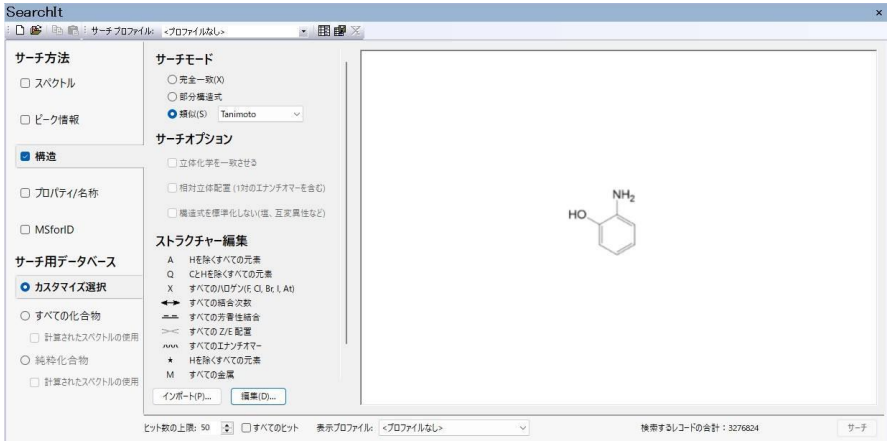
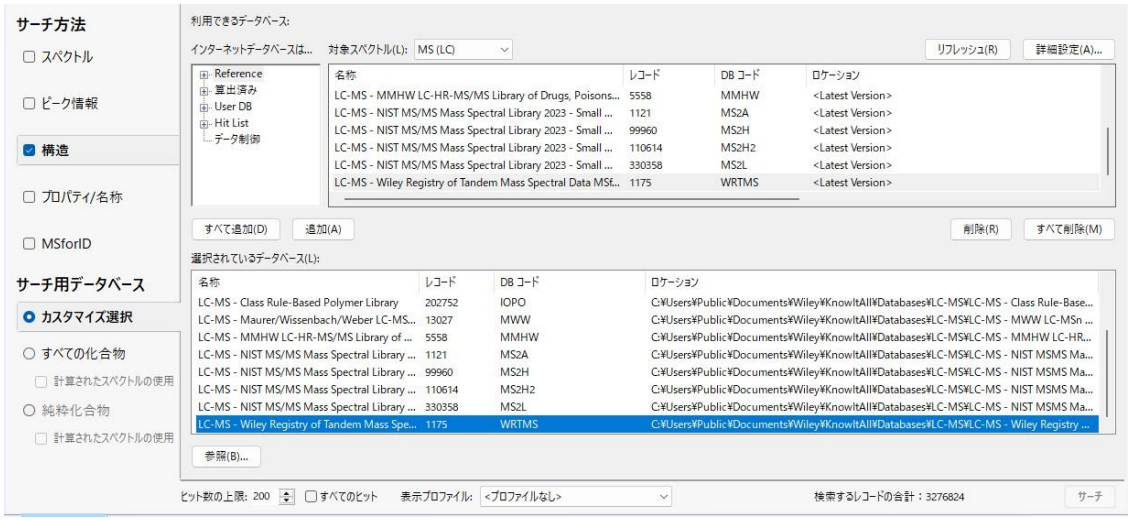
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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円の中にある。

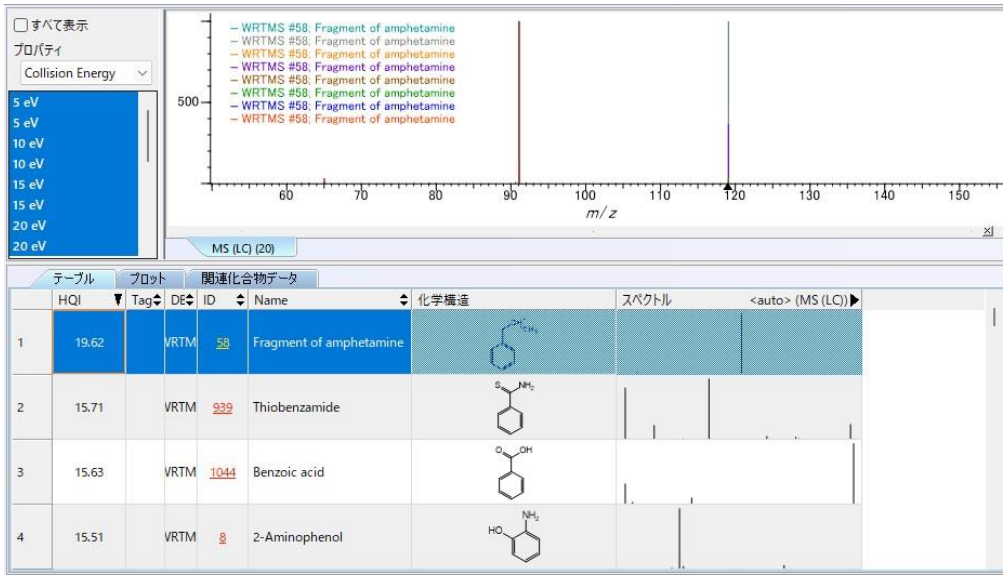
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

LC-MS

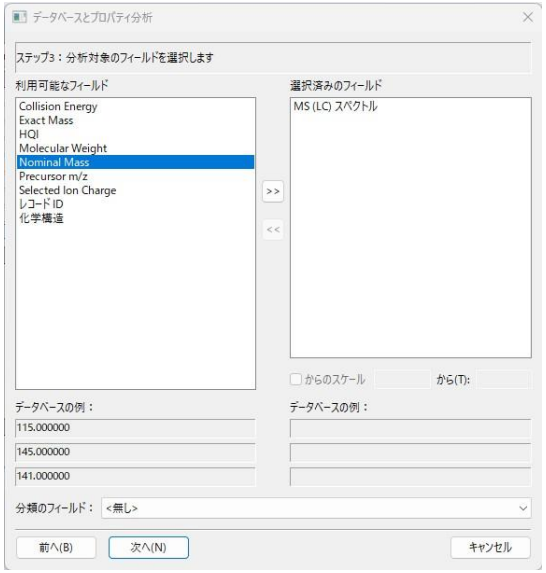
類似構造のヒットリスト解析

	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。	

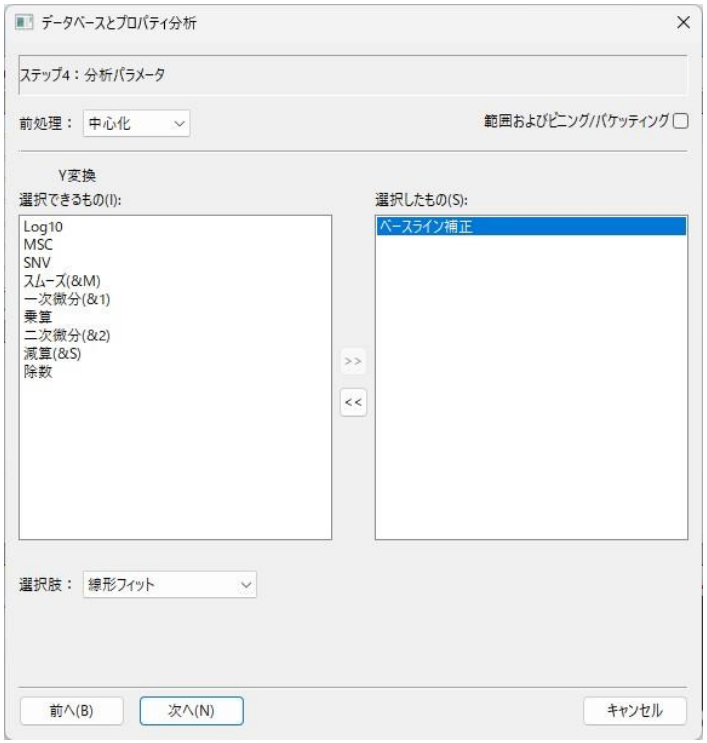
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	 このデータベースには異なる衝突エネルギーで得られた MS スペクトルの記録が含まれている。
4	• このヒットリストを Trendfinder に転送するには： 送り先: 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、直接開く。* • **次へ>**をクリックする。	

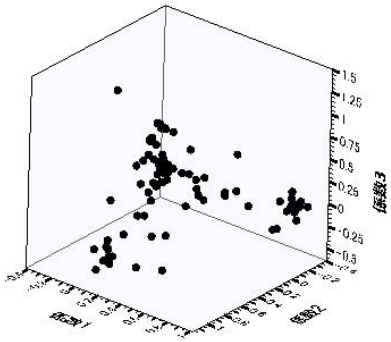
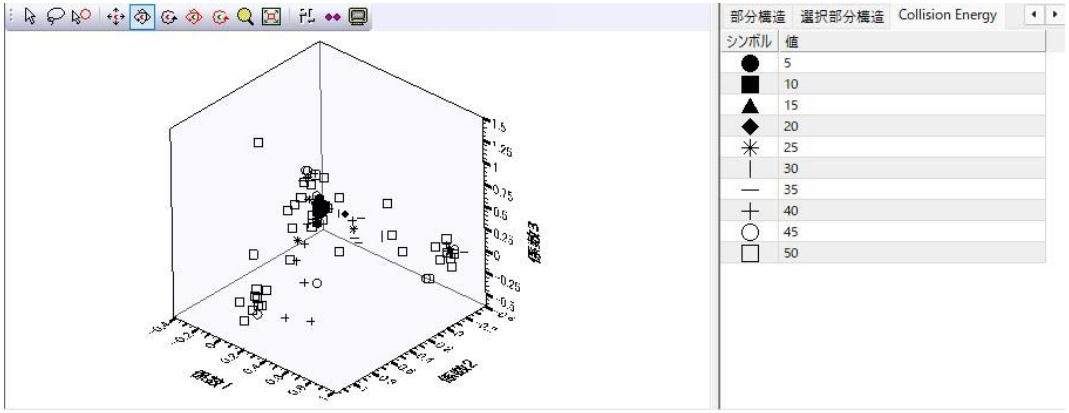
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

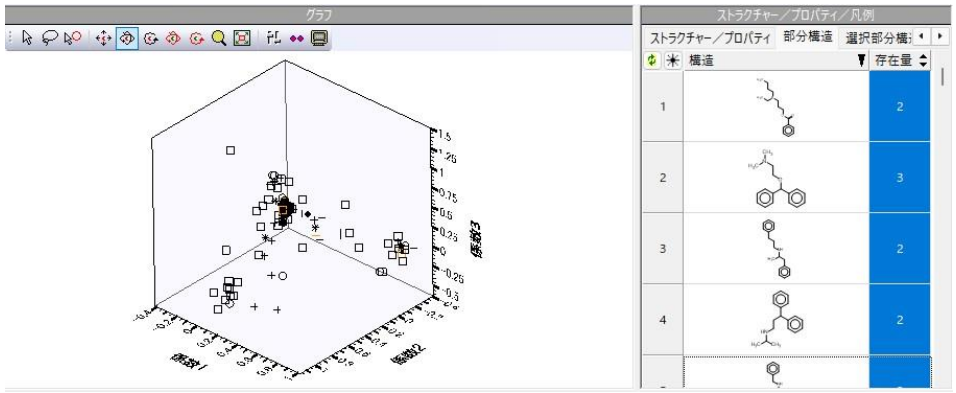
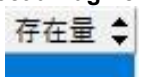
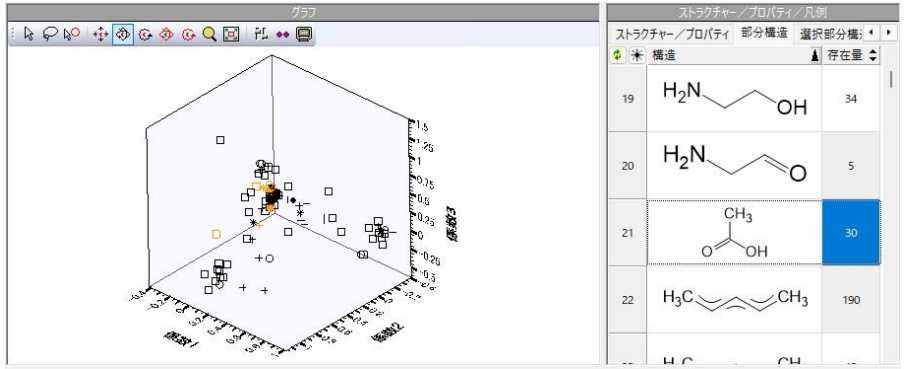
	アクション	結果
6	**[次へ>]**をクリックして続行する。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

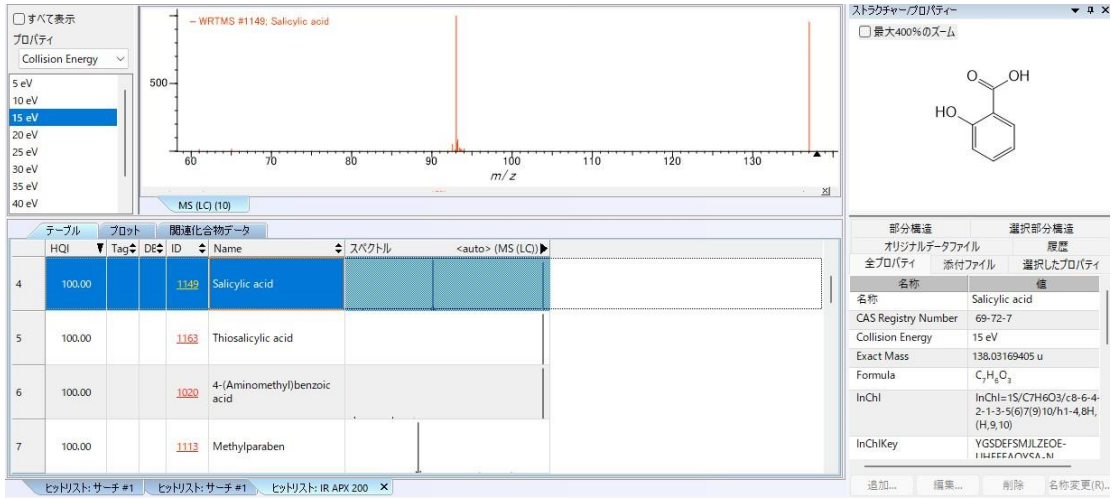
	アクション	結果
7	**完了**をクリックする。	 **スコア**プロットは上記のように開く。
8	**カテゴリ（Categorization）**で、**衝突エネルギー（Collision Energy by Symbol）**を選択して表示する。 	 このプロットはこのデータセットを見る興味深い方法だ。高い衝突エネルギーは分子をより徹底的に破壊し、スペクトルの違いをもたらす!
9	特定のスポット（*）を選択	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

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。
2	• 「**Select a fragment**」をクリックすることで、  • 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。

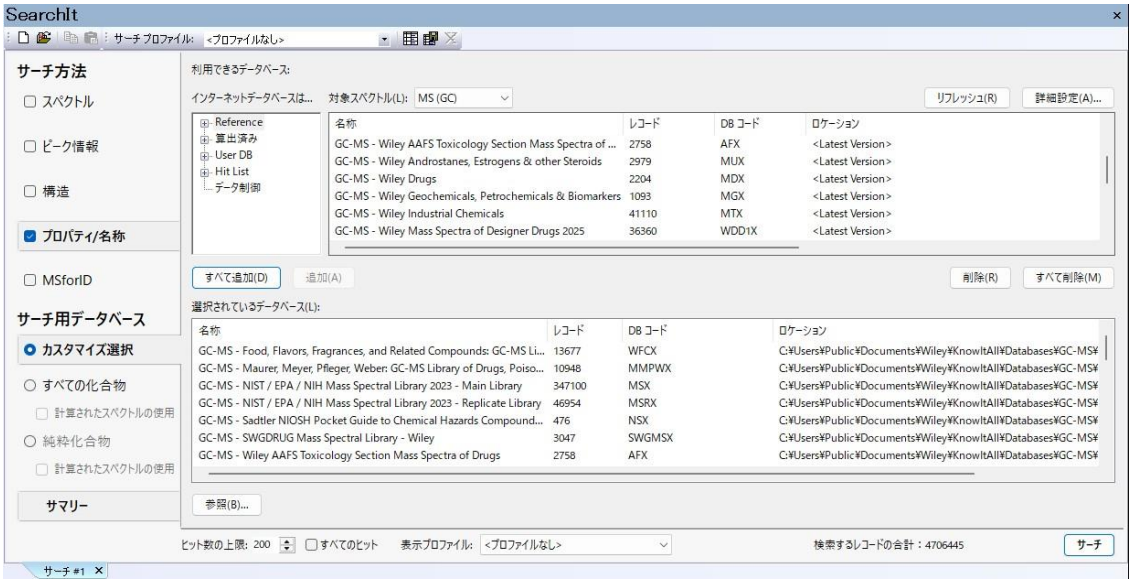
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	アクション	結果
4	• 強調表示された 54 件のレコードのコレクションを、**[転送先]**ボタンを使用して **MineIt** に転送する。 • **MineIt** でデータベースレコードが開く。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

GC-MS

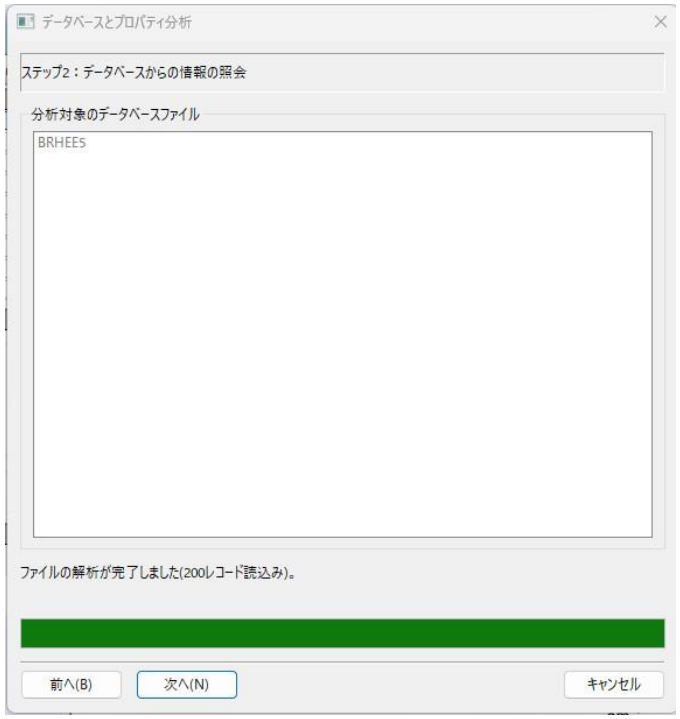
フェンタニルのヒットリスト分析

	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。	

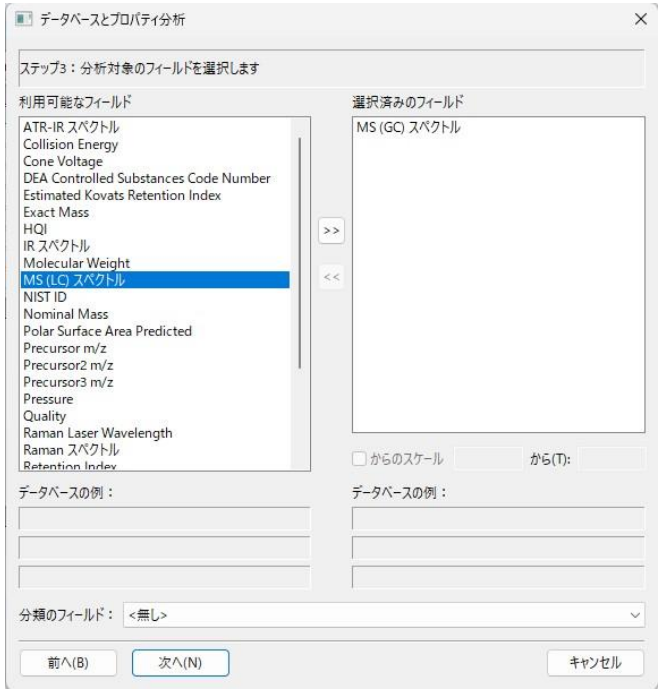
 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	アクション	結果
2	• **Property/Name** を **“Any Field c**ontains **‘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。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	アクション	結果
3	**MineIt** 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。	

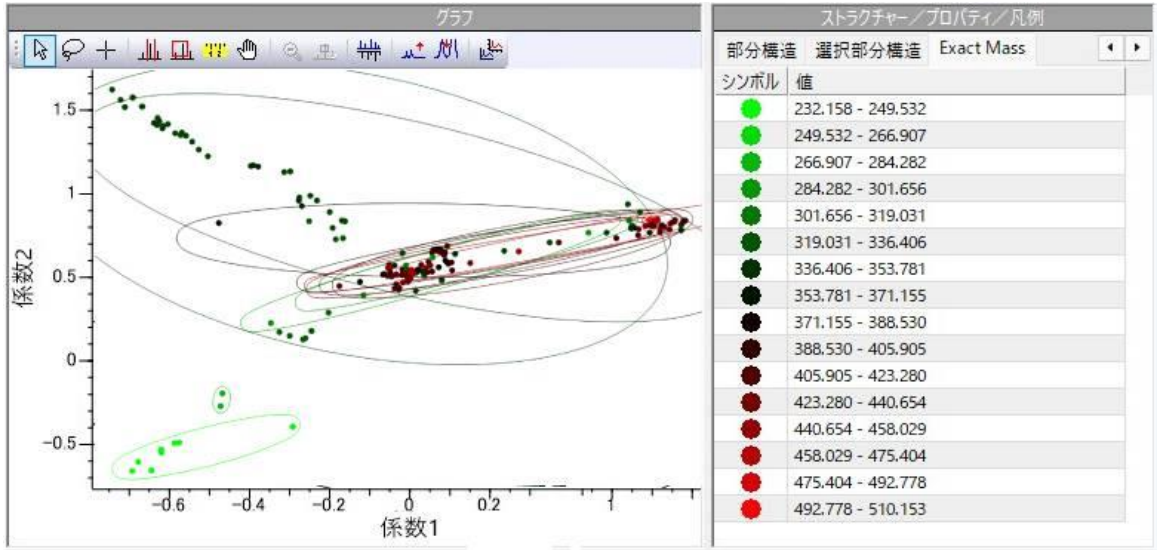
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

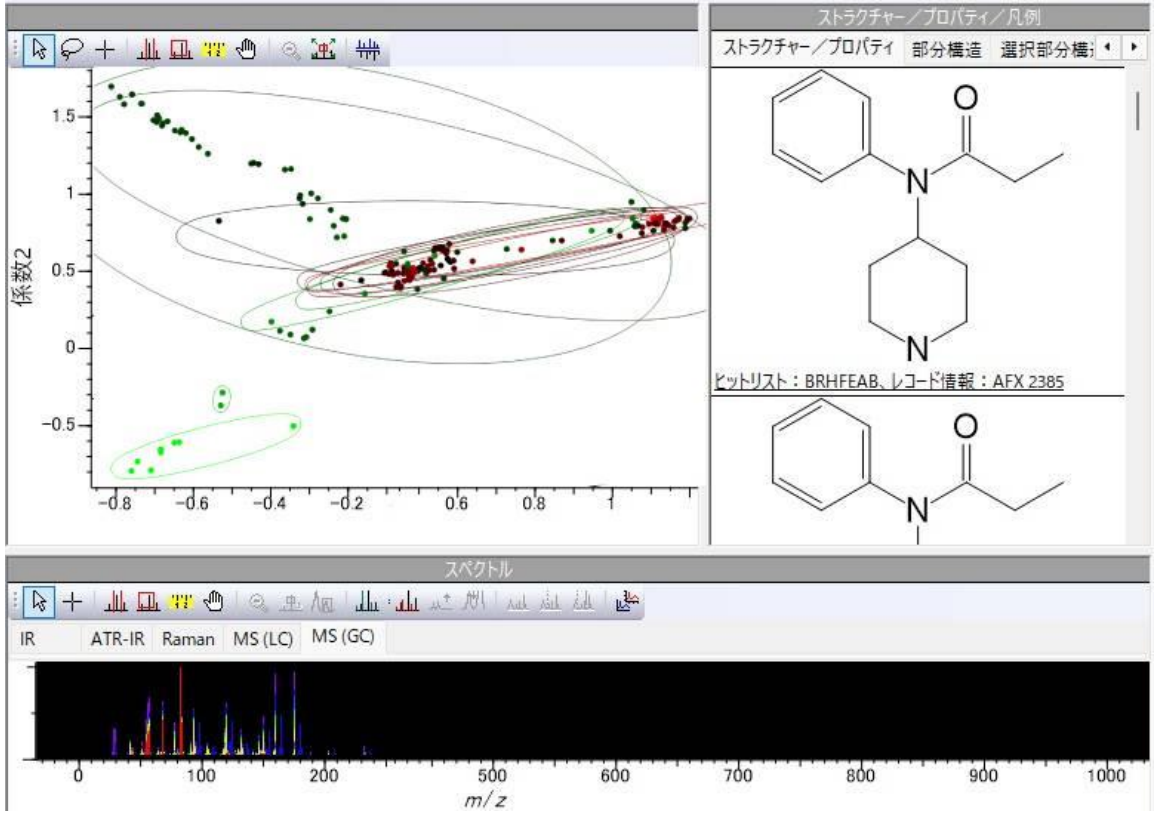
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

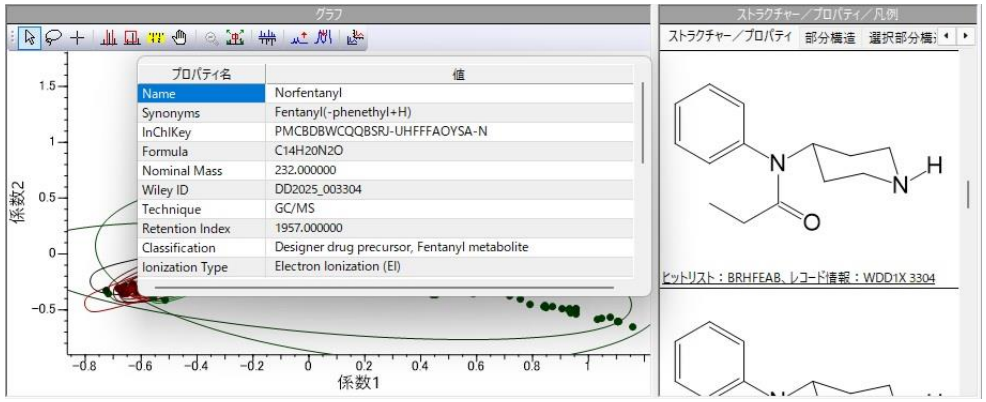
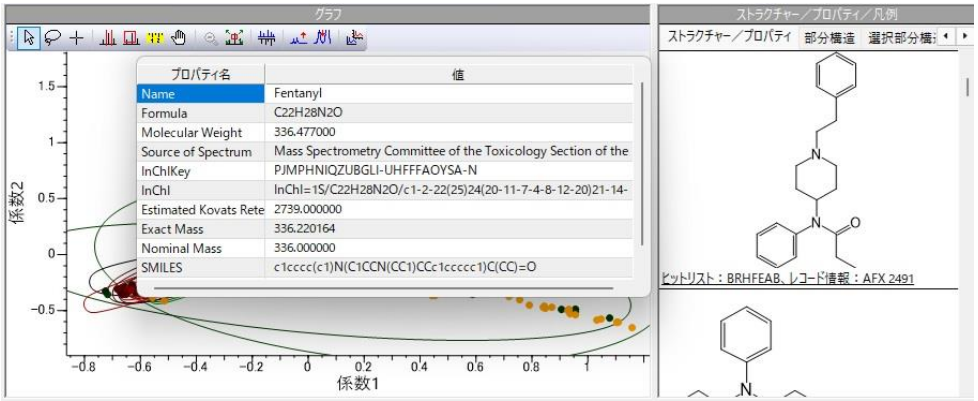
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	 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。

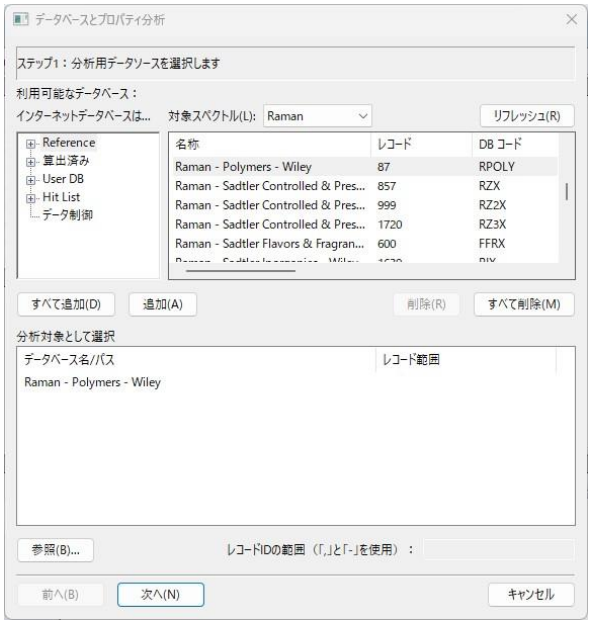
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	
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	

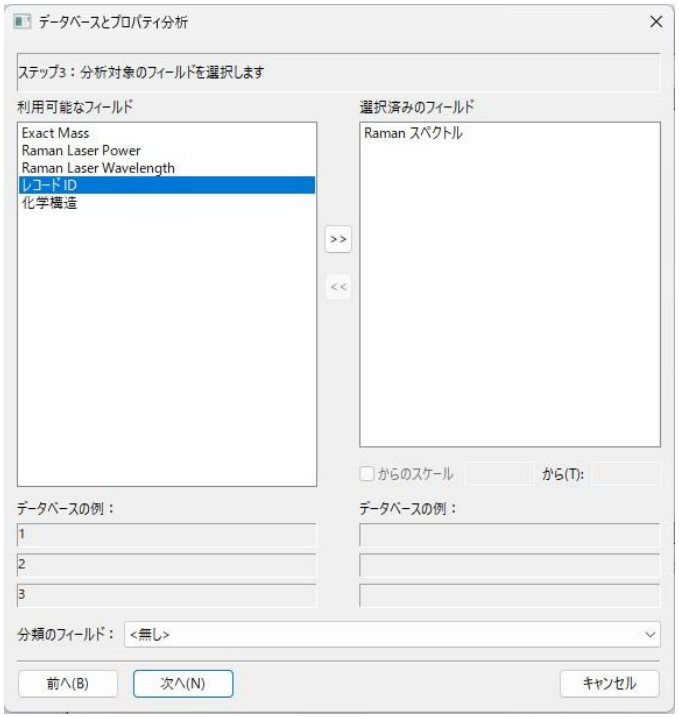
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

ラマン

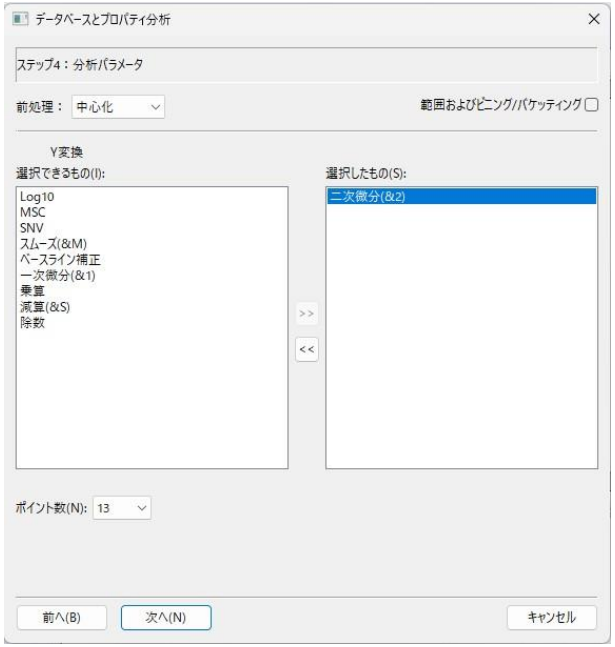
ポリマー分析

	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。	

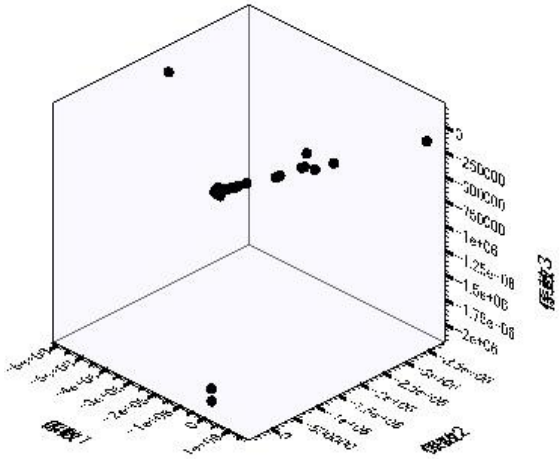
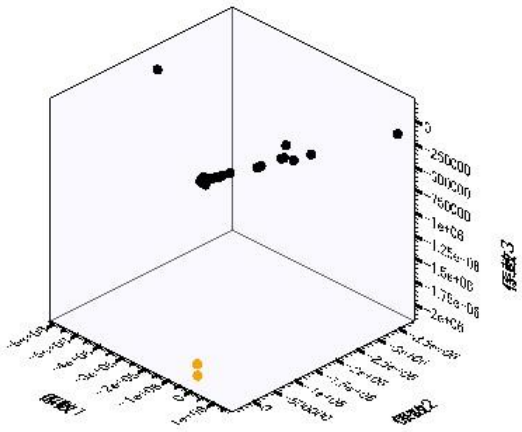
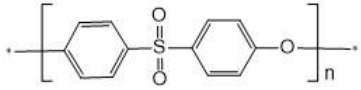
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

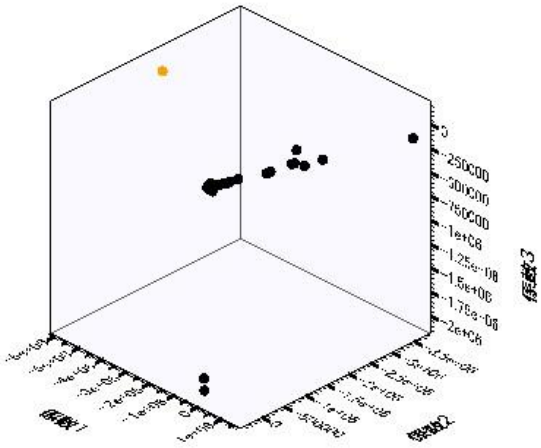
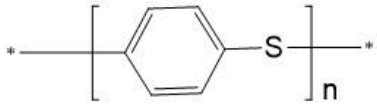
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

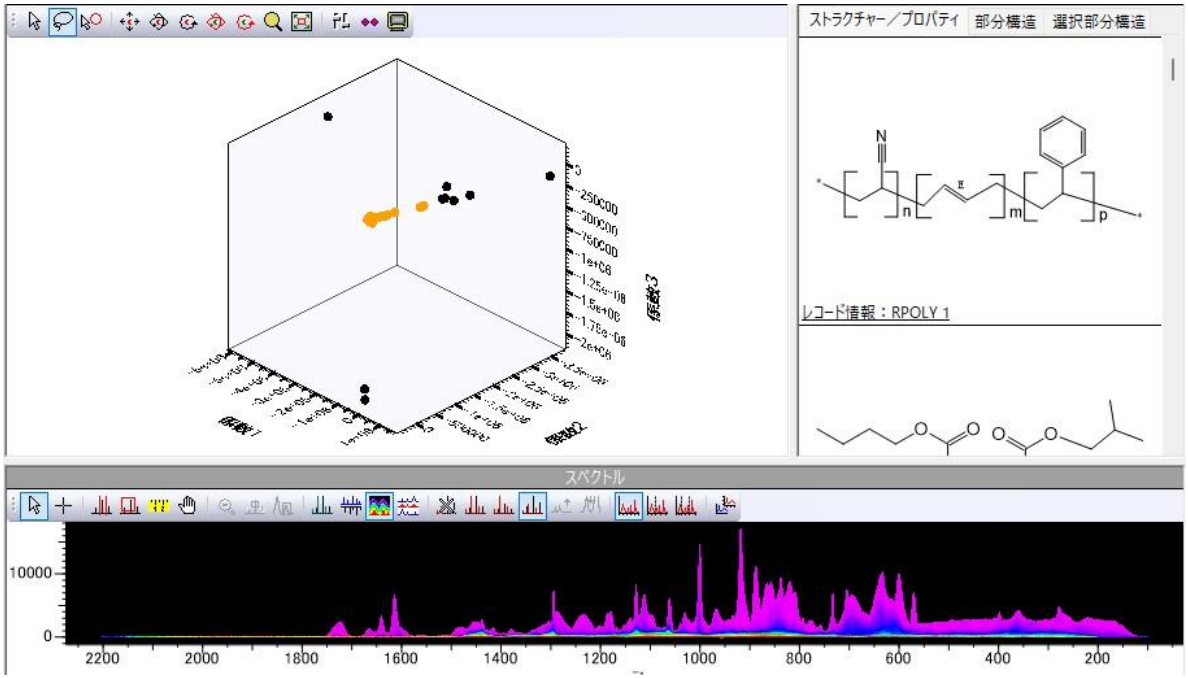
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	  レコード情報：RPOLY 57

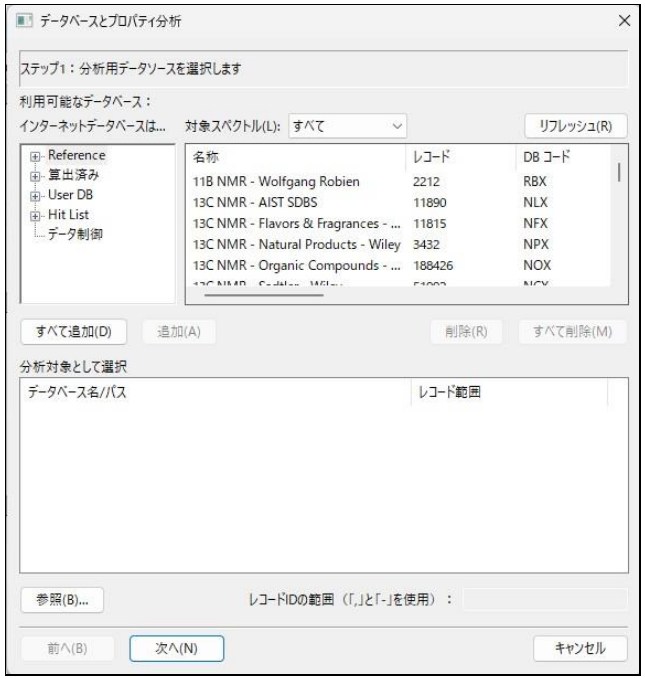
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。

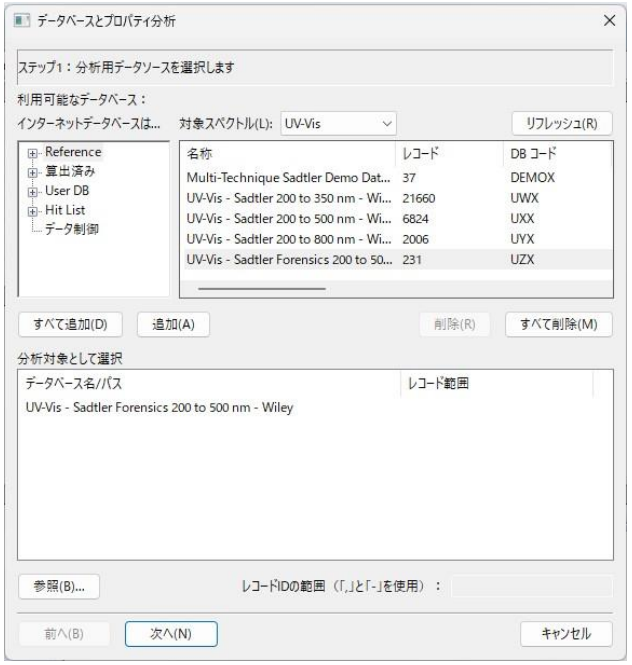
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

UV-Vis

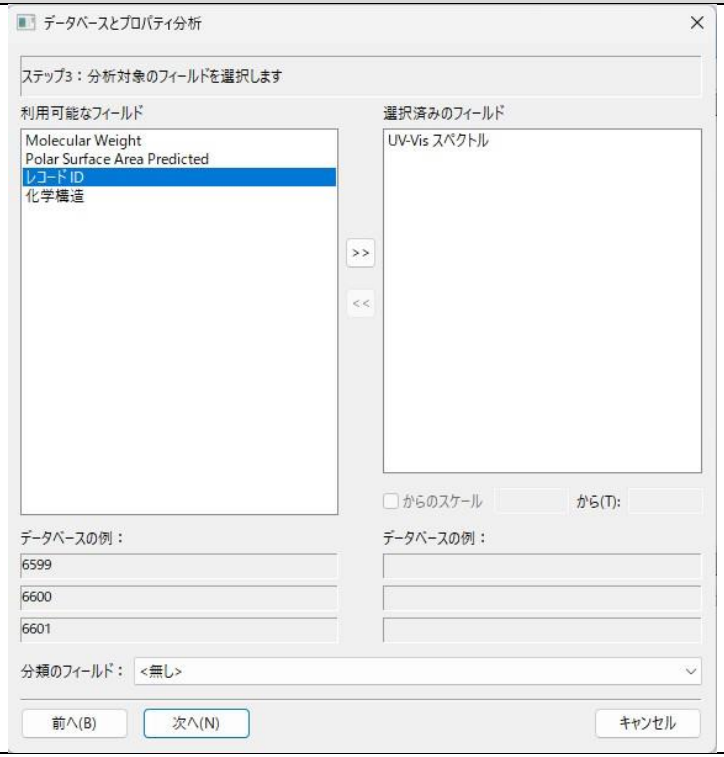
フォレンジックマテリアル分析

	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 

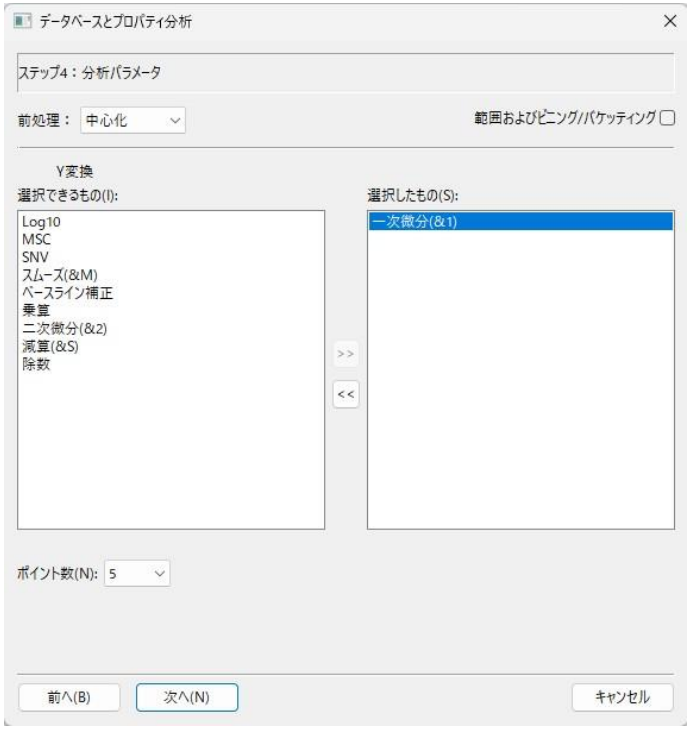
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

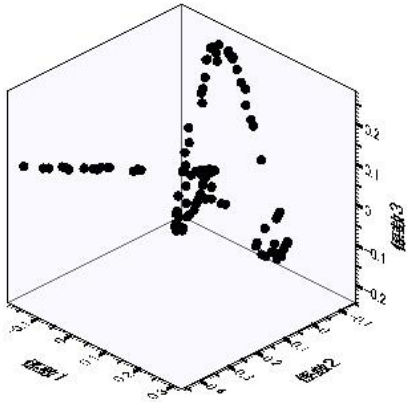
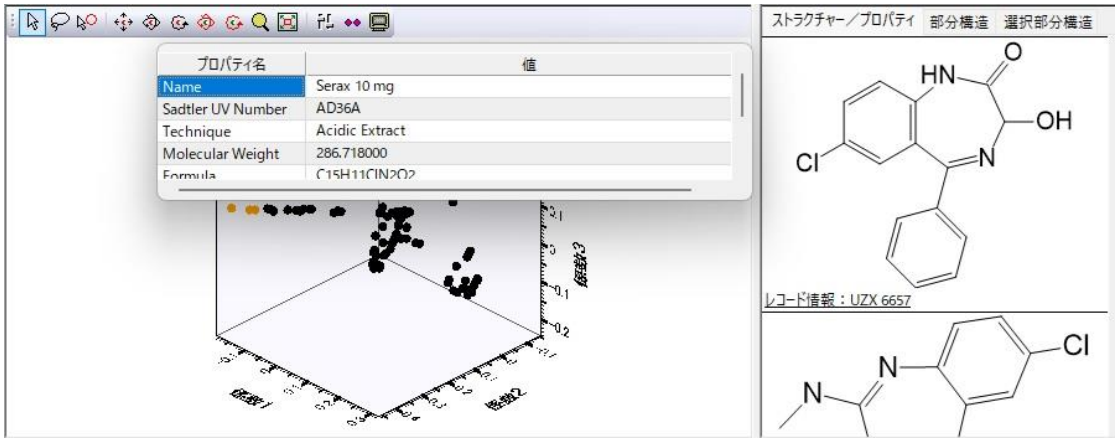
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

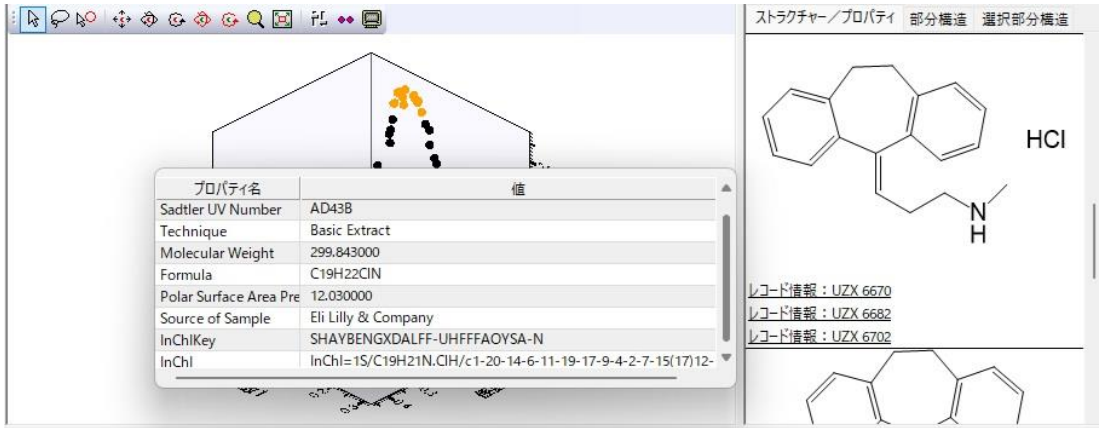
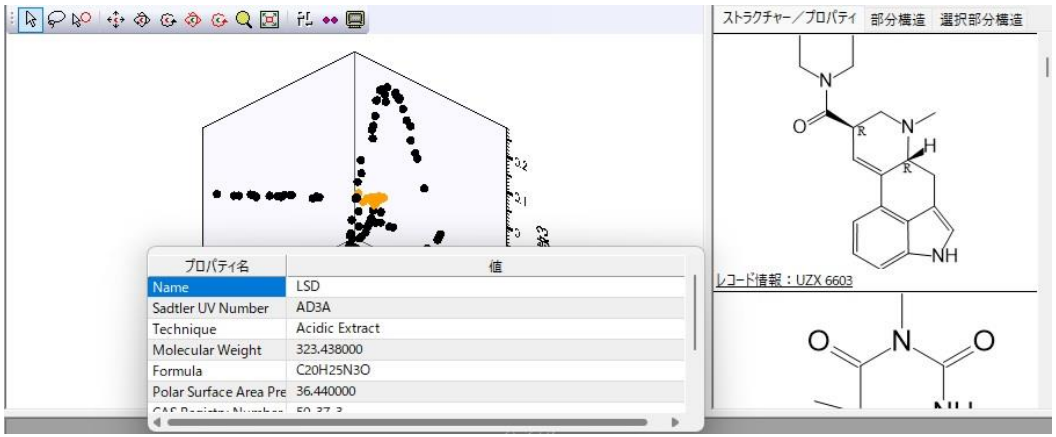
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。*	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	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。	

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

	アクション	結果
8		
9		

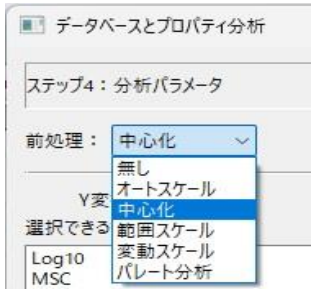
108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

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。

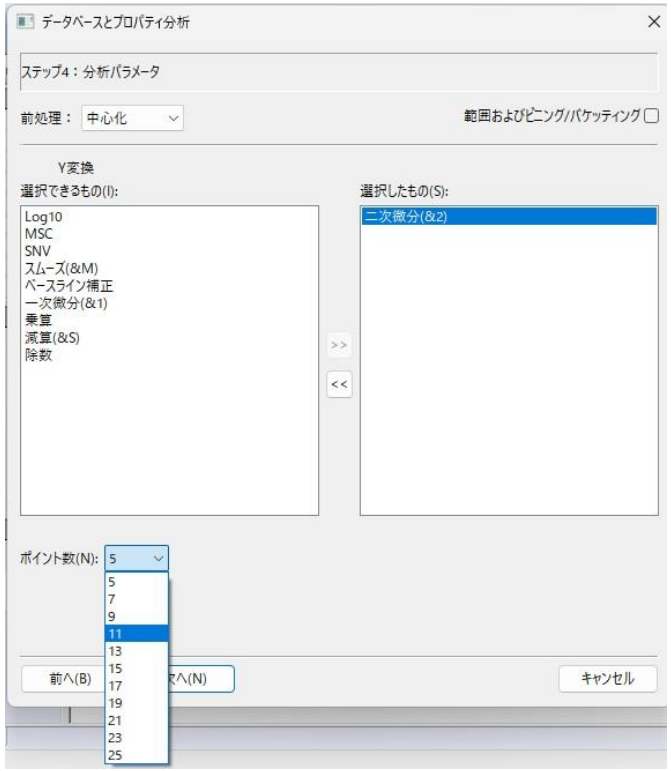
  自動スケーリングは、元のスケールや単位に関係なく、すべての変数が PCA に等しく寄与することを保証する。これは PCA が最大分散の方向を識別するために重要であり、自動スケーリングを行わないと、より大きなスケールの変数が分析を支配する可能性があるためである。
- **平均中心：**参照点 [1] を基準にしてデータを中央に配置する。
- **範囲スケール：** 特定の範囲内に収まるようにデータを変換する最小最大スケーリング [2]。
- **分散スケール：**まず、各価値の分散を計算する。次に、各変数を標準偏差で割る。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

- **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、全ての入力が与えられた出力 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 (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」はベル曲線(ピーク)の各辺の点の数である。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

- **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.

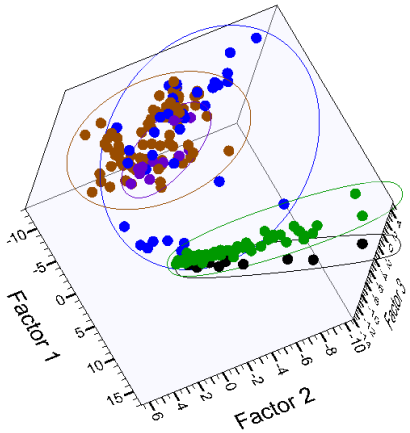
Standard Normal Variate（標準正規変換, 2025）Standard Normal Variate - an overview | ScienceDirect Topics, ScienceDirect（参照日：2025 年 8 月 19 日）。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

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の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。



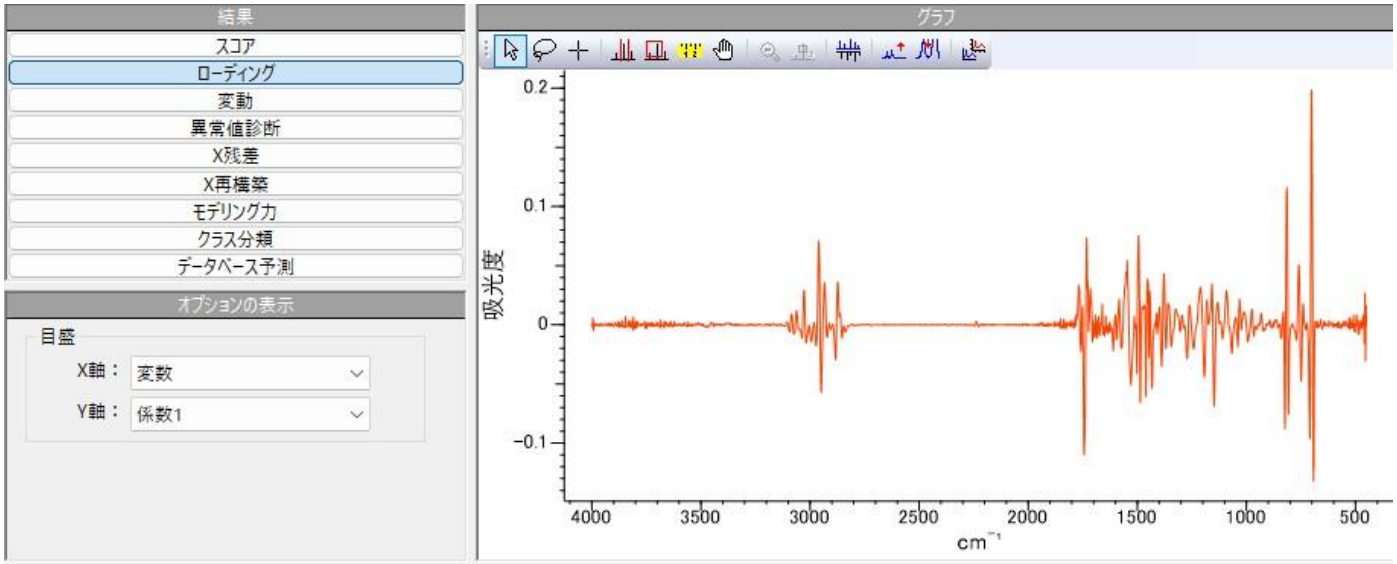
円（**軌跡**）は、**[分類（Classification）]フィールド**の値の境界を定義する)。

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、

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

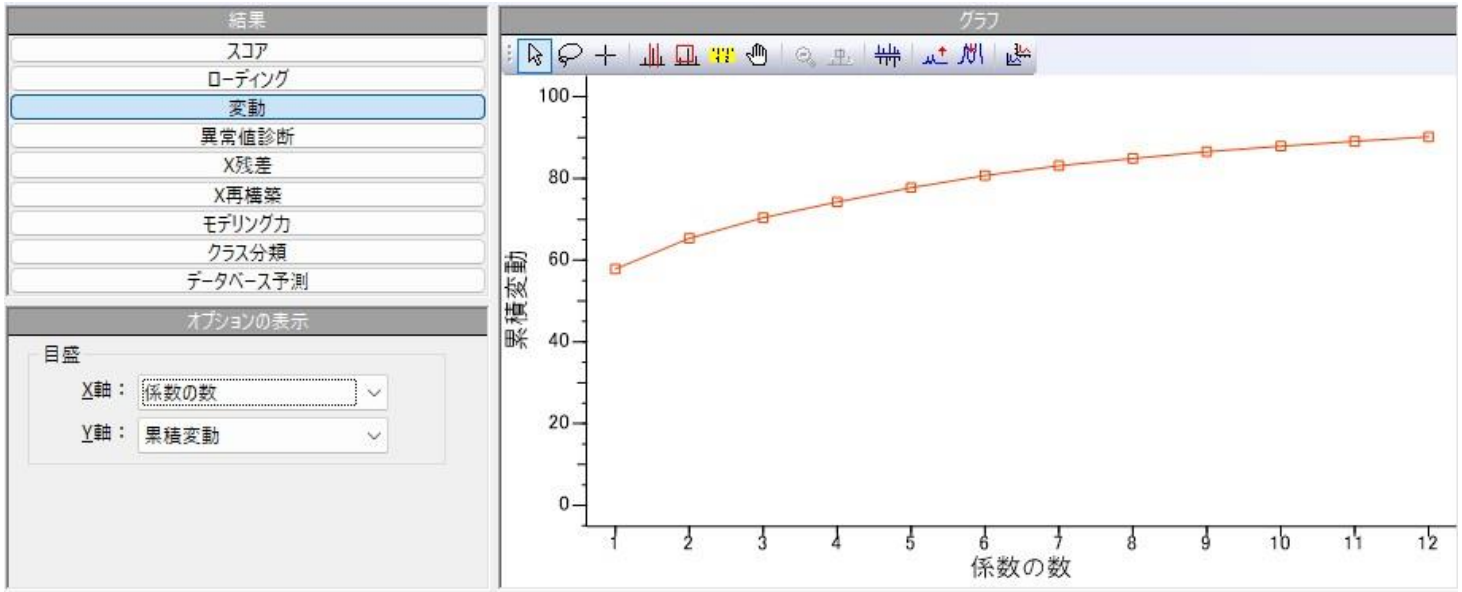


7 Schork, J.(2025) PCA の負荷とは? Statistics Global（https://statisticsglobe.com/what-are-loadings-pca#loadings-in-pca）（アクセス 2025-08-19）。

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。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。



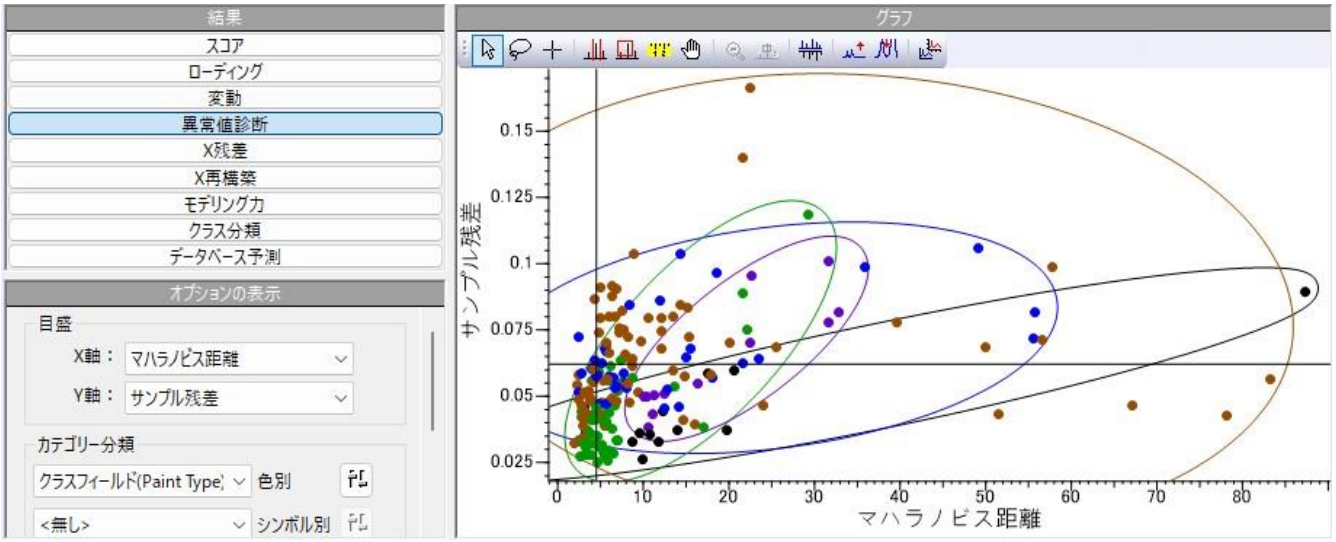
[8] Chouinard, J.C.(2023) What is the Explained Variance in PCA (Python Example), https://www.jcchouinard.com/pca-explained-variance/ (accessed 2025-08-19)。
[9] Cheplyaka, R.(2017) PCA における分散について説明した https://ro-che.info/articles/2017-12-11-pca-explained-variance (accessed 2025-08-19)。

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−μ)/σ z = (x - μ) / σ z=(x−μ)/σ 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。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。



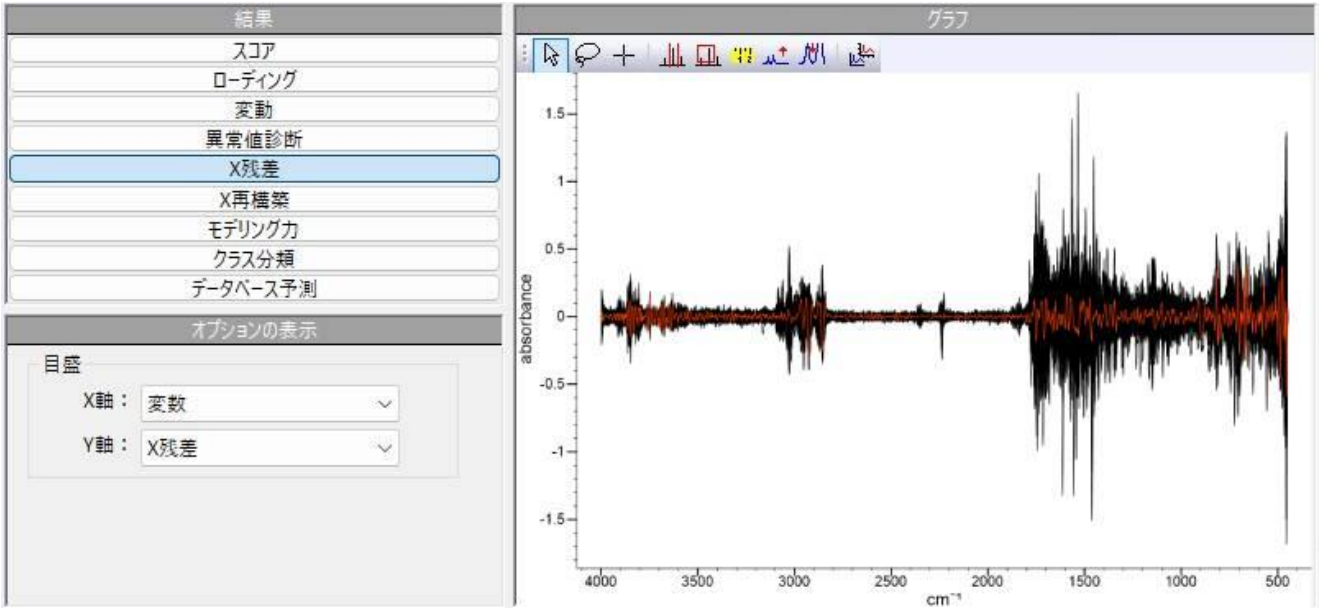
- **サンプル：**各サンプルの ID（1 から行/スペクトルの数）。
- **サンプルの残留**
- **F 比率：**これは、2 つの分散または標準偏差が有意に異なっているかどうかを評価するための統計である。ある分散を別の分散で割ることによって計算される。帰無仮説が真なら、F の値はほとんどの場合 1.0 に近いと期待する。F 比が大きいということは、群平均間の変動が偶然に見られると予想されるよりも大きいことを意味する。F-比（F-ぶんるい、英: F- ratio）は、検定統計量のヌル分布としてよく現れる連続確率分布であり、特に分散分析(ANOVA)や他の 15 において顕著である。
-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

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

X 残差

PCA 残差は残留行列 E = X–T P′ = X–X^（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 R2 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^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 R2 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:

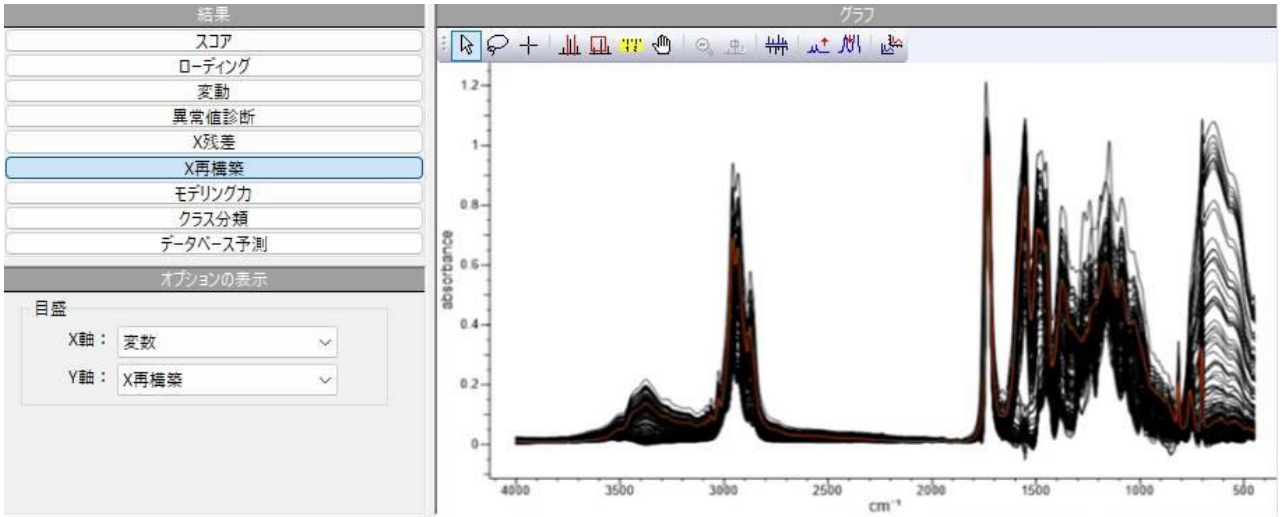


[13] Dunn, K.G。(2025)データを使用したプロセス改善における潜在変数モデリング, *https://learnche.org/pid/latent-variable-modelling/principal-component-analysis/interpreting-the-residuals* (accessed 2025-08-19)。

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。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

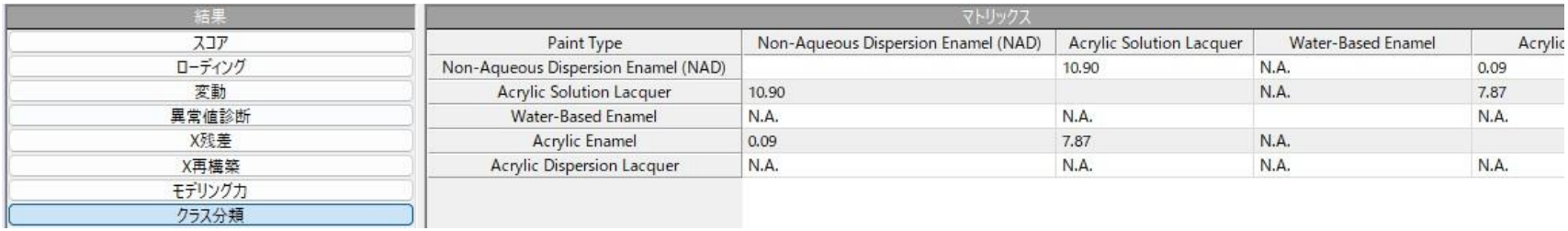


[14] Stack Exchange (2025) PCA を逆にして、いくつかの主成分から元の変数を再構築する方法は? https://stats.stackexchange.com/questions/229092/how-to-reverse-pca-and-reconstruct-original-variables-from-several-principal-com (accessed 2025-08-19)。

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：



Paint Type	Non-Aqueous Dispersion Enamel (NAD)	Acrylic Solution Lacquer	Water-Based Enamel	Acrylic
Non-Aqueous Dispersion Enamel (NAD)		10.90	N.A.	0.09
Acrylic Solution Lacquer	10.90		N.A.	7.87
Water-Based Enamel	N.A.	N.A.		N.A.
Acrylic Enamel	0.09	7.87	N.A.	
Acrylic Dispersion Lacquer	N.A.	N.A.	N.A.	N.A.

[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）

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。

108658-REV20250813 Copyright©2025 by John Wiley & Sons, Inc. 無断転載を禁ず。