

多変量解析を用いた分析データ解析の高度化



化学技術部 大崎 秀介

多変量解析を行うことで、一見して見分けのつかない分析データを差別化できる場合があります。

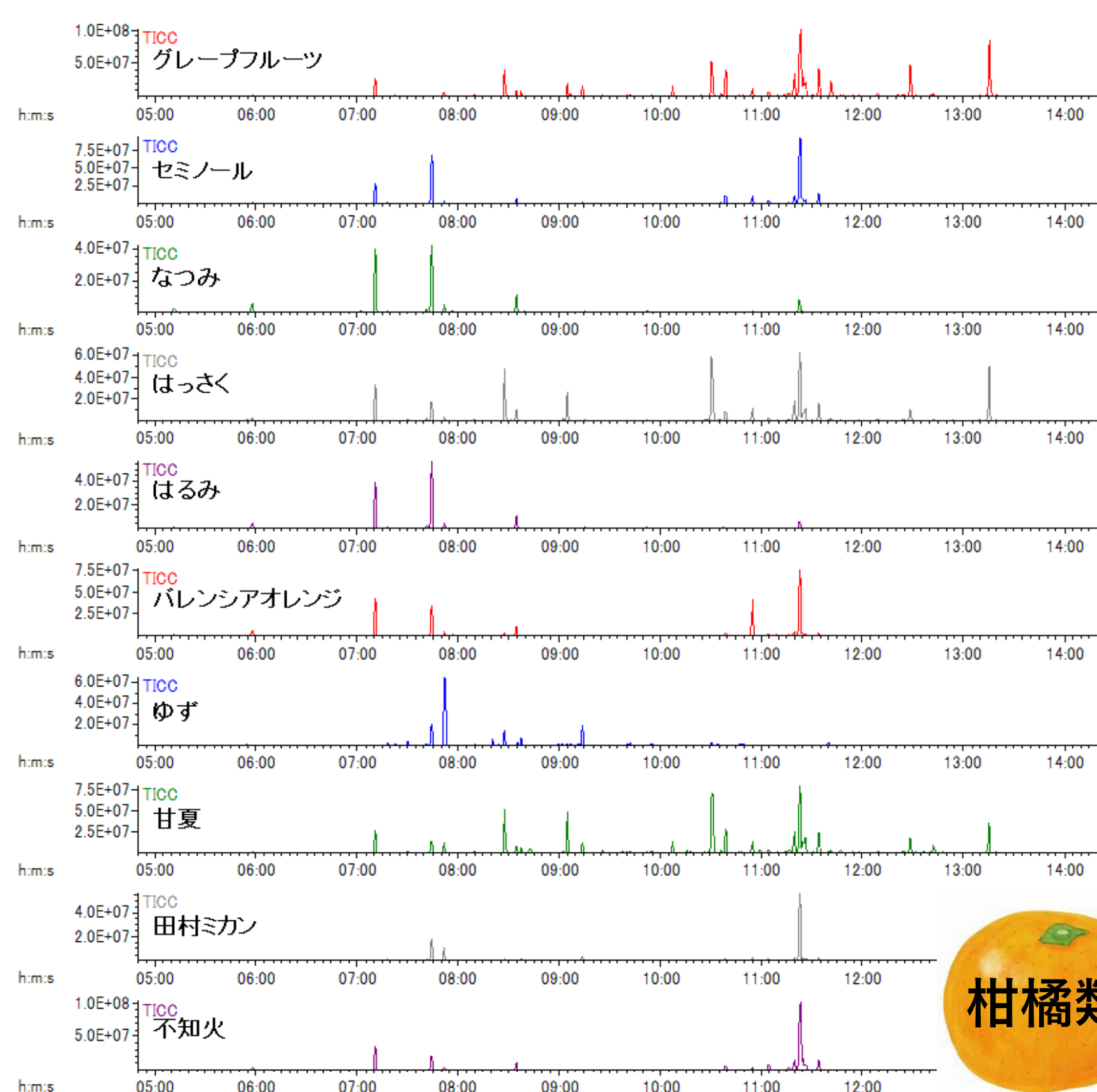
ここでは、当センターの受託試験において多くのご依頼をいただく、クロマト分析、スペクトル分析等の測定データに対して多変量解析を行った事例を紹介します。

多変量解析の種類

概観 大きな変動は何か？	分類 どのグループに分類されるか？	判別 違いの要因は何か？	回帰 何が連動しているか？	クラスター どれが似ているか？
PCA MOCA	PCA-Class (SIMCA)	PLS-DA OPLS-DA	PLS OPLS O2PLS※	HCA PLS-Tree

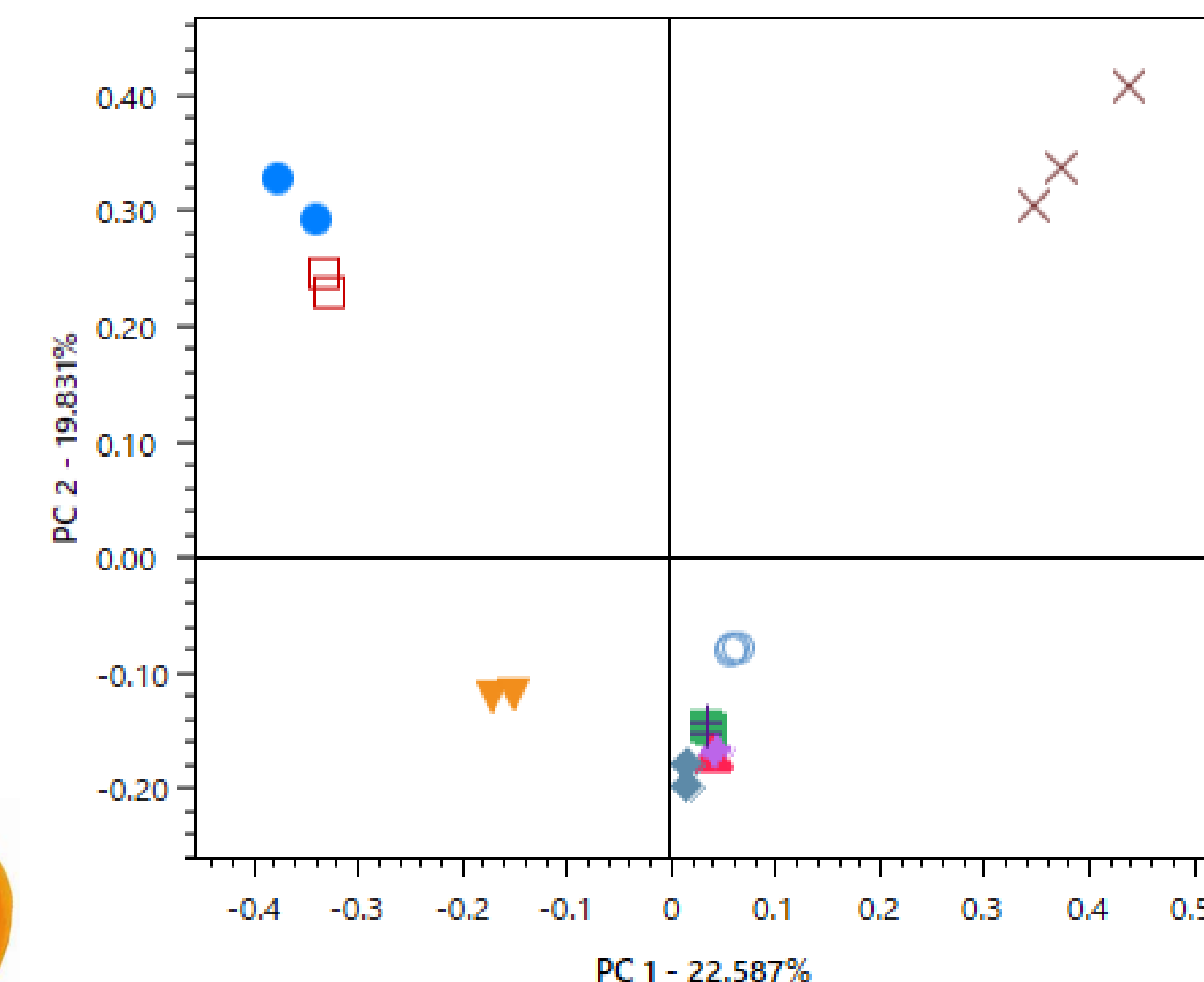
■ 概観分析 (PCA) / GC-MS

柑橘類の香気成分



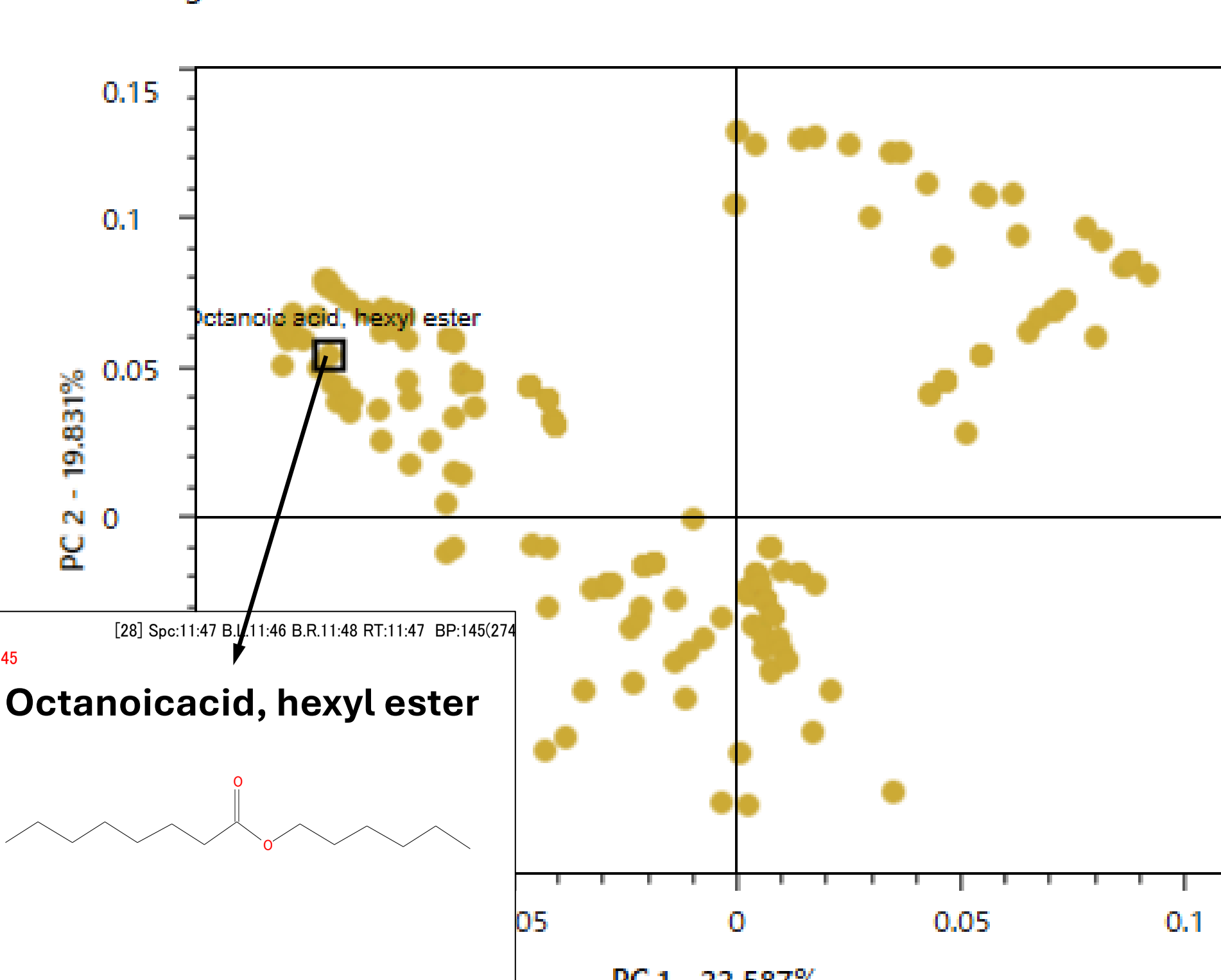
PCA scores from results

Unit variance scaling

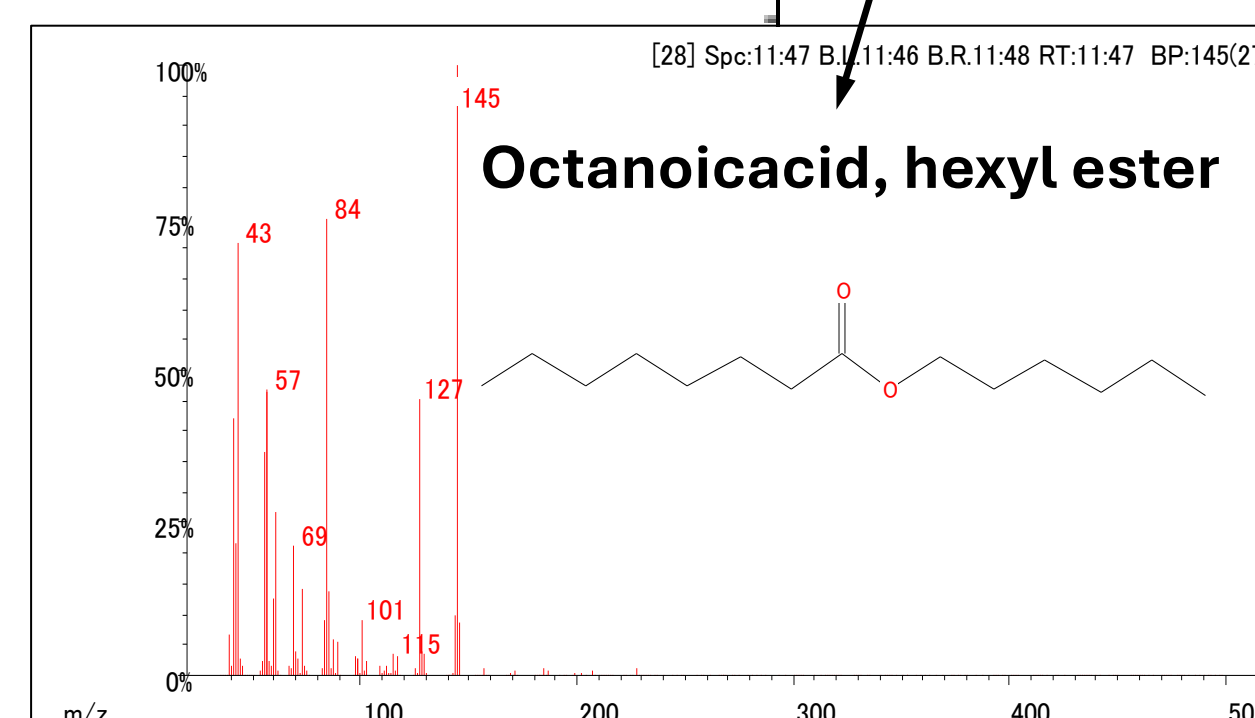


スコアプロット

PCA loadings from results

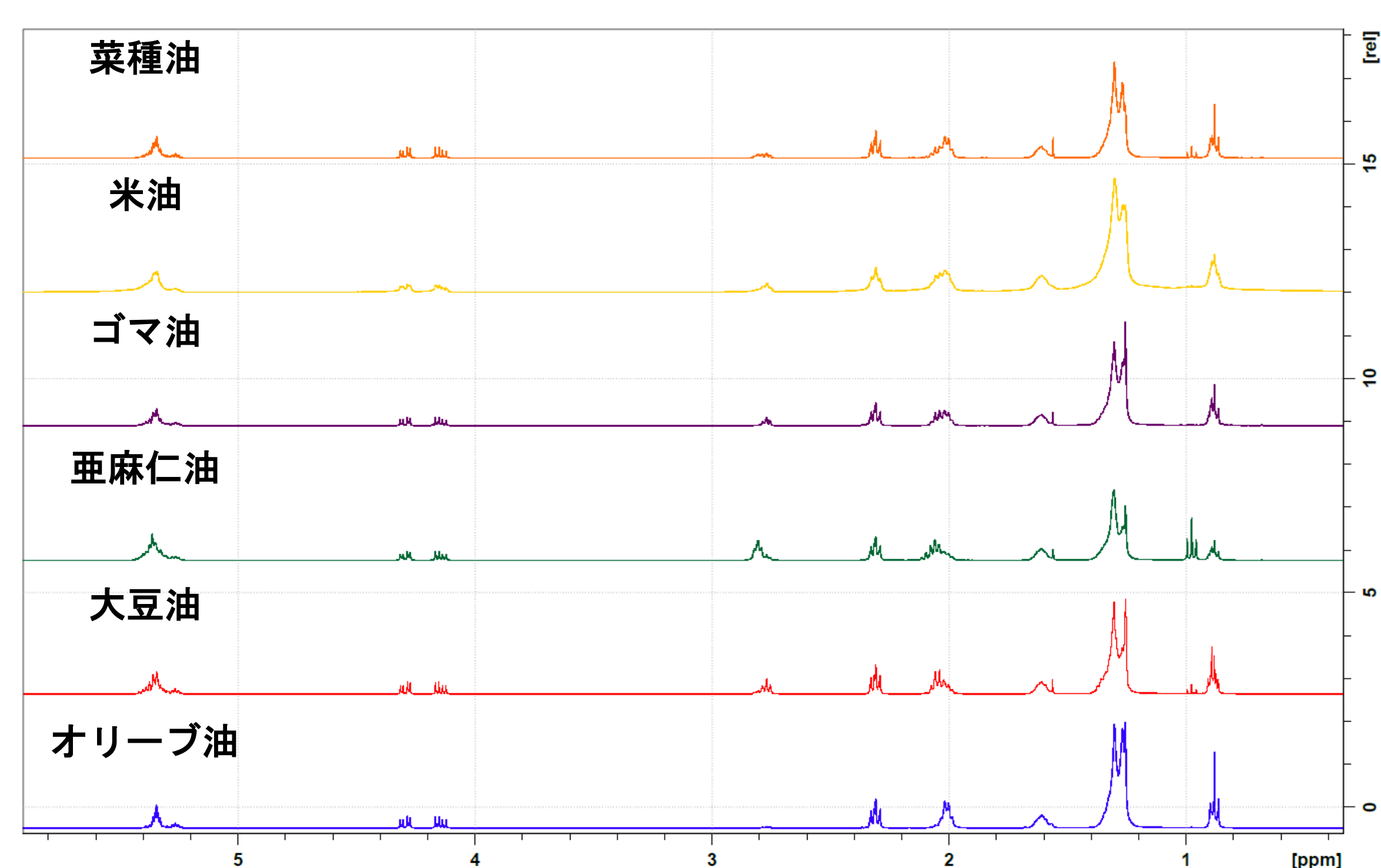


ローディングプロット



■ クラスター分析 (HCA) / NMR

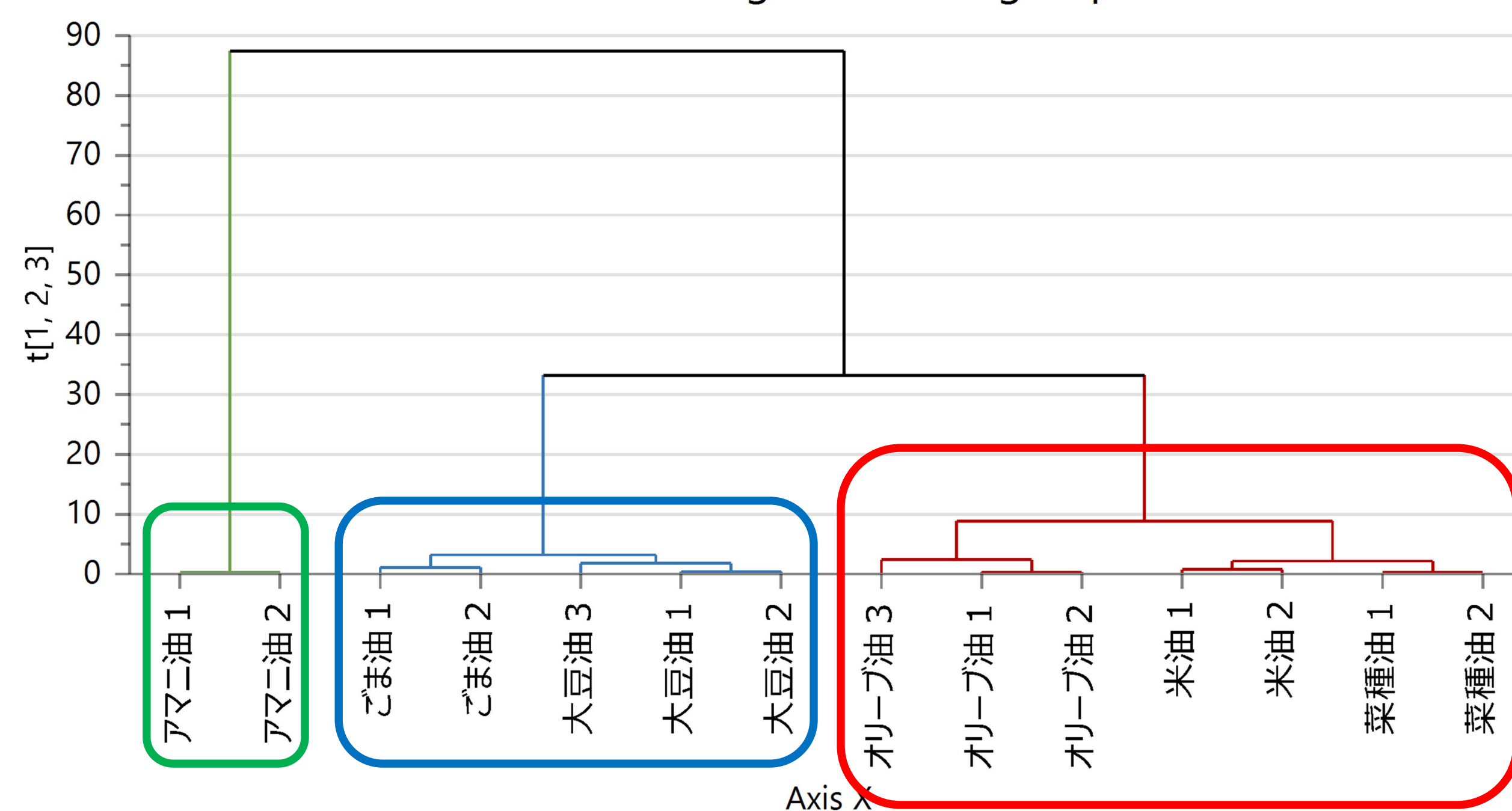
食用オイル



Hierarchical Clustering - oil (M1, PCA-X)

t[1, 2, 3]

Colored according to marked groups



Group 1
Group 2
Group 3

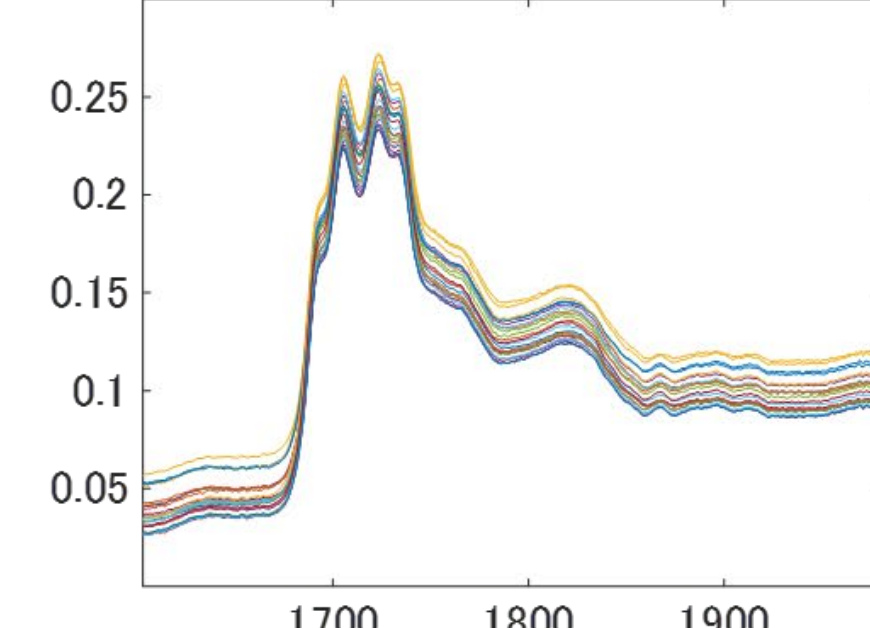
■ 回帰分析 (OPLS) / NIR

劣化度の異なるポリプロピレン (PP)

試験片の作成

キセノンウェザオメーターで劣化促進

近赤外分光測定 (NIR)



変換

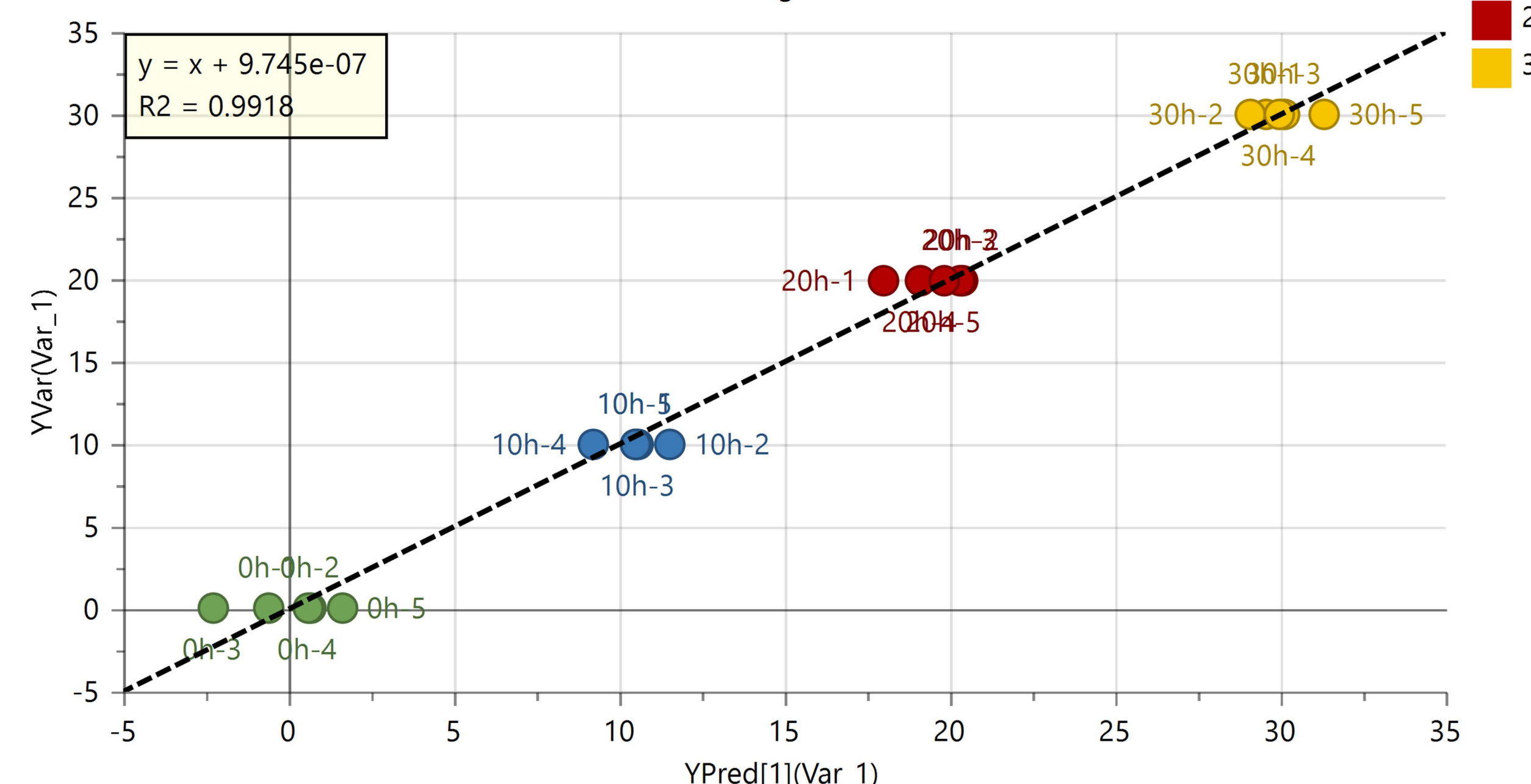
編集

波長/nm	1500	1501	1502	1503
0h-1	85.10942	85.09779	85.08877	85.08091
0h-2	85.09801	85.08882	85.06877	85.06068
0h-3	84.2557	84.23981	84.22825	84.22138
0h-4	84.883	84.86641	84.85506	84.8524
0h-5	85.20199	85.19402	85.18456	85.18137
10h-1	84.81493	84.81718	84.80959	84.80652
10h-2	85.00417	84.99719	84.98116	84.97118
10h-3	84.92097	84.91589	84.90474	84.89907
10h-4	85.1309	85.12488	85.11604	85.10975
10h-5	85.14113	85.13542	85.13253	85.12668

1	2	3	4	5	6	7
Primary ID	SClassID	Wavelength	1500	1501	1502	1503
Wavelength			1500	1501	1502	1503
0h-1	0	1	85.1094	85.0978	85.0888	85.0809
0h-2	0	2	85.098	85.0882	85.0688	85.0606
0h-3	0	3	84.2557	84.2398	84.2282	84.2214
0h-4	0	4	84.883	84.8664	84.8551	84.8524
0h-5	0	5	85.202	85.194	85.1846	85.1814
10h-1	10	6	84.8149	84.8172	84.8096	84.8065
10h-2	10	7	85.0042	84.9972	84.9812	84.9712

Observed vs. Predicted - Var_1 - NIR_01 (M20, OPLS), SNV_DS21_Session4

Colored according to classes in M20



「予測値 (X)」と「実測値 (Y)」に良好な相関